الجمهوريـة الجزائـريـة الديمقراطيـة الشعبيـة
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليـم العالـي والبحـث العلمـي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

N° Réf :...............

Centre Universitaire
Abd Elhafid Boussouf Mila

Institut des Sciences et Technologie

Département de Mathématiques et Informatique

Mémoire préparé en vue de l'obtention du diplôme de Master

En : Mathématiques
Spécialité : Mathématiques Appliquées

Thème :

Application de la méthode de Nikiforov-Ouvarov pour résoudre l'équation de Schrödinger

Préparé par :

- **Meziani Amira**
- **Bouguelot Fadila**

Soutenu devant le jury :

- Abdelouahab Mohamed Salah (Prof)	C.U. Abd Elhafid Boussouf	Président
- Boudjedaa Badredine (MCA)	C.U. Abdelhafid Boussouf	Encadreur
- Bouden Rabah (MCA)	C. U. Abdelhafid Boussouf	Examinateur

Année Universitaire : 2020/2021

Remerciements

Tout d'abord, nous avons à exprimer nos très grandes gratitudes et tous nos

Remerciements les plus sincères à notre bon Dieu, le tout puissant , pour le courage,

la volonté et la patience qu'il nous a données pour la réalisation de ce modeste travail.

Notre premier mot de remerciements, va naturellement vers notre

Monsieur Boudjedaa Badredine, enseignant au Centre Universitaire AbdelHafid Boussouf Mila, pour avoir accepté de diriger avec beaucoup d'attention et de soin ce mémoire. Nous lui sommes très reconnaissantes pour sa disponibilité, sa bienveillance, son soutien permanent, pour sa gentillesse et ses qualités humaines.

Nous remercions également les membres du jury,

Mr M. S. Abdelouahab et Mr R. Bouden. pour avoir accepté d'examiner notre travail et participer au jury de soutenance de notre mémoire de master.

A ces remerciements, nous tenons à associer tous les enseignants du département de mathématiques et informatiques, et en particulier les enseignants de la spécialité de mathématiques appliquées.

Et enfin, nous adressons notre sincères remerciements à nos parents, nos frères et nos sœurs, nos amis et tous ceux qui ont participé de loin ou de près à l'élaboration de ce travail.

Merci à tous et à toutes.

AMIRA et FADILA .

DÉDICACE

Du profond de mon cœur, je dédie ce modeste travail à tous ceux qui me sont chers.

A mon mode d'honneur et de principes, celle qui s'est toujours dévouée et sacrifiée pour moi, celle qui m'a aidée du mieux qu'elle pouvait pour réussir.

Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices qu'elle avait consenti pour mon instruction et mon bien être.

À MA TRÈS CHÈRE ET ADORÉE MÈRE "HOURIA."

À celui qui m'a toujours ouvert ses bras et soutenue, celui qui m'a accompagnée tout le long de mon parcours de mes études,

MON TRÈS CHER PÈRE "CHAABANE. "

Je vous remercie pour tout le soutient et l'amour que vous me porter depuis mon enfance et j'espère que votre bénédiction m'accompagne toujours.

Que ce travail soit l'exaucement par vos vœux tant formulés, le fruit de vos innombrables sacrifices. Puisse Dieu, le Très Haut, vos accorder la santé, le bonheur et une longue vie.

À TOUS MES CHERS FRÈRES.

À TOUS MES CHÈRES SŒURS.

À TOUS MES AMI(E)S.

"AMIRA."

Dédicace

Je remercie le Dieu pour m'avoir donné la force et la patience d'accomplir ce travail que je dédie :

A celle qui a continué à m'aider par ses prières et m'a soutenue tout le long de mon parcours, au plus beau cadeau de ce monde de Dieu, le battement de mon coeur, ma chère **maman**.

A celui qui m'a encouragée, m'a enseignée, et m'a donnée sa bonté, à la source de ma force, mon cher **père**, que Dieu le protège.

A la source de mon sourire et le soutien de ma vie mes chers sœurs et frères : Mon grand frère *Issam ,Haithem, Nardjes, Amina, Halima.*

Aux petits de la maison et sa joie : *Kossay, Ghaith*.

