

**RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE DISPERSIÓN
PARA LOS MODOS NORMALES
DE UNA RED DE ALAMBRES METÁLICOS ¹**

Alejandro Strejilevich de Loma
Av. Córdoba 2062, 1120 Capital Federal, Argentina

RESUMEN

El objetivo de este trabajo es calcular las raíces complejas de las ecuaciones que surgen al imponer condiciones de contorno a los campos magnético y eléctrico, producidos por efecto de la luz sobre la red. La solución de este problema es un punto central en el control de calidad de la red de transmisión de baja energía diseñada para la misión AXAF de la NASA, y también es útil en casos similares.

En este trabajo primero se demuestra en forma analítica la independencia de las raíces con respecto al ángulo de incidencia de la radiación sobre la red de alambres, hecho desconocido hasta el momento. Luego se prueban métodos numéricos basados en el desarrollo en serie de las funciones trigonométricas, se analiza la relación entre las raíces y los parámetros físicos del problema, y se prueban métodos alternativos basados en sumas y restas de raíces ya calculadas.

El algoritmo definitivo es muy rápido y general, siendo apropiado tanto para los parámetros físicos de interés actuales como para otros que puedan aparecer en el futuro.

ABSTRACT

The aim of this work is to calculate the complex roots of the equations that appear when we impose boundary conditions to the magnetic and electric fields, products of the light on the wire grating. Solve this problem is a central point in the quality control of the low energy transmission grating designed for NASA's mission AXAF, and it is also useful in similar problems.

First in this work it is proved analitically that the roots don't depend on the angle of incidence of the radiation on the wire grating, a fact not known before this moment. Then numerical methods based on power series of the trigonometric functions are tried, it is analyzed the relation between roots and physical parameters of the problem, and alternative methods based on sums and subtractions of roots which have been already worked out are tried.

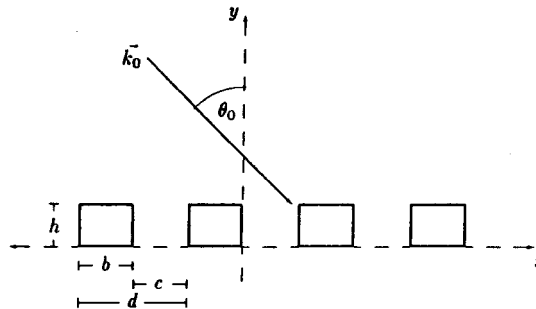
The definitive algorithm is very quick and general, being apropiate to the physical parameters of current interest as well as for other ones which could appear in the future.

1 INTRODUCCIÓN

Motivación

La red de transmisión de baja energía o LETG (low energy transmission grating) diseñada para la futura misión satelital AXAF (Advanced X-ray Astrophysics Facility) de la NASA [1], está formada por alambres de oro de sección rectangular, paralelos y equidistantes. Dicha red debe armarse a partir de más de mil subredes idénticas [2], por lo que son necesarios métodos muy eficientes para controlar tantos elementos. El control de calidad se simplifica si se supone un metal perfectamente conductor (impenetrable), pero de este

¹ Este trabajo es un resumen de la Tesis de Licenciatura en Ciencias de la Computación, del mismo título y autor. El director de tesis fué el Dr. Ricardo A. Depine, y la co-directora fué la C.C. Ana M.C. Ruedin

Figura 1: Red de alambres. Plano (x, y)

modo surgieron diferencias entre la teoría y las mediciones. A la vez, al aplicar resultados que consideraban un metal sólo altamente conductor [3, 4], se presentaron problemas para los valores físicos de interés.

Otro método para el control de calidad proviene de una colaboración entre el Instituto Max Planck de Física Extraterrestre (Garching, Alemania) y el Grupo de Scattering Electromagnético del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (Universidad de Buenos Aires). El método se basa en ajustar datos experimentales de cada muestra con los resultados calculados a partir de una teoría electromagnética especialmente desarrollada [5], y que actualmente está siendo perfeccionada y extendida [6, 7].

Este trabajo está orientado a resolver un problema numérico que, por ser un punto central del nuevo método [5], es un factor muy importante para obtener precisión en los resultados y tiempos de cómputo aceptables. Cabe destacar que la solución a este problema también es aplicable en redes de otros metales con alta conductividad (como la plata y el aluminio), así como en redes de alambres de sección arbitraria [7], donde el problema se resuelve considerando que los alambres están divididos en sectores de sección rectangular.

Descripción de la red

Imaginemos una red de alambres como la de la figura 1, en la cual se ha considerado un sistema de tres coordenadas ortogonales (x, y, z) . Los alambres se extienden a lo largo del eje z , en un plano paralelo al plano (x, z) . Están hechos de un material altamente conductor caracterizado por su índice de refracción complejo $\nu = (\nu_R, \nu_I)$, con $|\nu| \gg 1$ y $\nu_I \gg \nu_R > 0$. La red tiene período d y los alambres de sección rectangular tienen altura h y ancho $b = d - c$, donde c es la longitud del espacio libre entre alambres. Valores típicos para estos parámetros son $|\nu| \approx 4$, $d = 1\mu\text{m}$, $b = c = 0.5\mu\text{m}$ y $h = 0.4\mu\text{m}$.

