Capítulo 8

Derivadas Discretas

8.1 Introdução

Se um espaço de escala é gerado a partir de uma convolução, digamos, $F_t(\mathbf{x}) = K_t(\mathbf{x}) * f_0(\mathbf{x})$, podemos obter qualquer uma de suas derivadas parciais espaciais usando uma das seguintes expressões

$$\partial_{x^\alpha} F_t(\mathbf{x}) = \partial_{x^\alpha}(K_t(\mathbf{x}) * f_0(\mathbf{x})) = \partial_{x^\alpha} K_t(\mathbf{x}) * f_0(\mathbf{x}) = K_t(\mathbf{x}) * \partial_{x^\alpha} f_0(\mathbf{x})$$

onde ∂_{x^α} pode ser qualquer derivada parcial (possivelmente mista). Note que, mesmo que a função original f_0 não seja diferenciável o bastante para o cálculo de $\partial_{x^\alpha} f_0$, podemos calcular $\partial_{x^\alpha}(K_t(\mathbf{x})) * f_0(\mathbf{x})$ desde que o núcleo de convolução K_t o seja. Esta expressão também mostra que $\partial_{x^\alpha} F$ é um espaço de escala (correspondendo ao sinal inicial $\partial_{x^\alpha} f_0$). No caso da difusão linear, podemos escrever

$$\partial_t(\partial_{x^\alpha} F_t) = \nabla^2(\partial_{x^\alpha} F_t)$$

e então $\partial_{x^\alpha} F_t(\mathbf{x})$ é um espaço de escala.

Nesta seção, examinaremos como obter tais derivadas quando o espaço de escala é discreto espacialmente.

8.2 Discretização

Gostaríamos de definir um operador D_{x^α} discreto (correspondente à ∂_{x^α} no caso contínuo). Desejamos que este operador seja linear e invariante por translações, portanto podemos escrevê-lo como uma convolução:

$$D_{x^\alpha} F_t = D_{x^\alpha} * (K_t * f_0) = (D_{x^\alpha} * K_t) * f_0$$

Note que se K_t é uma família de núcleos de espaço de escala (com a propriedade de semi-grupo, como ocorre no caso N-dimensional) que comute com D_{x^α},

$$D_{x^\alpha} F_{t_2} = D_{x^\alpha} * K_{t_2} * f_0 = K_{t_2 - t_1} * (D_{x^\alpha} * K_{t_1} * f_0) = K_{t_2 - t_1} * D_{x^\alpha} F_{t_1}$$

e $D_{x^\alpha}F$ também será um espaço de escala no caso discreto. De fato, quase qualquer operador/núcleo D_{x^α} satisfaz essa propriedade; nossa grande preocupação é encontrar um que seja coerente, isto é, um que aproxime a derivada contínua à medida que diminuímos o "passo espacial".

A expressão $D_{x^\alpha} * (K_t * f_0) = K_t * (D_{x^\alpha} * f_0)$ mostra então que há duas maneiras equivalentes de obter o espaço de escala da derivada $D_{x^\alpha} * f_0$:

- Construindo diretamente o espaço de escala a partir de $D_{x^\alpha} * f_0$ por convolução com os núcleos de espaço de escala K_t;

- Diferenciando o espaço de escala de f_0;

Veremos abaixo que a diferenciação é, em geral, uma convolução com um núcleo de pequeno suporte (por exemplo, para imagens, há boas aproximações das derivadas de primeira e segunda ordem que correspondem a núcleos 3×3); portanto, **é mais simples utilizar o segundo método caso o espaço de escala f_0 esteja (ou precise ser) calculado**!

Este princípio é provavelmente o mais importante deste capítulo, portanto vamos repeti-lo: **caso você já tenha calculado o espaço de escala de f_0, não calcule o espaço de escala Gaussiano de $D_{x^\alpha}f_0$ através de convoluções deste com a Gaussiana! Ao invés, simplesmente calcule a derivada D_{x^α} do espaço de escala de f_0**. Aliás, mesmo que o espaço de escala de f_0 não tenha sido ainda calculado, o segundo método é quase tão custoso quanto o primeiro e provavelmente gerará melhores resultados; mais ainda, o segundo método é a única opção se f_0 não for diferenciável!

Só nos resta agora encontrar tais operadores derivada. Acreditamos que a maneira correta de encontrar tais operadores discretos coerentes vem da análise de séries de Taylor próximas do ponto em questão; o resultado é o resumo abaixo, onde apenas apresentamos as *máscaras* correspondentes a cada derivada discreta (uma *"máscara"* é um núcleo de convolução já refletido para facilitar a sua visualização; na nossa notação, a origem de cada máscara corresponde ao número central ou ao número destacado). O leitor interessado no processo de obtenção de tais núcleos por Fórmulas de Taylor o encontrará na seção a seguir (8.3).

8.2.1 Máscaras para derivadas 1D

Sugerimos o uso das seguintes aproximações $o\left(h^2\right)$ (daqui por diante, h representará o espaçamento do grid usado para discretização)

$$D_x = \frac{1}{2h}\left[-1\ 0\ 1\right]; \quad D_{xx} = \frac{1}{h^2}\left[1\ \ -2\ 1\right]$$

para gerar todas as outras derivadas através da relação recursiva

$$D_{x^n} = D_{x^{n-2}} * D_{xx}$$

obtendo uma família de aproximações (todas de ordem $o\left(h^2\right)$) cujas máscaras tem tamanho $n+1$ (se n é par) ou $n+2$ (se n é ímpar). Note que, infelizmente, $D_{xx} \neq D_x * D_x$. De fato, D_{xx} é uma versão amostrada de $D_x * D_x$.

Enquanto a opção acima é a nossa favorita, abaixo apresentamos outras opções de máscaras coerentes no caso unidimensional. A lista mostra todas as máscaras ótimas para cada tamanho apresentado.