A mes amis proches:*Marwa, Selma, Roukia, Meriem*.

Fadila

ملخص :

في هذا العمل للماستر, تخصص رياضيات تطبيقية, قدمنا طريقة نيكيفوروف-أوفاروف لحل معادلة شرودنجر, مع بعض التطبيقات في مجال فيزياء الكم. أولا, قدمنا تعريفات و خصائص أساسية نستخدمها خلال هذا العمل. ثم درسنا طريقة نيكيفوروف-أوفاروف والتي هي طريقة لحل المعادلات التفاضلية من الدرجة الثانية للنوع فوق الهندسي. أخيرا, في الفصل الاخير من هذه الاطروحة, يتعلق بتطبيق طريقة نيكيفوروف- أوفاروف لحل بعض المعادلات المتعلقة بمعادلة شرودنجر.

الكلمات المفتاحية :

طريقة نيكيفوروف-أوفاروف, صيغة رودريغز, الدوال الخاصة كثيرات الحدود المتعامدة الكلاسيكية.

Résume :

Dans ce travail de Master , spécialité Mathématiques Appliquées, nous avons présenté la méthode de Nikiforov-Ouvarov pour résoudre l'équation de Schrödinger avec quelques applications dans le domaine de la physique quantique . D' abord, nous avons donné des définitions et des propriétés essentielles que nous aurons utilisé dans notre travail. Ensuite, nous avons étudié la méthode de Nikiforov-Ouvarov, qui est une méthode pour résoudre des équations différentielles du second ordre du type hypergéométrique. Enfin, dans le dernier chapitre de ce mémoire nous avons donné des applications de la méthode de Nikiforov-Ouvarov pour résoudre quelques problèmes liés à l'équation de Schrödinger.

Mots-clés :

Méthode Nikiforov-Ouvarov , Formule de Rodrigues , Les fonctions spéciales, Les polynômes orthogonaux classiques.

Abstract :

In this work of Maser, specialty Applied Mathematics, we have presented the Nikiforov-Uvarov method to solve the Schrödinger equation with some applications in the field of quantum physics. First, we have given definitions and essential properties that we use in our work. Next, we studied the Nikiforov-Uvarov method, wich is a method for solving second-order differential equations of the hypergeometric type. Finally, in The last chapter of this thesis we dorné applications of Nikiforov-Uvarov method to solve some problems related to the Schrödinger equation.

Keywords :

Nikiforov-Uvarov method, Rodrigues Formula, Special functions, Classical orthogonal polynomials.

TABLE DES MATIÈRES

NOTATIONS

Les ensembles et les Symboles

- $\mathbb{R}$ L'ensemble des nombres réels.
- $\mathbb{R}^2$ L'ensemble de couples $(x,\ y)$ où $x,\ y \in \mathbb{R}$.
- $\mathbb{R}^n$ L'ensemble des n-uples $(x_1,\ x_2, ...,\ x_n)$ où $x_1,\ x_2, ...,\ x_n \in \mathbb{R}$.
- $\mathbb{C}$ L'ensemble des nombres complexes.
- N^* L'ensemble des entiers naturels non nuls.
- $\frac{dy}{dx}$ La dérivée d'une fonction $x \longmapsto y(x)$.
- $\frac{d^2y}{dx^2}$ La dérivée second d'une fonction $x \longmapsto y(x)$.

