UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Matemática

Tesis de Licenciatura

Scattering electromagnético por estructuras cristalinas

Agustín Fernández Lado

Director: Dr. Oscar P. Bruno

20 de Diciembre de 2013

Índice general

1. Scattering electromagnético **5**
1.1. Scattering de ondas electromagnéticas 5
1.2. Obstáculos periódicos 11
1.2.1. Gratings 11
1.2.2. Estructuras cristalinas 15

2. Ecuaciones integrales **19**
2.1. Funciones de Bessel 19
2.2. Operadores integrales 26
2.3. Scattering por objetos periódicos 32
2.3.1. Función de Green cuasiperiódica 32
2.3.2. Nueva función de Green cuasiperiódica 36

3. Métodos numéricos **43**
3.1. Método de Nyström 43
3.2. Evaluación eficiente de la función de Green cuasiperiódica 45
3.2.1. Método de la ventana 45
3.2.2. Particiones suaves de la unidad 49
3.3. Descomposición SVD 54

4. Scattering en estructuras cristalinas **57**
4.1. Criterio del balance de la energía 58
4.2. Solución con la función de Green clásica 60
4.2.1. Resultados numéricos 63
4.3. Solución usando la función de Green con polos 67
4.4. Alternativa simple para toda frecuencia 74

Agradecimientos

Esta tesis es el resultado del esfuerzo y la ayuda de múltiples personas. Aquí va un reconocimiento a ellas.

A los amigos que hice en la facultad: Emiliano, Fran, Pedro y Xavier. Habernos reído tanto en cada cursada será un recuerdo díficil de olvidar.

A Gabriel Acosta. Por tomarte el trabajo de leer esta tesis, encargarte de organizar todo y ofrecer siempre una mano. Por sobre todo, por los consejos que me diste en la primer charla. Me ayudaron a parar el carro y ver dónde estaba parado. Como resultado pudimos hacer que esto tenga final feliz.

A Javier Etcheverry. Tus clases fueron un verdadero lujo y una gran fuente de motivación. Aprecio mucho que siempre te hayas mostrado interesado en este trabajo, incluso un viernes a las 22.30 después de haber estado todo el día trabajando. Gracias por tomarte el tiempo para discutir ideas conmigo y todo lo que he aprendido con vos.

A ambos, porque aceptaron ser jurados en esta altura del año siempre tan complicada.

A Oscar. Desinteresadamente aceptaste dirigir este trabajo sin siquiera conocerme. Siempre tendré una deuda con vos por compartir tus ganas, tu visión y tu genialidad conmigo. He aprendido un montón de cosas en el tiempo que llevamos con este trabajo que exceden a la matemática, que me hicieron crecer científica pero también personalmente. Siempre te has mostrado dispuesto a dar una mano, incluso más allá de esta tesis en particular. También has logrado interesarme en algo y que esté orgulloso del resultado final. Pero lo que más agradezco es que siempre discutiste ideas conmigo de igual a igual.

A mis viejos, por todo el esfuerzo que hicieron siempre para que yo pudiera tomar la dirección que yo quisiera. La deuda tiende a infinito cuando pasan los años.

A Soledad, que me acompaña.

Resumen

El problema que se desea resolver en esta tesis es calcular el campo electromagnético en cada punto del espacio al interactuar con una estructura cristalina formada por conductores perfectos que se distribuyen periódicamente en alguna dirección. En el primer capítulo partimos de las ecuaciones de Maxwell para plantear matemáticamente el problema. Obtenemos una ecuación en derivadas parciales en $\mathbb{R}^2$ con condiciones de contorno específicas que representan el comportamiento del campo en el borde de los conductores. Para resolver esta ecuación, proponemos una formulación de ecuaciones integrales. En el segundo capítulo desarrollamos la teoría necesaria para fundamentar esta manera específica de resolver la ecuación diferencial. Como en cualquier formulación de ecuaciones integrales, es de vital importancia encontrar una función de Green apropiada para la geometría del problema. En ese sentido, definimos la función de Green cuasiperiódica clásica que viene dada por una serie. Por lo tanto, será necesario probar distintos resultados de convergencia para ésta. Veremos que existe una clase de frecuencias, llamadas Wood anomalies, en dónde esta serie deja de converger. Para que nuestra formulación soporte toda clase de frecuencias, describimos la función de Green cuasiperiódica de medio espacio (introducida en [2]) y sus principales resultados de convergencia.

Debido a que en la mayoría de las ocasiones resulta imposible resolver analíticamente una ecuación integral, describiremos en el tercer capítulo el método de Nyström que permite aproximar la solución de la ecuación integral mediante la resolución de un sistema lineal de dimensión finita. Para emplear esta metodología deberemos ser capaces de evaluar cualquiera de las dos funciones de Green cuasiperiódicas. Al estar dadas por series, será necesario truncarlas de alguna manera para su evaluación. De esta forma, describimos un método presentado en [17] que, lejos de las frecuencias anómalas, posee convergencia superalgebraica. Este método, como ya se verá, fue pensado en su formulación para computar eficientemente ciertas integrales impropias. Como veremos, la geometría de nuestro problema, al ser no conexa, no permitirá que podamos reescribir los operadores que consideraremos como integrales impropias. En esta etapa fue necesario contar con un resultado para seguir teniendo convergencia superalgebraica en nuestra geometría. Por lo tanto, basados en un teorema introducido en [4], cuya demostración no está completa, daremos un teorema y su respectiva prueba para obtener un resultado de convergencia más fuerte que en [17].

En el último capítulo presentamos tres propuestas que hemos considerado para resolver el problema de este trabajo. El estudio que haremos en este capítulo es netamente numérico. Como se verá, todos nuestros esfuerzos han girado en torno a cómo obtener ecuaciones bien condicionadas y métodos de álto órden para toda frecuencia, incluso para las Wood anomalies y frecuencias cercanas.

Capítulo 1

Scattering electromagnético

El fenómeno de scattering es un proceso que atraviesa transversalmente diversas áreas de la física. La idea subyacente es que cierta forma de radiación, ya sea luz, sonido o incluso partículas (esto último entendiéndolo como un gran número de partículas idénticas moviéndose en una dirección específica) se ven forzadas a apartarse de su trayectoria rectílinea. Un ejemplo clásico de esta idea es el experimento de Rutherford, el cual permitió conocer la estructura atómica de la materia. Rayos de partículas alfa inciden sobre una lámina de metal (oro en el experimento original) y, debido a la interacción electrostática entre estas partículas cargadas y los núcleos de los átomos, las partículas alfa (varios órdenes más livianas que los átomos de oro) se desvían cierto ángulo respecto de su trayectoria original. Posteriormente, al alejarse de la placa de metal, continúan en trayectoria rectílinea en otra dirección. Otro fénomeno famoso que se puede entender a partir de la teoría de scattering de la luz es la explicación de por qué el cielo es azul: la luz proveniente del Sol se ve desviada por la presencia de diminutas partículas presentes en la átmosfera (se dispersan en mayor medida aquellas ondas cuyas longitudes son cercanas al azul).

Nuestro análisis lo haremos en el caso electromagnético: queremos entender cómo la luz interactúa con ciertos materiales (conductores o dieléctricos) que cambian ciertas propiedades en el espacio y dan origen al fenómeno de scattering. Nuestro estudio se encuadra dentro de la llamada "óptica física", en tanto que partiremos de las leyes fundamentales del electromagnetismo y entenderemos a la luz como un fenómeno ondulatorio. Arribaremos a la ecuación de ondas y nuestro objetivo final será calcular el valor del campo en cualquier punto del espacio. Por ello, haremos una suposición fundamental antes de comenzar: todas las magnitudes físicas involucradas en el problema serán del mismo órden (como ya veremos, estas serán la longitud de onda, la dimensión del obstáculo y la separación entre copias de este). El caso extremo en que el obstáculo es varios órdenes de magnitud más grande que la longitud de onda puede ser estudiado con cierto grado de éxito mediante la llamda "óptica geométrica".

1.1. Scattering de ondas electromagnéticas

Nuestro punto de partida, como cualquier fenómeno electromagnético, serán las ecuaciones de Maxwell que, en forma diferencial, se escriben [7]

$$div(\bar{D}) = \rho_f \qquad div(\bar{B}) = 0$$
$$rot(\bar{E}) = -\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} \qquad rot(\bar{H}) = \bar{j}_f + \frac{\partial \bar{D}}{\partial t}$$

donde $\bar{D}$ es el desplazamiento eléctrico, $\bar{B}$ es la intensidad magnética, $\bar{E}$ el campo eléctrico y $\bar{H}$ el campo magnético. A su vez ρ_f y $\bar{j}_f$ son las densidades de carga y corriente libres respectivamente. Suponiendo que los medios son isótropos, lineales y homogeneos se verifica que $\bar{D} = \varepsilon \bar{E}$, $\bar{B} = \mu \bar{H}$ donde ε y μ son la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética del medio respectivamente. Dichas constantes dependen de cada material y se relacionan con ε_0 y μ_0 (la permitivadad y permeabilidad del vacío) del siguiente modo:

$$\varepsilon = k\varepsilon_0 \qquad \mu = \mu_r \mu_0$$

con k la constante dieléctrica y μ_r la permeabilidad magnética relativa. Para el estudio de ondas supondremos que no hay cargas ni corrientes libres. Luego las ecuaciones de Maxwell resultan:

$$div(\bar{D}) = 0 \qquad div(\bar{B}) = 0$$
$$rot(\bar{E}) = -\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} \qquad rot(\bar{H}) = \frac{\partial \bar{D}}{\partial t}$$

Usando la identidad para el rotor de campos vectoriales:

$$rot(rot(F)) = \nabla(div(F)) - \Delta F$$

obtenemos

$$-\Delta \bar{E} = -rot(\frac{\partial \bar{B}}{\partial t}) = -\frac{\partial}{\partial t}(rot(\bar{B})) = -\mu \frac{\partial}{\partial t}(rot(\bar{H})) = -\mu \frac{\partial^2 \bar{D}}{\partial t^2} = -\mu\varepsilon \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2}$$

Si llamamos $c^2 = \frac{1}{\mu\varepsilon}$ resulta:

$$\Delta \bar{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2} = 0$$

Si se realiza la misma cuenta para el campo $\bar{B}$ llegamos al mismo resultado:

$$\Delta \bar{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \bar{B}}{\partial t^2} = 0$$

Las ecuaciones que hemos deducido deben ser entendidas componente a componente. El carácter vectorial de los campos y el acoplamiento que existe entre estos (dando lugar a la polarización de la luz) introducen una mayor complejidad que, por ejemplo, el caso acústico. Daremos a continuación hipótesis que nos permitirán reducir este problema de carácter general a la resolución de cierta ecuación en derivadas parciales en el plano junto a ciertas condiciones de contorno que dependen de la clase del material.

En primer lugar, asumiremos que los campos tienen simetría de traslación en alguna dirección en particular:

$$\exists\, d \in \mathbb{R}^3 / \,\forall\, \alpha \in \mathbb{R}, \bar{E}(x + \alpha d) = \bar{E}(x) \text{ y } \bar{B}(x + \alpha d) = \bar{B}(x)$$

Sin pérdida de generalidad (reorientando los ejes de ser necesario), podemos suponer que la dirección de simetría es la del eje z. Por comodidad, utilizaremos notación compleja, es decir, supondremos que los campos toman valores en $\mathbb{C}$ y tomaremos al finalizar la parte real de la solución que obtengamos. Esta elección se encuentra justificada en que tanto las ecuaciones de Maxwell como las ecuaciones de contorno que tomaremos son lineales. Además, supondremos que las soluciones son armónicas, i.e.

$$\bar{E}(x,t) = e^{-i\omega t}\bar{E}(x) \qquad \bar{B}(x,t) = e^{-i\omega t}\bar{B}(x)$$

que reducen las ecuaciones de Maxwell a

$$\begin{aligned} div(\bar{E}) &= 0 & div(\bar{B}) &= 0 \\ rot(\bar{E}) &= i\omega\bar{B} & rot(\bar{B}) &= -i\omega\mu\varepsilon\bar{E} \end{aligned}$$

Como los campos son invariantes por la traslación $\bar{r} \to \bar{r} + z\hat{z}$, $\bar{E}$ y $\bar{B}$ no dependen de la coordenada z. Desglosando las ecuaciones para los rotores obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} &= i\omega B_x & \frac{\partial B_z}{\partial y} &= -i\omega\mu\varepsilon E_x \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -i\omega B_y & \frac{\partial B_z}{\partial x} &= i\omega\mu\varepsilon E_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= i\omega B_y & \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} &= -i\omega\mu\varepsilon B_y \end{aligned}$$

1. Supongamos que $B_z = 0$. Entonces

$$E_x = E_y = 0$$

$$B_x = \frac{1}{i\omega}\frac{\partial E_z}{\partial y}\,,\; B_y = -\frac{1}{i\omega}\frac{\partial E_z}{\partial x}$$

$$-i\omega\mu\varepsilon E_z = \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} = -\frac{1}{i\omega}\left(\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2}\right)$$

   Por lo tanto, en este caso, el comportamiento del campo electromágnetico queda determinado por la componente E_z y esta, a su vez, obedece la ecuación

$$\Delta E_z + k^2 E_z = 0$$

   donde $k = \frac{\omega}{c}$, $c^2 = \frac{1}{\mu\varepsilon}$

2. Supongamos que $E_z = 0$. Entonces

$$B_x = B_y = 0$$

$$E_x = -\frac{1}{\omega\mu\varepsilon}\frac{\partial B_z}{\partial y}\,,\; E_y = \frac{1}{\omega\mu\varepsilon}\frac{\partial B_z}{\partial x}$$

$$\Delta B_z + k^2 B_z = 0$$

Al caso $B_z = 0$ se lo llama polarización *TE (transverse electric)* y cuando $E_z = 0$, polarización *TM (transverse magnetic)*. Vemos entonces que la solución del problema general se puede obtener a partir de la superposición de las soluciones a estos dos casos fundamentales para los cuales sólo hace falta resolver

$$\Delta u(x) + k^2 u(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^2 \tag{1.1}$$

Esta última ecuación recibe el nombre de *ecuación de Helmholtz*, en honor al físico alemán *Hermann Ludwig Ferdinand von Helmholtz* que la introdujo en el estudio de ondas acústicas. Hemos mencionado anteriormente que estamos interesados en estudiar el resultado de la interacción del campo electromagnético con ciertos obstáculos. Por lo tanto, deberemos prescribir el comportamiento de una solución en un subconjunto del plano.

El primero caso es el de un conductor perfecto, que es una idealización de un material en cuyo interior el campo eléctrico se anula. Esto se explica a partir de que en esta clase de materiales (por lo general metales) existen cargas que son libres de moverse. Ante la presencia de un campo externo, estas cargas se redistribuyen en la superficie del conductor de forma tal que el campo que ellas producen cancelan al campo externo en el interior del conductor. A partir de la ley de Faraday, vemos que la derivada temporal del campo magnético es cero. De este modo, dentro del conductor no tenemos campos oscilatorios. En este caso las condiciones de contorno son:

$$\begin{aligned} \bar{B} \cdot \hat{n} &= 0 & \bar{E} \cdot \hat{n} &= \frac{\rho_s}{\varepsilon_0} \\ \bar{E} \times \hat{n} &= 0 & \bar{B} \times \hat{n} &= \mu_0 \bar{j_s} \end{aligned}$$

donde $\hat{n}$ es la normal exterior al obstáculo, ρ_s y $\bar{j_s}$ son las densidades superficiales de carga y corriente. Las ecuaciones igualadas a cero indican que la componente tangencial del campo eléctrico y la componente normal del campo magnético deben anularse en el borde.

Para hacer uso de nuestra aproximación supondremos que nuestro dominio se extiende infinitamente a lo largo del eje z. O sea:

$$D = D_0 \times \mathbb{R}\,,\ D_0 \subset \mathbb{R}^2$$

Claramente la configuración es invariante por una traslación en el eje z, de modo que el campo electromagnético presentará la misma simetría. Además la componente z de la normal exterior a este dominio es nula, o sea:

$$\hat{n} = (n_x, n_y, 0)$$

1. Polarización *TE*

   Si $B_z = 0$, entonces $E_x = E_y = 0$. Luego, la componente tangencial del campo eléctrico es cero y por lo tanto debe ser:

   $$E_z = 0$$

   Si C es una curva cerrada en el borde del dominio y la misma encierra una superficie S (la superficie encerrada está en el borde) entonces:

$$\int_S \bar{B} \cdot \hat{n} ds = (i\omega)^{-1} \int_S rot(\bar{E}) \cdot \hat{n}\, ds = (i\omega)^{-1} \oint_C \bar{E} \cdot d\bar{l} = 0$$

pues la componente tangencial del campo eléctrico se anula sobre la superficie del conductor. Como la curva era arbitraria, debe ser:

$$\bar{B} \cdot \hat{n} = 0$$

sobre el borde del dominio.

2. Polarización *TM*

Si $E_z = 0$, entonces $B_x = B_y = 0$. Es inmediato que $\bar{B} \cdot \hat{n} = 0$ pues el campo y la normal son ortogonales.

$$\hat{n} \cdot \bar{E} = (0, 0, n_x E_y - n_y E_x) = (i\omega\mu\varepsilon)^{-1}(0, 0, -n_x \frac{\partial B_z}{\partial x} - n_y \frac{\partial B_z}{\partial y})$$

y por lo tanto, se cumplirán las condiciones de borde si:

$$\frac{\partial B_z}{\partial n} = 0$$

De este modo, el problema se reduce a hallar $u : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ tal que:

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u &= 0 \text{ en } D^c \\ u &= 0 \text{ en } \partial D \text{ (TE)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u &= 0 \text{ en } D^c \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \text{ en } \partial D \text{ (TM)} \end{cases}$$

Por otra parte estaremos también interesados en estudiar el campo electromagnético en materiales cuya estructura interna responde a la presencia del campo externo. Por un lado encontramos los materiales dieléctricos. Estos, al contrario de los conductores, no poseen cargas que se muevan libremente (esto es una aproximación pues si el campo externo es muy intenso puede arrancar electrones de los átomos que forman el material). Lo que sí ocurre, a grandes rasgos, es que los átomos o moléculas se elongan generando pequeños dipolos que tienden a orientarse con el campo eléctrico. Esto genera una densidad de momento dipolar $\bar{P}$ que verifica

$$\bar{D} = \varepsilon_0 \bar{E} + \bar{P}$$

Usualmente, cuando se desea calcular el campo eléctrico en estos casos, $\bar{P}$ y $\bar{E}$ son incógnitas que, si bien están relacionadas, pueden hacerlo de maneras intrincadas. Nosotros supondremos que los medios son lineales, homogeneos e isótropos y entonces se cumple que:

$$\bar{P} = \varepsilon_0 \chi_e \bar{E}$$

donde χ_e es una constante que depende del medio, llamada *susceptibilidad eléctrica*.

De este modo,

$$\bar{D} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \bar{E}$$

y si $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi_e)$ entonces

$$\bar{D} = \varepsilon \bar{E}$$

Una situación similar ocurre con los materiales que responden al campo magnético. El movimiento de las cargas en los átomos junto a cierta propiedad intrínseca de estos, llamada *spin*, da origen, ante la presencia de un campo externo, a una densidad de momento dipolar magnético $\bar{M}$ (llamada magnetización) que verifica

$$\frac{\bar{B}}{\mu_0} = \bar{H} + \bar{M}$$

Al igual que en el caso dieléctrico, supondremos que existe una relación lineal entre el campo magnético y la magnetización, o sea:

$$\bar{M} = \chi_m \bar{H}$$

y por lo tanto, llamando $\mu = \mu_0(1 + \chi_m)$,

$$\bar{B} = \mu \bar{H}$$

Las condiciones de contorno que cumplen los campos en la interfase de dos medios con permitividades $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ y permeabilidades μ_1, μ_2 y sin fuentes externas son

$$\hat{n} \times (\bar{E}_2 - \bar{E}_1) = 0$$

$$\hat{n} \times (\bar{H}_2 - \bar{H}_1) = 0$$

$$\hat{n} \cdot (\bar{B}_2 - \bar{B}_1) = 0$$

$$\hat{n} \cdot (\bar{D}_2 - \bar{D}_1) = 0$$

donde $\hat{n}$ es la normal a la interfase que va del medio 1 al medio 2.

Estas ecuaciones expresan la continuidad de las componentes tangenciales del campo eléctrico e intensidad magnética y de las componentes normales del campo magnético y el desplazamiento eléctrico. Escribiendo todo en términos de $\bar{E}$ y $\bar{H}$

$$\hat{n} \times (\bar{E}_2 - \bar{E}_1) = 0$$

$$\hat{n} \times (\bar{H}_2 - \bar{H}_1) = 0$$

$$\hat{n} \cdot (\mu_2 \bar{H}_2 - \mu_1 \bar{H}_1) = 0$$

$$\hat{n} \cdot (\varepsilon_2 \bar{E}_2 - \varepsilon_1 \bar{E}_1) = 0$$

y de igual manera que para un conductor perfecto, usando nuestra aproximación, las condiciones para los casos (TE) y (TM) son:

$$E_z^{(2)} = E_z^{(1)} \qquad\qquad H_z^{(2)} = H_z^{(1)}$$

$$\frac{\partial E_z^{(2)}}{\partial n} = \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2 \frac{\partial E_z^{(1)}}{\partial n} \qquad\qquad \frac{\partial H_z^{(2)}}{\partial n} = \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right)^2 \frac{\partial H_z^{(1)}}{\partial n}$$

1.2. Obstáculos periódicos

1.2.1. Gratings

Un grating es un material que presenta una configuración periódica en su superficie. Idealizándolo, podemos pensar que su borde se puede parametrizar del siguiente modo:

$$S = \{(x, f(x), z) : x \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{R}\}$$

donde f es una función periódica de período L, el cual es también llamado *espaciado del grating*. La validez de suponerlo con simetría cilíndrica en z siempre estará supeditada a que las amplitudes de los campos que interactuen con la superficie sean mucho menores que la altura del grating. Claramente, esta simetría se enmarca en nuestro análisis anterior. Por lo tanto, para hallar el campo electromagnético para esta configuración bastará resolver la ecuación de Helmholtz en $\mathbb{R}^2$ junto a ciertas condiciones de borde sobre $\{(x, f(x)) : x \in \mathbb{R}\}$ dependiendo del caso en el que estemos interesados (conductores o dieléctricos).

Los gratings han encontrado una gran cantidad de aplicaciones en el campo de la óptica como, por ejemplo, espectroscopía, litografía, selectores de frecuencias para lasers, filtros de colores, etc. Para ver con mayor detalle estas aplicaciones se recomienda [19].

Supongamos que tenemos una onda plana y monocromática que incide con un ángulo θ (respecto del eje y) sobre el grating:

$$u^i(x, y) = exp(i\alpha x - i\beta y)$$

con $\alpha = k\sin(\theta)$ y $\beta = k\cos(\theta)$. Supongamos además que el material es un conductor perfecto.

Queremos saber cómo se refleja la onda en $\{(x, y) : x \in \mathbb{R}, y > f(x)\}$. El campo total será la superposición de la onda incidente y de la onda saliente, o sea

$$u = u^i + u^s$$

y como u^i es solución de la ecuación de Helmholtz, nuestra única incógnita será u^s que verifica

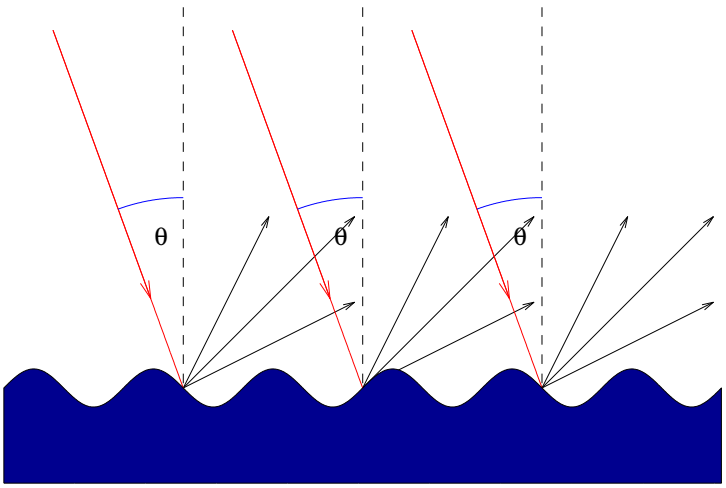

Figura 1.1: Esquema de un grating conductor con período 2π y ángulo incidente θ

$$\begin{cases} \Delta u^s + k^2 u^s &= 0 \quad \text{si } y > f(x)) \\ u^s &= -u^i \quad \text{si } y = f(x), \text{ (TE)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Delta u^s + k^2 u^s &= 0 \quad \text{si } y > f(x)) \\ \frac{\partial u^s}{\partial n} &= -\frac{\partial u^i}{\partial n} \quad \text{si } y = f(x), \text{ (TM)} \end{cases}$$

Una primera observación que podemos hacer es la siguiente: para fijar ideas, suponer que u^s es solución con la polarización (TE). Considerar la función

$$v(x,y) = exp(-i\alpha L)u^s(x+L,y)$$

Es claro, por la linealidad de la ecuación de Helmholtz, que v es solución de esta. Si tomamos $(x,y) \in \mathbb{R}^2 / y = f(x)$, al ser f periódica, $y = f(x+L)$ y por lo tanto:

$$\begin{aligned} v(x,y) &= exp(-i\alpha L)u^s(x+L, f(x+L)) \\ &= -exp(-i\alpha L)exp((i\alpha(x+L)) + i\beta f(x+L)) \\ &= -exp(i\alpha x + \beta f(x)) \\ &= u(x,y) \end{aligned}$$

Si asumimos la unicidad de la solución, debe ser

$$u(x+L,y) = exp(i\alpha L)u(x,y),\ \forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, y \geq f(x)$$

Una función que verifica esto se llama *αL-cuasiperiódica*. Es claro que para resolver la ecuación sólo hace falta conocer la solución sobre un único período del grating.

Si llamamos $T(x,y) = exp(-i\alpha x)u^s(x,y)$, T resulta ser una función periódica en x y desarrollándola por su serie de Fourier

$$T(x,y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} t_n(y) exp\left(in\frac{2\pi}{L}x\right)$$

y por lo tanto

$$u(x,y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} t_n(y) exp\left(i\alpha_n x\right)$$

donde $\alpha_n = \frac{2\pi}{L}n + \alpha$. Una diferenciación directa muestra que para
$y > H = max\{f(x)/x \in \mathbb{R}\}$

$$\frac{d^2 t_n}{dy^2} + \left(k^2 - \alpha_n^2\right) t_n = 0, \forall n \in \mathbb{Z}$$

Luego,

$$t_n(y) = A_n exp(-i\beta_n y) + B_n exp(i\beta_n y) \quad \text{si } y > H$$

donde

$$\beta_n = \begin{cases} \sqrt{k^2 - \alpha_n^2} & \text{si } n \in U \\ i\sqrt{\alpha_n^2 - k^2} & \text{si } n \notin U \end{cases}$$

donde $U = \left\{n \in \mathbb{Z} : k^2 - \alpha_n^2 > 0\right\}$

Si bien esta es una solución aceptable desde un punto de vista matemático, no lo es desde la física que pretendemos modelar. La solución que buscamos debe dar cuenta de

cómo una onda se dispersa en el espacio luego de que la onda incidente interactúa con el grating. La solución buscada debe representar a una onda reflejada que se aleja del grating. Diremos que u es una solución radiante si $u(x,y)$ es acotada cuando $y \to \infty$ y es saliente (notar que, debido a la periodicidad en x de la interfase, sólo podremos alejarnos tomando $y \to \infty$).