- Tamanho 2

$$D_{x+} = \frac{1}{h}\left[-\mathring{1}\ 1\right] \text{ ou } D_{x-} = \frac{1}{h}\left[-1\ \mathring{1}\right] \qquad o\left(h\right)$$

- Tamanho 3

$$\begin{aligned} D_x &= \frac{1}{2h}\left[-1\ 0\ 1\right] \qquad o\left(h^2\right) \\ D_{xx} &= \frac{1}{h^2}\left[1\ -2\ 1\right] = D_{x+} * D_{x-} \qquad o\left(h^2\right) \end{aligned}$$

- Tamanho 4

$$\begin{aligned} {}_4D_{x+} &= \frac{1}{6h}\left[-2\ -\mathring{3}\ 6\ -1\right] = D_{x+} * \frac{1}{6}\left[2\ 5\ -1\right] \quad o\left(h^3\right) \\ {}_4D_{x-} &= \frac{1}{6h}\left[1\ -6\ \mathring{3}\ 2\right] = D_{x-} * \frac{1}{6}\left[2\ 5\ -1\right] \quad o\left(h^3\right) \\ D_{xx} &= \frac{1}{h^2}\left[1\ -\mathring{2}\ 1\ 0\right] = \frac{1}{h^2}\left[0\ 1\ -\mathring{2}\ 1\right] \quad o\left(h^2\right) \\ D_{xxx+} &= \frac{1}{h^3}\left[-1\ \mathring{3}\ -3\ 1\right] = D_{xx} * D_{x+} \quad o\left(h\right) \\ D_{xxx-} &= \frac{1}{h^3}\left[-1\ 3\ -\mathring{3}\ 1\right] = D_{xx} * D_{x-} \quad o\left(h\right) \end{aligned}$$

- Tamanho 5

$$\begin{aligned} {}_5D_x &= \frac{1}{12h}\left[1\ -8\ 0\ 8\ -1\right] = D_x * \frac{1}{6}\left[-1\ 8\ -1\right] \quad o\left(h^4\right) \\ {}_5D_{xx} &= \frac{1}{12h^2}\left[-1\ 16\ -30\ 16\ -1\right] = D_{xx} * \frac{1}{12}\left[-1\ 14\ -1\right] \quad o\left(h^4\right) \\ D_{xxx} &= \frac{1}{2h^3}\left[-1\ 2\ 0\ -2\ 1\right] = D_{xx} * D_x \quad o\left(h^2\right) \\ D_{xxxx} &= \frac{1}{h^4}\left[1\ -4\ 6\ -4\ 1\right] = D_{xx} * D_{xx} \quad o\left(h^2\right) \end{aligned}$$

8.2.2 Máscaras para derivadas 2D

Sugerimos o uso das seguintes máscaras 3×3 que nos dão aproximações $o\left(h^2\right)$ de suas respectivas derivadas

$$D_x = \frac{1}{12h}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -4 & 0 & 4 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix};\ D_y = \frac{1}{12h}\begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -4 & -1 \end{bmatrix}$$
$$D_{xx} = \frac{1}{12h^2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix};\ D_{yy} = \frac{1}{12h^2}\begin{bmatrix} 1 & 10 & 1 \\ -2 & -20 & -2 \\ 1 & 10 & 1 \end{bmatrix}$$
$$D_{xy} = \frac{1}{4h^2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix};\ D_{xxyy} = \frac{1}{h^4}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

pois estas apresentam "simetria rotacional" (num sentido que ficará mais claro adiante) de ordem $o\left(h^4\right)$. Para derivadas de maior ordem, sugerimos o uso das relações recursivas (para $m, n \geq 0$)

$$\begin{aligned} D_{x^{m+2}y^{n+2}} &= D_{xxyy} * D_{x^m y^n} \\ D_{x^{m+2}y} &= D_{xx} * D_{x^m y} \\ D_{xy^{m+2}} &= D_{yy} * D_{xy^m} \\ D_{x^{m+2}} &= D_{xx} * D_{x^m} \\ D_{y^{m+2}} &= D_{yy} * D_{y^m} \end{aligned}$$

que definem todas as derivadas parciais de maneira única.

Em geral, mostraremos que toda máscara 3×3 coerente de ordem $o\left(h^2\right)$ para D_x tem a forma

$$D_x = \frac{1}{2h}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{A}{h}M_{xyy} + \frac{B}{h}M_{xxy} + \frac{C}{h}M_{xxyy}$$

onde

$$M_{xyy} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix};M_{xxy} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \end{bmatrix};$$
$$M_{xxyy} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

Para determinar os parâmetros A, B e C, vale notar algumas restrições desejáveis. Por exemplo, para que D_x seja simétrica na direção y, precisamos ter $B = 0$ (o que equivale a forçar $D_x(f(x,y)) = D_x(f(x,-y))$ para qualquer f discreta). Na literatura, é comum usar também $C = 0$ e esolher A arbitrariamente no intervalo $\left[0, \frac{1}{2}\right]$ sem uma explicação convincente; acreditamos que

$C = 0$ e $A = \frac{1}{6}$ geram a aproximação mais “corretamente assimétrica”, como mostraremos na seção seguinte.

De maneira análoga, a expressão $o\left(h^2\right)$ mais genérica para D_{xx} é

$$D_{xx} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{A}{h^2}M_{xyy} + \frac{B}{h^2}M_{xxy} + \frac{C}{h^2}M_{xxyy}$$

mas por motivos de simetria rotacional a serem explicitados mais tarde preferimos $A = B = 0$ e $C = \frac{1}{12}$ (que geram o conhecido “Laplaciano simétrico” encontrado na literatura).