Les polyômes et les fonctions

- $P_n(x)$ Les polyômes de *Legendre* d'ordre n.
- $P_n^m(x)$ Les polyômes de *Legendre* associées d'ordre m.
- $H_n(x)$ Les polyômes d'*Hermite* d'ordre n.
- $T_n(x)$ Les polyômes de *Tchebyvhev* du première espèce d'ordre n.
- $U_n(x)$ Les polyômes de *Tchebychev* du deuxième espèce d'ordre n.
- $L_n^\alpha\ (x)$ Les polyômes de *Laguerre* d'ordre $n + \alpha$.
- $C_n^\lambda(x)$ Les polyômes de *Gegenbauer* d'ordre $n + \lambda$.
- $\Gamma\ (x)$ La fonction gamma.
- $\beta(x, y)$ La fonction bêta.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

La méthode de $Nikiforov - Ouvarov$ a été proposée par *A.* $Nikiforov$ et *V.* $Ouvarov$ dans leur ouvrage [1]. C'est une méthode mathématique qui donne un schéma générale pour résoudre des équations différentielles linéaires du second ordre de type hypergéométrique. Par ce schéma générale on peut bien trouver et caractériser beaucoup de fonctions, considérées comme solutions particulières d'équations différentielles qui apparaissent dans de nombreux problèmes de la physique mathématique, appelées communément fonctions spéciales telles que : les fonctions de $Bessel$, les fonctions sphériques, les fonctions cylindriques et les fonctions hypergéométriques ainsi que les les polynômes orthogonaux classiques comme les polynômes de *Jacobi*, *Laguerre*, $Hermite$, T*chébychev*... etc. Les fonctions spéciales font leur apparition dans de nombreux problèmes de la Physique théorique et de la Physique mathématique tels que : la conduction de la chaleur, l'interaction rayonnement matière, la propagation d'ondes électromagnétiques et sonores, ce qui rend la connaissance des fonctions spéciales un outil indispensable pour répondre à de nombreuses questions capitales de la Physique théorique et de la Physique mathématique. Cette méthode trouve un très grand champ d'applications en mécanique quantique et elle permet de résoudre des équations telles que : l'équation de *Schrödinger*, l'équation de $Klein - Gordon$, l′équation $Dirac$ ...etc.

Dans ce mémoire, nous nous intéressons à la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$ et nous l'appliquerons pour résoudre l'équation de *Schrödinger*. Il est organisé et structuré comme suit : Dans le premier chapitre, nous donnerons les définitions et les notions essentielles que nous utiliserons tout le long de ce mémoire. Le deuxième chapitre est réservé à la description de la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$, nous aborderons en détails les différentes étapes de la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$ et nous donnerons quelques propriétés Générales des polynômes orthogonaux classiques. Dans le troisième chapitre, nous donnerons comme application de la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$ la résolution de deux problèmes de la mécanique quantique liés à l'équation de $Schrödinger$ pour deux types de potentiels : l'oscillateur harmonique et le potentiel $Coulombien$.

CHAPITRE 1

RAPPELS

Dans ce chapitre nous rappelons quelques définitions et des notions Générales sur les équations différentielles ordinaires qu'on utilisera dans toute la suite de ce mémoire.

1.1 Équations différentielles

Définition 1.1. *Une équation différentielle ordinaire* (EDO) *est une équation définie par une relation entre la fonction inconnue* $y : I \mapsto \mathbb{R}$*, la variable* $x \in I$ *et ses dérivées par rapport à* x *:*

$$\mathcal{F}\left(x, y(x), y'(x), y''(x), \cdots\right) = 0, \tag{1.1}$$

où I *est un intervalle ouvert de* $\mathbb{R}$*.*

Une EDO *est d'ordre* k*, si elle contient les dérivées de* y *jusqu'à l'ordre* k*.*

Définition 1.2. *La solution de l'équation différentielle est toute fonction* $y = \varphi(x)$ *vérifiant l'équation (1.1).*

1.1.1 Équations différentielles linéaires d'ordre n

Définition 1.3. *Une équations différentielle ordinaire linéaire d'ordre* n *est une équation de la forme :*

$$a_0(x)y^{(n)}(x) + a_1(x)y^{(n-1)}(x) + \cdots + a_n(x)y(x) = f(x), \quad \forall x \in I, \tag{1.2}$$

où $a_0 \neq 0$, $a_1, \ldots, a_n$ et f sont des fonctions seulement de x continues sur I,la fonction f est appelée le second membre de l'équation (1.2), y est la fonction inconnue.