La red es iluminada con cierta onda cuyo vector de onda \vec{k}_0 tiene un módulo $k_0 = 2\pi/\lambda$, siendo λ la longitud de onda de la radiación incidente. El vector \vec{k}_0 forma un ángulo $\theta_0 \in [0, \pi/2)$ con el eje y , mientras que el plano determinado por el vector \vec{k}_0 y el eje y (plano de incidencia), forma un ángulo $\phi_0 \in [0, 2\pi)$ con el eje x . Llamaremos $\gamma_0 = k_0 \sin \theta_0 \sin \phi_0$ al módulo de la proyección del vector \vec{k}_0 sobre el eje z .

Cuando el vector \vec{k}_0 está contenido en el plano (x, y) , resulta $\phi_0 = 0$ o $\phi_0 = \pi$, y por lo tanto es $\gamma_0 = 0$. Esta situación, conocida como montaje clásico, ha sido más estudiada debido a su mayor sencillez. En ella los vectores de onda de los órdenes difractados están contenidos en el plano de incidencia. Por el contrario, cuando el vector \vec{k}_0 está fuera del plano (x, y) , los vectores de onda de los órdenes difractados forman un cono de eje paralelo a los alambres, por lo que esta situación es conocida como montaje cónico.

2 PLANTEO DEL PROBLEMA

El método físico desarrollado para el control de calidad requiere calcular el campo magnético f^S (para polarización modo S) y el campo eléctrico f^P (para polarización modo P) en el espacio libre entre dos

alambres consecutivos. Estos campos son producidos por efecto de la luz sobre la red de alambres, y en el caso del montaje clásico ($\gamma_0 = 0$) son solución de la ecuación de Helmholtz

$$(\nabla^2 + k_0^2) f(x, y) = 0.$$

Si desarrollamos esta ecuación sabiendo que es $f(x, y) = f_1(x)f_2(y)$ obtenemos

$$f(x, y) = [C_1 \sin(\beta x) + D_1 \cos(\beta x)][C_2 \sin(\mu y) + D_2 \cos(\mu y)], \quad (1)$$

para valores complejos β y μ ligados por

$$\beta^2 + \mu^2 = \Gamma^2 = k_0^2 - \gamma_0^2. \quad (2)$$

Sólo interesan los valores de β y μ con parte real positiva, por lo que podemos obtener μ a partir de esta igualdad como $\mu = \sqrt{\Gamma^2 - \beta^2}$, donde $\sqrt{\quad}$ representa la raíz cuadrada compleja con parte real positiva.

Para determinar β se aplican a la expresión 1 condiciones de contorno que dependen de la impedancia superficial $Z \approx 1/\nu$ [8]. Al exigir que los campos f^S y f^P cumplan las condiciones de contorno en las paredes de los alambres, se llega a las ecuaciones de dispersión

$$\tan(\beta c) = \frac{2\beta\eta^S}{\beta^2 - (\eta^S)^2}, \quad (3)$$

para el modo S y

$$\tan(\beta c) = \frac{2\beta\eta^P}{(\beta\eta^P)^2 - 1}, \quad (4)$$

para el modo P , donde

$$\eta^S = \frac{Z\Gamma^2}{ik_0}, \quad (5)$$

y

$$\eta^P = \frac{Zik_0}{\Gamma^2}, \quad (6)$$

son llamadas impedancias superficiales equivalentes. Notar que $Z \rightarrow 0$ si suponemos un material impenetrable; en ese caso las condiciones de contorno dan lugar a las condiciones de Neumann y Dirichlet.

En el caso del montaje cónico ($\gamma_0 \neq 0$) se presentan efectos cruzados de polarización, y las condiciones de contorno establecen relaciones acopladas entre los campos f^S y f^P . Por un procedimiento similar al del montaje clásico, se llega a la ecuación de dispersión

$$\left[\beta\eta^P - 2\eta^S\eta^P \cot(\beta c) + \frac{\mu^2\gamma_0^2\eta^P}{\beta k_0^2} - \frac{\eta^S}{\beta} \right] \left[\beta\eta^P - 2\cot(\beta c) + \frac{\mu^2\gamma_0^2\eta^P}{\beta k_0^2} - \frac{\eta^S}{\beta} \right] = (\eta^S\eta^P - 1)^2. \quad (7)$$

El objetivo de este trabajo es implementar un algoritmo que permita hallar cierto número de raíces complejas β (con $\text{Re}(\beta) > 0$) de las ecuaciones de dispersión del montaje clásico (3 y 4) o del cónico (7), de acuerdo a los parámetros suministrados (ν , c , λ , θ_0 y ϕ_0). En una etapa posterior que excede los límites de este trabajo, se utilizarán dichas raíces para calcular efectivamente los campos de la expresión 1.