Vemos que si $n \notin U$, $exp(-i\beta_n y) \to \infty$ cuando $y \to \infty$. Si $n \in U$ entonces $exp(-i\beta_n y)$ es una onda que incide sobre el grating y por lo tanto no es saliente. Suponiendo que $U \cup U^c = \mathbb{Z}$, debe ser $A_n = 0, \forall n \in \mathbb{Z}$ y por lo tanto:

$$u^s(x,y) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} B_n exp(i\alpha_n x + i\beta_n y),\ y > H$$

Esta expresión es llamada *expansión de Rayleigh*. Vemos que la onda reflejada consiste en la superposición de ondas salientes propagantes, cuyos vectores de onda forman ángulos θ_n con el eje y, los cuales verifican

$$\sin\,\theta_n = \frac{\alpha_n}{\sqrt{\alpha_n^2+\beta_n^2}} = \frac{\alpha_n}{k} = \sin\,\theta + \frac{2\pi}{kL}n$$

Además la solución se compone de modos que decaen exponencialmente con y ($n \notin U$), llamados evanescentes. Si para algún $n \in \mathbb{Z}$ se cumple que $\beta_n = 0$ estamos en presencia de un modo que se desplaza paralelamente al eje x. Una frecuencia que verifica esto recibe el nombre de *Wood anomaly*. Fenómenos como éste se reproducen experimentalmente y, precisamente, fue *Robert W. Wood* quien los observó por primera vez [22].

Una de las metodologías que ha gozado de mayor popularidad en el área para evaluar la viabilidad de un método de resolución ha sido el *criterio del balance de la energía*. Consideremos la curva que se muestra en la figura

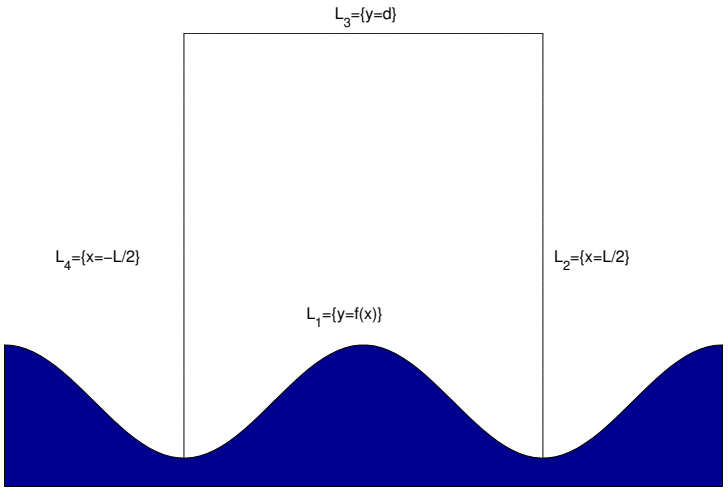

Figura 1.2: El borde del dominio C está formado por las curvas L_1, L_2, L_3, L_4

y usemos las identidades de Green allí: tomamos una solucion de la ecuación de Helm-

holtz cuasiperiódica y obtenemos

$$\int_{\partial C} \left(u\frac{\partial \bar{u}}{\partial n} - \bar{u}\frac{\partial u}{\partial n} \right) dS = \int_{C} \left(u\Delta\bar{u} - \bar{u}\Delta u \right) dV$$
$$= \int_{C} \left(u(\Delta\bar{u} + k^2\bar{u}) - \bar{u}(\Delta u + k^2 u) \right) dV = 0$$

Podemos dividir ∂C en cuatro caminos. Debido a la cuasiperiodicidad, las contribuciones de los segmentos verticales se cancelan. Si suponemos que la solución verifica las condiciones Dirichlet o Neumann homogeneas, o sea $u = u^i + u^s$, resulta

$$\int_{-L/2}^{L/2} u(x,d)\frac{\partial \bar{u}}{\partial y}(x,d)dx = 0$$

Al ser $d > H$, podemos expresar a u^s por su expansión de Rayleigh. Como podemos tomar d arbitrariamente grande, las exponenciales $e^{i\beta_n d}$ serán despreciables si $n \notin U$. Por lo tanto, luego de calcular la anterior integral obtenemos

$$\beta - \sum_{n\in U} \beta_n B_n \bar{B}_n = 0$$

Si definimos $e_n = \frac{\beta_n}{\beta} B_n \bar{B}_n$ la expresión se reduce a

$$\sum_{n\in U} e_n = 1 \tag{1.2}$$

Los coeficientes e_n reciben el nombre de *eficiencia del modo n-ésimo*. Teniendo en mente al vector de Poynting para una onda plana, e_n expresa la fracción de energía, respecto a la proveniente de la onda incidente, que lleva la n-ésima onda propagante. El resultado (1.2) puede ser interpretado entonces como la conservación de la energía: lo que ingresa por la onda incidente debe ser igual a lo que sale por las ondas salientes.

Supongamos ahora que tenemos dos materiales dieléctricos, cada uno llenando una región del plano y de forma tal que su interfase es periódica en x e invariante por traslaciones de z. De este modo, las permeabilidades magnéticas son iguales pero cambian las permitividades. Las llamaremos $\{\varepsilon^+ \varepsilon^-\}$.

Suponiendo que hay una onda u^i plana y monocromática que incide con un ángulo θ sobre el grating, tendremos entonces una onda reflejada u^r y una transmitida u^t. En el dieléctrico superior, la onda total será $u = u^i + u^r$ y en el inferior será sólo u^t y el problema a resolver es:

$$\begin{cases} \Delta u^r + k_+^2 u^r = 0 & y > f(x) \\ \Delta u^t + k_-^2 u^t = 0 & y < f(x) \\ u^r - u^t = -u^i & y = f(x) \\ \frac{\partial u^r}{\partial n} - C_p^2 \frac{\partial u^t}{\partial n} = -\frac{\partial u^i}{\partial n} & y = f(x) \end{cases}$$

donde:

$$Cp = \begin{cases} 1 & (TE) \\ \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} & (TM) \end{cases}$$

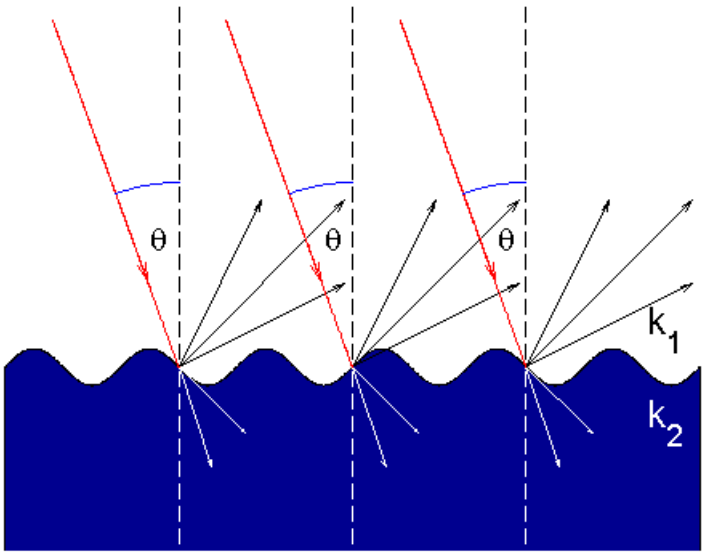

Figura 1.3: Esquema de un grating dieléctrico con período 2π y ángulo incidente θ

De igual modo que antes, podemos encontrar expansiones de Rayleigh para u^r y u^t

$$u^r(x,y) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} B_n^+ exp(i\alpha_n x + i\beta_n^+ y) \quad y > max\{f(x)\}$$

$$u^t(x,y) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} B_n^- exp(i\alpha_n x - i\beta_n^- y) \quad y < min\{f(x)\}$$

con $\alpha_n^2 + (\beta_n^+)^2 = k_+^2$ y $\alpha_n^2 + (\beta_n^-)^2 = k_-^2$.

De igual manera que hicimos para un conductor perfecto, se puede obtener un criterio del balance de la energía para el dieléctrico:

$$\sum_{n\in U^+} \beta_n^+ \left|B_n^+\right|^2 + C_p \sum_{n\in U^-} \beta_n^- \left|B_n^-\right|^2 = 0$$

Una deducción de este cálculo se puede consultar en [16].

1.2.2. Estructuras cristalinas

El uso de obstáculos periódicos para la luz se remonta a fines del siglo XVIII cuando el astrónomo estadounidense David Rittenhouse creó por primera vez un arreglo de estas características. Algunos años después, el físico alemán Joseph von Fraunhofer redescubrió independientemente el principio de funcionamiento de estos objetos. Sus investigaciones resultaron en grandes contribuciones, tanto desde la teoría como de las aplicaciones, al estudio de las llamadas *redes de difracción* [5], las cuales consisten en una grilla compuestas por finas hebras o alambres dispuestos verticalmente y separados por la misma distancia. Si las magntiudes involucradas son todas comparables con la longitud de onda, se producen, debido a la presencia de los obstáculos, ciertos patrones luminosos

característicos de estas estrucutras. Esta misma idea surge también en la llamada *cristalografía de Rayos X* la cual constituye una difundida técnica experimental para el estudio de materiales que poseen en escala atómica una estructura cristalina. Los obstáculos aquí son los constituyentes de la red y las ondas que se ven obstaculizadas son los rayos X (que no es más que luz no visible al ojo humano).

En los últimos treinta anõs esta idea ha sido reutilizada en el estudio de ciertos materiales llamados *cristales fotónicos*. La idea tuvo su origen, en realidad, en física del estado sólido. Por lo general, los conductores son, en escala microscópica, estructuras cristalinas: sus átomos o moléculas se encuentran distribuidas de manera periódica en el espacio y cada uno de llos genera un potencial eléctrico. Se puede ver que el potencial neto del conductor tiene la misma periodicidad que el cristal. Durante largo tiempo fue un misterio cómo es que los electrones (que son los portadores de cargas en un metal) se comportan, bajo ciertas condiciones, como un gas difuso de partículas en vez de ser afectadas por este potencial periódico. La respuesta vino desde la mecánica cuántica, a partir del teorema de Bloch que, en realidad, dada la dualidad onda-partícula, puede ser aplicado a cualquier fenómeno vibratorio donde exista algún tipo interacciçón con una estructura periódica. De allí surge el interés por repetir lo que ocurre en un conductor para otros fenómenos ondulatorios como, por ejemplo, la radiación electromagnética.

El análogo óptico son los cristales fotónicos. Aquí el potencial periódico pasa a ser un cambio periódico en la constante dieléctrica por donde se propaga la onda. Lo que se logra es que para ciertas frecuencias la onda no se puede propagar en determinadas direcciones pero para otras sí, logrando entonces controlar su flujo. Esto es lo que ha convertido a los cristales fotónicos en un objeto de ínteres en los últimos años, dados los avances para construir en escala nanométrica dichos arreglos periódicos.

Nuestro objetivo final será simular el comportamiento de un cristal fotónico bidimensional sobre el que incide una onda con una frecuencia del mismo orden de magnitud de la distancia con que están separados los dieléctricos.

Supongamos que $D_0 \subset \mathbb{R}^2$ es una región acotada del plano tal que el borde de cada componenta conexa del mismo se puede parametrizar como una curva cerrada C^1.

Tomemos $L > 0$ y consideremos $D_n = \{(x + nL, y) : (x, y) \in D_0\}$. D_n es la traslación a lo largo del eje x de D_0. Si

$$D = \bigcup_{n \in \mathbb{Z}} D_n$$

D posee la estructura periódica que deseamos, con período L, que lo supondremos de forma tal que

$$\overline{D_n} \cap \overline{D_{n+1}} = \emptyset, \quad \forall\, n \in \mathbb{Z}$$

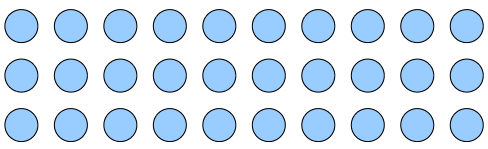

Figura 1.4: Ejemplo de una distribución periódica de tres discos de radio 1 separados con un período de $L = 3$

Por lo tanto, para conocer el valor en cada punto del espacio del campo electromagnético al interactuar con un cristal fotónico debemos resolver el siguiente problema de

contorno

$$\begin{cases} \Delta u_1 + k_1^2 u_1 = 0 \quad (x,y) \in D^c \\ \Delta u_2 + k_2^2 u_2 = 0 \quad (x,y) \in D \\ u_2 = u_1 \quad (x,y) \in \partial D \\ \frac{\partial u_1}{\partial n} - C_p^2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = 0 \quad (x,y) \in \partial D \end{cases}$$

donde:

$$Cp = \begin{cases} 1 \quad (TE) \\ \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \quad (TM) \end{cases}$$

Las condiciones de contorno para un dieléctrico acarrean algunas dificultades extra que, por simplicidad, hemos decidido no tratar. Sin embargo, como un primer paso que daremos en este vasto mundo de la nano-óptica, resolveremos el problema suponiendo que el material es un conductor perfecto en vez de un dieléctrico. Este es el caso de una red de difracción constituida por conductores perfectos. Por lo tanto, el problema que deberemos resolver será, para la polarización TE

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \quad (x,y) \in D^c \\ u = -u_{inc} \quad (x,y) \in \partial D \end{cases}$$

y para la polarización TM

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 \quad (x,y) \in D^c \\ \frac{\partial u}{\partial n} = -\frac{\partial u_{inc}}{\partial n} \quad (x,y) \in \partial D \end{cases}$$

donde en ambos casos la onda incidente será una onda plana, o sea

$$u_{inc}(x,y) = e^{ik\sin(\theta)x - \cos(\theta)y}$$

Capítulo 2

Ecuaciones integrales

Uno de lo métodos que ha gozado de mayor popularidad en una amplia gama de problemas de scattering es la formulación de ecuaciones integrales. Al igual que en otras formulaciones integrales para EDP, jugará un rol predominante encontrar una solución fundamental adecuada para la geometría del dominio donde se imponen las condiciones de contorno. El objetivo central de este capítulo será estudiar diversos abordajes que se han empleado en la literatura para poder, en el último capítulo, proponer ecuaciones integrales cuyas soluciones permitan resolver el problema de esta tesis.

2.1. Funciones de Bessel

El primer paso que daremos es hallar la función de Green de espacio libre para la ecuación

$$\Delta u + k^2 u = 0 \tag{2.1}$$

en el plano. Usando el método de separación de variables, proponemos

$$u = f(kr)g(\varphi)$$

y por lo tanto

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{df}{dr}\right) + \left(k^2 - \frac{\mu^2}{r^2}\right) f = 0$$

$$\frac{d^2 g}{d\varphi^2} + \mu^2 g = 0$$

Usualmente, la singularidad de una función de Green está asociada a la presencia de una fuente puntual que produce el fenómeno estudiado; por ejemplo, para la ecuación de Laplace en $\mathbb{R}^3$, la función de Green viene dada por

$$G(r; r') = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{|r - r'|}.$$

En el contexto electrostático, la función G se interpreta como el potencial eléctrico producido por una carga puntual unitaria colocada en la posición r'. En nuestro contexto,

la función de Green se interpretará como la perturbación del campo electromagnético producto de oscilaciones en las densidades de carga y corriente a lo largo de una recta infinita (recordar que consideramos la ecuación (2.1) en el plano). Dado que supondremos al espacio isótropo, ninguna dirección será privilegiada. La física nos impone entonces buscar soluciones con simetría radial. Por lo tanto, en las anteriores ecuaciones tomamos $\mu = 0$ para eliminar la dependencia angular. De este modo, debemos hallar soluciones de la ecuación

$$0 = \Delta u + k^2 u = k\frac{1}{r}\frac{df}{dr} + k^2\frac{d^2f}{dr^2} + k^2 f$$

que se pueden simplificar aún más multiplicando por r^2 e introduciendo el cambio de variables $t = kr$. Como resultado obtenemos la relación

$$t^2\frac{d^2f}{dt^2}(t) + t\frac{df}{dt}(t) + t^2 f(t) = 0$$

que, como se detalla en la siguiente definición, da lugar a las renombradas *funciones de Bessel*.

Definición 1. Sea $U \subset \mathbb{C}$ un conjunto abierto y sea $\nu \in \mathbb{C}$. Una función de Bessel (o cilíndrica) de orden ν es una función $f : U \to \mathbb{C}$ tal que:

$$z^2\frac{d^2f}{dz^2} + z\frac{df}{dz} + (z^2 - \nu^2)f = 0.$$

Vemos que la solución fundamental para la ecuación de Helmholtz vendrá dada por una función de Bessel de orden 0. Esta familia de funciones ha sido largamente estudiada debido a su importancia en diversas áreas de la física y la matemática. Incluimos a continuación algunas de sus propiedades que nos serán de gran utilidad. Las demostraciones de estos resultados pueden encontrarse en [12].

La ecuación de Bessel de órden n ($n \in \mathbb{N}_0$) es una EDO de orden dos. De acuerdo a la teoría de ecuaciones ordinarias, cualquier solución se podrá expresar como una combinación lineal de dos soluciones linealmente independientes. Usando el criterio del cociente se puede ver que las expresiones

$$J_n(z) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!(p+n)!}\left(\frac{z}{2}\right)^{n+2p}, z \in \mathbb{C} \tag{2.2}$$

$$Y_n(z) = \frac{2}{\pi}\left[log\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma\right]J_n(z) - \frac{1}{\pi}\sum_{p=0}^{n-1}\frac{(n-1-p)!}{p!}\left(\frac{2}{z}\right)^{n-2p} - \\ - \frac{1}{\pi}\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p!(p+n)!}\left(\frac{z}{2}\right)^{n+2p}\left(\psi(p+n) + \psi(p)\right), z \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, 0] \tag{2.3}$$

definen funciones analíticas en sus respectivos dominios de definición y convergen uniformemente sobre subconjuntos compactos del plano complejo. Además, mediante una

diferenciación directa de las expresiones (2.2) y (2.3) se ve que son soluciones de la ecuación de Bessel de orden n. En estas fórmulas hemos usado la notación:

$$\psi(p) = \sum_{m=1}^{p} \frac{1}{m}$$

y

$$\gamma = \lim_{n\to\infty} \sum_{m=1}^{n} \frac{1}{m} - log(n)$$

Las funciones J_n e Y_n reciben el nombre de *funciones de Bessel de primer y segunda especie*, respectivamente. A partir de (2.2) y (2.3), igualando exponentes, se puede ver que tanto J_n e Y_n y sus derivadas satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia:

$$f_{n+1}(z) + f_{n-1}(z) = \frac{2n}{z} f_n(z) \tag{2.4}$$

$$f_{n+1}(z) = -z^n \frac{d}{dz}\left[z^{-n} f_n(z)\right] \tag{2.5}$$

$$f_{n+1}(z) - f_{n-1}(z) = 2\frac{df_n}{dz}(z), n \geq 1 \tag{2.6}$$

A partir de (2.5), el Wronskiano $W(J_n(z), Y_n(z))$ satisface:

$$\frac{dW}{dz} + \frac{1}{z} W = 0 \tag{2.7}$$

y por lo tanto, tomando el límite para $z \to 0$, resulta:

$$W(J_n(z), Y_n(z)) = \frac{2}{\pi z} \tag{2.8}$$

De este modo, J_n e Y_n constituyen un conjunto de soluciones de la ecuación de Bessel de orden n linealmente independientes.

Presentamos a continuación las funciones de Hankel de primera y segunda especie:

$$H_n^{(1)} = J_n + iY_n \tag{2.9}$$

$$H_n^{(2)} = J_n - iY_n \tag{2.10}$$

las cuales son soluciones linealmente independientes de (2.1) y poseen el siguiente comportamiento asintótico:

$$H_n^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right] \text{ si } -\pi < arg(z) < 2\pi \tag{2.11}$$

.

$$H_n^{(2)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-i\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right] \text{ si } -2\pi < arg(z) < \pi. \tag{2.12}$$

Tras introducir las funciones de Bessel y sus propiedades, estamos en condiciones de hallar la solución fundamental para la ecuación (2.1). Definamos $\Phi : \mathbb{R}^2 \setminus \{0\} \to \mathbb{C}$ por medio de la expresión:

$$\Phi(\vec{r}) = H_0^1(k\,|\vec{r}|). \tag{2.13}$$

Como ya hemos visto, dicha función es analítica en su dominio de definición y posee una singularidad de tipo logarítmico en el origen. Por lo tanto, para ver que $\Phi \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^2)$ basta observar, a partir de (2.3), que

$$\rho \left| H_0^1(k\rho) \right| \to 0 \text{ si } \rho \to 0 \tag{2.14}$$

y, usando coordenadas polares, la integral sobre la bola unidad centrada en el origen de $\left|H_0^1(k\vec{r})\right|$ es finita, concluyendo entonces que Φ define una distribución sobre el conjunto de funciones $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$.

Veamos ahora que

$$\Delta\Phi + k^2\Phi = C_0\delta_0$$

en el sentido de distribuciones, donde C_0 será una constante de normalización. Notaremos por $A_x(r, R)$ al anillo con centro en x, radio interior r y exterior R. Tomemos $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$ y supongamos que su soporte está contenido en $B_0(R)$. Es claro que

$$\Phi(x)\left(\Delta\psi(x) + k^2\psi(x)\right) \in L^1(\mathbb{R}^2)$$

luego

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^2} \Phi(x)\left(\Delta\psi(x) + k^2\psi(x)\right) dx &= \int\limits_{B_0(R)} \Phi(x)\left(\Delta\psi(x) + k^2\psi(x)\right) dx = \\
&= \lim_{r\to 0} \int\limits_{A_0(r,R)} \Phi(x)\left(\Delta\psi(x) + k^2\psi(x)\right) = \\
= \lim_{r\to 0} \int\limits_{A_0(r,R)} \left(\Delta\Phi(x) + k^2\Phi(x)\right)\psi(x)dx &+ \int\limits_{\partial A_0(r,R)} \left(\Phi(x)\frac{\partial\psi}{\partial n}(x) - \psi(x)\frac{\partial\Phi}{\partial n}(x)\right) dS(x)
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Tenemos que $\Delta\Phi(x) + k^2\Phi(x) = 0$ en $A_0(r, R)$ y que $\psi = \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0$ en $\partial B_0(R)$. Luego,

$$\int_{\mathbb{R}^2} \Phi(x)\left(\Delta\psi(x) + k^2\psi(x)\right) dx = \lim_{r\to 0} \int\limits_{\partial B_0(r)} \left(\psi(x)\frac{\partial\Phi}{\partial n}(x) - \Phi(x)\frac{\partial\psi}{\partial n}(x)\right) dS(x) \tag{2.16}$$

A partir de (2.14), es inmediato ver que

$$\lim_{r\to 0}\int\limits_{\partial B_0(r)} \Phi(x)\frac{\partial \psi}{\partial n}(x)dS(x) = 0$$

y usando (2.5), $\left(H_0^1\right)'(t) = -H_1^1(t)$. De este modo,

$$\int\limits_{\partial B_0(r)} \psi(x)\frac{\partial \Phi}{\partial n}(x)dS(x) = k\left(H_0^1\right)'(kr)\int\limits_{\partial B_0(r)} \psi(x)dS(x) =$$

$$= -2\pi kr H_1(kr)\frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} \psi(rcos(t), rsin(t))dt \quad (2.17)$$

Debido a que ψ es una función continua:

$$\frac{1}{2\pi}\lim_{r\to 0}\int\limits_0^{2\pi} \psi(rcos(t), rsin(t))dt = \psi(0),$$

y a partir de (2.3) es claro que

$$\lim_{r\to 0} kr H_1^1(kr) = \frac{2i}{\pi},$$

obteniendo así

$$\int\limits_{\partial B_0(r)} \psi(x)\frac{\partial \Phi}{\partial n}(x)dS(x) = -4i\psi(0) \quad (2.18)$$

Hemos probado que

$$\Delta\Phi + k^2\Phi = -4i\delta_0 \quad (2.19)$$

y por lo tanto, la solución fundamental para la ecuación de Helmholtz está dada por:

$$G_0(r, r') = \frac{i}{4}H_0^1(k\left|r - r'\right|). \quad (2.20)$$

A partir de ella, daremos a continuación dos representaciones integrales para la solución de la ecuación de Helmholtz en el interior y exterior de un dominio acotado, respectivamente. En la literatura, dichas fórmulas reciben el nombre de *representaciones de Green*.

Teorema 1. *Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un dominio acotado con borde C^2 y sea n su normal exterior. Sea $u \in C^2(D) \cap C(\bar{D})$ una función que posee una derivada normal en el borde de D en el sentido de que el límite:*

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x) = \lim_{h\to 0^+} n(x)\cdot\nabla u(x - hn(x))\ , x \in \partial D$$

existe uniformemente en ∂D. Entonces

$$u(x) = \int_{\partial D} \left[\frac{\partial u}{\partial n}(y) G_0(x,y) - u(y) \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) \right] ds(y)$$

Demostración. El resultado es claro a partir de las identidades de Green, aislando la singularidad como hemos hecho anteriormente para obtener (2.19). □

Observación 1.

Se puede demostrar que la función de Bessel de primer orden J_0 tiene una cantidad infinita de ceros [12] y, al ser ésta una función analítica y no nula, los mismos forman un conjunto sin puntos de acumulación. Llamemos R_0 al primer cero positivo y consideremos $D = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x\| \leq kR_0\}$. Es inmediato que la función $f(x,y) = J_0(k\sqrt{x^2+y^2})$ es una solución de (2.1) en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}$ con condiciones de Dirichlet homogéneas. Por otra parte, la función constantemente nula es también una solución del mismo problema de contorno. Es necesario entonces imponer alguna condición adicional al problema exterior para que haya unicidad.

La dificultad esencial que encontramos aquí es que la función f no representa una solución admisible para el problema físico que pretendemos modelar. En efecto, es inmediato que

$$J_0(kr) = \frac{H_0^{(1)}(kr) + H_0^{(2)}(kr)}{2}.$$

De las expansiones (2.11) y (2.12) se ve que f es la superposición de dos ondas viajeras: una que se propaga desde el origen hacia infinito y la otra desde infinito hasta el origen. Esta última es la situación que deseamos evitar. La solución que buscamos pretende modelar cómo ciertas ondas, después de interactuar con un obstáculo, se dispersan desde éste hacia todo el espacio. La física de nuestro problema nos impone buscar soluciones que sean radiantes.

La condición que necesitamos recibe el nombre de *condición de radiación de Sommerfeld*, en honor a Arnold Sommerfeld, quien la introdujo en el año 1912. Para consultar una reseña histórica a este problema consultar [21].

Definición 2. Dado D un conjunto abierto y acotado del plano, diremos que

$$u : \mathbb{R}^2 \setminus D \to \mathbb{C}$$

satisface la condición de radiación de Sommerfeld, o que es una solución radiante, si:

$$\lim_{r\to\infty} \sqrt{r} \left| \frac{\partial u}{\partial r} - iku \right| = 0$$

uniformemente en todas las direcciones.