Para D_{xy} temos a expressão $o\left(h^2\right)$ mais geral como

$$D_{xy} = \frac{1}{4h^2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{A}{h^2}M_{xyy} + \frac{B}{h^2}M_{xxy} + \frac{C}{h^2}M_{xxyy}$$

mas preferimos $A = B = C = 0$.

Finalmente, mostraremos que a única aproximação coerente de D_{xxyy} em tamanho 3×3 é a apresentada acima.

8.3 Séries de Taylor e Derivadas Discretas*

8.3.1 Caso 1D

Máscaras de tamanho 2

Para obter máscaras de tamanho 2 que sejam candidatos para D_x, usamos uma das seguintes séries de Taylor de f

$$f\left(x \pm h\right) = f\left(x\right) \pm hf'\left(x\right) + \frac{h^2}{2}f''\left(x\right) \pm \frac{h^3}{3!}f'''\left(x\right) + o\left(h^4\right)$$

Então

$$\begin{aligned} \frac{f\left(x+h\right) - f\left(x\right)}{h} &= f'\left(x\right) + \frac{h}{2}f''\left(x\right) + o\left(h^2\right) \\ \frac{f\left(x\right) - f\left(x-h\right)}{h} &= f'\left(x\right) - \frac{h}{2}f''\left(x\right) + o\left(h^2\right) \end{aligned}$$

nos dão aproximações $o\left(h\right)$ para $f'\left(x\right)$ cujos erros são comandados pela segunda derivada de f. As máscaras correspondentes são

$$D_{x+} = \frac{1}{h}\left[-\mathring{1}\ 1\right] \text{ ou } D_{x-} = \frac{1}{h}\left[-1\ \mathring{1}\right]$$

Máscaras de tamanho 3

Se usarmos ambas as séries de Taylor ao mesmo tempo, temos

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=f'(x)+\frac{h^2}{3}f'''(x)+o\left(h^3\right)$$

que gera uma aproximação $o\left(h^2\right)$ de $f'(x)$, comandada pela terceira derivada de f, cuja máscara é a conhecida aproximação central da derivada

$$D_x=\frac{1}{2h}\left[-1\ 0\ 1\right]$$

Note que $D_x = D_{x+} * \frac{1}{2}\left[1\ \mathring{1}\right] = D_{x-} * \frac{1}{2}\left[\mathring{1}\ 1\right]$; portanto, D_x pode ser vista como uma versão suavizada de D_{x+} ou D_{x-}. A série de Taylor explicita porque D_x é uma aproximação melhor do que D_{x+} ou D_{x-}: ganhamos uma ordem de aproximação (de h a h^2). O preço a pagar é uma máscara maior.

Podemos também usar uma combinação linear de $f(x+h)$, $f(x-h)$ e $f(x)$ para zerar os termos em f e f':

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+\frac{h^2}{4!}f''''(x)+o\left(h^3\right)$$

obtendo uma aproximação $o\left(h^2\right)$ de $f''(x)$ comandada pela quarta derivada de f e cuja máscara é

$$D_{xx}=\frac{1}{h^2}\left[1\ -2\ 1\right]$$

Máscaras de tamanho 4

Para tamanho 4, escrevemos as séries em ordem $o\left(h^5\right)$

$$f(x+2h)=f(x)+2hf'(x)+\frac{4h^2}{2!}f''(x)+\frac{8h^3}{3!}f'''(x)+\frac{16h^4}{4!}f^{iv}(x)+o\left(h^5\right)$$

$$f(x\pm h)=f(x)\pm hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)\pm\frac{h^3}{3!}f'''(x)+\frac{h^4}{4!}f^{iv}(x)+o\left(h^5\right)$$

Para simplificar o trabalho, escreva os coeficientes destas séries numa matriz 4×4 como abaixo

	f	hf'	$\frac{h^2}{2}f''$	$\frac{h^3}{3}f'''$
$f(x-h)$	1	-1	1	-1
$f(x)$	1	0	0	0
$f(x+h)$	1	1	1	1
$f(x+2h)$	1	2	4	8

A matriz acima mostra como escrever $f(x+ah)$ $(a=-1,0,1,2)$ como combinações lineares das derivadas de f no ponto x (de acordo com as séries de Taylor de ordem $o\left(h^4\right)$). Queremos exatamente o contrário: escrever as derivadas de f como combinações lineares das expressões do tipo $f(x+ah)$. Para tanto, tudo o que temos de fazer é inverter a matriz 4×4 acima! Assim, como

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{6} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} \end{bmatrix}$$

então, lendo as linhas

$$\begin{aligned} f(x) &= 0f(x-h) + f(x) + 0f(x+h) + 0f(x+2h) + o\left(h^4\right) \\ hf'(x) &= -\frac{1}{3}f(x-h) - \frac{1}{2}f(x) + f(x+h) - \frac{1}{6}f(x+2h) + o\left(h^4\right) \\ \frac{h^2}{2}f''(x) &= \frac{1}{2}f(x-h) - f(x) + \frac{1}{2}f(x+h) + 0f(x+2h) + o\left(h^4\right) \\ \frac{h^3}{3!}f'''(x) &= -\frac{1}{6}f(x-h) + \frac{1}{2}f(x) - \frac{1}{2}f(x+h) + \frac{1}{6}f(x+2h) + o\left(h^4\right) \end{aligned}$$

Enquanto a primeira expressão não é útil, as outras três nos dão máscaras de tamanho 4 que aproximam as derivadas do lado esquerdo. As máscaras são

$$\begin{aligned} {}_4D_{x+} &= \frac{1}{6h}\left[-2\ -\mathring{3}\ 6\ -1\right] \\ D_{xx} &= \frac{1}{h^2}\left[1\ -\mathring{2}\ 1\ 0\right] \\ D_{xxx+} &= \frac{1}{h^3}\left[-1\ \mathring{3}\ -3\ 1\right] \end{aligned}$$

que correspondem a aproximações **pelo menos** $o\left(h^3\right)$, $o\left(h^2\right)$ e $o(h)$, respectivamente. Note que D_{xx} é a máscara de tamanho 3 encontrada anteriormente. Analisemos as outras máscaras individualmente.