3 EL CASO DEL MONTAJE CLÁSICO ($\gamma_0 = 0$)

Resultados anteriores a este trabajo

Si definimos

$$B = \beta c, \quad (8)$$

y

$$S = \eta^S c, \quad (9)$$

la ecuación 3 puede re-escribirse como

$$\tan B = \frac{2BS}{B^2 - S^2}. \quad (10)$$

Esta ecuación es independiente de las unidades. Para resolverla se ensayó un método numérico iterativo que arrojó resultados alentadores. Este método se comenta en la sección 5, junto con otros que son propios.

Ecuaciones parciales

Sería deseable adimensionar también la ecuación 4 del montaje clásico. Si definimos

$$P = (\eta^P)^{-1} c = \frac{c}{\eta^P}, \quad (11)$$

la ecuación 4 puede re-escribirse como

$$\tan B = \frac{2BP}{B^2 - P^2}. \quad (12)$$

Esta ecuación posee la ventaja adicional de tener la misma "forma" que la ecuación 10, lo que permite, en principio, utilizar los mismos métodos para resolver las dos ecuaciones del montaje clásico, resolviendo la misma ecuación una vez para $A = S$ y otra vez para $A = P$. En la sección 5 se investiga esta estrategia.

4 GENERALIZACIÓN

Re-escritura y factorización de la ecuación de dispersión del montaje cónico ($\gamma_0 \neq 0$)

Si definimos

$$B = \beta c, \quad (13)$$

$$S = \eta^S c \frac{k_0^2}{\Gamma^2}, \quad (14)$$

y

$$P = \frac{c}{\eta^P} \frac{k_0^2}{\Gamma^2} = (\eta^P)^{-1} c \frac{k_0^2}{\Gamma^2}, \quad (15)$$

la ecuación 7 del montaje cónico puede re-escribirse como

$$[B^2 - SP - 2BS \cot B] [B^2 - SP - 2BP \cot B] = B^2(S - P)^2,$$

que reordenada apropiadamente resulta

$$[(2BS \cot B) - (B^2 - S^2)] [(2BP \cot B) - (B^2 - P^2)] = 0.$$

Por ser el conjunto de los números complejos un dominio de integridad, dentro de las condiciones del problema las soluciones de esta ecuación son la unión de las soluciones de

$$\tan B = \frac{2BS}{B^2 - S^2}, \quad (16)$$

y

$$\tan B = \frac{2BP}{B^2 - P^2}. \quad (17)$$

Notar que las definiciones 13, 14 y 15, pueden verse como generalizaciones de las 8, 9 y 11 del montaje clásico, dado que coinciden cuando $\gamma_0 = 0$. De este modo las ecuaciones 16 y 17 resultan idénticas a las ecuaciones 10 y 12 del montaje clásico, no sólo en su "forma", sino también con respecto a S y P . Esto permite plantear las ecuaciones de dispersión de manera unificada para los dos montajes.

Independencia de las raíces con respecto a γ_0

Cualquiera sea el valor que tome γ_0 , las raíces β de las ecuaciones de dispersión originales son las mismas. Para probar esto alcanza con mostrar que γ_0 no aparece en las ecuaciones 16 y 17, que como vimos son equivalentes a las ecuaciones de dispersión originales de los dos montajes. Dado que en las ecuaciones 16 y 17 la raíz que se busca es $B = \beta c$, basta ver que ni S ni P están definidos en función de γ_0 . Si utilizamos las definiciones 5 y 14 (que sirven para los dos montajes), y la aproximación $Z \approx 1/\nu$ de la sección 2, podemos comprobar que

$$S = \eta^S c \frac{k_0^2}{\Gamma^2} = \left(\frac{Z\Gamma^2}{ik_0} \right) c \frac{k_0^2}{\Gamma^2} = Z \frac{ck_0}{i} \approx \nu^{-1} \frac{ck_0}{i}, \quad (18)$$

donde ninguno de los factores depende de γ_0 . En forma similar, de acuerdo a las definiciones 6 y 15 tenemos

$$P = (\eta^P)^{-1} c \frac{k_0^2}{\Gamma^2} = \left(\frac{\Gamma^2}{Zik_0} \right) c \frac{k_0^2}{\Gamma^2} = Z^{-1} \frac{ck_0}{i} \approx \nu \frac{ck_0}{i}. \quad (19)$$

Desde el punto de vista de la red de alambres, la independendencia con respecto a γ_0 significa que cualquiera sea el ángulo de incidencia de la radiación, las raíces β son las mismas. Esto no significa que los campos f^S y f^P de la sección 2 coincidan en todos los casos, dado que μ todavía depende de γ_0 según la igualdad 2.

