O Método de Muller

Ricardo A. D. Zanardini *

26 de abril de 2002

1 O Método de Muller

O método de Muller, uma generalização da abordagem utilizada no método da secante [1], é utilizado para obter uma ou mais raízes reais ou complexas de uma função $f(x)$.

Dados três valores reais, x_0, x_1, x_2, um polinômio quadrático é construído de modo que os três pontos $(x_i, f(x_i))$, com $i = 0, 1, 2$, são interpolados. Uma das raízes deste polinômio é utilizada como uma aproximação inicial para uma raiz α de $f(x)$.

O polinômio quadrático de interpolação é obtido através da fórmula de interpolação de Newton, dado por

$$p(x) = f(x_2) + (x - x_2)f[x_2, x_1] + (x - x_2)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \tag{1}$$

*E-mail: zanardin@cesec.ufpr.br. Home Page: http://www.cesec.ufpr.br/∼zanardin.

[1] O método da secante está relacionado com o método de Newton pois utilizando a aproximação $f'(x) \approx \frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n-x_{n-1}}$ na fórmula de Newton, $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, com $n \geq 0$, obtemos a fórmula da secante, $x_{n+1} = x_n - f(n)\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}$, com $n \geq 1$.

onde as diferenças divididas $f[x_2, x_1]$ e $f[x_2, x_1, x_0]$ são definidas como segue

$$\begin{aligned} f[x_2, x_1] &= \tfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} \\ f[x_2, x_1, x_0] &= \tfrac{f[x_2,x_1]-f[x_1,x_0]}{x_2-x_0}. \end{aligned} \tag{2}$$

Note que se x_0, x_1, x_2 são distintos, as diferenças obtidas são de primeira e segunda ordem, respectivamente. Estas diferenças estão relacionadas com as derivadas de $f(x)$ tais que $f[x_2, x_1] = f'(\xi)$ e $f[x_2, x_1, x_0] = f''(\Xi)$, onde ξ está entre x_1 e x_2 e Ξ está entre o mínimo e o máximo de x_0, x_1 e x_2.

E ainda, é fácil notar que

$$p(x_i) = f(x_i) \qquad i = 0, 1, 2$$

substituindo x_i em (1) e reduzindo a expressão obtida através de (2). A fórmula (1) é chamada de forma das diferenças divididas de Newton da interpolação polinomial.

Rescrevendo (1) em uma forma mais conveniente, temos

$$p(x) = a(x - x_2)^2 + 2b(x - x_2) + c$$

onde

$$\begin{aligned} a &= f[x_2, x_1, x_0] \\ b &= \tfrac{1}{2} f[x_2, x_1] + (x_2 - x_1) f[x_2, x_1, x_0] \\ c &= f[x_2]. \end{aligned}$$

Se h é a raiz de menor valor absoluto da fórmula quadrática $ah^2 + 2bh + c = 0$, então $x_3 = x_2 + h$ é a raiz de p(x), muito próxima de x_2.

Para encontrar a menor raiz da equação quadrática, utilizamos a solução padrão

$$h = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Por questões de estabilidade numérica, racionalizando o numerador, temos

$$x_3 = x_2 - \frac{c}{b \pm \sqrt{b^2 - ac}} \tag{3}$$

onde o sinal da raiz quadrada é escolhido de modo a maximizar o valor absoluto do denominador.

Genericamente, temos que o método de Muller consiste no seguinte processo recursivo

$$x_{i+1} = x_i - \frac{c_i}{b_i \pm \sqrt{b_i^2 - a_i c_i}} \tag{4}$$

onde

$$\begin{aligned} &a_i = f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] \\ &b = \tfrac{1}{2} f[x_i, x_{i-1}] + (x_i - x_{i-1}) f[x_i, x_{i-1}, x_{i-2}] \\ &c_i = f[x_i]. \end{aligned}$$

Repetindo (4) iterativamente, temos que se a seqüência gerada $\{x_n : n \geq 0\}$ converge para um ponto α e que se $f'(\alpha) \neq 0$, então α é uma raiz de $f(x)$.

Note que se $a = 0$ então a interpolação linear em cada iteração é equivalente ao método da secante. Se $a = b = 0$, então $f(x_0) = f(x_1) = f(x_2)$. Neste caso, iteração deve ser retomada com diferentes valores iniciais.

Referências

[1] Atkinson, K. E.. *An Introduction to Numerical Analysis.* New York: John Wiley & Sons, 1988.

[2] Stoer, J. and Bulirsch, R.. *Introduction to Numerical Analysis.* New York: Springer-Verlag, 1980.