Définition 1.4. *Une équation différentielle linéaire d'ordre n est dite homogène si le second membre $f = 0$ i.e. elle est de la forme :*

$$a_0(x)y^{(n)}(x) + a_1(x)y^{(n-1)}(x) + \cdots + a_n(x)y(x) = 0, \quad \forall x \in I, \tag{1.3}$$

Une équation différentielle linéaire est dite équation non homogène, ou avec second membre si le second membre $f \neq 0$.

Si $y_1(x),\ y_2(x), \cdots,\ y_n(x)$ sont des solutions linéairement indépendantes de l'équation (1.3) alors la solution homogène, i.e. la solution Générale de l'équation homogène, est donnée par :

$$y_h = \sum_{i=0}^{n} C_i y_i(x), \tag{1.4}$$

où $C_1, C_2, \ldots, C_n$ sont des constantes.

1.1.2 Équation différentielle linéaire d'ordre 2

Définition 1.5. *Une équation différentielle linéaire d'ordre 2 sur un intervalle I, est une équation qui est de la forme :*

$$a(x)y''(x) + b(x)y'(x) + c(x)y(x) = f(x),$$

où l'inconnue y est une fonction de x dérivable deux fois que l'on cherche à déterminer. $a \neq 0, b, c$ et f sont des fonctions données sur un intervalle I de $\mathbb{R}$.
Nous posons :

$$p_1(x) = \frac{b(x)}{a(x)},$$

$$p_2(x) = \frac{c(x)}{a(x)},$$

et

$$F(x) = \frac{f(x)}{a(x)},$$

alors

$$y''(x) + p_1(x))y'(x) + p_2(x)y(x) = F(x). \tag{1.5}$$

La solution Générale de l'équation (1.5) *est donnée par :*

$$y_G = y_h(x) + y_p(x),$$

où y_h *est la solution homogène et* y_p *est une solution particulière de l'équation différentielle* (1.5).
Si on impose à la solution de l'équation (1.5) *les conditions :*

$$y(x_0) = y_0, \quad y^{'}(x_0) = y_0^{'}, \quad x_0 \in I, \tag{1.6}$$

ces conditions s'appellent les conditions initiales de l'équation différentielle (1.5).

Le théorème suivant permet la vérification systématique de l'indépendance linéaire de deux fonctions.

Théorème 1.1. *Soient deux fonctions dérivables* $f(x)$ *et* $g(x)$ *sur un intervalle* I*. Le* $Wronskien$ *de* $f(x)$ *et* $g(x)$ *est définit par :*

$$W(f(x),\ g(x)) = \det\begin{vmatrix} f(x) & g(x) \\ f^{'}(x) & g^{'}(x) \end{vmatrix} = f(x)g^{'}(x) - f^{'}(x)g(x).$$

Si $W(f(x), g(x)) \neq 0,\ \forall x \in I,$ alors les deux fonction sont linéairement indépendantes.

1.1.3 L'existence et l'unicité de la solution

Théorème 1.2. *Si les fonctions* p_1, p_2 *et* F *dans l'équation* (1.5) *sont des fonctions continues sur l'intervalle ouvert* I*, alors il existe une et une seule solution* $y = \varphi(x)$*, de l'équation différentielle* (1.5) *satisfaisant aux conditions initiales* (1.6)*, cette solution existe pour tout* x *dans l'intervalle ouvert* I*.*

Exemple 1.1.

$$y'' - 2y' + y = \sin x. \tag{1.7}$$

1 - recherche de la solution de l'équation homogène associée à (1.7) :

$$y'' - 2y' + y = 0. \tag{1.8}$$

L'équation caractéristique :

$$r^2 - 2r + 1 = 0. \tag{1.9}$$

Cette équation du second ordre admet une racine double $r = 1$.

Les solutions homogènes sont les fonctions de la forme :

$$y_h = C_1 e^x + C_2 x e^x = (C_1 + C_2 x)\, e^x,$$

où C_1 et C_2 sont des réels arbitraires.