5 UN PRIMER INTENTO DE RESOLVER EL PROBLEMA

Presentaremos ahora estimaciones iniciales y métodos iterativos para hallar raíces B (con $\text{Re}(B) > 0$) de la ecuación

$$\tan B = \frac{2BA}{B^2 - A^2}, \quad (20)$$

con $A = S$ o $A = P$, según las igualdades 18 y 19. Como vimos en la sección 4, esta expresión resume las ecuaciones de dispersión tanto para el montaje clásico como para el cónico.

Métodos iterativos

Supongamos que luego de j iteraciones obtuvimos $\max n + 1$ estimaciones $\{B_n^{(j)}/n = 0 \dots \max n\}$ de $\max n + 1$ raíces de la ecuación 20. Las verdaderas raíces serán de la forma

$$B_n = B_n^{(j)} + \Delta_n^{(j)}, \quad (21)$$

para ciertos valores $\Delta_n^{(j)}$. Por ser B_n las raíces de la ecuación 20 se debe cumplir

$$\tan [B_n^{(j)} + \Delta_n^{(j)}] = \frac{2 [B_n^{(j)} + \Delta_n^{(j)}] A}{[B_n^{(j)} + \Delta_n^{(j)}]^2 - A^2}. \quad (22)$$

Si utilizamos la igualdad para la tangente de una suma y la aproximación $\tan \Delta \approx \Delta$ en el miembro izquierdo de esta ecuación, despreciando algunos términos resulta

$$\Delta_n^{(j)} = \frac{2BA - \tan B (B^2 - A^2)}{(B^2 - A^2)\delta_1 + 2B\delta_2 \tan B + 2BA\delta_3 \tan B - 2A\delta_3}, \quad (23)$$

donde $B = B_n^{(j)}$ y las variables $\delta_k \in \{0, 1\}$ de acuerdo a los términos que despreciemos o no. Dado que hicimos varias aproximaciones para despejar $\Delta_n^{(j)}$, la expresión 21 resulta sólo aproximada, y una nueva estimación de la raíz B_n es entonces

$$B_n^{(j+1)} = B_n^{(j)} + \Delta_n^{(j)}.$$

Como podemos repetir lo que hicimos para esta nueva estimación, las expresiones anteriores proporcionan (para cada elección de las variables δ_k) un posible método iterativo para resolver la ecuación 20.

Llamaremos método iterativo 1 al que resulta de elegir $\delta_1 = \delta_2 = 1$ y $\delta_3 = \delta_4 = 0$ en la expresión 23, y método 2 al que resulta de elegir $\delta_k = 1 \forall k$. El método 1 fue ideado originalmente por el Dr. Ricardo A. Depine para resolver la ecuación 10 del montaje clásico, y surgía de aproximar en forma apropiada la ecuación 22 para $A = S$. Notar que la expresión 23 admite $2^4 - 1 = 15$ elecciones diferentes para las variables δ_k (la única combinación no permitida es $\delta_k = 0 \forall k$); elegimos el método 1 por ser el primero implementado, y el método 2 por ser el que utiliza más información.

Estimaciones iniciales

Si consideramos un material impenetrable ($Z \rightarrow 0$), el miembro derecho de la ecuación 20 tiende a 0, por lo que sus raíces son de la forma $B_n = n\pi$, con n entero no negativo. Para un material altamente conductor ($|Z| \ll 1$), las raíces serán de la forma $B_n = n\pi + \Delta_n$, con $|\Delta_n| \approx 0$, por lo que una posibilidad para las estimaciones iniciales es tomar $B_n^{(0)} = n\pi$.

Observar sin embargo que $B_0^{(0)} = 0\pi$ anula el numerador de la expresión 23. Además, partiendo de $B_n^{(0)} = n\pi$ es posible considerar expresiones más complicadas para la primera iteración. Por tales motivos, si volvemos sobre la ecuación 22 y utilizamos el desarrollo en serie para la tangente (o seno y coseno) en su miembro izquierdo, despreciando algunos términos obtendremos un valor aproximado de $\Delta_n^{(0)}$, el cual nos permitirá dar una nueva estimación $B_n^{(1)}$ de la raíz B_n . Sin embargo, nada nos impide tomar a $\bar{B}_n^{(0)} = B_n^{(1)}$ como estimación inicial, y utilizarla con los métodos iterativos presentados.

Si consideramos sólo ecuaciones lineales, cuadráticas o bicuadradas para $\Delta_n^{(0)}$, siguiendo la estrategia descrita se obtienen 15 estimaciones distintas para la raíz B_0 , y 9 para las raíces B_n con $n > 0$. Casos particulares de estas estimaciones son dos ideadas originalmente por el Dr. Ricardo A. Depine para resolver la ecuación 10 del montaje clásico, las cuales surgían de aproximar de cierta forma la ecuación 22 para $A = S$ y $B_n^{(0)} = n\pi$, resultando una ecuación cuadrática para la raíz B_0 , y otra lineal para las demás raíces.