Teorema 2. *Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un abierto acotado cuyo borde es C^2 y sea n su normal exterior. Sea $u \in C^2(\mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}) \cap C(\mathbb{R}^2 \setminus D)$ una solución radiante de la ecuación de Helmholtz en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}$ y cuya derivada normal se encuentra definida en el sentido que el límite:*

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x) = \lim_{h\to 0^+} n(x) \cdot \nabla u(x - hn(x)) \ , \ x \in \partial D$$

existe uniformemente en ∂D. Entonces:

$$u(x) = \int_{\partial D} \left[\frac{\partial u}{\partial n}(y) G_0(x,y) - u(y) \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) \right] ds(y)$$

Demostración. Llamemos $S_R = \{x \in \mathbb{R}^2 / \, \|x\| = R\}$. En primer lugar, veamos que

$$\int_{S_R} |u|^2 \, dS$$

está acotado. Para ello, observar en primer lugar que, a partir de la definición (2),

$$\lim_{R\to\infty} \int_{S_R} \left| \frac{\partial u}{\partial n} - iku \right|^2 dS = 0.$$

Desarollando el integrando,

$$\int_{S_R} \left| \frac{\partial u}{\partial n} - iku \right|^2 dS = \int_{S_R} \left[\left| \frac{\partial u}{\partial n} \right|^2 + 2kIm\left(u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} \right) + k^2 |u|^2 \right] dS.$$

Llamando $D_R = \{x \in \mathbb{R}^2 \setminus D : \|x\| \leq R\}$ y usando la primer identidad de Green resulta

$$\int_{S_R} u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS = \int_{\partial D} u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS + \int_{D_R} \left[|\nabla u|^2 - k^2 |u|^2 \right] dy$$

y por lo tanto

$$Im\left(\int_{S_R} u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS \right) = Im\left(\int_{\partial D} u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS \right).$$

Combinando los resultados anteriores,

$$\lim_{R\to\infty} \int_{S_R} \left[\left| \frac{\partial u}{\partial n} \right|^2 + k^2 |u|^2 \right] dS = -2kIm\left(\int_{\partial D} u \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS \right)$$

Ambas cantidades en la primer integral son no negativas y por lo tanto, al tener la suma límite finito, las dos integrales por separado deben permanecer acotadas.

A partir de (2.11) tenemos:

$$\left| \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) - ikG_0(x,y) \right| = ik \sqrt{\frac{2}{\pi k|x-y|}} e^{i(k|x-y| - \frac{\pi}{4})} \left(-i \frac{x-y}{|x-y|} \cdot n(y) - 1 + O\left(\frac{1}{k|x-y|} \right) \right)$$

y esto es válido uniformemente para $y \in S_R$. Si definimos

$$I_1 = \int_{S_R} u(y) \left(\frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) - ikG_0(x,y) \right) dS(y)$$

$$I_2 = \int_{S_R} G_0(x,y) \left(\frac{\partial u}{\partial n}(y) - iku(y) \right) dS(y)$$

y utilizamos la desiguladad de Hölder, vemos fácilmente que $I1, I2 \to 0$ cuando $R \to \infty$. Si usamos el teorema anterior para el dominio acotado D_R, resulta

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_{\partial D_R} \left(\frac{\partial u}{\partial n}(y) G_0(x,y) - u(y) \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) \right) dS(y) \\ &= \int_{\partial D} \left(u(y) \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) - \frac{\partial u}{\partial n}(y) G_0(x,y) \right) dS(y) + I_1 - I_2 \end{aligned}$$

y obtenemos el resultado tomando $R \to \infty$.

□

A partir de las representaciones de Green para el interior y exterior de un dominio acotado (en el último caso asumiendo además la condición de radiación), la solución de la ecuación de Helmholtz queda unívocamente determinada si conocemos los valores de ésta sobre el borde del dominio. De esta forma, el enfoque que tienen las ecuaciones integrales es proponer combinaciones lineales como las de la representación de Green (con alguna función de Green adecuada) y tomar como incógnitas ciertas densidades en el borde. El desafío será doble: por un lado, encontrar ecuaciones (bien condicionadas) para estas densidades que reflejen las condiciones de borde de la EDP y, por otro, una vez que pasemos a estudiar dominios periódicos (por lo tanto, no acotados), hallar una función de Green que absorba en sí misma esta geometría.

2.2. Operadores integrales

Las ecuaciones integrales se pueden formalizar como operadores lineales en ciertos espacios funcionales y, si verifican ciertos resultados de compacidad, mediante la teoría de Fredholm podremos establecer la existencia de soluciones para ellas. A continuación introduciremos operadores que nos permitirán plantear el problema en este escenario.

Definición 3. Sea $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$. Diremos que Γ es una curva de clase C^k si dado $x \in \Gamma$, $\exists U \subset \mathbb{R}^2$ abierto, $I \subset \mathbb{R}$ intervalo abierto y $\Phi : U \cap \Gamma \to I$ tal que:

1. $x \in U$
2. Φ es una biyección entre $U \cap \Gamma$ e I
3. $\Phi^{-1} \in C^k(I)$

Definición 4. Sea $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ una curva de clase C^k y $K : \Gamma \times \Gamma \to \mathbb{C}$. K se dice un núcleo débilmente singular si:

1. K está definido y es continuo en $\Gamma \times \Gamma \setminus \{(x,x) : x \in \Gamma\}$
2. $\exists\, M > 0, \alpha \in (0,1]$ tal que: $\forall x, y \in \Gamma$, $|K(x,y)| \leq M|x-y|^{\alpha-1}$

Observación 2.

1. Al considerar una curva Γ con la topología heredada de $\mathbb{R}^2$, queda determinada la noción de continuidad para una función definida sobre Γ. Notaremos por $C(\Gamma)$ al conjunto:
$$C(\Gamma) = \{\phi : \Gamma \to \mathbb{C} : \phi \text{ es continua}\}$$

2. Como a lo largo de esta tesis consideraremos dominios cuyas componentes conexas son acotadas, nuestras curvas serán compactas como conjuntos de $\mathbb{R}^2$. De este modo, para $\phi \in C(\Gamma)$ notaremos con
$$\|\phi\|_\infty = \text{máx}\{|\phi(x)| : x \in \Gamma\}$$
$(C(\Gamma), \|\cdot\|_\infty)$ es un espacio de Banach.

3. Para una curva $\Gamma \in C^1$, notemos con $\sigma(x, y)$ la distancia entre x e y recorriendo la curva. Se verifica que dado un ángulo $\alpha_0 \in (0, \frac{\pi}{2})$, $\exists\, \sigma_0$, que sólo depende de α_0, tal que si $\sigma(x, y) \leq \sigma_0$, el ángulo que forman la tangente a x (o a y) y el segmento $\overline{xy}$ no supera a $\frac{\alpha_0}{2}$.

   Al estar definida la recta tangente en cada punto de la curva, fijado $x \in \Gamma$ podemos obtener una parametrización por longitud de arco (al menos localmente). Llamemos s al parámetro. Luego $s = \pm\sigma(x, y)$ dependiendo de qué lado se encuentre y respecto de x en la curva. Si
$$r(y) = |y - x|$$
   se prueba en [18] que
$$\frac{dr}{ds} = \pm cos\alpha$$
   donde α es el ángulo que forman el segmento $\overline{xy}$ y la tangente a y. Nuevamente, los signos corresponden al lado en que se encuentra y respecto de x sobre la curva. De este modo obtenemos la siguiente acotación
$$k_0 |s| \leq r(y) \leq |s|$$
   donde $k_0 = cos\frac{\alpha_0}{2} > 0$.

Teorema 3. *Sea $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ una curva C^1 compacta, $K : \Gamma \times \Gamma \to \mathbb{C}$ un núcleo débilmente singular. Sea $A : C(\Gamma) \to C(\Gamma)$ el operador lineal*
$$A\phi(x) = \int_\Gamma K(x, y)\phi(y)ds(y)$$

Entonces

1. *A está bien definido, o sea $A\phi \in C(\Gamma)$, $\forall \phi \in C(\Gamma)$*

2. *A es un operador compacto*

Demostración. Supongamos en primer lugar que K es continuo sobre $\Gamma \times \Gamma$, el cual es un conjunto compacto. Luego, K es uniformemente continuo; dado $\varepsilon > 0$, $\exists\, \delta > 0$ / si $\|x - x'\| < \delta \Rightarrow \forall y \in \Gamma$, $|K(x,y) - K(x',y)| < \varepsilon$. Tomando $\phi \in C(\Gamma)$

$$\left|A\phi(x) - A\phi(x')\right| \leq \int_{\Gamma} \left|K(x,y) - K(x',y)\right| |\phi(y)|\, ds(y) \leq \|\phi\|_{\infty}\, long(\Gamma)\varepsilon$$

resultando así $A\phi$ una función continua. Más aún, si $\|\phi\|_{\infty} \leq C$ entonces

$$\left|A\phi(x) - A\phi(x')\right| \leq C long(\Gamma)\varepsilon$$

para $\|x - x'\| < \delta$. Si notamos por $B_C = \{\phi \in C(\Gamma) : \|\phi\|_{\infty} \leq C\}$, la familia $A(B_C) \subset C(\Gamma)$ resulta ser equicontinua en todo punto de Γ y es evidente que para cada $x \in \Gamma$

$$|A\phi(x)| \leq C \|K\|_{\infty(\Gamma\times\Gamma)}, \forall \phi \in B_C,$$

obteniendo entonces que $\{A\phi(x) : \phi \in B_C\}$ es relativamente compacto. Por el teorema de Arzela-Ascoli, concluimos que $A(B_C)$ es relativamente compacto y, por lo tanto, el operador A es compacto.

Supongamos ahora que K es débilmente singular. Tomemos ρ suficientemente chico de manera que podamos aplicar la acotación de la observación anterior. Dado $x \in \Gamma$,

$$|A\phi(x)| \leq \|\phi\|_{\infty} \left[\int_{\Gamma\cap\{|x-y|>\rho\}} |K(x,y)|\, ds(y) + M \int_{\Gamma\cap\{|x-y|\leq\rho\}} |x-y|^{\alpha-1}\, ds(y) \right]$$

La segunda integral podemos acotarla de la siguiente manera:

$$\int_{\Gamma\cap\{|x-y|\leq\rho\}} |x-y|^{\alpha-1}\, ds(y) \leq \int_{-s_0}^{s_0} k_0^{\alpha-1} |s|^{\alpha-1}\, ds \leq 2k_0^{\alpha-1} s_0^{\alpha} \leq \frac{2}{k_0}\rho^{\alpha}$$

y se observa que la integral impropia que define al operador es finita para cada $x \in \Gamma$. Para probar la continuidad de $A\phi$ y la compacidad del operador, definamos para cada $n \in \mathbb{N}$ y $t \geq 0$

$$k_n(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t \geq \frac{1}{n} \\ 2nt - 1 & \text{si } \frac{1}{2n} < t < \frac{1}{n} \\ 0 & \text{si } t \leq \frac{1}{2n} \end{cases}$$

Sea $K_n : \Gamma \times \Gamma \to \mathbb{C}$

$$K_n(x,y) = \begin{cases} k_n(|x-y|)K(x,y) & \text{si } x \neq y \\ 0 & \text{si } x = y \end{cases}$$

Es claro que los K_n son núcleos continuos. Notemos con A_n a los respectivos operadores integrales con núcleo K_n. Dado $x \in \Gamma$ fijo:

$$|A\phi(x) - A_n\phi(x)| \leq \|\phi\|_{\infty} M \int_{\Gamma\cap\beta(x,\frac{1}{n})} |x-y|^{\alpha-1}\, ds(y)$$

.

Usando la observación, tomando n suficientemente grande y parametrizando el entorno de x sobre la curva por longitud de arco tenemos:

$$|A\phi(x) - A_n\phi(x)| \leq \|\phi\|_\infty M \int_{-s_0}^{s_0} k_0^{\alpha-1} |s|^{\alpha-1} ds \leq \|\phi\|_\infty M \frac{2}{k_0} \left(\frac{1}{n}\right)^\alpha$$

Por lo tanto,

$$\|A\phi - A_n\phi\|_\infty \leq \|\phi\|_\infty M \frac{2}{k_0} \left(\frac{1}{n}\right)^\alpha$$

y resulta entonces que $A\phi$ es continua.

Más aún, de la desigualdad anterior es claro que $A_n \to A$ en sentido fuerte. Por lo tanto A es un operador compacto. □

Observación 3.

1. Como $\forall \lambda > 0, t^\lambda \log(t) \to 0$ cuando $t \to 0$, si consideramos

   $$K(x,y) = f(x,y)\log(|x-y|) + g(x,y)$$

   donde f y g son funciones continuas, entonces K es débilmente singular.

2. A partir de las definiciones de la funciones de Bessel,

   $$\frac{i}{4}H_0^1(t) = -\frac{1}{4}Y_0(t) + \frac{i}{4}J_0(t) = \frac{-1}{2\pi}\log\left(\frac{t}{k}\right) + J(t)$$

   donde

   $$J(t) = -\frac{2}{\pi}\left[\left(\log\left(\frac{k}{2}\right) + C\right)J_0(t) - \sum_{p=0}^{\infty}\frac{(-1)^p}{(p!)^2}\left(\frac{t}{2}\right)^{2p}\psi(p)\right] + \frac{i}{4}J_0(t)$$

   y esta constituye una función analítica que verifica

   $$J'(t) = tH(t)$$

   con $H(t)$ analítica y $H(0) \neq 0$

Definición 5. Sea $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ una curva C^2 compacta. Notemos con $n(y)$ la normal a la curva en y. Dada $\phi \in C(\Gamma)$ definimos en $\mathbb{R}^2 \setminus \Gamma$ el potencial monopolar con densidad ϕ como

$$u(x) = \int_\Gamma \phi(y) G_0(x,y) ds(y)$$

y el potencial dipolar con densidad ϕ como

$$v(x) = \int_\Gamma \phi(y) \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) ds(y)$$

Como ya hemos visto, las soluciones a los problemas interiores y exteriores se pueden expresar como combinaciones lineales de los potenciales monopolar y dipolar con densidades apropiadas (i.e. los valores de la solución y su derivada normal en el borde del dominio).

Para $x \in \mathbb{R}^2 \setminus \Gamma$, la solución fundamental y su derivada normal son regulares y por lo tanto podemos iterar las derivadas con la integral. Es inmediato que para cualquier densidad $\phi \in C(\Gamma)$, ambos potenciales son soluciones de la ecuación de Helmholtz y por lo tanto cualquier combinación lineal lo será. Para encontrar soluciones a nuestro problema propondremos como solución la suma de los potenciales, teniendo como incógnitas a las densidades; para obtener ecuaciones para éstas necesitaremos conocer cómo se comportan los potenciales a medida que nos acercamos a la curva sobre la que están definidos.

A partir de la observación anterior,

$$G_0(x,y) = -\frac{1}{2\pi} log(|x-y|) + J(k\,|x-y|)$$

$$\begin{aligned}\nabla_y G_0(x,y) &= -\frac{1}{2\pi}\frac{x-y}{|x-y|^2} + kJ'(k\,|x-y|)\frac{x-y}{|x-y|} \\ &= -\frac{1}{2\pi}\frac{x-y}{|x-y|^2} + k^2 H(k\,|x-y|)(x-y)\end{aligned}$$

Resulta entonces que el comportamiento singular de la solución fundamental proviene exclusivamente del término logarítmico, que es exactamente la solución fundamental para la ecuación de Laplace en el plano. De este modo, para estudiar el comportamiento de los potenciales a medida que nos acercamos a la curva basta hacerlo para el caso $k = 0$. Este análisis se puede encontrar en [10] o en [20]. Enunciaremos aquí el resultado principal.

Teorema 4. *Sea Γ una curva C^2 y $\phi \in C(\Gamma)$. Entonces el potencial monopolar con densidad ϕ es continuo en el borde, valiendo:*

$$u(x) = \int_\Gamma \phi(y) G_0(x,y) ds(y)\ ,\ x \in \Gamma$$

Además:

$$\frac{\partial u_\pm}{\partial n}(x) = \int_\Gamma \phi(y)\frac{\partial G_0}{\partial n(x)}(x,y) ds(y) \mp \frac{1}{2}\phi(y)$$

El potencial dipolar con densidad ϕ puede ser extendido de manera continua en Γ valiendo:

$$v_\pm(x) = \int_\Gamma \phi(y)\frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y) ds(y) \pm \frac{1}{2}\phi(x)\ ,\ x \in \Gamma$$

Observación 4. Los índices $+, -$ se refieren al lugar desde donde nos aproximamos a la curva, siendo $+$ si nos acercamos desde el semiespacio que determinan la curva y su normal y $-$ en el caso contrario.

Las integrales que aparecen están bien definidas ya que G_0, $\frac{\partial G_0}{\partial n(x)}$ y $\frac{\partial G_0}{\partial n(y)}$ definen núcleos débilmente singulares.

La derivada normal del potencial dipolar no está, por lo general, bien definida pero vale el siguiente resultado:

$$\lim_{h\to 0^+}\left\{\frac{\partial v}{\partial n}(x+hn(x))-\frac{\partial v}{\partial n}(x-hn(x))\right\}=0$$

Definición 6. Dada una curva $\Gamma \in C^2$ definimos los operadores

$$S_\Gamma\phi(x)=\int_\Gamma G_0(x,y)\phi(y)ds(y)$$

$$K'_\Gamma\phi(x)=\int_\Gamma \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y)\phi(y)ds(y)$$

$$K_\Gamma\phi(x)=\int_\Gamma \frac{\partial G_0}{\partial n(x)}(x,y)\phi(y)ds(y)$$

$$T_\Gamma\phi(x)=\frac{\partial}{\partial n(x)}\int_\Gamma \frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y)\phi(y)ds(y)$$

Observación 5. Los operadores S_Γ, K_Γ y K'_Γ son acotados y compactos de $C(\Gamma)$ en $C(\Gamma)$ pues sus núcleos son débilmente singulares. Si bien el operador T_Γ resulta no acotado, en esta tesis sólo aparecerán diferencias de operadores similares cuyos núcleos serán continuos (debido a la cancelación de las singularidades)

Ejemplo 1. Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un dominio acotado con borde C^2. Queremos resolver la ecuación de Helmholtz en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}$ con condiciones Dirichlet $u = f$, donde f es una función continua en ∂D.

Supongamos que, de alguna manera, encontramos $\phi \in C(\partial D)$ que verifica la siguiente ecuación:

$$\phi(x)+2\int_{\partial D}\frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y)\phi(y)ds(y)=2f(x)\ ,\ x\in\partial D \tag{2.21}$$

Definamos

$$u(x)=\int_{\partial D}\frac{\partial G_0}{\partial n(y)}(x,y)\phi(y)ds(y)$$

Ya hemos visto que esta es una solución de la ecuación de Helmholtz en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}$. A partir de las relaciones de salto, es inmediato que u así definida verifica la condición de borde. Hemos reducido entonces el problema exterior a resolver la ecuación (2.21). La alternativa de Fredholm nos da condiciones bastante generales para determinar la existencia y unicidad de soluciones para (2.21). En un capítulo posterior daremos métodos numéricos para poder calcular, de manera aproximada, dicha solución.

2.3. Scattering por objetos periódicos

El scattering de ondas por objetos periódicos surge naturalmente en distintos ámbitos, entre ellos: redes de difracción, diseño de metamateriales (con el objetivo de responder de ciertas maneras deseadas a la interacción con el campo electromagnético), diseño de antenas, semiconductores, etc. La ecuación de Helmholtz es formalmente equivalente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Las geometrías periódicas surgen en física del estado sólido en el estudio de la propagación de electrones en una red cristalina.

Seguiremos el enfoque de ecuaciones integrales introducido anteriormente. Para ello, deberemos dar una función de Green que tenga incorporada esta geometría.

2.3.1. Función de Green cuasiperiódica

Definición 7. Sea $u : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ una función, $\alpha, L > 0$. Diremos que u es cuasiperiódica si:

$$u(\bar{r} + L\hat{x}) = e^{i\alpha L} u(\bar{r})$$

Observación 6.

1. Una función cuasiperiódica queda determinada por los valores que asume en un único período y, posteriormente, se puede extender considerando la fase correspondiente.

2. La cuasiperiodicidad es una propiedad deseable para una onda que interactúa con un dominio periódico. Supongamos que el obstáculo se repite periódicamente a lo largo del eje x con período L. En una gran cantidad de aplicaciones se supone que la onda incidente es plana, es decir, es de la forma

   $$u_{inc}(x, y) = e^{i(\alpha, -\beta)(x,y)}$$

   con $\alpha = ksin(\theta), \beta = kcos(\theta)$, siendo θ el ángulo de incidencia. Es inmediato que u_{inc} es cuasiperiódica. Por lo tanto tendremos condiciones de borde cuasiperiódicas para el problema de contorno. Si usáramos nuevas coordenadas $(x', y') \leftrightarrow (x \pm L, y)$, el fenómeno no tendría que cambiar, solamente veríamos un desfasaje producto de cómo expresamos la onda incidente en las nuevas coordenadas.

   En este sentido supondremos que las soluciones a nuestro problema son cuasiperiódicas.

3. Hemos visto anteriormente que la función

   $$\frac{i}{4} H_0^1(k\,|r|)$$

   representa la perturbación generadada en el origen y que se propaga radialmente al exterior. En una geometría periódica, si hay una fuente en la posición r', entonces habrá infinitas fuentes en las posiciones $\{r' + nL\hat{x}, n \in \mathbb{Z}\}$. Por la linealidad de la ecuación,

   $$\frac{i}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \mu_n H_0^1 \left(k \left|r - r' + nL\hat{x}\right|\right), \mu_n \in \mathbb{C} \tag{2.22}$$

   describe la perturbación en un punto del espacio producida por estas infinitas fuentes. Funciones como (2.22) reciben el nombre de *sumas sobre látices*. Para un estudio más detallado se recomiendan [13] y [14].

4. A partir de las observaciones anteriores, para obtener una función de Green cuasiperiódica, basta tomar los coeficientes μ_n como

$$\mu_n = e^{-i\alpha nL}$$

Definición 8. Sean $\alpha, L > 0$. Definimos la función de Green cuasiperiódica como:

$$G_0^q(x,y) = \frac{i}{4}\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\alpha Ln} H_0^1\left(k\left|r - r' + nL\hat{x}\right|\right) \tag{2.23}$$

A continuación probaremos resultados de convergencia para (2.23) y daremos otra representación para la misma, la cual nos dará una interpretración física de cómo funciona esta función de Green. Para ello necesitamos el siguiente lema, remitiendo al lector en busca de su demostración a [3].

Lema 1. *Sean $I \subset \mathbb{R}$ un intervalo que contiene al 0, $s, \mu : I \to \mathbb{C}$ funciones de variación acotada que tienden a cero al acercarse al origen. Sea*

$$r_n = (nA - r) + s\left(\frac{1}{n}\right)$$

donde $Im(A) \geq 0$, $A \notin \{2\pi n : n \in \mathbb{Z}\}$, $r \in \mathbb{C}$. Entonces:

1. *$\exists\, C > 0$ tal que*
$$\left|\sum_{n=1}^{N} e^{ir_n}\right| \leq C, \forall N \in \mathbb{N}$$
2. *Si $\mu_n = \mu\left(\frac{1}{n}\right)$, entonces*
$$\sum_{n=1}^{\infty} \mu_n e^{ir_n}$$
converge
3. *Si s, μ dependen además de un parámetro $\lambda \in \mathbb{R}^p$ y $s, \mu \to 0$ cuando $t \to 0$ uniformemente en λ, la anterior serie converge uniformemente en λ.*

Demostración. Usando la fórmula de Abel:

$$\sum_{n=1}^{N} k_n\mu_n = \sum_{n=1}^{N-1}\left(\sum_{j=1}^{n} k_j\right)(\mu_n - \mu_{n+1}) + \mu_N\sum_{j=1}^{N} k_j$$

2. y *3.* son inmediatas a partir de *1.* Para una demostración de *1.* ver [3] □

Notación 1.

$$\mathcal{B} := \left\{(x,y) \in \mathbb{C}^2 : -L - \gamma \leq Re(x) \leq L + \gamma, |Im(x)| \leq \frac{L}{2}. |Im(y)| \leq \frac{L}{2}\right\} \tag{2.24}$$

$$\mathcal{K} := \{k \in \mathbb{C} : Im(k) \geq 0, k \neq 0, k \neq |\alpha_n|\, \forall n \in \mathbb{Z}\} \tag{2.25}$$

$\mathcal{K}$ es el conjunto de frecuencias que no son Wood anomalies.

Teorema 5. *La serie*

$$\frac{i}{4}\sum_{n\neq -1,0,1} e^{-i\alpha nL} H_0^1\left(k\left|(x+nL,y)\right|\right)$$

converge uniformemente sobre compactos de $\mathcal{B}\times\mathcal{K}$

Demostración. Recordando el comportamiento asintótico de la función de Hankel (2.11)

$$H_n^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i\left(z-\frac{n\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right)}\left[1+O\left(\frac{1}{z}\right)\right] \text{ si } -\pi < arg(z) < 2\pi$$

basta ver entonces que la serie

$$\sum_{n\geq 2} \frac{e^{i(k\rho_n-\alpha nL)}}{\sqrt{k\rho_n}} \tag{2.26}$$

converge uniformemente, donde $\rho_n = \sqrt{(x+nL)^2+y^2}$.

Para ello, sean

$$\rho(x,y,t) = \sqrt{\left(x+\frac{L}{t}\right)^2+y^2}, t\in\left(0,\frac{1}{2}\right]$$

$$s(x,y,k,t) = k\rho(t) - k\left(x+\frac{L}{t}\right) = \frac{ky^2}{\sqrt{\left(x+\frac{L}{t}\right)^2+y^2}+\left(x+\frac{L}{t}\right)}$$

$$\mu(x,y,k,t) = \frac{1}{k\rho(x,y,t)}$$

Tanto s como μ tienden a 0 si $t\to 0$ uniformemente en (x,y,k). Además, son funciones suaves y, por lo tanto, de variación acotada. Al ser

$$k\rho_n - \alpha nL = nl(k-\alpha) + kx + s\left(\frac{1}{n}\right)$$

podemos utilizar el lema para concluir el resultado, pues

$$L(k-\alpha)\neq 2\pi m, \forall m\in\mathbb{Z}$$

□

Observación 7.

$$\sum_{|n|\geq N} \frac{e^{i(k\rho_n-nL)}}{\sqrt{k\rho_n}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

lo cual, tanto desde un punto de vista computacional como analítico, resulta ser una convergencia lenta. En la próxima sección introduciremos una nueva función de Green que converge más rápidamente e incluso para frecuencias que son Wood anomalies.

Teorema 6. *Sean* $(x,y)\in\mathbb{R}^2$ *tales que* $(x,y)\neq(nL,0), n\in\mathbb{Z}$. *Tomemos* $k\in\mathcal{K}$ *y* $\alpha>0$. *Sean*

$$\alpha_n = \alpha + \frac{2\pi}{L}n,\ \beta_n = \sqrt{k^2-\alpha_n^2}$$

Entonces

$$G_0^q(x,y) = \frac{i}{2L}\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{e^{i(\alpha_n x+\beta_n|y|)}}{\beta_n} \tag{2.27}$$

Demostración. Suponer $k = a + ib$ con $b > 0$. Utilizando la notación del teorema anterior,

$$e^{-b\rho_n} \leq e^{-b(x+Ln)} e^{-by}$$

y por lo tanto

$$\left|G_0^q(x,y)\right| \to 0 \text{ para } y \to \infty \text{ uniformemente en } x \in [0,L] \tag{2.28}$$

La función

$$F(x,y) = e^{-i\alpha x} G_0^q(x,y)$$

es periódica en x, si definimos para $y \neq 0$

$$a_n(y) = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i\alpha x} G_0^q(x,y) e^{-i\frac{2\pi}{L}nx} dx \tag{2.29}$$

tenemos que

$$\frac{d^2 a_n}{dy^2} + b_n^2 a_n = -\frac{1}{L}\delta(y)$$

y entonces

$$a_n(y) = \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\beta_n |y|} \tag{2.30}$$

Por otra parte, como $\frac{x}{L} \neq \mathbb{Z}$, aplicamos el lema a la serie

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{e^{i(\alpha_n x + \beta_n |y|)}}{\beta_n} \tag{2.31}$$

tomando

$$\mu_n = \frac{1}{\beta(\frac{1}{n})}$$

$$r_n = \alpha_n x + \beta_n |y| = \alpha + \frac{2\pi}{L} nx + \beta\left(\frac{1}{n}\right)|y|$$

donde

$$\beta(t) = \sqrt{k^2 - \left(\alpha + \frac{2\pi}{L}\frac{1}{t}\right)^2}$$

que es una función suave y tiende a cero si $t \to 0$. Luego, la serie (2.31) converge uniformemente sobre compactos de

$$\left\{ \frac{x}{L} \neq \mathbb{Z}, y \in \mathbb{R}, k \neq 0, Im(k) \geq 0, k^2 \neq \alpha_n \right\}$$

y es por lo tanto continua respecto de (k, x, y). Como la igualdad del teorema vale para $Im(k) > 0$ y la función de Green cuasiperiódica es continua en $\mathcal{K}$, concluimos que la igualdad vale también para $Im(k) = 0$. □

Observación 8.
Llamemos $U = \left\{ n \in \mathbb{Z} : k^2 > \alpha_n^2 \right\}$. Para frecuencias que no son Wood anomalies, tenemos que $\mathbb{Z} = U \cup U^c$. La representación espectral nos da una clara interpretación física de la función de Green cuasiperiódica. Las infinitas fuentes (desfasadas por la cuasiperiodicidad) se superponen generando frentes de onda planos: para $n \in U^c$, decaen exponencialmente (ondas evanescentes) y para $n \in U$ son ondas viajeras con vector de onda (α_n, β_n). Además, vale destacar que todos los modos satisfacen una condición de radiación: para $y > 0$ se propagan hacia $+\infty$ y, para $y < 0$, hacia $-\infty$.