2 - Détermination d'une solution particuliére de l'équation (1.7) :

Le second membre est une combinaison linéaire d'une fonction trigonométrique, on recherche une solution particuliére de la forme :

$$y_p = A\cos(x) + B\sin(x),$$

alors on a

$$y_p^{'} = -A\sin(x) + B\cos(x),$$

et

$$y_p^{''} = -A\cos(x) + B\sin(x).$$

En substituant y_p, $y_p^{'}$, $y_p^{''}$ dans l'équation (1.7) on obtient :

$$(-A\cos(x) + B\sin(x)) - 2(-A\sin(x) + B\cos(x)) + (A\cos(x) + B\sin(x)) = \sin(x), \tag{1.10}$$

i.e.

$$2A\sin(x) - 2B\cos(x) = \sin(x). \tag{1.11}$$

Par identification, on a :

$$\begin{cases} 2A & = 1, \\ 2B & = 0. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \dfrac{1}{2}, \\ B = 0. \end{cases}$$

Une solution particulière de l'équation (1.7) est :

$$y_2(x) = \frac{1}{2} cos(x). \tag{1.12}$$

La solution Générale de l'équation (1.7) est alors :

$$y = C_1 e^x + C_2 x e^x + \frac{1}{2} cos(x), \tag{1.13}$$

où C_1 et C_2 sont des constantes réelles.

1.2 Les fonctions hypergéométriques

Le terme de séries hypergéométriques a été introduit par *John Wallis* en 1656, et elles ont été étudiées pour la première fois par *Gauss* en 1812. Les fonctions hypergéométriques sont introduites comme généralisation de la notion de séries géométriques.

Définition 1.6. *Les fonctions hypergéométriques sont des fonctions qu'on peut exprimer en série entiére qui ont une forme un peu spéciale et particuliére, elles permettent également d'exprimer des fonctions spéciales et des polynômes orthogonaux classiques comme ceux de Bessel, Legendre, Jacobi ou Hermite.*

La fonction hypergéométrique généralisée ${}_pF_q$ *dépendant de plusieurs paramétres* α_i *et* β_j *de la maniére suivante :*

$$
{}_pF_q(\ \alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3,......\alpha_p;\ \beta_1,\ \beta_2,\ \beta_3,......\beta_q;\ x) =_p F_q \begin{bmatrix} \alpha_1,\ \alpha_2....\alpha_p \\ x \\ \beta_1,\ \beta_2,....\beta_q \end{bmatrix}
$$

$$
= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_r\,(\alpha_2)_r \ldots (\alpha_p)_r\, x^r}{(\beta_1)_r\,(\beta_2)_r \ldots (\beta_q)_r\, r!},
$$

avec le symbole de Pochhammer $(\alpha)_r$ *définit par :*

$$
\begin{aligned}
(\alpha)_r &= \alpha(\alpha+1),\ \cdots,\ (a+r-1) \\
&= \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha)}, \\
(\alpha)_0 &= 1, \quad r \in \mathbb{N}^*, \quad \alpha \in \mathbb{C}.
\end{aligned}
$$

en particulier $(1)_k = k!$.

Le test de convergence des séries montre que :

- Si $p \leq q$, la série converge pour toute valeur de x.
- Si $p = q+1$, la série converge pour $|x| < 1$ et diverge pour $|x| > 1$.
- Si $p > q+1$, la série diverge pour toute $x \neq 0$.
- Si $p = q+1$, la série converge absolument dans le cercle $|x| = 1$.

1.2.1 Propriétés de quelques fonctions hypergéométriques

Discutons en particulier de quatre types de fonction hypergéométrique telle que :

1 - Le cas où $p = 1, q = 0$:

$$ {}_1F_0(\alpha;\ \beta;\ x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_r}{r!} x^r, \tag{1.14}$$

qui est une solution de l'équation différentielle :

$$(1-x)\frac{dy}{dx} - \alpha y = 0. \tag{1.15}$$

2 - Le cas où $p = q = 1$ dans ce cas, la fonction est appelée la fonction hypergéométrique confluente :

$$ {}_1F_1(\alpha;\ \beta;\ x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_r}{(\beta_r r!} x^r, \tag{1.16}$$

qui est une solution de l'équation hypergéométrique confluente :

$$x\frac{d^2y}{dx^2} + (\beta x)\frac{dy}{dx} - \alpha y = 0. \tag{1.17}$$

3 - Le cas où $p = 2, q = 0$:

$$ {}_2F_0(\alpha;\ \beta;\ x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_r}{(\beta_r r!} x^r, \tag{1.18}$$

qui est une solution de l'équation différentielle suivante :