Resultados obtenidos

Las estimaciones iniciales y métodos iterativos presentados se implementaron en lenguaje FORTRAN, lo mismo que algunas variantes adicionales no mencionadas aquí. Para comentar los resultados obtenidos, dada una estimación inicial $B_n^{(0)}$ de una raíz B_n , definiremos el error inicial como $E_n = |B_n - B_n^{(0)}|$.

Lamentablemente las estimaciones iniciales no resultan apropiadas cuando $|A|$ no es chico. Esto incluye algunos casos particulares del modo S , y prácticamente todos los casos de interés del modo P . En la sección 6 volveremos sobre estos problemas.

Cuando $|A|$ es chico los resultados son buenos. Para la raíz B_0 las mejores (y más costosas) estimaciones son las que involucran resolver ecuaciones bicuadradas para $\Delta_0^{(0)}$. Comparativamente no importa mucho el tiempo necesario para calcular la estimación, dado que se trata de una sola raíz. Con respecto a las demás raíces, en la figura 2 podemos apreciar el comportamiento global de las estimaciones para el caso del modo S . Las estimaciones 2 y 3 (lineales) funcionan bien y son sencillas de calcular, mientras que la 8 (cuadrática) da mejores resultados para raíces distantes de $n\pi$ (estimación 1).

Los métodos iterativos investigados son apropiados dado que convergen correctamente, siempre que el error inicial sea lo suficientemente chico. El método 2 aumenta los casos en los que hay convergencia, a la vez que disminuye la cantidad de iteraciones necesarias para lograrla. Como en la implementación realizada el método 2 no resulta mucho más costoso que el 1, en definitiva se reduce el tiempo de ejecución.

Conviene mencionar que a iguales estimaciones iniciales, la subrutina DZANLY de IMSL Libraries [9] se comporta en forma similar al método iterativo 2 en relación a los casos en los que hay convergencia. En cuanto a la cantidad de iteraciones, casi siempre es considerablemente mayor en DZANLY (más del doble). El tiempo por iteración también crece bastante. El comportamiento de DZANLY empeora si no le son suministradas estimaciones iniciales (hasta cinco veces la cantidad de iteraciones del método 2).

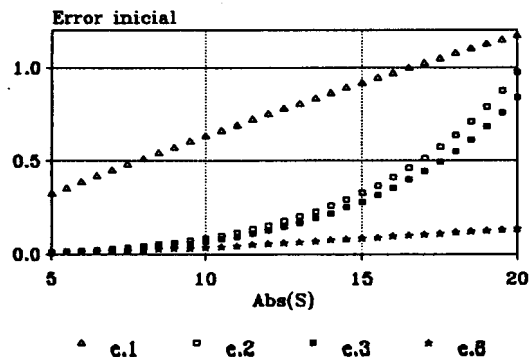


Figura 2: Comportamiento de las estimaciones iniciales para la raíz B_{10} del modo S ($\nu = 0.15 + 4.65i$)

6 RELACIÓN ENTRE LAS RAÍCES Y EL MÓDULO DE LOS PARÁMETROS

A fin de solucionar los problemas que quedaron pendientes en la sección 5, decidimos analizar cómo cambian las raíces de la ecuación de dispersión 20 al modificar el módulo de los parámetros. Se optó por esta investigación debido a que las raíces para $A \rightarrow 0$ y $A \rightarrow \infty$ son conocidas, y en algunos casos los problemas que se presentaron parecían estar relacionados con el módulo de A , que en definitiva depende del módulo de los parámetros según las igualdades 18 y 19.

Los resultados obtenidos indican que tanto para el modo S como para el modo P , hay raíces B_n cercanas a $n\pi$ cuando $|A|$ es chico. Al aumentar $|A|$, las raíces B_0 y B_1 del modo S se desplazan hacia $Si = S \times (0, 1)$. Las demás raíces se desplazan hacia $(n-1)\pi$ para el modo S , y hacia $(n+1)\pi$ para el modo P ; este desplazamiento disminuye al aumentar n (para cada valor de A). No hay raíces cercanas a 0 cuando $|A|$ es grande. Las figuras 3 y 4 muestran el comportamiento descrito para el caso del modo P .

Puede demostrarse analíticamente que para $|A|$ suficientemente grande, $B \approx Si$ es raíz de la ecuación de dispersión para el modo S , y que este es el único caso de raíces alejadas del eje real en los dos modos.

Debido a los desplazamientos mencionados, las estimaciones iniciales de la sección 5 resultan inapropiadas cuando $|A|$ es grande, dado que en estos casos muchas raíces están lejos de cualquier múltiplo de π . Son necesarias por lo tanto nuevas estimaciones que permitan solucionar los problemas pendientes.