2.3.2. Nueva función de Green cuasiperiódica

A continuación presentaremos una función de Green cuasiperiódica que converge para toda frecuencia. Daremos los principales resultados introducidos en [2] y comentaremos ciertos problemas que introduce esta nueva función.

Observación 9. 1. Usando el teorema del valor medio y la relación 2.5, dado $h > 0$, $\exists\, \xi / Y < \xi < Y + h$ tal que

$$H_0^1(k\sqrt{X^2+Y^2}) - H_0^1(k\sqrt{X^2+(Y+h)^2}) = \frac{hk(Y+\xi)}{\sqrt{X^2+(Y+\xi)^2}} H_1^1(k\sqrt{X^2+(Y+\xi)^2})$$

Como queremos evalular la función de Hankel para $X + NL$ con $N \to \infty$ e $|Y|$ acotado, usando la expresión asintótica (2.11), concluimos que

$$\left| H_0^1(k\sqrt{X^2+Y^2}) - H_0^1(k\sqrt{X^2+(Y+h)^2}) \right| \leq \frac{C}{|X|^{\frac{3}{2}}}$$

2. Sea $j \in \mathbb{N}$. Consideremos los siguientes operadores

$$\mathcal{I}^j : \mathbb{C}^{j+1} \to \mathbb{C}^{j+1}, \mathcal{I}^j(u_0 \dots u_j) = (u_0 \dots u_j)$$

$$\mathcal{E}^j : \mathbb{C}^{j+1} \to \mathbb{C}^{j+1}, \mathcal{E}^j(u_0 \dots u_j) = (u_1 \dots u_j, 0)$$

$$\mathcal{P}^j : \mathbb{C}^{j+1} \to \mathbb{C}, \mathcal{P}^j(u_0 \dots u_j) = u_0$$

y el operador de diferencias finitas

$$\mathcal{F}^j(u_0 \dots u_j) = \sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} u_l$$

Dado que $\mathcal{I}^j$ conmuta con cualquier otro operador, por la fórmula del binomio tenemos

$$\mathcal{F}^j = \mathcal{P}^j \circ (I^j - E^j)^j$$

o sea, $\mathcal{F}^j$ resulta de aplicar j veces el operador de diferencias finitas $\mathcal{I}^j - \mathcal{E}^j$.
Si tomamos un polinomio $P \in \mathbb{C}[Z]$ la aplicación de $I_j - E_j$ al vector en $\mathbb{C}^{j+1}$

$$u_l = P(Z + l\varepsilon), l = 0 \dots j$$

produce en cada componente del vector un polinomio de grado menor que P. Luego, si $gr(P) = j$, al aplicar el operador j veces, obtendremos

$$\sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} P(Z + \varepsilon l) = 0$$

Si consideramos una función v suave y aplicamos un desarrollo de Taylor resulta

$$\sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} v(Z + \varepsilon l) = \varepsilon^j \sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} \frac{l^j}{j!} v^{(j)}(Z + \varepsilon l)$$

Definición 9. Sean $h \in \mathbb{R}, j \in \mathbb{N}, k > 0$. Sean $(X, Y) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(0, lh) : 0 \leq l \leq j\}$. Se define la función de Green de medio espacio como:

$$G_j(X,Y) = \frac{i}{4}\sum_{l=0}^{j}(-1)^l \binom{j}{l} H_0^1\left(k\sqrt{X^2+(Y+lh)^2}\right)$$

Lema 2. *Sean $h \in \mathbb{R}, j \in \mathbb{N}, k > 0, M > 0$. Existe $C > 0, C = C(k,h,M)$ tal que $\forall Y \in \mathbb{R}$, $|Y| < M$, $\forall X \in \mathbb{R}, |X| > 1$*

$$\left|G_j(X,Y)\right| \leq C \begin{cases} |X|^{-\frac{j+1}{2}} & j \text{ es par} \\ |X|^{-\frac{j}{2}-1} & j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.32}$$

Demostración. Sea

$$f(X,Z) = \frac{i}{4}H_0^1\left(k\,|X|\,u(X)\right),\ u(Z) = \sqrt{1+Z^2} \tag{2.33}$$

Es claro que

$$G_j(X,Y) = \sum_{l=0}^{j}(-1)^l\binom{j}{l} f\left(X, \frac{Y}{|X|} + \frac{lh}{|X|}\right)$$

Para estudiar el decaimiento de $G_j(X,Y)$ cuando $|X| \to \infty$, aplicaremos la observación anterior a la función

$$v(Z) = f(X,Z)$$

para un valor fijo de X y tomando $Z = \frac{Y}{X}$ y $\varepsilon = \frac{h}{|X|}$. Luego

$$G_j(X,Y) = \left(\frac{h}{|X|}\right)^j \sum_{l=1}^{j}(-1)^l\binom{j}{l}\frac{l^j}{j!}f^{(j)}\left(X, \frac{Y}{|X|} + \xi_l\right),\ 0 \leq \xi_l \leq \frac{lh}{|X|} \tag{2.34}$$

donde $f^{(j)}$ denota la derivada respecto de Z de la composición de funciones (2.33):

$$f^{(j)}(X,Z) = \frac{i}{4}\frac{d^j}{dZ^j}\left(H_0^1(k\,|X|\,u(Z))\right). \tag{2.35}$$

Lo único que deberemos hacer para probar el lema será acotar esta cantidad. Usando la fórmula de Faà di Bruno [8]

$$f^{(j)}(X,Z) = \frac{i}{4}\sum \frac{j!}{m_1!\ldots m_j!}\left(H_0^1\right)^{(m)}(k\,|X|\,u(Z))\prod_{q=1}^{j}\left(\frac{k\,|X|\,u^{(q)}(Z)}{q!}\right)^{m_q}$$

donde $m = m_1 + \cdots + m_j$ y la suma se realiza sobre todas las j-uplas de enteros no negativos $(m_1, \ldots, m_j)$ que verifican $m_1 + 2m_2 + \cdots + jm_j = j$. Deberemos acotar dos cantidades: las derivadas de la función de Hankel de primer orden y la productoria de la anterior ecuación.

A partir de las relaciones (2.5) y (2.6) se puede ver fácilmente que

$$\left(H_0^1\right)^{(m)}(k\,|X|\,u(Z)) = \sum_{q=0}^{m} c_q^m H_q^1(k\,|X|\,u(Z))$$

y usando (2.11)

$$\left|H_q^1(t)\right| \leq \frac{L_1}{\sqrt{t}}\ ,\ q \in \mathbb{Z}\ , 0 \leq q \leq j\ , t > 0$$

para ciertas constantes c_q^m y L_1. Claramente,

$$\left|\frac{Y}{|X|} + \xi_l\right| \leq \frac{M + jh}{|X|}$$

y por lo tanto existe $L_2 = L_2(k, M, j, h)$ tal que

$$\left|\left(H_0^1\right)^{(m)}\left(k\,|X|\,u\left(\frac{Y}{|X|} + \xi_l\right)\right)\right| \leq \frac{L_2}{\sqrt{|X|}},\ \ \forall\, l = 0 \ldots j\ , \forall\, m = 0 \ldots j \tag{2.36}$$

Por otra parte, haciendo un desarrollo en serie de la función $\sqrt{1+t^2}$ se ve fácilmente que para $q = 0 \ldots j$

$$u^{(q)}(Z) \leq \begin{cases} L_3 & \text{si } q \text{ es par} \\ L_3 Z & \text{si } q \text{ es impar} \end{cases}$$

para cierta constante L_3. De este modo,

$$\prod_{q=1}^{j}\left(\frac{k\,|X|\,u^{(q)}(Z)}{q!}\right)^{m_q} \leq \begin{cases} L_4\,|X|^{\sum_{q=1}^{j} m_q - \sum_{q=1}^{j/2} m_{2q-1}} = |X|^{\sum_{q=1}^{j/2} m_{2q}} & \text{si } j \text{ es par} \\ L_4\,|X|^{\sum_{q=1}^{j} m_q - \sum_{q=1}^{(j+1)/2} m_{2q-1}} = |X|^{\sum_{q=1}^{(j-1)/2} m_{2q}} & \text{si } j \text{ es impar} \end{cases}$$

A su vez, es fácil ver que

$$\sum_{q=1}^{j/2} m_{2q} \leq \frac{j}{2} \text{ si } j \text{ es par}$$

y que

$$\sum_{q=1}^{(j-1)/2} m_{2q} \leq \frac{j-1}{2} \text{ si } j \text{ es impar}$$

obteniendo finalmente

$$\prod_{q=1}^{j}\left(\frac{k\,|X|\,u^{(q)}(Z)}{q!}\right)^{m_q} \leq \begin{cases} L_4\,|X|^{j/2} \text{ si } j \text{ es par} \\ L_4\,|X|^{(j-1)/2} \text{ si } j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.37}$$

Combinando (2.36) y (2.37) resulta

$$\left|f^{(j)}\left(X, \frac{Y}{|X|} + \xi_l\right)\right| \leq \begin{cases} \tilde{C}\,|X|^{-j/2-1/2} & \text{si } j \text{ es par} \\ \tilde{C}\,|X|^{-j/2-1} & \text{si } j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.38}$$

para cierta constante $\tilde{C}$. Teniendo en cuenta (2.34) el lema se deduce fácilmente. □

Lema 3. *Sean $h \in \mathbb{R}, j \in \mathbb{N}, k > 0, M > 0$. Existen $C_1 > 0, C_1 = C_1(k,h,M)$,$C_2 > 0$, $C_2 = C_2(k,h,M)$ tal que $\forall\, Y \in (-M, M), \forall X \in \mathbb{R}, |X| > 1$*

$$\left|\frac{\partial G_j}{\partial x_l}\right|(X,Y) \leq C_1 \begin{cases} |X|^{-\frac{j+1}{2}} & j \text{ es par} \\ |X|^{-\frac{j}{2}-1} & j \text{ es impar} \end{cases} \qquad l = 1, 2 \tag{2.39}$$

$$\left|\frac{\partial^2 G_j}{\partial x_l \partial x_p}\right|(X,Y) \leq C_2 \begin{cases} |X|^{-\frac{j+1}{2}} & j \text{ es par} \\ |X|^{-\frac{j}{2}-1} & j \text{ es impar} \end{cases} \qquad l=1,2 \;\; p=1,2 \tag{2.40}$$

Demostración. Para probar este resultado, calculamos las derivadas de

$$H_0^1(ku(x,y+lh))$$

con $u(t_1,t_2)=\sqrt{t_1^2+t_2^2}$. Para ello, usamos las relaciones

$$\frac{dH_0^1}{dz}(z) = -H_1^1(z)$$
$$\frac{dH_1^1}{dz}(z) = \frac{H_1^1(z)}{z} - H_2^1(z)$$

Luego

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(H_0^1(ku(x,y+lh))\right) = -kH_1^1(ku)\frac{x}{u(x,y+lh)}$$
$$\frac{\partial}{\partial y}\left(H_0^1(ku(x,y+lh))\right) = -kH_1^1(ku)\frac{y+lh}{u(x,y+lh)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(H_0^1(ku(x,y+lh))\right) = -k\left(\frac{H_1^1(ku(x,y+lh))}{u(x,y+lh)} - k\frac{x^2}{u^2(x,y+lh)}H_2^1(ku(x,y+lh))\right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(H_0^1(ku(x,y+lh))\right) = -k\left(\frac{H_1^1(ku(x,y+lh))}{u(x,y+lh)} - k\frac{(y+lh)^2}{u^2(x,y+lh)}H_2^1(ku(x,y+lh))\right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\left(H_0^1(ku(x,y+lh))\right) = k^2\frac{H_2^1(ku(x,y+lh))}{u^2(x,y+lh)}$$

De este modo, las derivadas del término l-ésimo de la sumatoria es una combinación lineal de funciones de Hankel por derivadas de la función u. Debido a (2.11), todas las funciones de Hankel de primer órden poseen el mismo comportamiento asintótico que hemos usado anteriormente. Por lo tanto, la prueba para estos casos se hace de manera análoga al lema anterior. □

Definición 10. Sea $j \in \mathbb{N}, h \in \mathbb{R}$. Se define la función de Green cuasiperiódica con j polos como:

$$G_j^q(X,Y) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL} G_j(X+nL,Y)$$

A partir de estos lemas, el siguiente teorema es inmediato.

Teorema 7. *Sean $j \in \mathbb{N}, k>0, h \in \mathbb{R}, M>0$. Sea $N \in \mathbb{N}$. Entonces*
$\exists\, D_M > 0, D_M = D_M(k,h,j,M)$ tal que $\forall\, X \in \left(-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right), \forall\, Y \in (-M,M)$ y $\forall\, N>1$

$$\left|\sum_{n\in\mathbb{Z},|n|>N} e^{-i\alpha nL} G_j(X+nL,Y)\right| \leq D_M \begin{cases} N^{-\frac{j-1}{2}} & j \text{ es par} \\ N^{-\frac{j}{2}} & j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.41}$$

$$\left| \sum_{n\in\mathbb{Z},|n|>N} e^{-i\alpha nL} \frac{\partial G_j}{\partial x_l}(X+nL,Y) \right| \leq D_M \begin{cases} N^{-\frac{j-1}{2}} & j \text{ es par} \\ N^{-\frac{j}{2}} & j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.42}$$

$$\left| \sum_{n\in\mathbb{Z},|n|>N} e^{-i\alpha nL} \frac{\partial^2 G_j}{\partial x_l \partial x_p}(X+nL,Y) \right| \leq D_M \begin{cases} N^{-\frac{j-1}{2}} & j \text{ es par} \\ N^{-\frac{j}{2}} & j \text{ es impar} \end{cases} \tag{2.43}$$

El truncamiento de la serie

$$\sum_{n=-N}^{N} e^{-i\alpha nL} G_j(X+nL,Y)$$

y sus respectivas derivadas convergen a la función de Green cuasiperiódica y a sus derivadas cuando $N \to \infty$ como $N^{-(j-1)/2}$ para j par y como $N^{-j/2}$ si j es impar.

Esta nueva función corrige dos problemas que posee la función de Green cuasiperiódica presentada en la sección anterior: la convergencia no falla para frecuencias que son Wood anomalies y es acelerada a medida que aumentamos j.

De todos modos, la introducción de los polos conlleva, en principio, dos problemas. Si tomamos una frecuencia que no es una Wood Anomaly, podemos usar la representación espectral. Tomando $h > 0$ (los polos están debajo del eje x) e $Y > 0$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_j^q(X,Y) &= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} \left(\sum_{l=0}^{j} (-1)^l \binom{j}{l} e^{i\beta_n lh} \right) e^{i(\alpha_n x+\beta_n y)} \\ &= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} \left(1-e^{i\beta_n h}\right)^j e^{i(\alpha_n x+\beta_n y)} \end{aligned}$$

De esta forma, si elegimos el parámetro arbitrario h de manera que

$$\beta_n h \equiv 0 \ (2\pi)$$

para algún $n \in \mathbb{Z}$, la función de Green perderá la información sobre ese modo.

De igual manera, si hacemos un desarrollo de Taylor de $(1-e^{i\beta_n h})^j$, es inmediato que para $j \geq 2$

$$\frac{(1-e^{i\beta_n h})^j}{\beta_n} \to 0 \text{ si } \beta_n \to 0$$

Recordando que $\beta_n \to 0$ para algún n cuando nos acercamos a una Wood Anomaly, la función de Green $\tilde{G}_j^q$, si bien sigue convergiendo, pierde la información de los modos que se desplazan paralelos al eje x. Los autores corrigen este problema sencillamente sumando aquello que desparece: si A es el conjunto de índices de los modos que se pierden, se considera una nueva función de Green:

$$\tilde{\tilde{G}}_j^q(X,Y) = G_j^q(X,Y) + \sum_{n\in A} A_n e^{i(\alpha_n x+\beta_n y)} \tag{2.44}$$

donde A_n son constantes a definir.

El problema producido por las Wood anomalies es, en algún sentido, más fundamental que el producido por la selección arbitraria de h. Entender cómo introducir los modos que desaparecen producto de las Wood anomalies (e incluso, evaluar si ese es el abordaje

correcto) ha sido la mayor fuente de problemas de esta tesis. En un capítulo posterior usaremos las herramientas presentadas aquí para dar un planteo en términos de ecuaciones integrales al problema presentado en el primer capítulo y daremos una solución al problema que generan las frecuencias anómalas.

Capítulo 3

Métodos numéricos

3.1. Método de Nyström

En el capítulo anterior habíamos definido operadores entre espacios funcionales para establecer ecuaciones integrales que den cuenta de las condiciones de borde de la EDP. En general, dado un núcleo arbitrario para un operador integral resulta díficil (si no imposible) hallar expresiones cerradas para las soluciones y, por ello, acudimos a rutinas numéricas para aproximarlas. El enfoque que hemos elegido para resolver las ecuaciones integrales que obtendremos en el siguiente capíutlo es el llamado *método de Nyström*.

Sea $G \subset \mathbb{R}^m$ un conjunto medible (Jordan), $K : G \times G \to \mathbb{C}$ un núcleo (continuo o débilmente singular) y consideremos, como en el capítulo anterior, el operador integral $A : C(G) \to C(G)$

$$A(\varphi)(x) = \int_G K(x,y)\varphi(y)dy$$

La idea principal del método es aproximar la integral que da lugar al operador por una regla de cuadratura. Tomando $n \in \mathbb{N}$, eligiendo puntos $x_1 \dots x_n \in G$ como nodos y pesos $\alpha_1^{(n)} \dots \alpha_n^{(n)}$ construimos el operador

$$(A_n\varphi)(x) := \sum_{k=1}^{n} \alpha_k^{(n)} K(x,x_k)\varphi(x_k)$$

Supongamos que queremos resolver, por ejemplo, la ecuación de segundo tipo

$$\varphi - A\varphi = f$$

Si definimos $f_n \in \mathbb{C}^{n\times 1}$, $(f_n)_i = f(x_i)$ y resolvemos el sistema lineal que verifica

$$\varphi_n - A_n\varphi_n = f_n$$

podríamos interpolar $\varphi_n \in \mathbb{C}^n$ para aproximar φ. Con mayor formalidad formulamos el siguiente teorema de fácil demostración.

Teorema 8. *Sea $\varphi_n \in C(G)$ una función que verifica*

$$\varphi_n(x) - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k^{(n)} K(x,x_k)\varphi_n(x_k) = f(x), x \in G \tag{3.1}$$

Entonces los valores $\varphi_j^{(n)} = \varphi_n(x_j), j = 1 \dots n$, *son solución del sistema lineal*

$$\varphi_j^{(n)} - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k K(x_j, x_k)\varphi_k^{(n)}, j = 1 \dots n \tag{3.2}$$

Respectivamente, si $\varphi_j^{(n)}$, $j = 1 \dots n$ *es solución de (3.2), entonces la función*

$$\varphi_n(x) := f(x) + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k K(x, x_k)\varphi_k^{(n)}, x \in G$$

resuelve la ecuación (3.1)

Para obtener sistemas lineales deberemos dar reglas de cuadratura especiales. Como hemos mencionado anteriormente, algunos de los núcleos con los que vamos a trabajar en esta tesis tienen una singularidad de tipo logarítmico. En [11] y [15] se introduce una regla de cuadratura especial, la regla *MK* (o de *Martensen-Kussmaul*), que permite tratar con gran precisión esta clase de singularidades. En efecto, consideremos el operador integral

$$(Qg)(t) := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \log\left[4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right] g(\tau)d\tau \tag{3.3}$$

donde g es una función continua y 2π-periódica. Esta última hipótesis se encuentra fundamentada en que consideraremos ecuaciones integrales sobre curvas cerradas (y que por lo tanto podremos parametrizar de manera periódica) o sobre superficies periódicas (el caso de un grating) donde podremos reescribir el operador de manera tal que las densidades y los núcleos resulten periódicos. De este modo, tomamos $n \in \mathbb{N}$ y si consideramos los $2n$ nodos

$$t_j = j\frac{\pi}{n}\,,\ j = 0 \dots 2n-1$$

obtenemos la cuaratura

$$(Q_n g)(t) = \sum_{j=0}^{2n-1} R_j^{(n)}(t) g(t_j) \tag{3.4}$$

donde

$$R_j^{(n)}(t) = \frac{1}{2n} \sum_{q=-n+1}^{n} \int_0^{2\pi} e^{iq(\tau - t_j)} \log\left[4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right] d\tau \tag{3.5}$$

Con la ayuda de las integrales

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \log\left[4\sin^2\left(\frac{\tau}{2}\right)\right] e^{im\tau}d\tau = \begin{cases} 0 & \text{si } m = 0 \\ -\frac{1}{m} & \text{si } m = 1, 2, \dots \end{cases} \tag{3.6}$$

resulta

$$R_j^{(n)}(t) = -\frac{1}{n}\left\{\sum_{m=1}^{n-1}\frac{1}{m}cos\left(m(t-t_j)\right) + \frac{1}{2n}cos\left(n(t-t_j)\right)\right\} \text{ para } j = 0 \dots 2n-1 \tag{3.7}$$

Por otra parte, tendremos que evaluar integrales con núcleos regulares. Para ello, utilizaremos la regla de trapecios compuesta

$$\int_0^{2\pi} K(t,\tau)\varphi(\tau)d\tau \sim \frac{\pi}{n}\sum_{j=0}^{2n-1} K(t,t_j)\varphi(t_j) \tag{3.8}$$

Ambas reglas de cuadratura poseen órdenes de convergencia altos para la clase de funciones de nuestro interés. Para funciones analíticas y periódicas, la regla de Martensen-Kussmaul y la de trapecios convergen exponencialmente con el número de nodos y, para funciones C^∞ y periódicas, la convergencia es súperalgebraica, o sea, mejor que cualquier potencia en el número de nodos. Las ventajas que presenta el método de Nyström frente a otros consisten en que solamente exige una evaluación de cada núcleo para calcular cada elemento de la matriz. Además, es en general estable, en tanto que se preserva la condición de la ecuación de operadores integrales al pasar a un sistema lineal y, fundamentalmente, el análisis del error en la solución es simple: se puede probar bajo condiciones generales sobre el núcleo y la solución exacta del problema de operadores que el órden de convergencia de la cuadratura se traslada al orden de convergencia en la solución. Se puede consultar una demostración de todos estos resultados en [10].

3.2. Evaluación eficiente de la función de Green cuasiperiódica

Como acabamos de mencionar, el método de Nyström requiere de la evaluación, en un conjunto finito de nodos, del núcleo que da lugar al operador integral. En este trabajo, este núcleo proviene de la función de Green cuasiperiódica (con o sin polos) o bien de sus derivadas normales en diferentes curvas. Una parte esencial será buscar una forma de evaluar eficientemente dicha función, la cual viene dada por una serie, razón por la cual deberemos truncarla de alguna manera. La primer idea que puede proponerse es, sencillamente, realizar la suma con $n = -N \dots N$. Ya hemos mencionado en el anterior capítulo que esto resulta en una convergencia de orden $O(N^{-1/2})$ sin agregar polos y $O(N^{-j/2})$ si los agregamos. Presentaremos a continuación dos resultados que nos darán un método de convergencia superalgebraica, i.e., mejor que $O(N^{-p})$ para cualquier entero positivo p.

3.2.1. Método de la ventana

En la tesis [17] se introduce por primera vez un método para la integración eficiente de la función de Green cuasiperiódica G_0^q y de su derivada normal para problemas de gratings, es decir, curvas que son el gráfico de una función periódica. La idea principal es reescribir la integral cuyo núcleo está asociado a la función de Green cuasiperiódica sobre un único periodo como una integral impropia y aproximar esta última por una integral con límites finitos. Por simplicidad y para no recargar la notación, analizaremos solamente el caso en que el núcleo es la función de Green cuasiperiódica. El caso en que el núcleo sea alguna derivada de esta función se analiza de igual manera.

Llamemos $\Gamma = \{(x, f(x)) : x \in \mathbb{R}\}$ y $\Gamma_0 = \left\{(x, f(x)) : x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]\right\}$ donde $f \in C^2$ y es periódica con período L. Estamos interesados en evaluar la siguiente integral

$$\int_{\Gamma_0} G_0^q(r-r')\mu(r')dS(r') \tag{3.9}$$

Recordando que la función G_0^q viene dada por una serie que converge uniformemente sobre compactos que no contienen singularidades y para frecuencias lejanas a una Wood anomaly, (3.9) se puede reescribir como

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL}\int_{\Gamma_0} G_0(r-r'+nL\hat{x})\mu(r')dS(r') =$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} G_0(x-x'+nL, y-f(x'))\mu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2}dx' \tag{3.10}$$

Supongamos que μ, que en principio es una densidad definida sobre Γ_0, la extendemos de manera cuasiperiódica a toda la curva Γ. Luego, como ya hemos visto, la función

$$\nu(x,y) = e^{-i\alpha x}\mu(x,y)$$

es periódica de período L. Reescribiendo (3.10) resulta

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} G_0(x-x'+nL, y-f(x'))\mu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2}dx'$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} G_0(x-x'+nL, y-f(x'))e^{-i\alpha nL}e^{i\alpha x'}\nu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2}dx' \tag{3.11}$$

Realizando para cada $n \in \mathbb{N}$ el cambio de variables $t' = x' - nL$, la última expresión resulta igual a

$$\int_{-\infty}^{\infty} G_0(x-x', y-f(x'))\mu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2}dx' \tag{3.12}$$

El método que describimos aproxima esta integral, cuyo soporte es infinito, por una integral cuyo soporte es compacto y este truncamiento se realiza utilizando una partición suave de la unidad. Consideremos la función

$$S(x,x_0,x_1) = \begin{cases} 1 & |x| \le x_0 \\ exp(\frac{2e^{-1/u}}{u-1}) & x_0 \le |x| \le x_1,\ u = \frac{|x|-x_0}{x_1-x_0} \\ 0 & |x| \ge x_1 \end{cases} \tag{3.13}$$

y, dados $c \in (0,1)$, $A > 0$, tomemos la siguiente partición suave de la unidad

$$P_1(t,c,A) = S(t,cA,A)$$

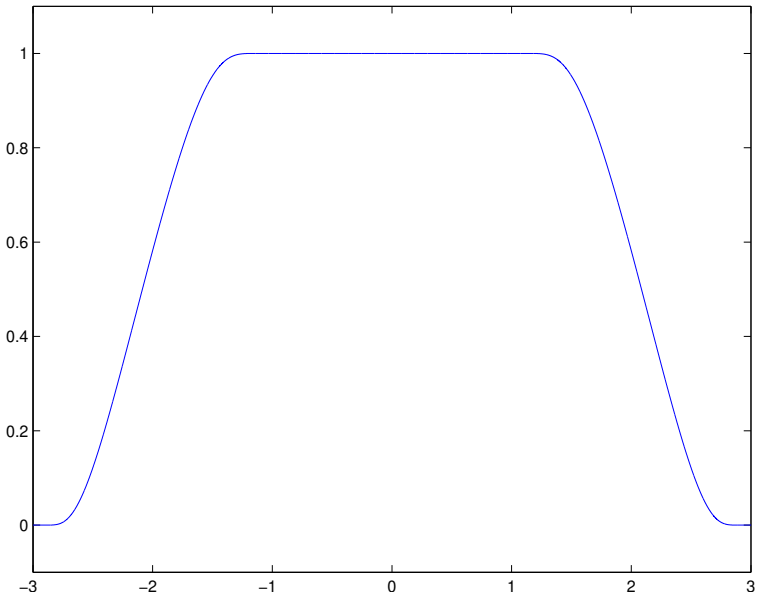

Figura 3.1: Función S con $x_0 = 1$ y $x_1 = 3$

$$P_2(t, c, A) = 1 - P_1(t, c, A)$$

Claramente (3.12) puede ser expresada como

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_1(x - x', c, A) G_0(x - x', y - f(x')) \mu(x') \sqrt{1 + (f'(x'))^2} dx' + \\ + \int_{-\infty}^{\infty} P_2(x - x', c, A) G_0(x - x', y - f(x')) \mu(x') \sqrt{1 + (f'(x'))^2} dx' \quad (3.14)$$

Si usamos la notación

$$I_A = \int_{-\infty}^{\infty} P_1(x - x', c, A) G_0(x - x', y - f(x')) \mu(x') \sqrt{1 + (f'(x'))^2} dx'$$

es evidente que la integral que nosotros pretendemos aproximar se obtiene calculando I_A con A suficientemente grande. Para estimar el error que cometemos basta estudiar el comportamiento de la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_2(x - x', c, A) G_0(x - x', y - f(x')) \mu(x') \sqrt{1 + (f'(x'))^2} dx'$$

con $A \to \infty$. En [17] se demuestra que esta familia de integrales converge superalgebraicamente con el tamaño de la ventana. En el siguiente apartado nosotros iremos aún más lejos dado que probaremos que el uso de particiones de la unidad para truncar la serie que define la función de Green cuasiperiódica produce la convergencia superalgebraica sobre compactos y, como consecuencia, la convergencia con esta tasa de las integrales.