Primeiro, note que ${}_4D_{x+} = D_{x+} * \frac{1}{6}[2\ 5\ -1]$ pode ser considerada um tipo de suavização de D_{x+}. A combinação correspondente

$$\frac{-2f(x-h) - 3f(x) + 6f(x+h) - f(x+2h)}{6h} = f'(x) + \frac{h^3}{12}f^{iv}(x) + o\left(h^4\right)$$

nos dá uma aproximação $o\left(h^3\right)$ cujo erro é comandado pela quarta derivada.

Para D_{xxx+}, obtemos a combinação

$$\frac{-f(x-h) + 3f(x) - 3f(x+h) + f(x+2h)}{h^3} = f'''(x) + \frac{h}{2}f^{iv}(x) + o\left(h^2\right)$$

que nos dá uma aproximação $o(h)$ cujo erro também é comandado pela quarta derivada. Note que $D_{xxx+} = D_{xx} * D_{x+}$.

Outras possibilidades surgem se utilizarmos a série de $f(x-2h)$ ao invés de $f(x+2h)$. Enquanto a máscara para D_{xx} não muda, temos

$$\begin{aligned} {}_4D_{x-} &= \frac{1}{6h}\left[1\ -6\ \dot{3}\ 2\right] = D_{x-} * \frac{1}{6}[-1\ 5\ 2] \\ D_{xxx-} &= \frac{1}{h^3}\left[-1\ 3\ \mathring{3}\ 1\right] = D_{xx} * D_{x-} \end{aligned}$$

Máscaras de tamanho 5

As séries

$$f(x \pm 2h) =$$
$$= f(x) \pm 2hf'(x) + \frac{4h^2}{2!}f''(x) \pm \frac{8h^3}{3!}f'''(x) + \frac{16h^4}{4!}f^{iv}(x) \pm \frac{32h^5}{5!}f^{v}(x) + o\left(h^6\right)$$

$$f(x \pm h) =$$
$$= f(x) \pm hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) \pm \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{iv}(x) \pm \frac{h^5}{5!}f^{v}(x) + o\left(h^6\right)$$

dão origem à matriz (em $o\left(h^5\right)$)

	f	hf'	$\frac{h^2}{2}f''$	$\frac{h^3}{3!}f'''$	$\frac{h^4}{4!}f^{iv}$
$f(x-2h)$	1	-2	4	-8	16
$f(x-h)$	1	-1	1	-1	1
$f(x)$	1	0	0	0	0
$f(x+h)$	1	1	1	1	1
$f(x+2h)$	1	2	4	8	16

cuja inversa é

	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$
f	0	0	1	0	0
hf'	$\frac{1}{12}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$
$\frac{h^2}{2}f''$	$-\frac{1}{24}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{5}{4}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{24}$
$\frac{h^3}{3!}f'''$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$	0	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{12}$
$\frac{h^4}{4!}f^{iv}$	$\frac{1}{24}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{24}$

As linhas nos dão as seguintes máscaras

$$
\begin{aligned}
{}_5D_x &= \frac{1}{12h}\left[1\ -8\ 0\ 8\ -1\right] = D_x * \frac{1}{6}\left[-1\ 8\ -1\right] \\
{}_5D_{xx} &= \frac{1}{12h^2}\left[-1\ 16\ -30\ 16\ -1\right] = D_{xx} * \frac{1}{12}\left[-1\ 14\ -1\right] \\
D_{xxx} &= \frac{1}{2h^3}\left[-1\ 2\ 0\ -2\ 1\right] = D_x * D_{xx} \\
D_{xxxx} &= \frac{1}{h^4}\left[1\ -4\ 6\ -4\ 1\right] = D_{xx} * D_{xx}
\end{aligned}
$$

que serão aproximações pelo menos $o\left(h^4\right)$, $o\left(h^3\right)$, $o\left(h^2\right)$ e $o(h)$ de suas respectivas derivadas.

De fato, ${}_5D_x$ corresponde à expressão

$$\frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h} =$$
$$= f'(x) - \frac{2h^4}{5}f^{v}(x) + o\left(h^5\right)$$

que nos dá uma aproximação $o\left(h^4\right)$ cujo erro é comandado pela quinta derivada de f.

Para ${}_5D_{xx}$, obtemos um "cancelamento extra" e

$$\frac{-f(x-2h)+16f(x-h)-30f(x)+16f(x+h)-f(x+2h)}{12h^2} = \\ = f''(x) - \frac{4h^4}{15} f^{vi}(x) + o\left(h^5\right)$$

é uma aproximação $o\left(h^4\right)$ com erro comandado pela sexta derivada[1].

Para D_{xxx}, temos uma aproximação $o\left(h^2\right)$ comandada pela quinta derivada

$$\frac{-f(x-2h)+2f(x-h)-2f(x+h)+f(x+2h)}{2h^3} = \\ = f'''(x) - 3h^2 f^{v}(x) + o\left(h^3\right)$$

Finalmente, para D_{xxxx}, obtemos uma ordem extra: $o\left(h^2\right)$ na sexta derivada

$$\frac{f(x-2h)-4f(x-h)+6f(x)-4f(x+h)+f(x+2h)}{h^4} = \\ = f^{iv}(x) + 4h^2 f^{vi}(x) + o\left(h^3\right)$$

Conclusão

Note como as melhores máscaras de tamanho 5 para a terceira e quarta derivadas são $D_{xxx} = D_x * D_{xx}$ e $D_{xxxx} = D_{xx} * D_{xx}$ (ambas de ordem $o\left(h^2\right)$). Em geral, pode-se mostrar que a relação recursiva

$$D_{x^n} = D_{x^{n-2}} * D_{xx}$$

nos dá aproximações $o\left(h^2\right)$ cujas máscaras tem tamanho $n+1$ (se n é par) ou $n+2$ (se n é ímpar). Tais derivadas discretas são ótimas para seus tamanhos e simples de computar, justificando essa nossa escolha.