7 NUEVAS ESTIMACIONES INICIALES

Raíces $B_0 \approx Si \approx B_1$ del modo S

De acuerdo a los resultados de la sección 6, para $|S|$ suficientemente grande se cumple $B_0 \approx Si \approx B_1$. Por lo tanto, en vez de buscar las raíces B_0 y B_1 cerca de 0 y de π respectivamente, podría ser mejor buscarlas cerca de Si . Esta estrategia funciona bien, y tratándose sólo de dos raíces no ahondaremos en el tema.

Raíces B_n con $n > 1$ del modo S , y raíces del modo P

Si definimos la diferencia entre raíces consecutivas como $F_n^{[1]} = B_{n+1} - B_n$, resulta $B_n = B_{n+1} - F_n^{[1]}$, y una forma de estimar la raíz B_n es estimar la diferencia $F_n^{[1]}$.

En la figura 4 de la sección 6 (o su similar para el modo S), podemos notar que es $F_n^{[1]} \approx \pi$, y una posible estimación para la raíz B_n es entonces

$$B_n^{(0)} = B_{n+1} - \pi,$$

la cual llamaremos de 1 punto en alusión a que es necesario haber calculado una raíz para estimar otra.

La estimación de 1 punto no tiene en cuenta que $F_n^{[1]}$ es sólo cercana a π . Si tenemos dos raíces B_{n+1} y B_{n+2} , podemos suponer que es $F_n^{[1]} \approx F_{n+1}^{[1]}$, de donde resulta la estimación inicial de 2 puntos para la raíz B_n dada por

$$B_n^{(0)} = B_{n+1} - F_{n+1}^{[1]} = 2B_{n+1} - B_{n+2}.$$

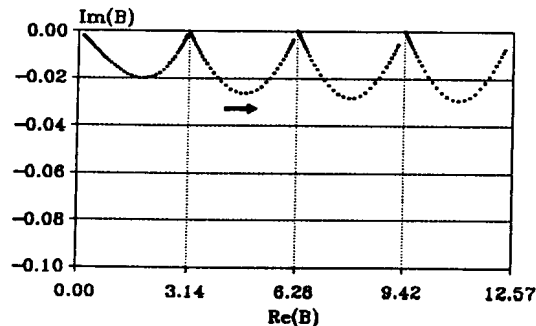


Figura 3: Variación de las raíces del modo P ($\nu = 0.15 + 4.65i$)

Aunque la estimación de 2 puntos tiene en cuenta una diferencia más real entre las raíces, no considera la posible variación entre las sucesivas diferencias. Si tenemos tres raíces B_{n+1} , B_{n+2} y B_{n+3} , podría resultar una mejor estimación si antes de restar la diferencia $F_{n+1}^{[1]}$ de B_{n+1} , corregimos esa diferencia con la variación que hubo entre $F_{n+1}^{[1]}$ y $F_{n+2}^{[1]}$. Notar que la variación entre las diferencias es a su vez una diferencia, y antes de usarla podríamos corregirla con la variación que haya tenido, previamente corregida por su correspondiente variación, y así sucesivamente. Como generalización, dadas entonces $p > 1$ raíces $\{B_{n+k}/k = 1 \dots p\}$, si definimos

$$F_n^{[j]} = \begin{cases} B_n & \text{si } j = 0 \\ F_{n+1}^{[j-1]} - F_n^{[j-1]} & \text{si } j > 0, \end{cases} \quad (24)$$

llamaremos estimación inicial de p puntos para la raíz B_n a

$$B_n^{(0)} = B_{n+1} - \left(F_{n+1}^{[1]} - \left(F_{n+1}^{[2]} \dots - \left(F_{n+1}^{[p-2]} - F_{n+1}^{[p-1]} \right) \dots \right) \right) = \sum_{j=0}^{p-1} (-1)^j F_{n+1}^{[j]}, \quad (25)$$

en alusión a que es necesario haber calculado p raíces para estimar otra.

Es interesante notar que si se define (al estimar cada raíz B_n) la función $r(k) = B_{n+k}$, resulta $B_n^{(0)} = L(0) \approx r(0) = B_n$, donde $L(x)$ es el polinomio de Lagrange que aproxima a la función $r(k)$ en los puntos $\{B_{n+k}/k = 1 \dots p\}$. Es decir, la estimación de p puntos para la raíz B_n es el valor que da el polinomio de Lagrange para $r(0) = B_n$.

Observar que en la práctica (incluso para $p = 1$) necesitamos p estimaciones iniciales "externas" que permitan calcular las raíces B_{n+k} . Una vez calculada la raíz B_n desecharemos B_{n+p} y utilizaremos las raíces $\{B_{n+k}/k = 0 \dots p-1\}$ para estimar B_{n-1} , repitiendo el proceso hasta estimar y calcular todas las raíces.