Sin embargo, por completitud y para facilitiar la comprensión de la prueba que daremos, mostraremos un análisis simplificado de la convergencia de las integrales. Para ello recordamos que, para argumentos grandes, la función de Hankel H_0^1 tiene el siguiente comportamiento asintótico

$$H_0^1(z) \sim \frac{e^{iz}}{\sqrt{z}}.$$

Por otra parte, $\mu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2}$ es una función cuasiperiódica y por lo tanto puede ser expresada como una serie de Rayleigh

$$\mu(x')\sqrt{1+(f'(x'))^2} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} a_n e^{i\alpha_n x'}$$

De esta manera, el integrando de (3.12) puede ser aproximado por una suma infinta de términos de la forma

$$\frac{e^{ik_n x'}}{\sqrt{x'}}$$

con $k_n = k \pm (\alpha + \frac{2\pi}{L}n)$. Nuestro análisis simplificado se basará en usar la partición de la unidad para aproximar

$$I_{ex} = \int_0^\infty \frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

Remarcamos que esto es válido sólo para frecuencias que no son Wood anomalies ya que, como se puede apreciar, si la frecuencia fuera una Wood anomaly, k_n sería nulo para algún entero y, por lo tanto, la anterior integral no sería convergente. Como hemos hecho anteriormente, separamos la integral usando la partición de la unidad

$$I_{ex} = \int_0^\infty P_1(t, cA, A)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt + \int_0^\infty P_2(t, cA, A)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

Luego, aproximaremos I_{ex} por

$$I_{S,A} = \int_0^\infty P_1(t, cA, A)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

y para estudiar el error que cometemos deberemos analizar la segunda integral:

$$I_{ex} - I_{S,A} = \int_0^\infty P_2(t, cA, A)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt = \int_{cA}^\infty P_2(t, cA, A)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

que, realizando el cambio de variables $x = \frac{t}{cA}$, es igual a

$$\sqrt{cA}\int_1^\infty P_2\left(t, 1, \frac{1}{c}\right)\frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

Es claro que $P_2(1, 1, \frac{1}{c}) = 0$ y como $P_2(t, 1, \frac{1}{c}) \in C^\infty$ y es constante en $(-1, 1)$ todas sus derivadas se anulan en 1. De esta manera, integramos p veces por partes obteniendo

$$I_{ex} - I_{S,A} = \frac{(-1)^p}{(ik_n)^p (cA)^{p-1/2}} \int_{cA}^{\infty} \frac{\partial^p}{\partial x^p} \left(\frac{P\left(x, 1, \frac{1}{c}\right))}{\sqrt{x}} \right) e^{ik_n cAx} dx$$

Como ya veremos, las derivadas p-ésimas permanecen acotadas y decaen cuando $x \to \infty$. Por lo tanto, para cada $p \in \mathbb{N}$, la última integral permanece acotada uniformemente en A (aunque crecen cuando c es cercano a 0 o 1, por lo que la elección de este parámetro arbitrario debe hacerse para evitar estos dos casos) y obtenemos

$$|I_{ex} - I_{s,A}| \leq \frac{C}{k_n^p (cA)^{p-1/2}} \tag{3.15}$$

En otras palabras, el error $|I_{ex} - I_{s,A}|$ es de órden $\mathcal{O}\left(A^{p-1/2}\right)$ para todo $p \in \mathbb{N}$, obteniendo la convergencia superalgebraica deseada.

Para comparar nuestro método introducimos la expresión

$$I_{H,A} = \int_0^A \frac{e^{ik_n t}}{\sqrt{t}} dt$$

que se puede interpretar como truncar la serie que define a la función de Green cuasiperiódica hasta el término N-ésimo o tomar como función de truncamiento en la integral a la función de Heaviside.

A	$\lvert I_{ex} - I_{H,A} \rvert$	$\lvert I_{ex} - I_{S,A} \rvert$
10	$5{,}0 \times 10^{-2}$	$8{,}5 \times 10^{-5}$
20	$3{,}6 \times 10^{-2}$	$9{,}7 \times 10^{-7}$
50	$2{,}3 \times 10^{-2}$	$4{,}9 \times 10^{-10}$
100	$1{,}6 \times 10^{-2}$	$7{,}7 \times 10^{-14}$

Cuadro 3.1: Comparación de los errores producidos al aproximar I_{ex} para $k_n = 2\pi$ y $c = 0{,}1$

3.2.2. Particiones suaves de la unidad

Tal como se ha mencionado, la primer prueba que se dio sobre la convergencia superalgebraica en [17] era acerca de integrales impropias similares a las anteriores. Como hemos visto, para reescribir la integral sobre un único período, se uso fuertemente la hipótesis de que la superficie sobre la que se integra es un grating. En esta tesis, los obstáculos, si bien se repiten de manera periódica, están desconectados. De esta forma, al querer integrar sobre un óbstaculo la función de Green cuasiperiódica, no podremos usar la misma idea de reescribir la integral. Al arribar a esta parte, nos resultó necesario contar con un resultado de convergencia para integrales sobre curvas cerradas. En [4] se puede encontrar un teorema para el caso 3D, cuya demostración está incompleta, análogo al que nosotros probaremos. En pocas palabras, nuestro resultado establece que si el término general que da lugar a la función de Green cuasiperiódica es multiplicado por una función C^∞ con soporte compacto y que vale 1 en, por ejemplo, $(-c, c)$ con $c \in (0, 1)$, entonces esta suma finita converge a la función de Green cuasiperiódica uniformemente sobre compactos que no contienen singularidades y con tasa superalebraica a medida que aumentamos el soporte de la función suave.

Teorema 9. *Sea $\chi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función C^∞ que vale 1 en $(-c, c)$ y 0 en $(-1, 1)^c$, $c < 1$. Si k es una frecuencia que no es una Wood anomaly, o sea $\nexists j \in \mathbb{Z} / k^2 = (\alpha + \frac{2\pi}{L} j)^2$ entonces la función*

$$G^A(x, y) = \frac{i}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL} H_0^1(ku(x + nL, y)) \chi\left(\frac{x + nL}{A}\right) \tag{3.16}$$

con $u(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$ converge superalgebraicamente a la función de Green cuasiperiódica G_0^q cuando $A \to \infty$ para $(x, y) \notin L\mathbb{Z} \times \{0\}$. Más aún, si $K \subset \mathbb{R}^2$ es un compacto que no contiene singularidades y $p \in \mathbb{N}$ entonces existe $C_p = C_p(k, K)$ tal que

$$\left\| G^A - G_0^q \right\|_{\infty(K)} \leq \frac{C_p}{A^p} \tag{3.17}$$

para A suficientemente grande.

Demostración. Según la fórmula de suma de Poisson [9], dada f

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} f(t + nP) = \frac{1}{P} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \hat{f}\left(\frac{m}{L}\right) e^{i\frac{2\pi}{L} mt}$$

donde esta fórmula debe ser entendida en el sentido distribucional. De este modo,

$$G_0^q(x, y) - G^A(x, y) = \frac{i}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i\alpha nL} H_0^1(ku(x + nL, y)) \left(1 - \chi\left(\frac{x + nL}{A}\right)\right) \tag{3.18}$$

$$= \frac{i}{4L} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L} nx} I_m \tag{3.19}$$

donde

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha s} H_0^1(ku(s, y)) \left(1 - \chi\left(\frac{s}{A}\right)\right) e^{-i\frac{2\pi}{L} ns} ds \tag{3.20}$$

Realizando el cambio de variables $s = \frac{t}{A}$

$$I_m = A \int_{-\infty}^{\infty} H_0^1(ku(As, y)) \left(1 - \chi(s)\right) e^{-i\alpha_m As} ds \tag{3.21}$$

Dado que $1 - \chi(s) = 0$ para $|s| < c$ resulta

$$I_m = A \int_{-\infty}^{-c} H_0^1(ku(As, y)) \left(1 - \chi(s)\right) e^{-i\alpha_m As} ds + \\ + A \int_{c}^{\infty} H_0^1(ku(As, y)) \left(1 - \chi(s)\right) e^{-i\alpha_m As} ds \tag{3.22}$$

Analizaremos la integral con límites c e ∞, la restante se analiza de igual manera. Queremos ver que dado $p \in \mathbb{N}$ fijo, cada una de estas integrales puede ser acotada en la forma

$$|I_m| \leq b_m \frac{C}{A^p}$$

con $(b_m)_{m\in\mathbb{Z}}$ una sucesión sumable. Notamos que, como tomaremos $A \to \infty$, sólo nos interesará conocer de la función de Hankel H_0^1 su comportamiento para argumentos grandes. Por lo tanto, usamos la respectiva expansión asintótica

$$H_0^1(z) = \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} e^{i(z-\pi/4)} \left[\sum_{k=0}^{n} \frac{c_k}{z^k} + \frac{R(z)}{z^{n+1}}\right] \tag{3.23}$$

con $n \in \mathbb{N}$. Dejamos para el final la acotación del término correspondiente al resto. Los restantes términos son integrales de la forma

$$\int_c^\infty \frac{e^{iku(As,y)}}{(u(As,y))^{j+1/2}} \left(1-\chi(s)\right) e^{-i\alpha_m As} ds,\ j = 0 \dots n \tag{3.24}$$

que, luego de realizar ciertas operaciones, pueden ser reescritas como

$$\int_c^\infty \frac{e^{ik\frac{y^2}{As+\sqrt{A^2s^2+y^2}}}}{(u(As,y))^{j+1/2}} \left(1-\chi(s)\right) e^{i(k-\alpha_m)As} ds \tag{3.25}$$

Para analizar la integral impropia estudiaremos, como es usual, la integral definida con el extremo superior finito y luego tomaremos límite. Escribamos

$$h(s) = \frac{1-\chi(s)}{(u(As,y))^{j+1/2}} exp\left(ik\frac{y^2}{As+\sqrt{A^2s^2+y^2}}\right)$$

Realizando una integración por partes, resulta

$$\int_c^M h(s)e^{iAs(k-\alpha_m)} ds = \left.\frac{h(s)e^{iAs(k-\alpha_m)}}{iA(k-\alpha_m)}\right|_c^M + \frac{i}{A(k-\alpha_m)} \int_c^M \frac{dh}{ds}(s) e^{iAs(k-\alpha_m)} ds \tag{3.26}$$

Debido a que $\chi(c) = 1$, $h(c) = 0$. Es inmediato de la definición de h que $h(M) \to 0$ cuando $M \to \infty$. Luego,

$$\int_c^\infty h(s)e^{As(k-\alpha_m)} ds = \frac{i}{A(k-\alpha_m)} \int_c^\infty \frac{dh}{ds}(s) e^{iAs(k-\alpha_m)} ds \tag{3.27}$$

Nos vemos tentados a seguir integrando por partes para obtener factores $\frac{1}{A}$ y obtener una tasa de convergencia arbitraria. Como la función de truncamiento es C^∞ sus derivadas evaluadas en c siempre serán nulas y, por lo tanto, no deberemos preocuparnos por este extremo de integración. Sólo deberemos ver que las derivadas de h convergen rápidamente. En efecto, es inmediato que para $s > 1$, $h(s) = \varphi(As)$ donde

$$\varphi(t) = \frac{1}{(u(t,y))^{j+1/2}} exp\left(ik\frac{y^2}{t+\sqrt{t^2+y^2}}\right)$$

Las derivadas de h serán de la forma

$$h^{(n)}(s) = A^n \varphi^{(n)}(as)$$

y, de este modo, deberemos ver que

$$\varphi^{(n)}(t) = \mathcal{O}\left(t^{-n}\right) \text{ si } t \to \infty$$

Definamos la función

$$\psi(w) = \frac{1}{(1+w^2)^{j/2+1/4}} exp\left(iky\frac{w}{1+\sqrt{1+w^2}}\right)$$

que es analítica en una bola centrada en el origen y verifica

$$\varphi(t) = \frac{1}{t^{j+1/2}}\psi\left(\frac{y}{t}\right)$$

para $|t| > \rho_0$ y

$$\psi(0) = 1$$

Por lo tanto

$$\varphi(t) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta_l}{t^{j+l+1/2}}$$

Diferenciando n veces obtenemos el decaimiento deseado pues

$$\frac{d^n\varphi}{dt^n}(t) = (-1)^n \sum_{l=0}^{\infty} \beta_l \frac{(j+l+1/2)\dots(j+l+n-1+1/2)}{t^{n+j+l+1/2}}$$

Las constantes β_l dependen sólo de k y de y. De este modo, en (3.27) podemos integrar por partes una cantidad arbitraria de veces obteniendo

$$\int_c^{\infty} h(s)e^{As(k-\alpha_m)}ds = \left(\frac{i}{A(k-\alpha_m)}\right)^p \int_c^{\infty} \frac{d^p h}{ds^p}(s)e^{iAs(k-\alpha_m)}ds \tag{3.28}$$

Se puede ver fácilmente a partir del decaimiento rápido que mostramos anteriormente que las integrales impropias convergen para cualquier p y, fijado p, cada integral está acotada uniformemente en A. Más aún, suponiendo que $y \in K$, con K un compacto de la recta, existe $C_p = C_p(k, K)$ tal que las integrales en (3.28) pueden ser acotadas por

$$C_p \left|\frac{1}{A(k-\alpha_m)}\right|^p$$

Por último debemos acotar el término correspondiente al resto. Si bien tomando n suficientemente grande, podríamos acotar a

$$\int_c^{\infty} \frac{e^{iku(As,y)}}{(u(As,y))^{n+3/2}} R(k(u(As,y)))\,(1-\chi(s))\,e^{-i\alpha_m As}ds \tag{3.29}$$

por

$$\frac{C}{A^{p-1}}$$

con C alguna constante, no debemos olvidar que tenemos que realizar una suma infinita. Por lo tanto, es necesario que la constante dependa explícitamente de m y que esta sucesión de constantes sea sumable. Una forma que podemos hacerlo es aplicando la misma metodología que antes, o sea, integrando por partes. En primer lugar, definamos

$$\tilde{h}(s) = \frac{1-\chi(s)}{(u(As,y))^{n+3/2}} R(ku(As,y)) exp\left(ik\frac{y^2}{As+\sqrt{A^2s^2+y^2}}\right)$$

En [12] se prueba que la expresión (3.23) puede ser derivada y por lo tanto R es derivable. Más aún, $R(z)$ y sus derivadas primeras y segundas están acotadas cuando $|z| \to \infty$. De esta manera, tomando A suficientemente grande, integramos por partes (pues $\tilde{h}$ tiene un decaimiento rápido como en las anteriores integrales) y (3.29) puede ser acotada, como hemos hecho anteriormente con h, por

$$\frac{1}{(A(k-\alpha_m))^2} \int_A^\infty \frac{C}{(u(As,y))^{n+3/2}} ds$$

y al ser $\sqrt{A^2s^2+y^2} \geq As$, esta última es menor igual que

$$\frac{C}{A^{n+7/2}} \int_A^\infty \frac{1}{s^{n+3/2}} ds$$

De esta forma, para el término del resto, si tomamos n tal que $n + \frac{7}{2} \geq p$, obtenemos la acotación deseada. Así, resulta finalmente que

$$|I_m| \leq \frac{C}{A^{p-1}} \frac{1}{|k-\alpha_m|^2}$$

y al ser $\alpha_m = \alpha + \frac{2\pi}{L} m$

$$\left|G^q(x,y) - G^A(x,y)\right| \leq \frac{C_p}{4LA^{p-1}} \sum_{m\in\mathbb{Z}} \frac{1}{|k-\alpha_m|^2}$$

uniformemente en $(x,y) \in K$ con K un conjunto compacto del plano que no contiene singularidades. De este modo, nuestro teorema queda probado □

Observación 10. Un resultado análogo puede formularse para aproximar las derivadas de la función de Green cuasiperiódica puesto que las derivada n-ésima de H_0^1 puede expresarse como una combinación lineal de $H_0^1 \dots H_n^1$ y todas poseen el mismo comportamiento asintótico que mencionamos anteriormente.

Usando la notación del teorema anterior, probamos la convergencia superalgebraica de las integrales.

Teorema 10. *Sea Γ_0 una curva en el plano compacta y suave. Sea $k > 0$ una frecuencia que no es una Wood anomaly y χ como en el teorema anterior. Llamemos $n(r)$ a la normal de Γ en el punto $r \in \Gamma_0$. Sea $\mu \in C(\Gamma)$, entonces*

$$\int_{\Gamma_0} G^a(r-r')\mu(r')dS(r') \to \int_{\Gamma_0} G_0^q(r-r')\mu(r')dS(r'),\ a \to \infty \tag{3.30}$$

$$\int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^a}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r') \to \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r'),\ a \to \infty \tag{3.31}$$

$$\int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^a}{\partial x_i}(r-r')\mu(r')dS(r') \to \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial x_i}(r-r')\mu(r')dS(r'),\ a \to \infty \tag{3.32}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^a}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r')\right) \to \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\int_{\Gamma_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r')\right),\ a \to \infty \tag{3.33}$$

y la convergencia es superalgebraica. Para las primeras tres integrales, el punto campo r puede incluso pertenecer al conjunto

$$\bigcup_{n\in\mathbb{Z}} \{\Gamma_0 + nL\}$$

Demostración. La demostración es clara por la convergencia sobre compactos del teorema anterior si el punto no está sobre la curva (o sea, $r - r'$ no es una singularidad). Si r pertenece a $\bigcup_{n\in\mathbb{Z}} \{\Gamma_0 + nL\}$, recordamos que la singularidad que tiene el núcleo es logarítmica, o sea es débilmente singular. Por lo tanto, usando la absoluta continuidad de la integral podremos aislar la singularidad y esa porción de la integral será arbitrariamente chica. La parte restante se realiza usando la convergencia sobre compactos. □

3.3. Descomposición SVD

Tal como comentamos anteriormente, nuestra rutina numérica se reducirá a resolver un sistema lineal finito. Una herramienta que nos ha resultado de vital importancia para comprender ciertos problemas de no unicidad que surgen en la formulación integral de nuestro problema ha sido la descomposición SVD (*singular value decomposition*). Daremos a continuación una breve descripición de la misma y haremos un comentario sobre la información que se puede extraer de ella para entender la estructura algebraica de una matriz. Las pruebas las haremos en el caso que las matrices tengan coeficientes reales. El caso complejo se repite de igual manera cambiando la condición de ortogonalidad por la condición de que la matriz sea unitaria. Para una mayor amplitud de la brevísima descripción que daremos de la descomposición SVD recomendamos consultar [6]

En primer lugar notamos que, a partir del proceso de Gram-Schmidt, el siguiente resultado es inmediato

Teorema 11. *Sea $V_1 \in \mathbb{R}^{n\times r}$ cuyas columnas forman un conjunto ortonormal, entonces existe $V_2 \in \mathbb{R}^{n\times(n-r)}$ tal que*

$$V = [V_1 V_2]$$

es ortonormal.

Al ser la norma euclídea invariante por transformaciones ortogonales, dadas $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $Z \in \mathbb{R}^{n\times n}$ con Q, Z ortogonales es claro que

$$\|A\|_2 = \|QAZ\|_2$$

Usando estos resultados podemos pasar a demostrar el resultado fundamental de esta sección.

Teorema 12. *Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, entonces existen matrices ortogonales*

$$U = [u_1 \dots u_m] \in \mathbb{R}^{m\times m} \;\; y \; V = [v_1 \dots v_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

tales que

$$A = U\Sigma V^T$$

donde $\Sigma \in \mathbb{R}^{p\times p}, \Sigma = diag(\sigma_1 \dots \sigma_p)$, $p = min(n, m)$. Los valores σ_i son denominados valores singulares de la matriz, son no negativos y verifican $\sigma_{i+1} \geq \sigma_i$.

Demostración. Sean $x \in \mathbb{R}^n$ e $y \in \mathbb{R}^m$ vectores de norma euclídea unitaria tales que

$$Ax = \sigma y$$

con $\sigma = \|A\|_2$. A partir del teorema anterior existen $V_1 \in \mathbb{R}^{n\times(n-1)}$ y $U_1 \in \mathbb{R}^{m\times(m-1)}$ tales que $V = [x\, V_1]$, $U = [y\, U_1]$ son ortogonales. Se ve fácilmente que

$$U^T AV = \begin{bmatrix} \sigma & w^T \\ 0 & B \end{bmatrix} := A_1$$

Como

$$\left\| A_1 \begin{bmatrix} \sigma \\ w \end{bmatrix} \right\|_2^2 \geq \left(\sigma^2 + w^T w\right)^2$$

tenemos que $\left\|A_1^1\right\|_2 \geq (\sigma^2 + w^T w)$. Pero, por la observación anterior, $\sigma = \|A\|_2 = \|A_1\|_2$. Al ser el conjunto de matrices ortogonales un grupo bajo el producto, el resultado se sigue claramente haciendo inducción. □

Observación 11.

1. Escribiendo $AV = U\Sigma$ es inmediato que

$$Av_i = \sigma_i u_i$$

Esto tiene un claro significado geométrico: la función lineal canónica $T(x) = Ax$ transforma cada vector v_i en el vector u_i estirándolo una cantidad σ_i. Más aún, si A es una matriz inversible, la imagen de la bola unidad de $\mathbb{R}^n$ se transforma en el elipsoide de $\mathbb{R}^n$ con semiejes $\sigma_1 \dots \sigma_n$.

2. La descomposición SVD da una gran cantidad de información sobre la estructura algebraica de la matriz. Supongamos que para $r \in \mathbb{N}, \sigma_{r+1} \dots \sigma_p = 0$. Entonces

$$Rg(A) = r$$

$$Nu(A) = < v_{r+1} \dots v_n >$$

$$Im(A) = < u_1 \dots u_r >$$

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T$$

Existe una enorme cantidad de resultados del álgebra lineal que tienen como hipótesis ciertas propiedades sobre el rango de una matriz. Desde un punto de vista numérico, debido a errores de redondeo o datos introducidos con desviación, la tarea de establecer el rango de una matriz no es una tarea sencilla. Sin embargo, la descomposición SVD nos da gran información en este sentido. Cada valor singular σ_{k+1} nos informa cuál es la distancia, en norma 2, de la matriz al conjunto de matrices de rango k. En otras palabras

Teorema 13. *Sea $k < r = Rg(A)$ y sea $A_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$,*

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T$$

entonces

$$min\left\{\|A - B\|_2 : Rg(B) = k\right\} = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

Demostración. Es claro que

$$U^t A_k V = diag(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, 0, \ldots, 0)$$

y por lo tanto $Rg(A_k) = k$. Además, como

$$U^t(A - A_k)V = diag(0, \ldots, 0, \sigma_{k+1} \ldots \sigma_n)$$

y los valores singulares están ordenados en orden decreciente, $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$

Supongamos entonces que $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $Rg(B) = k$. Sea $x_1 \ldots x_{n-k}$ una base ortonormal del núcleo de B. Por un argumento de dimensión, es claro que la intersección de los subespacios $< v_1 \ldots v_{k+1} >$ y $< x_1 \ldots x_{n-k} >$ no puede ser trivial. Tomemos entonces $z \in \mathbb{R}^n$ un vector de norma 1 en dicha intersección. Como $Bz = 0$ y

$$Az = \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i (v_i^t z) u_i$$

obtenemos que

$$\|A - B\|_2^2 \geq \|(A - B)z\|_2^2 = \|Az\|_2^2 = \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 (v_i^t z)^2 \geq \sigma_{k+1}^2$$

□

Esto nos permite analizar de manera precisa si un sistema está mal condicionado y, al conocer la base que corresponde a la matriz V, podremos saber con exactitud de dónde proviene este mal condicionamiento.

Capítulo 4

Scattering en estructuras cristalinas

Para empezar, recordamos el problema que dejamos planteado en el primer capítulo. Consideremos un conjunto abierto y acotado $D_0 \subset \mathbb{R}^2$ con finitas componentes conexas que, sin pérdida de generalidad, suponemos que contiene al origen. Sean $L > 0$ el período del cristal y $\varepsilon > 0$ tal que

$$\overline{D_0 + L - \varepsilon} \cap \overline{D_0} = \overline{D_0 - L + \varepsilon} \cap \overline{D_0} = \emptyset$$

Introducimos $\varepsilon > 0$ para evitar que los obstáculos sean cercanos entre sí (en ese caso aparecen singularidades que deben ser tratadas apropiadamente). Queremos entender cómo interactua una onda incidente plana con conductores perfectos representados por el dominio

$$D = \bigcup_{n \in \mathbb{Z}} \{D_0 + nL\}$$

Para ello, debemos resolver la ecuación de Helmholtz con condiciones de borde de conductor perfecto en el exterior del conjunto D. Si suponemos que el campo total está formado por la onda incidente más la onda dispersada, o sea

$$u_d + u_{inc}$$

con $u_{inc}(x, y) = e^{ik\sin(\theta)x - \cos(\theta)y}$ los problemas de contorno que obtenemos son

$$(TE) \begin{cases} \Delta u_d + k^2 u_d = 0 \, , \, x \in \mathbb{R}^2 \setminus D \\ u_d = -u_{inc} \, , \, x \in \partial D \end{cases} \quad (TM) \begin{cases} \Delta u_d + k^2 u_d = 0 \, , \, x \in \mathbb{R}^2 \setminus D \\ \dfrac{\partial u_d}{\partial n} = -\dfrac{\partial u_{inc}}{\partial n} \, , \, x \in \partial D \end{cases} \tag{4.1}$$

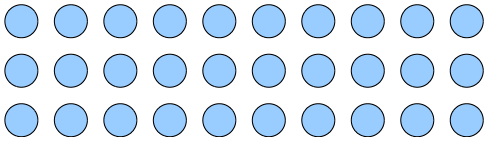

Figura 4.1: Ejemplo de una distribución periódica de tres discos de radio 1 separados con un período de $L = 3$

Figura 4.2: Ejemplo de una distribución periódica de un dominio cuyo borde se parametriza por la ecuación (4.23)

A continuación presentaremos tres propuestas para resolver (4.24), todas basadas en ecuaciones integrales. La primera hace uso de la función de Green cuasiperiódica clásica y, por lo tanto, será válida para frecuencias lejanas a las Wood anomalies. En vistas de incluir este caso, propondremos una segunda alternativa para poder hacer uso de la función de Green con polos. Veremos que al acercarnos a una Wood anomaly, esta idea no funciona. Finalmente presentaremos una propuesta que sirve para toda clase de frecuencias. El análisis numérico ha ido a la par del entendimiento de este problema, retroalimentandose el uno al otro durante el desarrollo de este trabajo. De esta manera, creemos conveniente presentar a lo largo de este capítulo los resultados que hemos obtenido en lugar de presentarlos en un capítulo adicional.