O leitor familiar com Álgebra Linear poderá entender o problema de obtenção de máscaras da seguinte forma:

- O espaço das máscaras de tamanho n é identificado com $\mathbb{R}^n$;
- Uma base é dada pelas máscaras elementares $e_1 = [1\ 0\ 0\ ...\ 0]$, $e_2 = [0\ 1\ 0\ ...\ 0]$, ... e $e_n = [0\ 0\ 0\ ...\ 1]$, cada uma delas representando uma expressão do tipo $f(x \pm ah)$;

[1] Note que esta aproximação é melhor do que a gerada por $D_x * D_x = \frac{1}{4h^2}[1\ 0\ -2\ 0\ 1]$. De fato, esta expressão corresponde a

$$\frac{f(x-2h)-2f(x)+f(x+2h)}{4h^2} = f''(x) + \frac{h^2}{3} f^{iv}(x) + o\left(h^3\right)$$

que geraria uma aproximação apenas $o\left(h^2\right)$ (precisão já obtida com a máscara de tamanho 3).

- As séries de Taylor de ordem $o(h^n)$ nos mostram como escrever a base $\{e_i\}$ em termos de uma outra base, dada pelos vetores $v_0 = f(x)$, $v_1 = hf'(x)$, $v_2 = \frac{h^2}{2} f''(x)$, ..., $v_n = \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x)$;

- As matrizes montadas a partir dos coeficientes da série de Taylor são nada mais que matrizes de mudança de base!

- Queremos as derivadas escritas como máscaras, isto é, queremos escrever os vetores v_j em função dos vetores e_i; portanto, tudo que há a fazer é obter a matriz de mudança de base inversa.

- Note que as matrizes que aparecem segundo este método serão matrizes de Vandermonde **não-singulares**, justificando o porquê de $\{v_j\}$ ser de fato uma base; assim, o método funciona para qualquer tamanho de máscara desejado.

8.3.2 Caso 2D

O método acima pode ser estendido para o caso bidimensional se utilizarmos séries de Taylor a duas variáveis. Na primeira subseção abaixo, abordamos o problema de determinar boas máscaras 3×3 na forma da resolução de um sistema linear de equações; veremos que sobram 3 "graus de liberdade" na determinação das derivadas de primeira e segunda ordem, e restringimos tal liberdade procurando outras propriedades desejáveis de nossas aproximações (além da coerência quando $h \to 0$).

A presença de tais graus de liberdade não deve surpreender os leitores mais familiares com Álgebra Linear: a escolha da "base de derivadas" (a base $\{v_j\}$ na notação anterior) não é tão imediata quanto era no caso 1D. No exemplo acima, as máscaras 3×3 correspondem a um espaço de dimensão 9. Se escrevermos as séries de Taylor em ordem $o\left(h^3\right)$, obtemos as derivadas f, f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy} e f_{yy} – 6 candidatos a vetores. Assim, haverá uma ambigüidade na escolha de máscaras, explicando a presença dos 3 graus de liberdade. Por outro lado, a utilização de ordem $o\left(h^4\right)$ leva a 10 candidatos a vetores; pior ainda, não só eles são linearmente dependentes (como teriam de ser), mas pode-se ver que estes 10 candidatos varrem um espaço de dimensão apenas 8. Mesmo que joguemos fora um deles (digamos, f_{xxx}), ainda não podemos resolver o problema de mudança de base! Na segunda subseção abaixo mostramos como escolher uma base de derivadas corretamente.

Máscaras 3×3 por sistemas lineares

Como no caso 1D, utilizamos combinações lineares de fórmulas de Taylor; a duas variáveis e em ordem $o\left(h^4\right)$, temos

$$\begin{aligned} f(x+ah, y+bh) = {} & f(x,y) + (ah) f_x(x,y) + (bh) f_y(x,y) + \\ & + \frac{(ah)^2}{2} f_{xx}(x,y) + (ah)(bh) f_{xy}(x,y) + \frac{(bh)^2}{2} f_{yy}(x,y) + \\ & + \frac{(ah)^3}{3!} f_{xxx}(x,y) + \frac{3(ah)^2(bh)}{3!} f_{xxy}(x,y) + \\ & + \frac{3(ah)(bh)^2}{3!} f_{xyy}(x,y) + \frac{(bh)^3}{3!} f_{yyy}(x,y) + o\left(h^4\right) \end{aligned}$$

Portanto uma máscara 3×3 dada por

$$\begin{bmatrix} \alpha_6 & \alpha_7 & \alpha_8 \\ \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_0 & \alpha_1 & \alpha_2 \end{bmatrix}$$

corresponde a $\alpha_0 f(x-h, y-h) + \alpha_1 f(x, y-h) + ... + \alpha_8 f(x+h, y+h)$, que terá os seguintes termos de ordem até h^2

$$\begin{aligned} \text{em } f &: \alpha_0+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4+\alpha_5+\alpha_6+\alpha_7+\alpha_8 \\ \text{em } hf_x &: -\alpha_0+\alpha_2-\alpha_3+\alpha_5-\alpha_6+\alpha_8 \\ \text{em } hf_y &: -\alpha_0-\alpha_1-\alpha_2+\alpha_6+\alpha_7+\alpha_8 \\ \text{em } \frac{h^2}{2}f_{xx} &: \alpha_0+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_5+\alpha_6+\alpha_8 \\ \text{em } \frac{h^2}{2}f_{yy} &: \alpha_0+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_6+\alpha_7+\alpha_8 \\ \text{em } h^2 f_{xy} &: \alpha_0-\alpha_2-\alpha_6+\alpha_8 \end{aligned}$$

Agora escolha a sua derivada discreta favorita e resolva o sistema linear correspondente! Por exemplo, para encontrar uma aproximação para f_x, force os termos acima a serem $0, \frac{1}{h}, 0, 0, 0$ e 0 respectivamente – encontrar-se-á uma aproximação **pelo menos** $o\left(h^2\right)$ para tal derivada (após a inevitável divisão por h); para encontrar f_{xx}, tente $0, 0, 0, \frac{2}{h^2}, 0$ e 0 (aproximação **pelo menos** $o(h)$ de f_{xx}); para f_{xy}, tente $0, 0, 0, 0, 0, \frac{2}{h^2}$; e assim por diante.