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + (1 + (1 + \alpha + \beta)x)\frac{y}{x} + \alpha = 0. \tag{1.19}$$

4 - Le cas où $p = 2, q = 1$:

$$ {}_2F_1(\alpha;\ \beta;\ \gamma;\ x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_r(\beta_r)}{(\gamma_r)} \frac{x^r}{r!}, \tag{1.20}$$

qui est une solution de l'équation hypergéométrique de *Gauss* :

$$x(1-x)\frac{d^2y}{dx^2} + (\gamma - (\alpha + \beta + 1)x)\frac{y}{x} - \alpha\beta y = 0. \tag{1.21}$$

1.3 La fonction gamma et la fonction bêta

La fonction gamma et la fonction bêta sont définies respectivement par :

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt, \qquad \text{pour } x > 0, \tag{1.22}$$

$$\beta(x, y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1} dt. \qquad \text{pour } \; x > 0, \; y > 0. \tag{1.23}$$

Les intégrales ci-dessus sont convergentes si et seulement si $x > 0$, $y > 0$.

1.3.1 Propriétés de la fonction gamma et bêta

I- La fonction gamma :

1 - $\Gamma(1) = 1$.

2 - $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x), \; x > 0$.

3 - Si x est un entier non négatif, alors $\Gamma(x+1) = x!$.

4 - $\Gamma(x) = 2\int_0^\infty e^{-t^2} t^{2x-1} dt$.

5 - $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^{2x-1}\theta \sin^{2y-1}\theta d\theta = \dfrac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{2\Gamma(x+y)}$.

6 - $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$.

II- La fonction bêta :

1 - $\beta(x, \; y) = \beta(y, \; x)$.

2 - $\beta(x, \; y) = \beta(y, \; x)$.

3- $\beta(x+1, \; y) = \dfrac{x}{x+y}\beta(x, \; y) \quad , \quad \beta(x, \; y+1) = \dfrac{y}{x+y}\beta(x, \; y)$.

Théorème 1.3. *(Formule de duplication de Legendre) La fonction gamma vérifie la formule de duplication de Legendre :*

$$\Gamma(2x) = \frac{2^{2x-1}}{\sqrt{\pi}}\Gamma(x)(x + \frac{1}{2}).$$

Théorème 1.4. *(Formule des compléments) Elle est donnée par :*

$$\Gamma(x)\Gamma(x-1) = \frac{\pi}{\sin \pi x}. \tag{1.24}$$

1.3.2 La relation entre la fonction gamma et la fonction bêta

La fonction Bêta est reliée à la fonction Gamma par la relation :

$$\beta(x,\ y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}.$$

Pour plus de détails concernant toutes les notions données dans ce chapitre voir [2] et [3].

CHAPITRE 2

LA MÉTHODE DE NIKIFOROV-OUVAROV

Dans ce chapitre, nous présentons la méthodede $Nikiforov - Ouvarov$ dans sa forme la plus générale et nous donnons aussi quelques propriétés générales des polynômes orthogonaux classiques.