Observación 12. En vista de varios cálculos que haremos, llamaremos

$$M = \text{ínf}\,\{M > 0 : \bar{D} \subset \mathbb{R} \times [-M, M]\}$$

4.1. Criterio del balance de la energía

Como hemos señalado en el primer capítulo, uno de los abordajes que se ha usado en el área para evaluar la convergencia de distintos métodos ha sido el criterio del balance de la energía. Antes de comenzar, deberemos reescribir ligeramente el resultado que establecimos para la conservación de la energía. Es claro que, dado que el dominio que se repite periódicamente tiene finitas componentes conexas y exigimos que el período L produzca que las clausuras no se intersequen, existe una curva suave que separa a D_0 y sus copias inmediatas. En otras palabras, podemos incluir a D_0 en un dominio como el de la figura

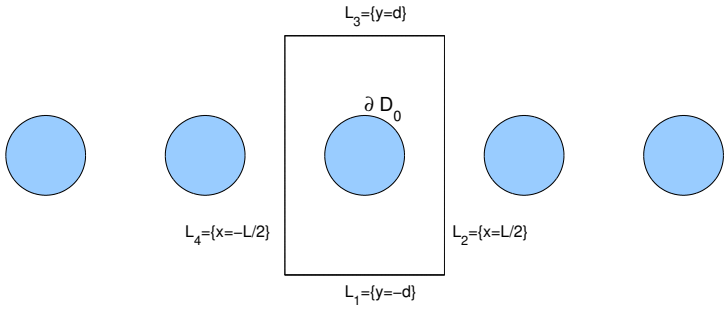

Figura 4.3: D_0 está contenido en el dominio C cuyo borde está formado por las curvas L_1, L_2, L_3, L_4y ∂D_0. Además, tomamos $d > M$

Aplicando las identidades de Green, dadas u y v soluciones de la ecuación de Helmholtz en el exterior

$$\int_{\partial C}\left(u\frac{\partial v}{\partial n}-v\frac{\partial u}{\partial n}\right)dS-\int_{\partial D_0}\left(u\frac{\partial v}{\partial n}-v\frac{\partial u}{\partial n}\right)dS=\int_{C\setminus D_0}(u\Delta v-v\Delta u)\,dV$$
$$=\int_{C\setminus D_0}\left(u(\Delta v+k^2v)-v(\Delta u+k^2u)\right)dV=0$$

Por lo tanto, si u es la solución de (4.24), claramente $\bar{u}$ también lo será. Concluimos entonces que

$$\int_{\partial C}\left(u\frac{\partial \bar{u}}{\partial n}-\bar{u}\frac{\partial u}{\partial n}\right)dS=0$$

Si suponemos que la solución es cuasiperiódica entonces las integrales a lo largo de las curvas que separan a los obstáculos se cancelan y obtenemos finalmente

$$Im\left(\int_{-L/2}^{L/2}\left(u(x,d)\frac{\partial \bar{u}}{\partial y}(x,d)\right)dS\right)=Im\left(\int_{-L/2}^{L/2}\left(u(x,-d)\frac{\partial \bar{u}}{\partial y}(x,-d)\right)dS\right)\tag{4.2}$$

Recordamos que el campo total se compone por la onda incidente y por la onda reflejada, por lo tanto, usando la cuasiperiodicidad, representamos u por una suma de Rayleigh, o sea

$$u(x,y)=e^{i\alpha x-i\beta y}+\sum_{n\in\mathbb{Z}}B_n^+e^{i\alpha_n x+i\beta_n y}\ ,y>M$$
$$u(x,y)=e^{i\alpha x-i\beta y}+\sum_{n\in\mathbb{Z}}B_n^-e^{i\alpha_n x-i\beta_n y}\ ,y<-M$$

Llamemos $U=\{n\in\mathbb{Z}:k^2\geq\alpha_n^2\}$. Los modos que corresponden a $n\notin U$ son modos evanescentes, por lo tanto decaen exponencialmente. Podemos tomar d suficientemente grande y despreciar estos términos. Físicamente esto significa que la energía que transportan estos modos es insignifcante frente a aquellos que corresponden a $n\in U$, los cuales son verdaderas ondas que transportan energía. De este modo, la serie se reemplaza por una suma finita y luego de un cálculo paciente y cuidadoso, obtenemos

$$\int_{-L/2}^{L/2}\left(u(x,d)\frac{\partial \bar{u}}{\partial y}(x,d)\right)dS=iL\left(\beta+2i\beta Im\left(B_0^+e^{2i\beta d}\right)-\sum_{n\in U}\beta_n\left|B_n^+\right|^2\right)$$
$$\int_{-L/2}^{L/2}\left(u(x,-d)\frac{\partial \bar{u}}{\partial y}(x,-d)\right)dS=iL\left(\beta+2\beta Re(B_0^-)+\sum_{n\in U}\beta_n\left|B_n^-\right|^2\right)$$

Finalmente, tomando parte imaginaria,

$$2Re(B_0^-)+\sum_{n\in U}e_n^++e_n^-=0$$

donde hemos definido la expresión $e_n^\pm=\frac{\beta_n}{\beta}\left|B_n^\pm\right|^2$, la cual recibe el nombre *eficiencia del modo n-ésimo* y corresponde a la fracción de energía que propaga la respectiva onda.

Cabe mencionar que este criterio constituye una condición necesaria mas no suficiente para la convergencia del método. Es aún un problema abierto establecer hipótesis para que esto último sea válido. Es, sin embargo, un buen indicador de la potencialidad de un método.

4.2. Solución con la función de Green clásica

Queremos proponer una solución cuasiperiódica que, al tomar límite cuando nos acercamos al borde del dominio, de lugar a una ecuación integral de segundo tipo. A partir de las relaciones de salto dadas en el segundo capítulo es fácil ver que si definimos

$$(TE) \quad u(r) = \int_{\partial D_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r') \tag{4.3}$$

$$(TM) \quad u(r) = \int_{\partial D_0} G_0^q(r-r')\mu(r')dS(r') \tag{4.4}$$

obtenemos las relaciones

$$(TE) \quad \frac{1}{2}\mu(r) + \int_{\partial D_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial n(r')}(r-r')\mu(r')dS(r') = -u_{inc}(r), \;\; r \in \partial D_0 \tag{4.5}$$

$$(TM) \quad -\frac{1}{2}\mu(r) + \int_{\partial D_0} \frac{\partial G_0^q}{\partial n(r)}(r-r')\mu(r')dS(r') = -\frac{\partial u_{inc}}{\partial n(r)}(r), \;\; r \in \partial D_0 \tag{4.6}$$

que escrito en lenguaje de operadores resulta

$$(TE) \quad \left(I + 2K'_{\partial D_0}\right)(\mu) = -2u_{inc} \tag{4.7}$$

$$(TM) \quad \left(I - 2K_{\partial D_0}\right)(\mu) = 2\frac{\partial u_{inc}}{\partial n(r)} \tag{4.8}$$

Ya hemos visto que los operadores $K'_{\partial D_0}, K_{\partial D_0} : C(\partial D_0) \to C(\partial D_0)$ son compactos. Si bien existen casos donde las ecuaciones anteriores tienen núcleo no trivial, éstos se producen debido a problemas de autofunciones del laplaciano para un dominio específico. Esta clase de dificultades no las tendremos en cuenta ya que no revisten un problema en sí mismo. Nosotros propusimos una determinada forma que debe tener la solución y las complicaciones surgen por eso y no por un problema intrínseco del problema de EDP. Este tipo de coyunturas se suele resolver cambiando el núcleo del operador integral y resolviendo otra ecuación integral. De esta manera, la existencia y unicidad de soluciones para estas ecuaciones integrales queda supeditada a determinar los casos en que el núcleo del operador sea trivial. Suponiendo que ese sea el caso, basta aplicar la alternativa de Fredholm para concluir que las ecuaciones integrales tienen solución única y como corolario, el problema de borde tiene una solución. Asegurar que la ecuación diferencial posea una única solución es un problema abierto del área. Existen ciertos estudios al respecto [1] pero aún no ha sido posible dar una prueba convincente y, menos aún, constructiva, que permita conocer, por ejemplo, qué frecuencias fallan en la unicidad de la ecuación.

Como se puede apreciar, las formulaciones para cada caso de polarización son muy similares. Bastará realizar nuestro análisis para el caso (TE). A partir de la representación espectral de la función de Green cuasiperiódica podemos calcular fácilmente los coeficientes de la expansión de Rayleigh y, en consecuencia, las eficiencias de cada modo. En efecto, para $y > M$

$$u(x,y) = \int\limits_{\partial D_0} \frac{\partial}{\partial n(r')} \left(\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\alpha_n(x-x')+i\beta_n(y-y')} \right) \mu(r') dS(r') \tag{4.9}$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \left(\frac{1}{2L\beta_n} \int\limits_{\partial D_0} < (\alpha_n,\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'} \mu(r') dS(r') \right) e^{i\alpha_n x + i\beta_n y} \tag{4.10}$$

y para $y < M$

$$u(x,y) = \int\limits_{\partial D_0} \frac{\partial}{\partial n(r')} \left(\sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\alpha_n(x-x')-i\beta_n(y-y')} \right) \mu(r') dS(r') \tag{4.11}$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \left(\frac{1}{2L\beta_n} \int\limits_{\partial D_0} < (\alpha_n,-\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'} \mu(r') dS(r') \right) e^{i\alpha_n x - i\beta_n y} \tag{4.12}$$

obteniendo entonces

$$B_n^+ = \frac{1}{2L\beta_n} \int\limits_{\partial D_0} < (\alpha_n,\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'} \mu(r') dS(r') \tag{4.13}$$

$$B_n^- = \frac{1}{2L\beta_n} \int\limits_{\partial D_0} < (\alpha_n,-\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'} \mu(r') dS(r') \tag{4.14}$$

Como ya hemos dicho, resolveremos las ecuaciones integrales numéricamente. Usaremos para ello las rutinas numéricas que introdujimos en el anterior capítulo. En primer lugar, emplearemos la partición de la unidad que describimos en la sección 3.2.1. De este modo, el operador integral $K'_{\partial D_0}$ lo aproximaremos por

$$K_A(\mu) = \int\limits_{\partial D_0} \sum_{n\in\mathbb{Z}} \left(P_1(x-x'+nL, cA, A) \frac{\partial}{\partial n(r')} \left(\frac{i}{4} H_0^1(k\sqrt{(x-x'+nL)^2+(y-y')^2}) \right) \right) \mu(r') dS(r') \tag{4.15}$$

Como estamos considerando únicamente a D_0 en la integración, la única singularidad en la suma aparece cuando $n = 0$. Los restantes términos son C^∞. De esta forma, el núcleo puede ser separado en una parte regular y otra singular y esta última puede ser reescrita para hacer explícita la singularidad logarítmica. En efecto,

$$\frac{\partial}{\partial n(r')} \left(\frac{i}{4} H_0^1(k\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2}) \right) = \frac{H(ku(x-x',y-y'))}{u^2(x-x',y-y')} < (x-x',y-y'); n(r') > \tag{4.16}$$

donde hemos escrito

$$H(s) = \frac{i}{4} s H_1^1(s)$$

$$u(x,y) = \sqrt{x^2+y^2}$$

La ecuación integral está evaluada sobre puntos de la curva y la integral se efectúa sobre ésta. De ahora en más, por simplicidad, suponemos que el obstáculo es un conjunto conexo. Esto es sólo para simplificar los cálculos y el programa. Como se puede apreciar, nada cambia (excepto estas dos situaciones que señalamos) si se supone que hay más de una componente conexa. Si usamos la parametrización $\partial D_0 = \{(C_x(t), C_y(t)) : t \in [0, 2\pi]\}$ la anterior expresión es igual a

$$K(t,\tau) = \frac{H(ku(C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau)))}{u^2(C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau))} \cdot \\ \cdot < (C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau)); \frac{(\dot{C}_y(\tau), -\dot{C}_x(\tau))}{\sqrt{\dot{C}_x(\tau)^2+\dot{C}_y(\tau)^2}} > \quad (4.17)$$

De la definición de la función de Bessel de segunda especia Y_1, se puede ver fácilmente que

$$H(s) = H_r(s) - \frac{1}{2\pi}\log\left(\frac{s^2}{4}\right) sJ_1(s)$$

donde H_r es una función analítica y $H_r(0) = \frac{1}{2\pi}$. Como $\frac{s^2}{4}$ y $\sin^2(\frac{s}{2})$ poseen el mismo comportamiento cuando $s \to 0$, con el objetivo de usar la cuadratura MK reescribimos (4.17) como

$$K(t,\tau) = \log\left(4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right) K_s(t,\tau) + K_r(t,\tau)$$

donde

$$K_s(t,\tau) = -\frac{k}{2\pi}\frac{J_1(ku(C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau)))}{u(C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau))} \cdot \\ \cdot < (C_x(t)-C_x(\tau), C_y(t)-C_y(\tau)); \frac{(\dot{C}_y(\tau), -\dot{C}_x(\tau))}{\sqrt{\dot{C}_x(\tau)^2+\dot{C}_y(\tau)^2}} > \quad (4.18)$$

$$K_r(t,\tau) = K(t,\tau) - \log\left(4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right) K_s(t,\tau) \quad (4.19)$$

Tanto K_s como K_r son núcleos analíticos fuera de la diagonal. La función de Bessel J_1 tiene un cero de órden 1 en el origen. Luego, la singularidad de K_s es evitable y podemos extenderlo de forma analítica sobre la diagonal (anulándose allí). Más aún,

$$\lim_{\tau\to t} \log\left(4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right) K_s(t,\tau) = 0$$

y por lo tanto, la singularidad de K_r es también evitable, valiendo sobre la diagonal

$$K_r(t,t) = \frac{1}{4\pi}\frac{\ddot{C}_x(t)\dot{C}_y(t) - \ddot{C}_y(t)\dot{C}_x(t)}{\left(\dot{C}_x^2+\dot{C}_y^2\right)^{3/2}}$$

De esta manera, K_s y K_r son analíticos como funciones de t y de τ y (4.15) puede ser expresado como

$$K_A(\mu)(C(t)) = \int_0^{2\pi} \left(\tilde{K_r}(t,\tau) + \log\left(4\sin^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)\right)\tilde{K_s}(t,\tau)\right)\mu(\tau)d\tau \tag{4.20}$$

donde $\tilde{K_r}$ y $\tilde{K_s}$ surgen a partir de la descompisición que hicimos anteriormente, de la suma de los términos no singulares en la función de Green cuasiperiódica y de multiplicar por la partición de la unidad. Por lo tanto, los núcleos resultantes son infinitamente derivables y periódicos como función de t y de τ. De esta forma, al aplicar las reglas de cuadatura introducidas en el capítulo anterior, obtendremos los respectivos órdenes de convergencia que allí comentamos. Si tomamos la partición uniforme de $[0, 2\pi]$

$$t_j = \frac{2\pi}{N_i} j, \;\; j = 0 \ldots 2\pi$$

donde N_i es un número par, construimos el vector $b \in \mathbb{C}^{Ni\times 1}$

$$b_j = -2u_{inc}(C_x(t_j), C_y(t_j))$$

y, finalmente, consideramos las matrices $M_r \in \mathbb{C}^{Ni\times Ni}$, $M_s \in \mathbb{C}^{Ni\times Ni}$, $W \in \mathbb{C}^{Ni\times Ni}$

$$(M_r)_{i,j} = \frac{2\pi}{N_i}\tilde{Kr}(t_i, t_j)$$

$$(M_s)_{i,j} = \tilde{Ks}(t_i, t_j)$$

$$W_{i,j} = -\frac{2}{N_i}\left\{ \sum_{m=1}^{Ni/2-1} \frac{1}{m}\cos\left(m(t_i - t_j)\right) + \frac{1}{N_i}\cos\left(N_i(t_i - t_j)\right)\right\}$$

el sistema lineal que debemos resolver entonces es

$$\left(\mathbb{I}_{N_i} + 2(M_r + WM_s)\right)\tilde{\mu_{N_i}} = b \tag{4.21}$$

4.2.1. Resultados numéricos

Daremos a continuación una selección de resultados numéricos de esta propuesta para mostrar la convergencia del método. Además, presentaremos para estos casos la solución de la ecuación diferencial que se obtiene aplicando esta metodología.

Para ver la convergencia analizaremos el caso en que el obstáculo es un círculo de radio a determinar. Variaremos el espaciado entre éstos, el número de onda y el ángulo de incidencia. Comenzamos tomando los siguientes valores de los parámetros

$$k = 3, L = 3, \theta = \frac{\pi}{6}, R = 1$$

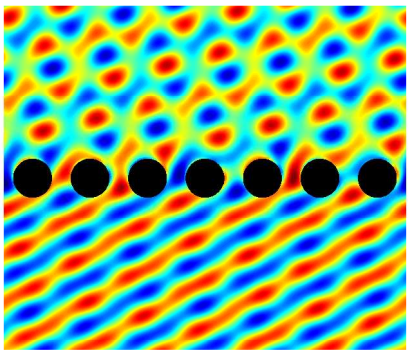
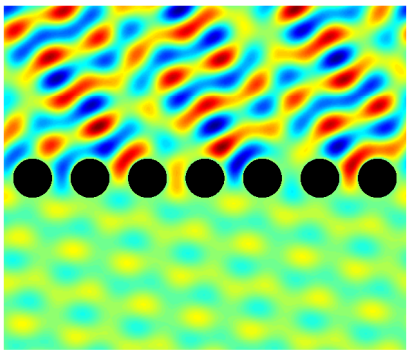

Figura 4.4: La figura de la izquierda muestra el campo dispersado, o sea, la solución que nosotros calculamos mientras que la figura de la derecha muestra el campo total, o sea, la onda incidente más la onda dispersada para los parámetros $k = 3$, $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$

N_i \ A	100	200	400	800	1600
32	$5{,}02 \times 10^{-4}$	$1{,}34 \times 10^{-4}$	$4{,}39 \times 10^{-7}$	$4{,}05 \times 10^{-9}$	$4{,}31 \times 10^{-11}$
64	$4{,}91 \times 10^{-4}$	$1{,}36 \times 10^{-4}$	$4{,}29 \times 10^{-7}$	$4{,}06 \times 10^{-9}$	$3{,}34 \times 10^{-12}$
128	$4{,}9 \times 10^{-4}$	$1{,}36 \times 10^{-4}$	$4{,}28 \times 10^{-7}$	$4{,}05 \times 10^{-9}$	$3{,}35 \times 10^{-12}$

Cuadro 4.1: Error en el criterio del balance de la energía. $k = 3$, $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$

Como se puede apreciar en este cuadro, para números de onda chicos, aumentar el número de nodos no aumenta en gran medida la precisión del método. Esto se entiende a partir del órden alto de las reglas de cuadratura que empleamos. Sin embargo, en el siguiente ejemplo, en dónde aumentamos el número de onda, se hace relevante la necesidad de aumentar el número de nodos, como se puede apreciar en la siguiente tabla.

N_i \ A	100	200	400	800	1600
32	$3{,}78 \times 10^{-4}$	$1{,}39 \times 10^{-5}$	$2{,}75 \times 10^{-6}$	$2{,}92 \times 10^{-6}$	$2{,}92 \times 10^{-6}$
64	$2{,}76 \times 10^{-4}$	$1{,}2 \times 10^{-5}$	$1{,}27 \times 10^{-7}$	$6{,}93 \times 10^{-9}$	$1{,}98 \times 10^{-11}$
128	$2{,}69 \times 10^{-4}$	$1{,}25 \times 10^{-5}$	$1{,}15 \times 10^{-7}$	$7{,}17 \times 10^{-9}$	$1{,}88 \times 10^{-11}$

Cuadro 4.2: Error en el criterio del balance de la energía. $k = 10$, $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{3}$

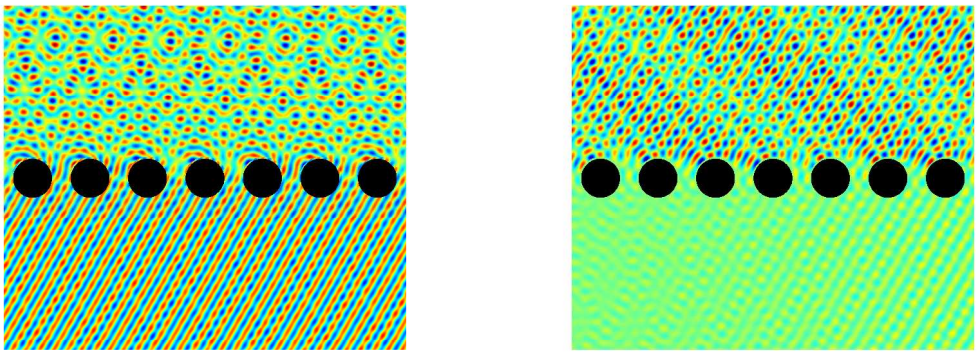

Figura 4.5: La figura de la izquierda muestra el campo dispersado, o sea, la solución que nosotros calculamos mientras que la figura de la derecha muestra el campo total, o sea, la onda incidente más la onda dispersada para los parámetros $k = 10$, $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{3}$

A su vez, al aumentar el espaciado entre los obstáculos, es necesario aumentar el tamaño de la ventana. Esto es claro a partir de que para un tamaño fijo de la ventana, si aumentamos L, la cantidad de términos que sumamos para el truncamiento suave de la función de Green cuasiperiódica disminuye.

N_i \ A	100	200	400	800	1600	3200
32	$5{,}2 \times 10^{-3}$	$9{,}15 \times 10^{-3}$	$5{,}76 \times 10^{-5}$	$1{,}54 \times 10^{-5}$	$4{,}91 \times 10^{-7}$	$8{,}2 \times 10^{-11}$
64	$5{,}3 \times 10^{-3}$	$9{,}02 \times 10^{-4}$	$5{,}78 \times 10^{-5}$	$1{,}59 \times 10^{-5}$	$5{,}01 \times 10^{-7}$	$4{,}7 \times 10^{-12}$
128	$5{,}3 \times 10^{-3}$	$9{,}00 \times 10^{-4}$	$5{,}78 \times 10^{-5}$	$1{,}6 \times 10^{-5}$	$5{,}02 \times 10^{-7}$	$4{,}82 \times 10^{-12}$

Cuadro 4.3: Error en el criterio del balance de la energía.$k = 3$, $L = 10$, $\theta = \frac{\pi}{3}$

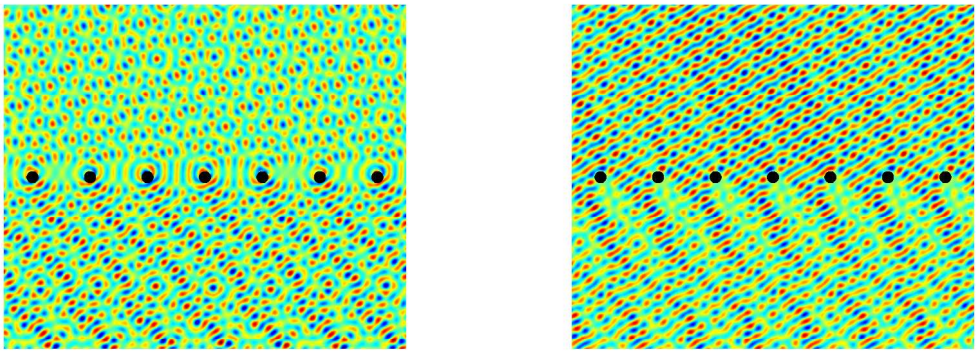

Figura 4.6: La figura de la izquierda muestra el campo dispersado, o sea, la solución que nosotros calculamos mientras que la figura de la derecha muestra el campo total, o sea, la onda incidente más la onda dispersada para los parámetros $k = 3$, $L = 10$, $\theta = \frac{\pi}{6}$

Finalmente, mostramos la solución para dominios no triviales. La primer figura corresponde a la curva parametrizada por

$$C(t) = (1 + 0{,}1\cos(5t) + 0{,}01\cos(10t))(\cos(t), \sin(t)),\ t \in [0, 2\pi] \tag{4.22}$$

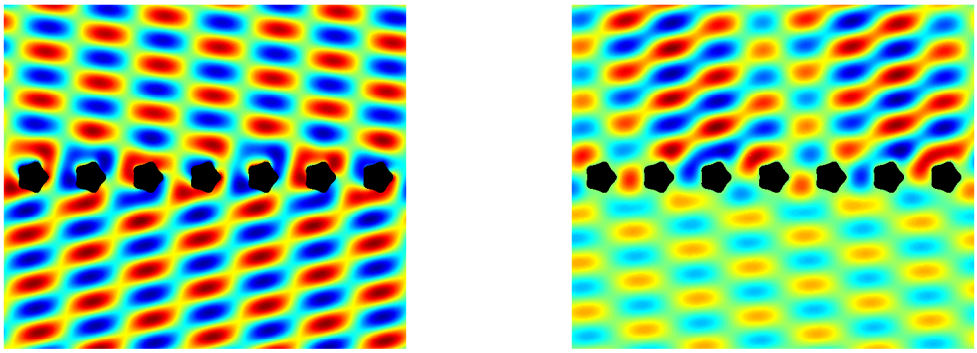

Figura 4.7: La figura de la izquierda muestra el campo dispersado, o sea, la solución que nosotros calculamos mientras que la figura de la derecha muestra el campo total, o sea, la onda incidente más la onda dispersada para los parámetros $k = 2$, $L = 4$, $\theta = \frac{\pi}{6}$. Para los valores $A = 800$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ hemos obtenido un error de $2{,}61 \times 10^{-5}$

La segunda geometría que consideraremos corresponde a la parametrización

$$C(t) = (1{,}5\sin(t), -\cos(t) - 0{,}65\cos(2t) + 0{,}65),\ t \in [0, 2\pi] \tag{4.23}$$

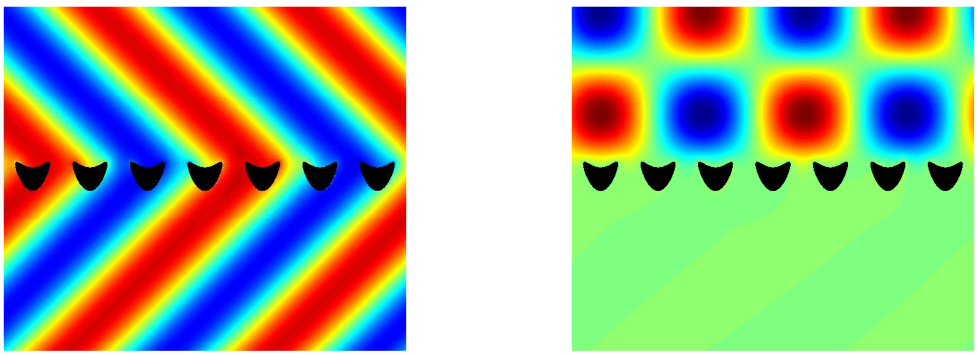

Figura 4.8: La figura de la izquierda muestra el campo dispersado, o sea, la solución que nosotros calculamos mientras que la figura de la derecha muestra el campo total, o sea, la onda incidente más la onda dispersada para los parámetros $k = 0{,}5$, $L = 5$, $\theta = \frac{\pi}{4}$. Para los valores $A = 800$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ hemos obtenido un error de $2{,}61 \times 10^{-5}$

4.3. Solución usando la función de Green con polos

En vista de contar con métodos que soporten todo tipo de frecuencias, presentaremos a continuación un esquema basado en la función de Green cuasiperiódica con j polos.