Vale a pena notar que há 6 equações lineares para 9 incógnitas; portanto, nossas soluções terão 3 graus de liberdade. Aliás, como os sistemas de equações lineares para f_x, f_{xx}, f_{xy}, etc. são **exatamente os mesmos a menos dos termos independentes**, vale a pena encontrar primeiro a solução homogênea do sistema linear (que nos dá os tais 3 graus de liberdade). Igualando os 6 termos acima a 0, encontramos a seguinte solução homogênea

$$S_0 : \begin{bmatrix} \alpha_6 & \alpha_7 & \alpha_8 \\ \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_0 & \alpha_1 & \alpha_2 \end{bmatrix} = AM_{xyy} + BM_{xxy} + CM_{xxyy}$$

Agora, basta encontrar uma solução particular para cada sistema mencionado acima. Por exemplo, o sistema linear para f_x tem como solução particular

$$\alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_4 = \alpha_7 = \alpha_8 = \alpha_9 = 0;\ \alpha_3 = -\frac{1}{2h};\ \alpha_5 = \frac{1}{2h}$$

chegando à solução geral

$$D_x = \frac{1}{2h}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{S_0}{h}$$

(separamos h dos coeficientes A, B e C dentro de S_0 por conveniência).

Similarmente, as soluções particulares para D_{xx} e D_{xy} dão as expressões gerais

$$D_{xx} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{S_0}{h^2}$$
$$D_{xy} = \frac{1}{4h^2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{S_0}{h^2}$$

As expressões gerais de D_y e D_{yy} são análogas às de D_x e D_{xx}.

Agora, qual o significado de cada um desses graus de liberdade em S_0? Como escolher os seus parâmetros? Para responder a esta pergunta, temos de voltar às Fórmulas de Taylor e usar ordem $o\left(h^6\right)$. Os termos até h^2 já haviam sido determinados; os termos com h^3 e h^4 são

$$\begin{aligned}
\text{em } \frac{h^3}{3!}f_{xxx} &: \ -\alpha_0 + \alpha_2 - \alpha_3 + \alpha_5 - \alpha_6 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } hf_x\text{)} \\
\text{em } \frac{3h^3}{3!}f_{xxy} &: \ -\alpha_0 - \alpha_2 + \alpha_6 + \alpha_8 \\
\text{em } \frac{3h^3}{3!}f_{xyy} &: \ -\alpha_0 + \alpha_2 - \alpha_6 + \alpha_8 \\
\text{em } \frac{h^3}{3!}f_{yyy} &: \ -\alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } hf_y\text{)} \\
\text{em } \frac{h^4}{4!}f_{xxxx} &: \ \alpha_0 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_5 + \alpha_6 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } \frac{h^2}{2}f_{xx}\text{)} \\
\text{em } \frac{4h^4}{4!}f_{xxxy} &: \ \alpha_0 - \alpha_2 - \alpha_6 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } h^2 f_{xy}\text{)} \\
\text{em } \frac{6h^4}{4!}f_{xxyy} &: \ \alpha_0 + \alpha_2 + \alpha_6 + \alpha_8 \\
\text{em } \frac{4h^4}{4!}f_{xyyy} &: \ \alpha_0 - \alpha_2 - \alpha_6 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } h^2 f_{xy}\text{)} \\
\text{em } \frac{h^4}{4!}f_{yyyy} &: \ \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 \text{ (igual ao termo em } \frac{h^2}{2}f_{yy}\text{)}
\end{aligned}$$

Assim, estabelecemos as seguintes 9 correspondências (aqui com termos em h^5 também; a última foi calculada em $o\left(h^8\right)$)

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = f$$

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = hf_x + \frac{h^3}{6}f_{xxx} + \frac{h^5}{120}f_{xxxxx} + o\left(h^6\right)$$

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = hf_y + \frac{h^3}{6}f_{yyy} + \frac{h^5}{120}f_{yyyyy} + o\left(h^6\right)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = h^2 f_{xx} + \frac{h^4}{12}f_{xxxx} + o\left(h^6\right)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = h^2 f_{yy} + \frac{h^4}{12}f_{yyyy} + o\left(h^6\right)$$

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot f = h^2 f_{xy} + \frac{h^4}{6}f_{xxxy} + \frac{h^4}{6}f_{xyyy} + o\left(h^6\right)$$

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot f = h^3 f_{xyy} + \frac{20h^5}{5!}f_{xxxyy} + \frac{10h^5}{5!}f_{xyyyy} + o\left(h^6\right)$$

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \cdot f = h^3 f_{xxy} + \frac{10h^5}{5!}f_{xxxxy} + \frac{20h^5}{5!}f_{xxyyy} + o\left(h^6\right)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \cdot f = h^4 f_{xxyy} + \frac{h^6}{12}\left(f_{xxxxyy} + f_{xxyyyy}\right) + o\left(h^8\right)$$

que explicitam uma base do espaço vetorial de todas as máscaras 3×3 que é adequado à descrição das suas correspondentes aproximações de Taylor. Estas relações são fundamentais no entendimento da relação entre máscaras e aproximações discretas de derivadas! Por exemplo, note que as 3 últimas expressões (correspondentes aos tais graus de liberdade) são de ordem h^3 e h^4, e portanto não farão diferença alguma se procuramos combinações lineares que são aproximações $o\left(h^2\right)$ de algo! Denotaremos as 9 máscaras acima respectivamente por M_0, M_x, M_y, M_{xx}, M_{yy}, M_{xy}, M_{xyy}, M_{xxy} e M_{xxyy} (de acordo com o primeiro termo de suas Fórmulas de Taylor).