2.1 L'équation différentielle pour les fonctions spéciales

Dans la résolution d'un grand nombre de problèmes importants de la physique, en particulier la physique théorique et mathématique, on est ramené à résoudre une équation différentielle du type :

$$\psi''(x) + \frac{\tilde{\tau}(x)}{\sigma(x)}\psi'(x) + \frac{\tilde{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)}\psi(x) = 0. \tag{2.1}$$

dans lesquelles $\sigma(x)$ et $\tilde{\sigma}(x)$ sont des polynômes de degré non supérieur à 2 , $\tilde{\tau}(x)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1. La variable x est susceptible de prendre toute valeur réelle ou complexe. On trouve des équations de ce type dans la résolution des équations de *Laplace* et d'*Helmholtz* en coordonnées curvilignes par la méthode de séparation des variables, dans les problèmes fondamentaux de la mécanique quantique : mouvement d'une particule dans un champ à symétrie sphérique, oscillateur harmonique, recherche des solutions d'équations de *Schrödinger*, de *Dirac* et de $Klein - Gordon$ pour le potentiel *Coulombien*, mouvement d'une particule dans un champ électrique ou magnétique homogène...

L'équation $(2-1)$ apparaît également dans bon nombre de problèmes modèles de la physique atomique, moléculaire et nucléaire.

Les équations du type $(2-1)$ admettent comme solutions particulières des fonctions spéciales appartenant aux classes suivantes :

- polynômes orthogonaux classiques (polynômes de *Jacobi*, de *Laguerre* et d'*Hermite*) ;
- fonctions sphériques ;
- fonctions cylindriques ;
- fonctions hypergéométriques.

Ces fonctions sont souvent appelées les fonctions spéciales de la physique mathématique.

Essayons de mettre l'équation $(2-1)$ sous une forme plus simple au moyen du changement $\psi(x) = \varphi(x)y(x)$ et d'un choix particulier de la fonction $\varphi(x)$. L'équation $(2-1)$ devient :

$$y^{''}(x) + \left(2\frac{\varphi^{'}(x)}{\varphi(x)} + \frac{\widetilde{\tau}(x)}{\sigma(x)}\right)y^{'}(x) + \left(\frac{\varphi^{''}(x)}{\varphi(x)} + \frac{\varphi^{'}(x)}{\varphi(x)}\frac{\widetilde{\tau}(x)}{\sigma(x)} + \frac{\widetilde{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)}\right)y(x) = 0. \tag{2.2}$$

En vue rendre $(2-2)$ plus simple que $(2-1)$, on donnera au coefficient de $y^{'}(x)$ l'aspect $\frac{\tau(x)}{\sigma(x)}$, où $\tau(x)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1. La fonction $\varphi(x)$ se définira alors par l'équation :

$$\frac{\varphi^{'}(x)}{\varphi(x)} = \frac{\pi(x)}{\sigma(x)}, \tag{2.3}$$

dans laquelle

$$\pi(x) = \frac{1}{2}\left(\tau(x) - \widetilde{\tau}(x)\right) \tag{2.4}$$

est un polynôme du premier degré non supérieur à 1. Puisque

$$\frac{\varphi^{''}(x)}{\varphi(x)} = \left(\frac{\varphi^{'}(x)}{\varphi(x)}\right)^{'} + \left(\frac{\varphi^{'}(x)}{\varphi(x)}\right)^2 = \left(\frac{\pi(x)}{\sigma(x)}\right)^{'} + \left(\frac{\pi(x)}{\sigma(x)}\right)^2, \tag{2.5}$$

l'équation $(2-2)$ devient :

$$y^{''}(x) + \frac{\tau(x)}{\sigma(x)}y^{'}(x) + \frac{\bar{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)}y(x) = 0. \tag{2.6}$$

où

$$\tau(x) = \widetilde{\tau}(x) + 2\pi(x), \tag{2.7}$$

$$\bar{\sigma}(x) = \widetilde{\sigma}(x) + \pi^2(x) + \pi(x)(\widetilde{\tau}(x) - \sigma^{'}(x)) + \pi^{'}(x)\sigma(x). \tag{2.8}$$

Les fonctions $\tau(x)$ et $\widetilde{\sigma}(x)$ sont deux polynômes de degré non supérieur à 1 et à 2 respectivement. L'équation $(2-6)$ est donc de même type que $(2-1)$. Nous avons trouvées de cette façon la classe des transformations qui laissent inchangé le type de l'équation : ce sont les transformations qu'on fait subir à l'équation $(2-1)$ en opérant le changement

$\psi(x) = \varphi(x)y(x)$, où $\varphi(x)$ vérifie l'équation $(2-3)$ quelque soit le polynôme du premier degré $\pi(x)$.