Puede demostrarse que si en vez de estimar la raíz B_n a partir de las raíces $\{B_{n+k}/k = 1 \dots p\}$ (estimación descendente), se utilizan en forma similar las raíces $\{B_{n-k}/k = 1 \dots p\}$ (estimación ascendente), los errores iniciales se desplazan p raíces hacia arriba (es decir, E_{n+p} ascendente es igual a E_n descendente). Por lo tanto, lo que determina mayormente la ventaja de un tipo de estimación sobre la otra es la facilidad con la que se calculan las raíces externas, que no tienen errores iniciales en común con el otro tipo. De acuerdo a esto, para $|A|$ no muy grande convendrá utilizar la estimación descendente empezando por la raíz a calcular de mayor subíndice, dado que es esperable que el desplazamiento comentado en la sección 6 no la afecte demasiado; para $|A|$ realmente grande utilizaremos la estimación ascendente empezando por la raíz de menor subíndice, ya que desplazamiento será tal en ella que de todos modos estará cerca de $(n \pm 1)\pi$ (según el modo), y será igual fácil de estimar con alguna de las estimaciones de la sección 5.

En favor de la estimación de p puntos podemos decir que el almacenamiento adicional requerido es muy poco ($p-1$ diferencias), que las operaciones en la expresión 25 son las más rápidas en una computadora (sumas y restas), y que dicha expresión puede simplificarse modificando levemente la definición 24.

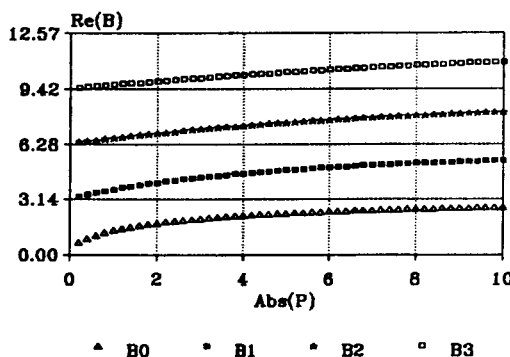


Figura 4: Variación de las raíces del modo P ($\nu = 0.15 + 4.65i$). Parte real

Resultados obtenidos

La figura 5 muestra un ejemplo del comportamiento global de las estimaciones iniciales de p puntos. Tanto para las raíces B_n con $n > 1$ del modo S , como para las raíces del modo P , los resultados son muy buenos. No hace falta usar muchos puntos para lograr mejores estimaciones iniciales que las de la sección 5. Si las raíces externas son correctas, esta estrategia funciona bien para valores diversos de $|A|$. En general los errores iniciales disminuyen conforme se usan más puntos para hacer el cálculo, pero llega un momento en que se tarda más en agregar un punto que la disminución producida por la mejor estimación.

8 ALGORITMO DEFINITIVO

El resultado final de este trabajo es la implementación de dos subrutinas en lenguaje FORTRAN (una para cada modo) que permiten hallar cierto número de raíces complejas de las ecuaciones de dispersión, una vez suministrados los parámetros necesarios.

Para lograr convergencia se eligió en todos los casos el método iterativo 2 de la sección 5, variando en cambio las estimaciones iniciales de acuerdo al módulo de $A = S$ o $A = P$. La mayoría de las raíces son estimadas con la estimación de 5 puntos de la sección 7. En estos casos se utiliza primero la estimación 8 de la sección 5 para estimar dos raíces, luego la estimación de 2 puntos de la sección 7 para estimar otra, después la de 3 puntos, y finalmente la de 4, obteniéndose de esta forma las 5 raíces externas necesarias. Se comienza con la estimación 8 porque da buenos resultados aún con aquellas raíces que están bastante lejos de $n\pi$, y el éxito de la estimación de p puntos depende fuertemente de las raíces externas.

En la figura 6 podemos ver una salida obtenida utilizando una de las subrutinas mencionadas. No hay mucho que agregar a lo ya dicho en las secciones 5 y 7. En principio no existe límite para los valores de $|A|$ que el algoritmo definitivo maneja en forma rápida y correcta. El algoritmo también funciona de manera eficiente para valores diversos del ángulo de A . Los errores iniciales son muy bajos en casi todos los casos. Esto produce que para precisiones bastante altas (10^{-10}), la cantidad de iteraciones rara vez supere a 5, y en promedio sea bastante menor que 3. Algunas raíces incluso son halladas en sólo una iteración.

9 CONCLUSIONES

La factorización de la ecuación de dispersión del montaje cónico nos permitió demostrar la independencia de las raíces con respecto al ángulo de incidencia de la radiación sobre la red de alambres. Ambos hechos eran conocidos en el caso de un material perfectamente conductor, pero al considerar conductividad finita se presentan efectos cruzados de polarización, por lo cual la factorización misma resulta sorprendente, más aún la independencia. De este modo la independencia de las raíces no sólo simplifica notablemente el problema numérico de su cálculo, sino que además interesa desde el punto de vista teórico.