Muitos argumentariam a esta altura que a melhor escolha para D_x seria então $\frac{M_x}{h}$. Afinal, por que acrescentar M_{xyy}, M_{xxy} ou M_{xxyy}? No entanto, note que a série de Taylor associada a M_x já vem com um termo em f_{xxx} do qual não podemos nos livrar (pelo menos não dentro do tamanho 3×3 imposto).

Talvez a presença dessas outras derivadas de ordem mais alta possa "abrandar" a intrusão do termo em f_{xxx}. A escolha dos termos a serem adicionados dependem do objetivo da aproximação.

Um possível critério de escolha é o seguinte: no caso contínuo, o operador ∂_x não é rotacionalmente simétrico, mas sua integral com relação a x é rotacionalmente simétrica. Em outras palavras, queremos manter a propriedade de que f_x é a derivada com relação a x de um objeto rotacionalmente simétrico (a saber, f). Enquanto é impossível manter tal propriedade no caso discreto (já que a introdução de um grid dificulta até mesmo a definição do conceito "rotacionalmente simétrico"), podemos pelo menos manter tal propriedade na aproximação de Taylor correspondente. Afinal, a aproximação geral de D_x com parâmetros A, B e C corresponde a

$$\begin{aligned}
D_x \cdot f &= \frac{1}{h}\left(M_x + AM_{xyy} + BM_{xxy} + CM_{xxyy}\right) \cdot f = \\
&= f_x + \frac{h^2}{6} f_{xxx} + Ah^2 f_{xyy} + Bh^2 f_{xxy} + Ch^3 f_{xxyy} + o\left(h^4\right) = \\
&= \left(f + h^2\left(\frac{f_{xx}}{6} + Af_{yy}\right) + Bh^2 f_{xy} + Ch^3 f_{xxy}\right)_x + o\left(h^4\right)
\end{aligned}$$

que será a derivada com relação a x de uma expressão rotacionalmente simétrica (em ordem $o\left(h^4\right)$) se e somente se $A = \frac{1}{6}$ e $B = C = 0$. Acrescentamos ainda mais uma ordem para ver que essa escolha de parâmetros nos dá

$$D_x \cdot f = \frac{\partial}{\partial x}\left(f + \frac{h^2}{6}\nabla^2 f\right) + \frac{h^4}{5!}\left(f_{xxxxx} + \frac{10}{3} f_{xxxyy} + \frac{5}{3} f_{xyyyy}\right) + o\left(h^5\right)$$

(note que é impossível conseguir a simetria rotacional em ordem $o\left(h^5\right)$) e a máscara correspondente é, explicitamente

$$D_x = \frac{1}{12h}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -4 & 0 & 4 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(a máscara D_y é obtida de modo análogo).

Uma vantagem adicional de tal escolha é que o cálculo da norma do gradiente usando tais máscaras será automaticamente rotacionalmente simétrico em ordem $o\left(h^4\right)$. De fato, escrevendo $g = f + \frac{h^2}{6}\nabla^2 f$, vê-se que

$$\begin{aligned}
D_x \cdot f = g_x + o\left(h^4\right);\ \ D_y \cdot f = g_y + o\left(h^4\right) \Rightarrow \\
\Rightarrow \left(D_x \cdot f\right)^2 + \left(D_y \cdot f\right)^2 = |\nabla g|^2 + o\left(h^4\right)
\end{aligned}$$

note-se que **nenhuma outra máscara 3×3 apresenta tal simetria no cálculo da norma do gradiente até esta ordem**.

Similarmente, partimos da expressão geral

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{h^2}\left(M_{xx} + AM_{xyy} + BM_{xxy} + CM_{xxyy}\right) \cdot f = \\
&\quad = f_{xx} + \frac{h^2}{12} f_{xxxx} + Ahf_{xyy} + Bhf_{xxy} + Ch^2 f_{xxyy} + o\left(h^3\right) = \\
&\qquad = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(f + Bhf_y + \frac{h^2}{12} f_{xx} + Ch^2 f_{yy}\right) + Ahf_{xxy} + o\left(h^3\right)
\end{aligned}$$

e vemos que D_{xx} será a derivada segunda com relação a x de algo rotacionalmente simétrico até a maior ordem possível quando $A = B = 0$ e $C = \frac{1}{12}$.

Usando esses parâmetros (e uma ordem adicional)

$$D_{xx} \cdot f = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(f + \frac{h^2}{12}\nabla^2 f\right) + o\left(h^4\right)$$

e obtemos uma "simetria rotacional" de ordem $o\left(h^4\right)$! A expressão correspondente de D_{xx} é

$$D_{xx} = \frac{1}{12h^2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 10 & -20 & 10 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

A vantagem adicional desta escolha (e da escolha análoga para D_{yy}) é que o cálculo do Laplaciano usando esta máscara é rotacionalmente simétrico em ordem $o\left(h^4\right)$. De fato, tome $g = f + \frac{h^2}{12}\nabla^2 f$ e temos

$$\begin{aligned}
&D_{xx} \cdot f = \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + o\left(h^4\right); \quad D_{yy} \cdot f = \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + o\left(h^4\right) \Rightarrow \\
&\quad \Rightarrow \left(D_{xx} + D_{yy}\right) \cdot f = \nabla^2 g + o\left(h^4\right)
\end{aligned}$$

e note-se novamente que **nenhuma outra escolha de máscaras** 3×3 **apresenta tal simetria rotacional até esta ordem**.