Está función está bien adaptada para obtener soluciones en la mitad de un semiespacio del plano, por ejemplo, en una de las regiones delimitadas por una superficie periódica: basta introducir los polos en el semiespacio donde no nos interesa evaluar la solución de la ecuación diferencial.

Nuestro problema es en todo el plano: el dominio que se repite periódicamente, si bien constituye un obstáculo, debido a la separación que existe entre cada componente, no logra separar al plano en dos. Si pusiéramos los polos debajo de cada dominio no podremos evaluar la solución en puntos debajo de los obstáculos.

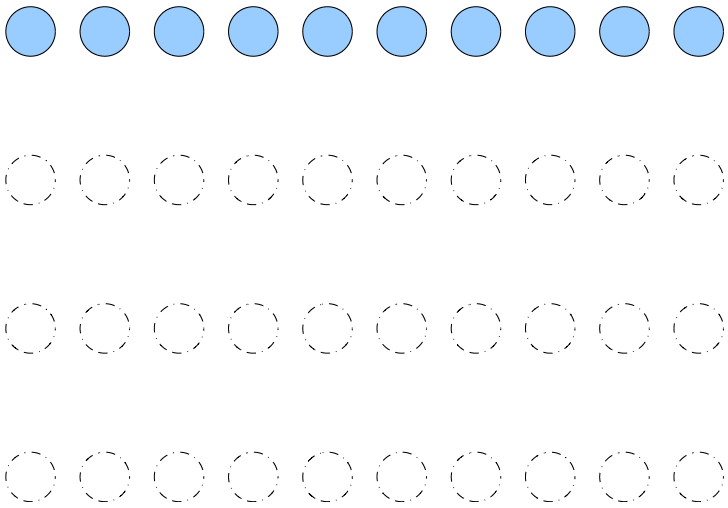

Figura 4.9: En este ejemplo, tomando $j = 3$, $h > 0$ si usamos la nueva función de Green, al introducir los polos, no podremos evaluar la solución en los puntos que se encuentran en las línea punteadas.

Nuestra propuesta consiste en colocar, artificialmente, una superficie periódica debajo de los obstáculos. Así, deberemos resolver dos problemas: la reflexión de la onda producto del dominio y la transmisión de la onda a través de la superficie periódica. Esto es, en realidad, análogo a resolver el problema de obstáculos periódicos que poseen debajo un grating dieléctrico con la única particularidad que las constantes dieléctricas coinciden.

Sea $\Gamma_0 = \{(x, f(x)) : x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]\}$, $\Gamma = \{(x, f(x)) : x \in \mathbb{R}\}$ donde f es una función L-periódica y $f \in C^r, r \geq 2$. Supondremos que

$$max\{f(x) : x \in \mathbb{R}\} < -M$$

o sea, la superficie se encuentra por debajo de los obstáculos y no se intersecan. Como podemos elegir la posición de esta curva arbitrariamente, para evitar trabajo extra en el tratamiento numérico de la singularidad de los operadores, supondremos que los puntos de mayor acercamiento entre las curvas son mayores que varias longitudes de onda. Llamemos

$$R^+ = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \setminus D : y > f(x)\}$$

$$R^- = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : y < f(x)\}$$

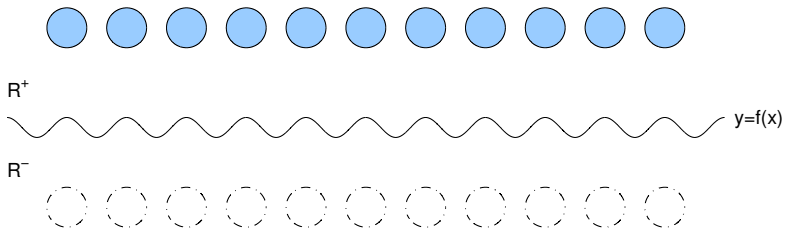

Figura 4.10: El espaciado en la nueva función de Green debe elegirse de manera que la primer copia del obstáculo se encuentre por debajo de la curva que agregamos.

Las ondas al pasar de la región R^+ a la región R^- no deben sufrir ningún cambio: la separación es completamente artificial. Por lo tanto, nada en particular debe ocurrir allí. Esta condición se satisface si el campo y su derivada normal son continuos a lo largo de esta curva. De este modo, deberemos resolver los siguientes problemas

$$(TE)\ \begin{cases} \Delta u_+ + k^2 u_+ = 0 \text{ en } R^+ \\ \Delta u_- + k^2 u_- = 0 \text{ en } R^- \\ u_+ = -u_{inc} \text{ en } \partial D \\ u_+ - u_- = 0 \text{ en } \Gamma \\ \dfrac{\partial u_+}{\partial n} - \dfrac{\partial u_-}{\partial n} = 0 \text{ en } \Gamma \end{cases} \quad (TM)\ \begin{cases} \Delta u_+ + k^2 u_+ = 0 \text{ en } R^+ \\ \Delta u_- + k^2 u_- = 0 \text{ en } R^- \\ \dfrac{\partial u_+}{\partial n} = -\dfrac{\partial u_{inc}}{\partial n} \text{ en } \partial D \\ u_+ - u_- = 0 \text{ en } \Gamma \\ \dfrac{\partial u_+}{\partial n} - \dfrac{\partial u_-}{\partial n} = 0 \text{ en } \Gamma \end{cases} \tag{4.24}$$

Observamos que en este problema aparecen dos nuevas condiciones de borde sobre Γ. Esto nos da la pauta de agregar, en nuestra propuesta de ecuaciones integrales, dos nuevos términos que corresponden a la contribución de la curva periódica al campo. Proponemos para la polarización (TE)

$$u_+(r) = \int_{\Gamma_0} G^q_{j,1}(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r')}(r-r')\nu(r')dS(r') + \int_{\partial D} \frac{\partial G^q_{j,3}}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') \tag{4.25}$$

$$u_-(r) = \int_{\Gamma_0} G^q_{j,2}(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^q_{j,2}}{\partial n(r')}(r-r')\nu(r')dS(r') \tag{4.26}$$

y para la polarización (TM)

$$u_+(r) = \int_{\Gamma_0} G^q_{j,1}(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r')}(r-r')\nu(r')dS(r') + \int_{\partial D} G^q_{j,3}(r-r')\psi(r')dS(r') \tag{4.27}$$

$$u_-(r) = \int_{\Gamma_0} G^q_{j,2}(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^q_{j,2}}{\partial n(r')}(r-r')\nu(r')dS(r') \tag{4.28}$$

Aquí las funciones $G^q_{j,1}$ y $G^q_{j,3}$ toman los polos debajo de la curva, o sea $h_1 > 0, h_3 > \rho$ (donde ρ es mayor a la máxima distancia entre dos puntos cualesquiera del obstáculo y de la curva) y $G^q_{j,2}$ toma los polos arriba de la curva, o sea $h_2 < 0$.

Como antes, nos concentraremos en analizar el caso (TE). El caso (TM) se analiza de la misma manera. Al igual que antes usamos las relaciones de salto y obtenemos

$$\begin{aligned}\mu - \int_{\Gamma_0} \left(\frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r)} - \frac{\partial G^q_{j,2}}{\partial n(r)} \right)(r-r')\mu(r')dS(r') - \\ - \frac{\partial}{\partial n(r)} \left(\int_{\Gamma_0} \left(\frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r')} - \frac{\partial G^q_{j,2}}{\partial n(r')} \right)(r-r')\nu(r')dS(r') \right) - \\ - \frac{\partial}{\partial n(r)} \left(\int_{\partial D_0} \frac{\partial G^q_{j,3}}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') \right) = 0,\ r \in \Gamma_0\end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}\nu + \int_{\Gamma_0} \left(G^q_{j,1} - G^q_{j,2} \right)(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \left(\frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r')} - \frac{\partial G^q_{j,2}}{\partial n(r')} \right)(r-r')\nu(r')dS(r') + \\ + \int_{\partial D_0} \frac{\partial G^q_{j,3}}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') = 0,\ r \in \Gamma_0\end{aligned} \tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}\psi + 2\int_{\Gamma_0} G^q_{j,1}(r-r')\mu(r')dS(r') + \int_{\Gamma_0} \frac{\partial G^q_{j,1}}{\partial n(r')}(r-r')\nu(r')dS(r') + \\ + 2\int_{\partial D_0} \frac{\partial G^q_{j,3}}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') = -2u_{inc}(r),\ r \in \partial D_0\end{aligned} \tag{4.31}$$

Reescrito en forma de operadores resulta

$$\left(Id + \begin{bmatrix} -\left(K^1_{\Gamma_0} - K^2_{\Gamma_0}\right) & -\left(T^1_{\Gamma_0} - T^2_{\Gamma_0}\right) & -T^3_{\partial D_0} \\ \left(S^1_{\Gamma_0} - S^2_{\Gamma_0}\right) & \left(K'^{,1}_{\Gamma_0} - K'^{,2}_{\Gamma_0}\right) & K'^{,3}_{\partial D_0} \\ 2S^1_{\Gamma_0} & 2K'^{,1}_{\Gamma_0} & 2K'^{,3}_{\partial D_0} \end{bmatrix} \right) \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2u_{inc} \end{pmatrix} \tag{4.32}$$

El espacio vectorial $C(\Gamma_0) \times C(\Gamma_0) \times C(\partial D_0)$ junto a la norma

$$\left\| \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \\ \psi \end{pmatrix} \right\| = max\{\|\mu\|, \|\nu\|, \|\psi\|\} \tag{4.33}$$

es un espacio de Banach. El operador

$$B : C(\Gamma_0) \times C(\Gamma_0) \times C(\partial D_0) \to C(\Gamma_0) \times C(\Gamma_0) \times C(\partial D_0)$$

dado por la matriz de operadores anterior es compacto pues cada uno de los operadores que lo componen es compacto [20]. De esta forma, para determinar la existencia y unicidad de soluciones de este sistema de ecuaciones basta analizar el núcleo de $Id + B$. Supondremos, como antes, que este es trivial y por lo tanto existe una única solución al sistema de ecuaciones integrales.

El planteo numérico se hace sin mayores dificultades pues los operadores

$$\begin{matrix} K^1_{\Gamma_0} - K^2_{\Gamma_0} & S^1_{\Gamma_0} - S^2_{\Gamma_0} \\ T^1_{\Gamma_0} - T^2_{\Gamma_0} & K'^{,1}_{\Gamma_0} - K'^{,2}_{\Gamma_0} \end{matrix}$$

tienen núcleos suaves a lo largo de la curva ya que, al poseer la misma frecuencia k, el término singular en cada una se cancela. Los operadores correspondientes a

$$B_{1,3}, B_{2,3}, B_{3,1}, B_{3,2}$$

poseen núcleos suaves pues los puntos de evaluación y de integración pertenecen a diferentes curvas y los polos adicionales no caen sobre ninguna de ellas (recordar que tomamos el espaciado en la función de Green que usamos en ∂D suficientemente grande)

Por lo tanto, para usar la metodología de Nyström bastará, en estos casos, usar la regla de trapecios. Para el último de los operadores aplicamos la misma idea que describimos anteriormente. La única singularidad proviene del polo que tiene la función de Green original. Los polos adicionales, al tomar el espaciado suficientemente grande, no constituyen singularidades adicionales al momento de calcular el respectivo operador integral.

Los coeficientes de la expansión de Rayleigh se obtienen de igual manera que antes, o sea, expresando la función de Green cuasiperiódica por su respectiva representación espectral. Obtenemos

$$\begin{aligned} B_n^+ = \frac{i}{2L}\frac{(1-e^{i\beta_n|h_1|})^j}{\beta_n} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n f(x')} \mu(x') \sqrt{1+(f'(x'))^2}\, dx' + \\ + \frac{1}{2L}\frac{(1-e^{i\beta_n|h_1|})^j}{\beta_n} \int_{-L/2}^{L/2} \left(\beta_n - \alpha_n f'(x')\right) e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n f(x')} \nu(x')\, dx' + \\ + \frac{1}{2L}\frac{(1-e^{i\beta_n|h_3|})^j}{\beta_n} \int_{0}^{2\pi} \left(\alpha_n \dot{C}_y(\tau) - \beta_n \dot{C}_x(\tau)\right) e^{-i\alpha_n C_x(\tau) - i\beta_n C_y(\tau)} \psi(\tau)\, d\tau \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} B_n^- = \frac{i}{2L}\frac{(1-e^{i\beta_n|h_2|})^j}{\beta_n} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n f(x')} \mu(x') \sqrt{1+(f'(x'))^2}\, dx' - \\ - \frac{1}{2L}\frac{(1-e^{i\beta_n|h_2|})^j}{\beta_n} \int_{-L/2}^{L/2} \left(\beta_n + \alpha_n f'(x')\right) e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n f(x')} \nu(x')\, dx' \end{aligned} \quad (4.35)$$

Utilizando esta metodología, para los casos que estudiamos anteriormente obtenemos los siguientes resultados en el error del balance de la energía.

Caso	Error
$k = 3, L = 3, \theta = \frac{\pi}{6}, R = 1$	$1{,}2953 \times 10^{-8}$
$k = 10, L = 3, \theta = \frac{\pi}{3}, R = 1$	$5{,}1767 \times 10^{-6}$
$k = 3, L = 10, \theta = \frac{\pi}{3}, R = 1$	$1{,}1174 \times 10^{-8}$

Cuadro 4.4: Error del criterio del balance de la energía. Los parámetros del algoritmo que hemos tomado son $A = 1000$,$N_i = 64$, $j = 3$, $h_1 = -h_2 = 2$ y $h_3 = 10$ siendo estos últimos parámetros el espaciado entre los polos adicionales para las respectivas funciones de Green.

Observación 13. Se puede apreciar con claridad en el cálculo de los coeficientes de la expansión de Rayleigh la dificultad que mencionábamos en el final del segundo capítulo. En efecto, consideremos el caso en que $\exists\, n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$\beta_{n_0} |h_2| \equiv 0\,(2\pi) \tag{4.36}$$

De esa manera

$$B_n^- = 0$$

y esto nos dice que la solución debajo de los obstáculos no tendrá este modo en su expansión de Rayleigh: el campo final pierde completamente la información sobre esa onda. De igual manera podemos perder los modos en la región superior realizando malas elecciones de los parámetros h_1, h_3. Esta dificultad resulta grave en nuestro planteo pues el problema subyacente es que el operador integral

$$I + B$$

no puede ser invertido. En efecto supongamos que elegimos h_2 como en (4.36) y que podemos invertir las ecuaciones. Luego, para cualquier condición de borde cuasiperiódica encontraremos soluciones μ, ν, ψ. Podemos tomar como condición de borde

$$u(x, y) = e^{i\alpha_{n_0} x - i\beta_{n_0} y}, (x, y) \in \partial D$$

La exponencial compleja

$$e^{i\alpha_{n_0} x - i\beta_{n_0} y}$$

es trivialmente una solución de la ecuación diferencial en todo el espacio y de la condición de borde. Por lo tanto, suponiendo que haya unicidad del problema de borde, la solución calculada a partir de las densidades μ, ν, ψ debe ser igual a esta exponencial. Esto es absurdo pues, por lo comentado respecto a la expansión de Rayleigh, la solución no posee ese modo.

De igual forma se presenta la misma dificultad cuando nos acercamos a una Wood anomaly. El término

$$\frac{(1 - e^{i\beta_n h})^j}{\beta_n} = \mathcal{O}(\beta_n^{j-1})$$

y tiende a cero para $j \geq 2$. Por lo tanto, el respectivo modo desaparecerá y la solución no podrá dar cuenta de éste.

Por lo tanto, en vista de la alternativa de Fredholm, esto genera que el núcleo del operador $I + B$ sea no trivial. Trasladado a nuestra rutina numérica, al acercarnos a una de estas situaciones, el sistema será cada vez más cercano a una matriz singular dando lugar a problemas en el condicionamiento y, claramente, en el empobrecimiento de la precisión de nuestro método.

Los siguientes ejemplos numéricos ponen de manifiesto estas dificultades. En primer lugar, examinamos el mal condicionamiento producido por las Wood anomalies. Consideramos nuevamente cilindros de radio $R = 1$, espaciado $L = 3$ y ángulo incidente $\theta = \frac{\pi}{6}$. Una forma sencilla de obtener frecuencias que son Wood anomalies es tomar

$$k = n\frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))},\ n \in \mathbb{N}$$

Para $n = 1$, $k = 1{,}3963$. A su vez, usaremos la notación σ para denotar al mínimo de todos los valores singulares del sistema lineal que obtenemos.

j	Error	σ
2	0,0030	$2{,}321 \times 10^{-5}$
3	0,0002	$1{,}828 \times 10^{-5}$
4	0,0055	$1{,}909 \times 10^{-6}$
5	0,0053	$5{,}29 \times 10^{-7}$
6	0,0089	$1{,}0883 \times 10^{-7}$
7	0,0101	$2{,}054 \times 10^{-8}$
8	0,0163	$5{,}472 \times 10^{-9}$
9	0,0182	$1{,}84 \times 10^{-9}$

Cuadro 4.5: Comportamiento singular del sistema para distintas cantidades de polos adicionales. Tomamos como parámetros del algoritmo $A = 1000$,$c = 0{,}5$, $N_i = 32$, $h_1 = -h_2 = 2$ y $h_3 = 10$. Recordamos que estos dos últimos parámetros son los espaciados que tomamos para cada función de Green.

Podemos variar los parámetros del problema para observar el mismo comportamiento singular, por ejemplo, $R = 0{,}5$, $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $k = 3{,}6806$

j	Error	σ
2	0,0050	$2{,}034 \times 10^{-4}$
3	0,0013	$6{,}8627 \times 10^{-5}$
4	0,0087	$1{,}237 \times 10^{-5}$
5	0,0146	$4{,}92 \times 10^{-6}$
6	0,0055	$2{,}274 \times 10^{-6}$
7	0,0114	$6{,}2305 \times 10^{-7}$
8	0,0196	$1{,}792 \times 10^{-7}$
9	0,0607	$4{,}573 \times 10^{-8}$

Cuadro 4.6: Comportamiento singular del sistema para distintas cantidades de polos adicionales. Tomamos los mismos parámetros del algoritmo que antes.

También veremos el comportamiento singular del sistema cuando tomamos una mala elección del espaciado de los polos. Consideramos un caso lejos de una Wood anomaly,

por ejemplo, $k = 3$, $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{3}$ y $R = 1$ y tomemos $h_2 = -2{,}4702$. Para este caso tenemos 3 modos propagantes siendo

$$\beta_{-2} = 2{,}5435,\ \beta_{-1} = 2{,}9574,\ \beta_0 = 1{,}5$$

Por lo tanto

$$\frac{\beta_{-2}\,|h_2|}{2\pi} = 0{,}99981$$

estando entonces cerca de la singularidad que mencionamos antes. La siguiente tabla muestra numéricamente este comportamiento.

j	Error	σ
2	$2{,}4803 \times 10^{-4}$	$4{,}1925 \times 10^{-9}$
3	0,1563	$6{,}3367 \times 10^{-13}$
4	11,82	$3{,}0512 \times 10^{-14}$
5	1,304	$8{,}7257 \times 10^{-14}$
6	0,6508	$1{,}5335 \times 10^{-13}$
7	0,4204	$2{,}9411 \times 10^{-13}$

Cuadro 4.7: Comportamiento singular del sistema para distintas cantidades de polos adicionales. Tomamos los mismos parámetros del algoritmo que antes.

Seguiremos el enfoque presentado en [2] para resolver la singularidad presentada por el parámetro h. No hemos tenido éxito en aplicar el mismo enfoque para el caso de una Wood anomaly en nuestro problema (si bien en el artículo mencionado la misma idea da buenos resultados).

Como hemos visto, las dificultades surgen a partir de que la función de Green con polos pierde un conjunto finito de modos. La idea entonces será, sencillamente, sumar aquello que se perdió. En otros términos, dado $\varepsilon > 0$ consideramos el conjunto

$$U^i_{res} = \left\{ n \in \mathbb{Z} : (1 - e^{i\beta_n h_i})^j < \varepsilon \right\}$$

y definamos las funciones

$$G^i_{res}(X, Y) = \sum_{n \in U^i_{res}} e^{i\alpha_n X + i\beta_n Y}, \quad i = 1, 3$$

$$G^i_{res}(X, Y) = \sum_{n \in U^i_{res}} e^{i\alpha_n X - i\beta_n Y}, \quad i = 2$$

Las nuevas funciones de Green serán

$$G^i_j(X, Y) + G^i_{res}(X, Y)$$

y con ellas se reescriben las ecuaciones integrales. El desarrollo de los coeficientes de la expansión de Rayleigh sufren pequeñas modificaciones.

$$B_n^+ = \left(\frac{i}{2L} \frac{(1-e^{i\beta_n|h_1|})^j}{\beta_n} + \delta_{U_{res}^1}(n) \right) \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n f(x')} \mu(x') \sqrt{1+(f'(x'))^2} dx' +$$
$$+ \left(\frac{1}{2L} \frac{(1-e^{i\beta_n|h_1|})^j}{\beta_n} - i\delta_{U_{res}^1}(n) \right) \int_{-L/2}^{L/2} \left(\beta_n - \alpha_n f'(x')\right) e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n f(x')} \nu(x') dx' +$$
$$+ \left(\frac{1}{2L} \frac{(1-e^{i\beta_n|h_3|})^j}{\beta_n} - i\delta_{U_{res}^3}(n) \right) \int_0^{2\pi} \left(\alpha_n \dot{C}_y(\tau) - \beta_n \dot{C}_x(\tau)\right) e^{-i\alpha_n C_x(\tau) - i\beta_n C_y(\tau)} \psi(\tau) d\tau \tag{4.37}$$

$$B_n^- = \left(\frac{i}{2L} \frac{(1-e^{i\beta_n|h_2|})^j}{\beta_n} + \delta_{U_{res}^2}(n) \right) \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n f(x')} \mu(x') \sqrt{1+(f'(x'))^2} dx' -$$
$$- \left(\frac{1}{2L} \frac{(1-e^{i\beta_n|h_2|})^j}{\beta_n} + i\delta_{U_{res}^2}(n) \right) \int_{-L/2}^{L/2} \left(\beta_n + \alpha_n f'(x')\right) e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n f(x')} \nu(x') dx' \tag{4.38}$$

donde $\delta_{U_{res}^i}(n)$ representa a la función indicadora del conjunto U_{res}^i.

Para finalizar esta sección, mostramos los resultados que obtuvimos con la corrección para el caso analizado en la tabla (13).

j	Error	σ
2	$3{,}4709 \times 10^{-8}$	0,0244
3	$1{,}289 \times 10^{-8}$	0,0233
4	$2{,}4771 \times 10^{-8}$	0,0203
5	$1{,}6394 \times 10^{-7}$	0,0149
6	$4{,}0875 \times 10^{-7}$	0,0094
7	$4{,}0513 \times 10^{-7}$	0,0055

Cuadro 4.8: Corrección a la singularidad producida por una mala elección del parámetro h_2.

4.4. Alternativa simple para toda frecuencia

La representación integral que dimos en (4.25), (4.26) y (4.27), (4.28) para la solución oculta, en cierta medida, la física del problema: introducimos dos densidades pues habíamos agregado dos condiciones de borde adicionales. En este sentido, pareciera que el rol que cumplen es enteramente matemática: preservar la continuidad del campo y de su derivada normal. Veremos que tienen una interpretación física específica y ello nos conducirá naturalmente a nuestra propuesta.

A partir de ahora supondremos que la curva dónde imponemos la condición de transmisión es una recta infinta paralela al eje x y, al menos por el momento, que estamos lejos

de una Wood anomaly. Veamos, en primer lugar, cómo es el campo que genera ∂D_0 a partir de la función de Green con polos en la región debajo de los obstáculos pero arriba de la recta. Debido a como elegimos el espaciado, esto corresponde a evaluar la función de Green $G_j^q(X,Y)$ con $-h < Y < 0$. Luego, usando la representación espectral, obtenemos

$$G_j^q(X,Y) = \sum_{l=0}^{j}(-1)^l \binom{j}{l} \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\alpha_n X} e^{i\beta_n |Y+lh|} \tag{4.39}$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\alpha_n X} \left[e^{-i\beta_n Y} + \left(\left(1 - e^{i\beta_n h}\right)^j - 1 \right) e^{i\beta_n Y} \right] \tag{4.40}$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} e^{i\alpha_n X - i\beta_n Y} + \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{i}{2L\beta_n} \left(\left(1 - e^{i\beta_n h}\right)^j - 1 \right) e^{i\alpha_n X + i\beta_n Y} \tag{4.41}$$

Vemos aquí que, en esta zona, $G_j(X,Y)$ da lugar a ondas que se desplazan hacia abajo y ondas que se desplazan hacia arriba. Estas últimas no deberían extrañarnos: son el producto de haber introducido los polos adicionales. Estos, al ser integrados sobre ∂D_0, generan copias artificiales del dominio separados una distancia h. De esta manera, la zona que estamos evaluando es, para las j copias, la región superior y, de esa manera, generan ondas que irradian hacia arriba. Por lo tanto, el campo producido por D_0 en esta región es

$$u(x,y) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} C_n(\psi) e^{i\alpha_n x - i\beta_n y} + \sum_{n\in\mathbb{Z}} D_n(\psi) e^{i\alpha_n x + i\beta_n y} \tag{4.42}$$

donde

$$C_n(\psi) = \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, -\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'} \psi(r') dS(r')$$

$$D_n(\psi) = \frac{\left(\left(1 - e^{i\beta_n h}\right)^j - 1\right)}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, \beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'} \psi(r') dS(r')$$

Hemos insistido en que las soluciones a nuestro problema deben ser radiantes. Por lo tanto, al estar analizando la situación debajo de los obstáculos, las ondas de la forma

$$D_n(\psi) e^{i\alpha_n x + i\beta_n y}$$

no son admisibles pues se dirigen hacia arriba. Sin embargo, no debemos olvidar que el campo total se compone de la contribución de los obstáculos y de la recta. Para esta última, la región de nuestro análisis es la parte superior. Por lo tanto, la función de Green, al ser integrada sobre el segmento, se compondrá sólo de modos que van hacia arriba. De esta manera, el campo generado por el segmento debe cancelar a

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} D_n(\psi) e^{i\alpha_n x + i\beta_n y}$$

para que la solución que obtengamos tenga sentido físico.