La re-escritura de las ecuaciones parciales nos permitió desarrollar e implementar en forma más o menos sencilla, prácticamente todos los métodos numéricos razonables basados en aproximar las funciones trigo-

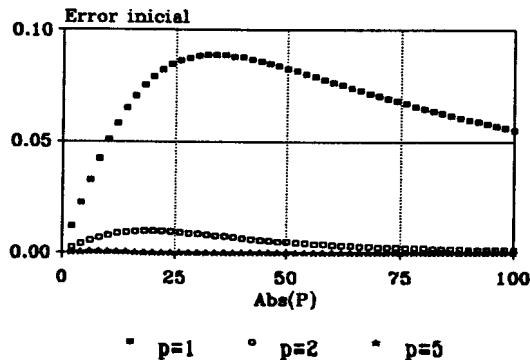


Figura 5: Estimaciones iniciales de p puntos para la raíz B_{10} del modo P ($\nu = 0.15 + 4.65i$)

```

LONGITUD DE ONDA = 0.31          ERROR PERMITIDO = 1.00E-010
*****
>>> EST.INICIAL      | IT      RAIZ B      | B-BINI
-----|-----|-----|-----
3.0693928100  -.0022692567 | 2 3.0693273612  -.0022755245 | .0000657482
6.1393527143  -.0044850473 | 2 6.1388380856  -.0045338472 | .0005169373
9.2083488099  -.0067921698 | 2 9.2087128134  -.0067581909 | .0003655860
12.2789515448 -.0089485557 | 2 12.2791268381 -.0089326066 | .0001760174
15.3502554528 -.0110411453 | 2 15.3502476732 -.0110423351 | .0000078700
18.4222350530 -.0130738067 | 2 18.4222328917 -.0130741107 | .0000021826
21.4952301257 -.0150161619 | 2 21.4952282986 -.0150163965 | .0000018421
24.5693679307 -.0168593838 | 2 24.5693664806 -.0168595427 | .0000014588
27.6447668065 -.0185957869 | 1 27.6447657550 -.0185958690 | .0000010547
30.7215301693 -.0202196645 | 1 30.7215295176 -.0202196735 | .0000006517
33.7997462433 -.0217272329 | 1 33.7997459744 -.0217271767 | .0000002747
...

```

Figura 6: Salida obtenida utilizando el algoritmo definitivo implementado

nométricas por medio de su desarrollo en serie. Dichos métodos resultaron en algunos casos insuficientes, lo que nos llevó a desarrollar e implementar métodos alternativos.

El algoritmo definitivo implementado supera tanto en rapidez como en variedad de los parámetros que acepta, a otros algoritmos conocidos (orientados o no al problema) con los que se intentó resolver las ecuaciones de dispersión. Esto permite solucionar de manera eficiente tanto los problemas actuales como otros similares que puedan aparecer en el futuro.

REFERENCIAS

- [1] A. C. Brinkman, J. J. van Rooijen, J. A. M. Bleeker, J. H. Dijkstra, J. Heise, P. A. J. de Korte, R. Mewe, T. Paerels, "Low energy X-ray transmission grating spectrometer for AXAF", en X-ray Instrumentation in Astronomy, J. L. Culhane, editor, Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. 597, 1985, 232-237.
- [2] H. Brauningner, H. Kraus, H. Dangschat, P. Predehl, J. Trumper, "Fabrication of transmission gratings for use in cosmic X-ray and XUV astronomy", Applied Optics 18, 1979, 3502-3505.
- [3] L. C. Botten, M. S. Craig, R. C. McPhedran, "Complex zeros of analytic functions", Computer Physics Communications 29, 1983, 245-259.
- [4] A. Roberts, R. C. McPhedran, "Power losses in highly conducting lamellar gratings", Journal of Modern Optics 34, 1987, 511-538.
- [5] H. Lochbihler, R. A. Depine, "Highly conducting wire gratings in the resonance region", Applied Optics 32, 1993, 3459-3465.
- [6] H. Lochbihler, R. A. Depine, "Characterization of highly conducting wire gratings using an electromagnetic theory of diffraction", Optics Communications 100, 1993, 231-239.
- [7] H. Lochbihler, R. A. Depine, "Diffraction from highly conducting wire gratings of arbitrary cross-section", Journal of Modern Optics 40, 1993, 1273-1298.
- [8] R. A. Depine, C. I. Valencia, "The Leontovich boundary condition in problems of conical diffraction", Optik 92, 1993, 129-133.
- [9] IMSL Inc., "User's Manual - MATH/LIBRARY", IMSL Inc., 1987, 767-769.