Para D_{xy}

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{h^2}\left(M_{xy} + AM_{xyy} + BM_{xxy} + CM_{xxyy}\right) = \\
&= f_{xy} + \frac{h^2}{6} f_{xxxy} + \frac{h^2}{6} f_{xyyy} + Ahf_{xyy} + Bhf_{xxy} + Ch^2 f_{xxyy} + o\left(h^3\right) = \\
&\qquad = \frac{\partial^2}{\partial x\, \partial y}\left(f + \frac{h^2}{6}\nabla^2 f + Ahf_y + Bhf_x + Ch^2 f_{xy}\right) + o\left(h^3\right)
\end{aligned}$$

e a escolha natural é de fato $A = B = C = 0$.

Usando uma ordem adicional nota-se que

$$D_{xy} \cdot f = \frac{\partial^2}{\partial x\, \partial y}\left(f + \frac{h^2}{6}\nabla^2 f\right) + o\left(h^4\right)$$

e obtemos novamente $o\left(h^4\right)$ na "simetria" desejada. A expressão final para D_{xy} é

$$D_{xy} = \frac{1}{4h^2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Finalmente, note que a única combinação linear das 9 máscaras acima que dá uma aproximação de D_{xxyy} corresponde a tomarmos apenas a última, a saber

$$D_{xxyy} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

então

$$\begin{aligned} D_{xxyy} \cdot f &= f_{xxyy} + \frac{h^2}{12}\left(f_{xxxxyy} + f_{xxyyyy}\right) + o\left(h^4\right) = \\ &= \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2}\left(f + \frac{h^2}{12}\nabla^2 f\right) + o\left(h^4\right) \end{aligned}$$

é novamente "rotacionalmente simétrica" em $o\left(h^4\right)$.

Método geral

No caso geral, se procurarmos máscaras $m \times n$, a base de derivadas correta a se usar é $\frac{h^{i+j}}{i!j!}f_{x^i y^j}$ onde $i \in \{0, 1, ..., m-1\}$ e $j = \{0, 1, ..., n-1\}$. Com esta base podemos estender o método do caso 1D com sucesso.

- Caso 2×2: usamos a seguinte matriz 4×4

Coef.de $\rightarrow$ em $\downarrow$	f	hf_x	hf_y	$h^2 f_{xy}$
$f(x,y)$	1	0	0	0
$f(x+h,y)$	1	1	0	0
$f(x,y+h)$	1	0	1	0
$f(x+h,y+h)$	1	1	1	1

e sua inversa

	$f(x,y)$	$f(x+h,y)$	$f(x,y+h)$	$f(x+h,y+h)$
f	1	0	0	0
hf_x	-1	1	0	0
hf_y	-1	0	1	0
$h^2 f_{xy}$	1	-1	-1	1

cujas linhas (quando reformatadas em 2×2) nos dão

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot f = hf_x + \frac{h^2}{2} f_{xx} + \frac{h^3}{3!} f_{xxx} + o\left(h^4\right)$$
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \cdot f = hf_y + \frac{h^2}{2} f_{yy} + \frac{h^3}{3!} f_{yyy} + o\left(h^4\right)$$
$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot f = h^2 f_{xy} + \frac{h^3}{2} f_{xxy} + \frac{h^3}{2} f_{xyy} + o\left(h^4\right)$$

(note como temos de verificar para onde vão os termos f_{xx} e f_{yy} que não apareciam na nossa base). Uma aproximação de $\frac{\partial}{\partial x}$ tem um grau de liberdade (assim como $\frac{\partial}{\partial y}$); é possível também aproximar $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$ com máscaras 2×2:

$$D_{x+} = \frac{1}{h}\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + C \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\right) \tilde{} \frac{\partial}{\partial x} \qquad o(h)$$
$$D_{x+y+} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tilde{} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \qquad o(h)$$

- Caso 3×3: usamos a seguinte matriz 9×9

Ponto	f	hf_x	$\frac{h^2 f_{xx}}{2}$	hf_y	$h^2 f_{xy}$	$\frac{h^3 f_{xxy}}{2}$	$\frac{h^2 f_{yy}}{2}$	$\frac{h^3 f_{xyy}}{2}$	$\frac{h^4 f_{xxyy}}{4}$
$-h, -h$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
$0, -h$	1	0	0	-1	0	0	1	0	0
$h, -h$	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1
$-h, 0$	1	-1	1	0	0	0	0	0	0
0.0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
$h, 0$	1	1	1	0	0	0	0	0	0
$-h, h$	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1
$0, h$	1	0	0	1	0	0	1	0	0
h, h	1	1	1	1	1	1	1	1	1

cuja inversa é

$$\begin{array}{c} f \\ hf_x \\ \frac{h^2}{2} f_{xx} \\ hf_y \\ h^2 f_{xy} \\ \frac{h^3}{2} f_{xxy} \\ \frac{h^2}{2} f_{yy} \\ \frac{h^3}{2} f_{xyy} \\ \frac{h^4}{4} f_{xxyy} \end{array} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{bmatrix};$$

cada linha desta matriz (depois de uma normalização e colocação em formato 3×3) nos dá uma das máscaras M_0, M_x, M_y, M_{xx}, M_{yy}, M_{xy}, M_{xyy},

M_{xxy} e M_{xxyy}. Como f_{xxx}, f_{yyy}, f_{xxxx}, f_{xxxy}, f_{xyyy} e f_{yyyy} não aparecem diretamente na tabela acima, os seus coeficientes devem ser calculados a posteriori utilizando as máscaras encontradas para que determinemos corretamente todas as expressões em $o\left(h^5\right)$ (como feito na subseção anterior).