Usando la respectiva representación espectral e integrando, se puede ver fácilmente que el campo generado por la curva en R^+ es

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} A_n e^{i\alpha_n x + i\beta_n y}$$

y en R^-

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} B_n e^{i\alpha_n x - i\beta_n y}$$

con A_n y B_n constantes (esto se logra usando la cuasiperiodicidad y reemplazando las densidades μ y ν por sus respectivas expansiones de Rayleigh, pasando a tener como incógnitas a los coeficientes de cada una). De esta forma, la física que queremos modelar nos impone que

$$A_n = -D_n(\psi),\ \forall n \in \mathbb{Z}$$

para que los modos no deseados se cancelen. Podemos interpretar esto también matemáticamente. El campo debajo del segmento se compone de la superposición de exponenciales complejas que se dirigen hacia abajo y, si por encima de éste existiera algún modo que se dirige hacia arriba, la solución de la ecuación diferencial, representada de esta forma, jamás podrá preservar la continuidad del campo y de su derivada normal: en el segmento, el campo total tendrá un salto. Por lo tanto, para exigir la continuidad sobre el segmento arbitrario que introdujimos debemos cancelar todos los modos que van hacia arriba. Así, una vez que eliminamos esos modos, el campo total arriba de la curva y debajo de los obstáculos es igual a

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} C_n(\psi) e^{i\alpha_n x - i\beta_n y}$$

y, por lo tanto, para que el campo y su derivada normal sean continuos a lo largo de la curva debe ser

$$B_n = C_n(\psi),\ \forall n \in \mathbb{Z}$$

A partir de estas observaciones planteamos nuestro método. El campo producido por el segmento es una combinación lineal infinita de ondas de la forma

$$e^{i\alpha_n x + i\beta_n y}$$

o

$$e^{i\alpha_n x - \beta_n y}$$

Al ser

$$\beta_n = i\sqrt{|k^2 - \alpha_n^2|}$$

para todo entero salvo un conjunto finito, la mayoría de los modos decaen exponencialmente con y. Por lo tanto, la mayor parte de la información estará concetrada en unos pocos modos. De esta forma, para aproximar la solución propondremos que el campo producido por la curva arriba y debajo de ésta sea una combinación lineal finita de estos modos, teniendo como incógnitas los coeficientes que acompañan a las exponenciales complejas. Por otra parte, para la contribución de ∂D_0, propondremos como antes una formulación integral. En otras palabras, dado $H < -M$, definimos

$$u(r) = \int_{\partial D_0} \frac{\partial G_j^q}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') + \sum_{n\in U_N} A_n e^{i\alpha_n x + i\beta_n y}, \quad y > H \tag{4.43}$$

$$u(r) = \sum_{n\in U_N} B_n e^{i\alpha_n x - i\beta_n y}, \quad y \leq H \tag{4.44}$$

donde $U_N = \{m_1 - N \leq i \leq m_2 + N\}$ con

$$m_1 = min\{n \in \mathbb{Z} : k^2 - \alpha_n^2 \geq 0\}$$

$$m_2 = max\{n \in \mathbb{Z} : k^2 - \alpha_n^2 \geq 0\}$$

es decir, $2N$ es la cantidad de modos evanescentes que agregamos para aproximar la contribución al campo del segmento.

De esta forma debemos resolver:

$$\psi(r) + 2\int_{\partial D_0} \frac{\partial G_j^q}{\partial n(r')}(r-r')\psi(r')dS(r') + 2\sum_{n\in U_N} A_n e^{i\alpha_n x + i\beta_n (y-H)} = -2u_{inc}(r), \quad r = (x,y) \in \partial D_0 \tag{4.45}$$

$$A_n = -\frac{1}{2L\beta_n}\left((1-e^{i\beta_n h})^j - 1\right)\int_{\partial D_0} < (\alpha_n, \beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'}\psi(r')dS(r') \tag{4.46}$$

$$B_n = \frac{1}{2L\beta_n}\int_{\partial D_0} < (\alpha_n, -\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'}\psi(r')dS(r') \tag{4.47}$$

Una observación pertinente que debemos hacer es que las únicas incógnitas que se encuentran realmente acopladas son ψ y A_n. Es inmediato que una vez que obtengamos ψ podremos despejar fácimente B_n. Por lo tanto, el único problema auténtico será resolver las ecuaciones (4.45) y (4.46).

Como antes, para obtener un sistema lineal, usamos la cuadratura MK y la regla de trapecios en (4.45) (separando las partes regulares y singulares) y la regla de trapecios en (4.46), ambas con N_i nodos. El sistema que obtenemos es de la forma

$$\left[I + \begin{pmatrix} K_1 & E \\ K_2 & 0 \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \tilde{\psi} \\ \tilde{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ 0 \end{pmatrix}$$

donde $K_1 \in \mathbb{C}^{Ni\times Ni}$ surge a partir de discretizar el potencial dipolar, $E \in \mathbb{C}^{Ni\times|U_N|}$ surge a partir de evaluar las respectivas exponenciales en (4.45) sobre los puntos de la curva $C(t_j)$ $j = 0 \ldots N_i - 1$, K_2 surge a partir de discretizar las integrales en (4.46) e I representa la respectiva matriz identidad.

En los ejemplos numéricos con los que hemos experimentado, lejos de una Wood anomaly, no encontramos un comportamiento singular de este sistema. Como se puede apreciar en la siguiente tabla, obtenemos errores del mismo órden comparado con las alternativas de las anteriores secciones.

Caso	Error
$k = 3, L = 3, \theta = \frac{\pi}{6}, R = 1$	$2{,}7647 \times 10^{-9}$
$k = 10, L = 3, \theta = \frac{\pi}{3}, R = 1$	$3{,}6911 \times 10^{-9}$
$k = 3, L = 10, \theta = \frac{\pi}{3}, R = 1$	$7{,}0638 \times 10^{-6}$

Cuadro 4.9: Error del criterio del balance de la energía. Los parámetros del algoritmo que hemos tomado son $A = 1000$, $N_i = 64$, $j = 3$, $h = 5$

Por otra parte, al acercarnos a una Wood anomaly, el número de condición vuelve a aumentar a medida que tomamos frecuencias más y más cercana a la anómala. Como se puede apreciar en las siguiente tablas, esto no se debe a que la matriz tenga un núcleo sino a que existe una dirección que, al aplicarle la matriz del sistema, produce un crecimiento hacia ∞. Esto se puede ver claramente gracias a la descomposición SVD, ya que el primer valor singular (o sea, el máximo de todos los valores singulares) aumenta cada vez más.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}2$)	0,0438	0,0438	0,0438	0,0438
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}02$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}0002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}00002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}000002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427

Cuadro 4.10: Cálculo del mínimo valor singular del sistema lineal para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-1}$)	$4{,}8 \times 10^{-4}$	$4{,}8 \times 10^{-4}$	$4{,}8 \times 10^{-4}$	$4{,}8 \times 10^{-4}$
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-2}$)	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-3}$)	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$	$7{,}8 \times 10^{-5}$

Cuadro 4.11: Cálculo del mínimo valor singular del sistema lineal para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}2$)	16,11	16,12	16,12	16,13
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}02$)	16,17	16,17	16,17	16,17
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}002$)	89,36	89,36	89,36	89,36
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}0002$)	893,0	893,0	893,0	893,0
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}00002$)	$8{,}93 \times 10^3$	$8{,}93 \times 10^3$	$8{,}93 \times 10^3$	$8{,}93 \times 10^3$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}000002$)	$8{,}93 \times 10^4$	$8{,}93 \times 10^4$	$8{,}93 \times 10^4$	$8{,}93 \times 10^4$

Cuadro 4.12: Cálculo del máximo valor singular del sistema lineal para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-1}$)	14,8	14,8	14,8	14,8
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-2}$)	15,09	15,01	15,1	15,1
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-3}$)	19,8	19,8	19,8	19,8
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	$1{,}01 \times 10^3$	$1{,}02 \times 10^3$	$1{,}02 \times 10^3$	$1{,}02 \times 10^3$
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	$1{,}02 \times 10^4$	$1{,}02 \times 10^4$	$1{,}02 \times 10^4$	$1{,}02 \times 10^4$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	$1{,}02 \times 10^5$	$1{,}02 \times 10^5$	$1{,}02 \times 10^5$	$1{,}02 \times 10^5$

Cuadro 4.13: Cálculo del máximo valor singular del sistema lineal para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

Deseamos descubrir a qué se debe este comportamiento. Examinando la ecuación (4.46) para $n_0 \in \mathbb{Z}$ tal que $\beta_{n_0} \to 0$ podemos ver que al discretizarla, la fila correspondiente en el sistema lineal tiene en la j-ésima columna el valor

$$\frac{\left(1 - (1 - e^{i\beta_{n_0}h})^j\right)}{2L\beta_{n_0}} \frac{2\pi}{N_i} < (\alpha_{n_0}, \beta_{n_0}), (\dot{C}_y(t_j), -\dot{C}_x(t_j)) > e^{-i\alpha_{n_0}C_x(t_j) - i\beta_{n_0}C_y(t_j)}$$

Es inmediato a partir de esto ver que cada uno de estos valores tiene un módulo más y más grande si $\beta_{n_0} \to 0$. Luego, esta fila es la que produce que exista una dirección que al aplicarle la matriz genere un vector más y más grande.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-1}$)	11,0	11,1	11,2	11,2
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-2}$)	15,7	15,7	15,7	15,7
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-3}$)	16,1	16,1	16,1	16,1
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	16,2	16,2	16,2	16,2
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	16,2	16,2	16,2	16,2
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	16,2	16,2	16,2	16,2

Cuadro 4.14: Cálculo del segundo máximo valor singular del sistema lineal para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-1}$)	13,79	14,7	17,3	23,19
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-2}$)	16,32	16,5	18,32	24,4
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-3}$)	20,45	21,45	24,2	36,98
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	20,5	21,5	24,3	37,9
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	20,5	21,5	24,3	37,9
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	20,5	21,5	24,3	37,9

Cuadro 4.15: Cálculo del segundo máximo valor singular del sistema lineal para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

Como se puede apreciar en las tablas anteriores, el segundo de los valores singulares no se agranda si $\beta_{n_0} \to 0$. En este sentido podemos decir que el mal condicionamiento de la matriz proviene exclusivamente de esta fila. Para sortear esta dificultad haremos uso de la identidad de Woodbury [23]

$$(B + UCV)^{-1} = B^{-1} - B^{-1}U(C^{-1} + VB^{-1}U)^{-1}VB^{-1} \tag{4.48}$$

donde $B \in \mathbb{C}^{(N_i+|U_N|)\times(N_i+|U_N|)}$ es igual a la matriz del sistema restándole a la matriz K_2 la fila que tiende a ∞,

$$C = \frac{\left(1 - (1 - e^{i\beta_{n_0}h})^j\right)}{2L\beta_{n_0}}$$

y U y V son vectores columna y fila respectivamente de manera que UCV produce una matriz en $\mathbb{C}^{(N_i+|U_N|)\times(N_i+|U_N|)}$ que contiene a la fila que estamos considerando en su ubicación original y es cero en el resto de los coeficientes. De esa manera, el comportamiento singular que tiene C se invierte, obteniendo una cantidad que varía continuamente y es cero en una Wood anomaly. Por lo tanto, a partir de (4.48) las sucesivas soluciones cuando nos acercamos a una Wood anomaly poseen un límite y este último puede ser calculado usando esta misma identidad.

Observación 14. Recordamos que

$$\beta_n = \sqrt{k^2 - \left(\alpha + \frac{2\pi}{L}n\right)^2}$$

Por lo tanto, podrían existir casos donde existan dos $n \in \mathbb{Z}$ que verfiquen $\beta_n = 0$, dando lugar a dos filas que tienden a infinito. Para este caso, la idea se extiende fácilmente redefiniendo las matrices C, U y V para contemplar esto.

Nos resta calcular el coeficiente B_n cuando estamos en una Wood anomaly para el modo problemático que, como se puede apreciar en (4.47), posee la misma dificultad de dividir por $\beta_n = 0$. Para resolver esto, calculamos

$$A_n - B_n = \frac{1}{2L\beta_n}\left(1 - (1 - e^{i\beta_n h})^j\right) \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, \beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'} \psi(r') dS(r') - \\ - \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, -\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'} \psi(r') dS(r') \quad (4.49)$$

Como tomamos la cantidad de polos adicionales $j \geq 2$, el término

$$\frac{(1 - e^{i\beta_n h})^j}{\beta_n} = \mathcal{O}\left(\beta_n^{j-1}\right)$$

podremos despreciarlo en el cálculo que haremos, ya que tomaremos el límite. Indiquemos con * a los valores límites de A_n, B_n, α_n y ψ. Luego

$$A_n^\star - B_n^\star = \lim_{\beta_n \to 0} \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, \beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' - i\beta_n y'} \psi(r') dS(r') - \\ - \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} < (\alpha_n, -\beta_n), n(r') > e^{-i\alpha_n x' + i\beta_n y'} \psi(r') dS(r') \quad (4.50)$$

$$A_n^\star - B_n^\star = \lim_{\beta_n \to 0} \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} \left[< (\alpha_n, \beta_n), n(r') > e^{-i\beta_n y'} - < (\alpha_n, -\beta_n), n(r') > e^{i\beta_n y'} \right] e^{-i\alpha_n x'} \psi(r') dS(r') \quad (4.51)$$

$$A_n^\star - B_n^\star = \lim_{\beta_n \to 0} \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} \left[< \left(\alpha_n \left(e^{-i\beta_n y'} - e^{i\beta_n y'}\right), \beta_n \left(e^{-i\beta_n y'} + e^{i\beta_n y'}\right)\right), n(r') > \right] e^{-i\alpha_n x'} \psi(r') dS(r') \quad (4.52)$$

$$A_n^\star - B_n^\star = \lim_{\beta_n \to 0} \frac{1}{2L\beta_n} \int_{\partial D_0} \left[< \left(-\alpha_n 2i \sin(\beta_n y'), \beta_n 2\cos(\beta_n y')\right), n(r') > \right] e^{-i\alpha_n x'} \psi(r') dS(r') \quad (4.53)$$

$$A_n^\star - B_n^\star = \frac{1}{L}\int\limits_{\partial D_0} \left[< \left(-\alpha_n^\star iy', 1\right), n(r') > \right] e^{-i\alpha_n^\star x'} \psi^\star(r') dS(r') \tag{4.54}$$

Obteniendo finalmente

$$B_n^\star = A_n^\star + \frac{1}{L}\int\limits_{\partial D_0} \left[< \left(\alpha_n^\star iy', -1\right), n(r') > \right] e^{-i\alpha_n^\star x'} \psi^\star(r') dS(r') \tag{4.55}$$

Como se puede ver en las siguientes tablas, la matriz B que debemos invertir no presenta un comportamiento singular cuando nos acercamos (o estamos) sobre una Wood anomaly.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}0002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}00002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}000002$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427
k_{wa} ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0$)	0,0427	0,0427	0,0427	0,0427

Cuadro 4.16: Cálculo del mínimo valor singular de la matriz B para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}0002$)	19,3	19,3	19,3	19,3
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}00002$)	19,3	19,3	19,3	19,3
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}000002$)	19,3	19,3	19,3	19,3
k_{wa} ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0$)	19,3	19,3	19,3	19,3

Cuadro 4.17: Cálculo del máximo valor singular de la matriz B para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$	$7{,}3 \times 10^{-5}$

Cuadro 4.18: Cálculo del mínimo valor singular de la matriz B para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	23,5	26,8	29,5	43,6
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	23,5	26,8	29,5	43,6
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	23,5	26,8	29,5	43,6
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	23,5	26,8	29,5	43,6

Cuadro 4.19: Cálculo del máximo valor singular del sistema lineal para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

Para concluir, mostramos el valor del error del balance de la energía que este método arroja para los casos anómalos.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}2$)	$1{,}2 \times 10^{-6}$	$7{,}2 \times 10^{-8}$	$4{,}1 \times 10^{-8}$	$1{,}9 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}02$)	$5{,}9 \times 10^{-6}$	$1{,}01 \times 10^{-6}$	$9{,}5 \times 10^{-8}$	$8{,}9 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}002$)	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}9 \times 10^{-8}$	$7{,}8 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}0002$)	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}8 \times 10^{-8}$	$7{,}7 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}00002$)	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}8 \times 10^{-8}$	$7{,}7 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0{,}000002$)	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}8 \times 10^{-8}$	$7{,}7 \times 10^{-8}$
k_{wa} ($\lvert\beta_{-1}\rvert = 0$)	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}8 \times 10^{-8}$	$7{,}7 \times 10^{-8}$

Cuadro 4.20: Error del balance de la energía para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $R = 1$ y $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

k \ j	3	5	7	9
$k_{wa} - 10^{-2}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-1}$)	$1{,}5 \times 10^{-6}$	$1{,}0 \times 10^{-8}$	$1{,}31 \times 10^{-7}$	$1{,}4 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-4}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-2}$)	$6{,}5 \times 10^{-5}$	$1{,}3 \times 10^{-5}$	$3{,}3 \times 10^{-6}$	$3{,}7 \times 10^{-7}$
$k_{wa} - 10^{-6}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-3}$)	$9{,}1 \times 10^{-5}$	$4{,}2 \times 10^{-6}$	$3{,}0 \times 10^{-6}$	$8{,}4 \times 10^{-7}$
$k_{wa} - 10^{-8}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-4}$)	$9{,}1 \times 10^{-5}$	$4{,}2 \times 10^{-6}$	$2{,}9 \times 10^{-6}$	$8{,}6 \times 10^{-8}$
$k_{wa} - 10^{-10}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-5}$)	$9{,}1 \times 10^{-5}$	$4{,}2 \times 10^{-6}$	$2{,}9 \times 10^{-6}$	$8{,}6 \times 10^{-7}$
$k_{wa} - 10^{-12}$ ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 3{,}5 \times 10^{-6}$)	$9{,}1 \times 10^{-5}$	$4{,}2 \times 10^{-6}$	$2{,}9 \times 10^{-6}$	$8{,}6 \times 10^{-7}$
k_{wa} ($\lvert\beta_{-2}\rvert = 0$)	$9{,}1 \times 10^{-5}$	$4{,}2 \times 10^{-6}$	$2{,}9 \times 10^{-6}$	$8{,}6 \times 10^{-7}$

Cuadro 4.21: Error del balance de la energía para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $R = 0{,}5$ y $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$. Los parámetros del algoritmo son $A = 2000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$ y $h = 5$.

Se puede apreciar que a medida que aumentamos j el error disminuye. Esto se explica a partir de que, dado que estamos cerca de una Wood anomaly, el método de la ventana pierde la convergencia superalgebraica. Sin embargo, una de las virtudes de la función de Green cuasiperiódica con polos es que su órden de convergencia aumenta con j. De allí que observemos este comportamiento.

El siguiente cuadro muestra la convergencia al aumentar el tamaño de la ventana para una frecuencia que es una Wood anomaly.

j \ A	1000	2000	4000	8000
3	$2{,}22 \times 10^{-5}$	$4{,}5 \times 10^{-6}$	$8{,}42 \times 10^{-7}$	$1{,}53 \times 10^{-7}$
5	$1{,}4 \times 10^{-5}$	$1{,}1 \times 10^{-6}$	$8{,}77 \times 10^{-8}$	$7{,}29 \times 10^{-9}$
7	$3{,}65 \times 10^{-6}$	$2{,}77 \times 10^{-8}$	$5{,}12 \times 10^{-9}$	$3{,}1 \times 10^{-10}$
9	$4{,}92 \times 10^{-7}$	$7{,}71 \times 10^{-8}$	$1{,}7 \times 10^{-9}$	$8{,}3 \times 10^{-12}$

Cuadro 4.22: Error del balance de la energía para $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$ y $R = 1$. Los parámetros del algoritmo que dejamos fijos son $c = 0{,}5$, $N_i = 32$ y $h = 5$.

j \ A	1000	2000	4000	8000
3	$3{,}99 \times 10^{-4}$	$6{,}4 \times 10^{-5}$	$1{,}07 \times 10^{-5}$	$1{,}83 \times 10^{-6}$
5	$4{,}2 \times 10^{-5}$	$6{,}8 \times 10^{-6}$	$2{,}33 \times 10^{-7}$	$2{,}34 \times 10^{-8}$
7	$2{,}38 \times 10^{-5}$	$1{,}61 \times 10^{-6}$	$5{,}9 \times 10^{-8}$	$1{,}69 \times 10^{-8}$
9	$4{,}92 \times 10^{-6}$	$5{,}92 \times 10^{-7}$	$1{,}68 \times 10^{-8}$	$8{,}73 \times 10^{-9}$

Cuadro 4.23: Error del balance de la energía para $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$ y $R = 0{,}5$. Los parámetros del algoritmo que dejamos fijos son $c = 0{,}5$, $N_i = 32$ y $h = 5$.

Para finalizar, exhibimos la solución para estos dos casos, ambos considerando frecuencias que son exactamente Wood anomalies.

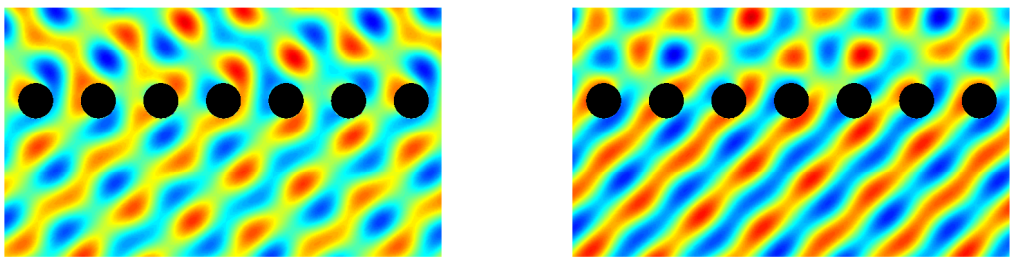

Figura 4.11: Campo dispersado (izquierda) y campo total (derecha) para los parámetros $L = 2$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, $k_{wa} = \frac{4\pi}{L(1+\sin(\theta))}$ y $R = 0{,}5$. Los parámetros para el algoritmo son $j = 5$,$A = 1000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$, $h = 5$ y agregamos 20 modos evanescentes.

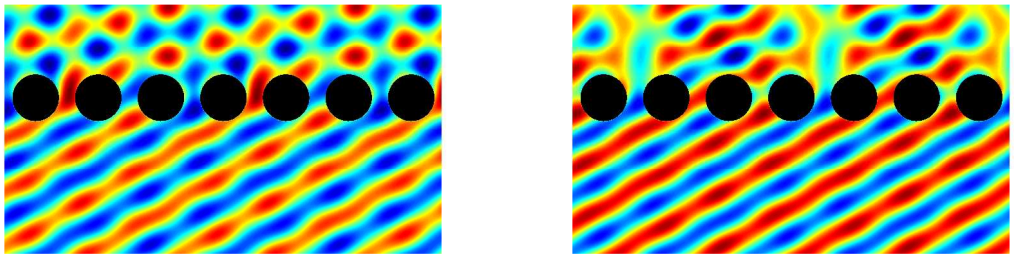

Figura 4.12: Campo dispersado (izquierda) y campo total (derecha) para los parámetros $L = 3$, $\theta = \frac{\pi}{6}$, $k_{wa} = \frac{2\pi}{L(1+\sin(\theta))}$ y $R = 1$. Los parámetros para el algoritmo son $j = 5$,$A = 1000$, $c = 0{,}5$, $N_i = 64$, $h = 5$ y agregamos 20 modos evanescentes.

Conclusiones

A lo largo de este trabajo hemos desarrollado el formalismo de ecuaciones integrales para resolver el problema de scattering de una onda electromagnética por un conjunto de obstáculos que se repiten periódicamente. Como resultados principales podemos destacar la demostración de la convergencia superalgebraica sobre compactos del truncamiento suave y el nuevo método que hemos introducido para calcular el campo electromagnético para todo tipo de frecuencias, aquellas cercanas a una Wood anomaly y exactamente en una Wood anomaly.

Esta tesis es quizá, por decirlo de alguna manera, la parte visible de un proyecto de mayor envergadura. Aún queda mucho trabajo por hacer. Nuestro programa lo hemos implementado en MATLAB por la rápidez que posee este para trasladar ideas del papel a la computadora. Un programa en un lenguaje compilado reducirá el tiempo de procesamiento en gran medida. Más aún, en [2] se introduce una metodología para optimizar la evaluación de la función de Green cuasiperiódica basada en el análisis asintótico de esta, teniendo implementaciones que resuelven el problema con gran precisión en unas pocas fracciones de segundo. Si bien hemos resaltado que las geometrías tratadas en ese artículo y en esta tesis son de distinta índole, el uso que se hace de la función de Green es prácticamente el mismo que el nuestro. Esperamos que una implementación optimizada de los cálculos de esta tesis resulte también en tiempos computacionales similares. Por otra parte queda pendiente dar fundamentos sólidos al método que propusimos y estudiar con rigurosidad su condicionamiento. Además, debemos darle mayor generalidad al programa para admitir que el obstáculo posea más de una componente conexa. Dado el creciente interés que existe en los cristales fotónicos, el próximo paso a dar será incorporar condiciones de dieléctrico al planteo. Por último, y por sobre todas las cosas, es de vital importancia entender en mayor profundidad las implicancias físicas que tiene nuestro método, preguntándonos qué información valiosa podemos extraer a partir de conocer en cada punto del espacio el campo electromagnético para estas condiciones de contorno.

Bibliografía

[1] Anne-Sophie Bonnet-Bendhia and Felipe Starling. Guided waves by electromagnetic gratings and non-uniqueness examples for the diffraction problem. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 17(5):305–338, 1994.

[2] Oscar P. Bruno and Bérangère Delourme. Rapidly convergent two-dimensional quasi-periodic Green function throughout the spectrum-including Wood anomalies. *Submitted en Journal of Computational Physics*, 2013.

[3] Oscar P. Bruno and Fernando Reitich. Solution of a boundary value problem for the helmholtz equation via variation of the boundary into the complex domain. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh: Section A Mathematics*, 122:317–340, 1 1992.

[4] Oscar P. Bruno, S. P. Shipman, C. Turc, and S. Venakides. Efficient Evaluation of Doubly Periodic Green Functions in 3D Scattering, Including Wood Anomaly Frequencies. *ArXiv e-prints*, July 2013.

[5] Eugene Hecht. *Optics*. Addison-Wesley, 2001.

[6] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix computations (3rd ed.)*. Johns Hopkins University Press, 1996.

[7] John D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, 1998.

[8] Warren P. Johnson. The curious history of Faà di Bruno's formula. *Amer. Math. Monthly*, 109:217–234, 2002.

[9] Ram Kanwal. *Generalized functions: Theory and technique*. Birkäuser, second edition, 1998.

[10] R. Kress. *Linear integral equations*. Springer-Verlag, 1999.

[11] R. Kussmaul. Ein numerisches Verfahren zur Lösung des Neumannschen Ausssenraumproblems für die Helmholtzsche Schwingungsgleichung. *Computing*, 4(3):246–273, 1969.

[12] N.N. Lebedev. *Special functions and their applications*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1965.

[13] C.M. Linton. The Green's function for the two-dimensional Helmholtz equation in periodic domains. *Journal of Engineering Mathematics*, 33(4):377–401, 1998.

[14] C.M. Linton. Lattice sums for the Helmholtz equation. *SIAM Rev.*, 52(4):630–674, November 2010.

[15] Erich Martensen. Über eine Methode zum räumlichen Neumannschen Problem mit einer Anwendung für torusartige Berandungen. *Acta Mathematica*, 109(1):75–135, 1963.

[16] D. Maystre. Rigorous vector theories of diffraction gratings. 21:1 – 67, 1984.

[17] John A. Monro. *A super-algebraically convergent, Windowing-based approach to the evaluation of scattering from periodic rough surfaces*. PhD thesis, 2007.

[18] N. I. Muskhelishvili. *Singular integral equations: boundary problems of functions theory and their applications to mathematical physics*. Groningen: Noordhoff, 1953.

[19] R. Petit. *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag, 1980.

[20] D. Colton R. Kress. *Integral equation methods in Scattering theory*. Wiley and Sons, 1983.

[21] Steven H Schot. Eighty years of Sommerfeld's radiation condition. *Historia Mathematica*, 19(4):385 – 401, 1992.

[22] R W Wood. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 18(1):269, 1902.

[23] Max A. Woodbury. *Inverting Modified Matrices*. Number 42 in Statistical Research Group Memorandum Reports. Princeton University, Princeton, NJ, 1950.