L'arbitraire dans le choix de $\pi(x)$ nous permettra de choisir, parmi les formes possibles de l'équation $(2-6)$, celle qui est la plus simple. Si on Choisit les coefficients du polynôme $\pi(x)$ de telle façon que le polynôme $\bar{\sigma}(x)$ figurant dans $(2-6)$ soit un multiple exacte de $\sigma(x)$, i.e.

$$\bar{\sigma}(x) = \lambda\sigma(x), \tag{2.9}$$

où λ est une constante. Cela est possible, car, en identifiant les coefficients qui affectent les puissances correspondante de x dans les deux membres de l'égalité $(2-6)$, on obtient trois équations pour trois constantes inconnues : la constante λ et deux coefficients du polynôme $\pi(x)$. L'équation $(2-6)$ deviendra :

$$\sigma(x)y^{''}(x) + \tau(x)y^{'}(x) + \lambda y(x) = 0. \tag{2.10}$$

Nous dirons que l'équation $(2-10)$ est du type hypergéométrique, et ses solutions sont des fonctions du type hypergéométrique. Il sera donc tout naturel d'appeler l'équation $(2-1)$ équation généralisée du type hypergéométrique.

Pour définir le polynôme $\pi(x)$ et la constante λ, mettons la condition $(2-9)$ sous la forme :

$$\pi^2(x) + (\widetilde{\tau}(x) - \sigma^{'}(x))\pi(x) + \widetilde{\sigma}(x) - k\sigma(x) = 0,$$

où

$$k = \lambda - \pi^{'}(x). \tag{2.11}$$

Supposons pour l'instant que la constante k connue, on peut expliciter $\pi(x)$ dans l'équation du second degré :

$$\pi(x) = \frac{(\sigma^{'}(x) - \widetilde{\tau}(x))}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma^{'}(x) - \widetilde{\tau}(x)}{2}\right)^2 - \widetilde{\sigma}(x) + k\sigma(x)}. \tag{2.12}$$

$\pi(x)$ étant un polynôme, le radicande doit être le carré d'un polynôme. Pour qu'il en soit ainsi, il faut que soit nul le discriminant du polynôme du second degré sous le signe de la racine. Cette condition nous conduit à l'équation, en générale du second degré, pour la constante k.

Une fois k trouvé, on cherche $\pi(x)$ par la formule $(2-12)$, puis $\varphi(x)$, $\tau(x)$ et λ à l'aide des formules $(2-3)$, $(2-7)$ et $(2-11)$. Il est évident qu'il existe plus d'une possibilité de réduire l'équation $(2-1)$ à l'équation du type hypergéométrique $(2-10)$, possibilités fournies par le choix de la constante k et celui du signe de $\pi(x)$ dans la formule $(2-12)$.

Grâce à la transformation proposée, on aura à discuter, au lieu de l'équation $(2-1)$, une équation plus simple du type $(2-10)$.

Exemple 2.1. Mettons sous la forme $(2-10)$ l'équation de *Bessel* :

$$x^2\psi^{''}(x) + x\psi^{'}(x) + (x^2 - v^2)\psi(x) = 0. \tag{2.13}$$

En faisant le changement $\psi(x) = \varphi(x)y(x)$. Pour $\sigma(x) = x$, $\tilde{\tau}(x) = 1$, $\tilde{\sigma}(x) = x^2 - v^2$, l'équation $(2-13)$ est un cas particulier de l'équation $(2-1)$. Le radicande de $(2-12)$ définie alors sous la forme : $-x^2 + kx + v^2$.

Annulant le discriminant de ce trinôme du second degré, on obtient l'équation pour la constante k :

$$k^2 + 4v^2 = 0, \tag{2.14}$$

d'où $k = \pm 2iv$.
On a donc, en vertu de l'équation $(2-12)$:

$$\pi(x) = \pm\sqrt{-x^2 + v^2 \pm 2ivx} = \pm(ix \pm v). \tag{2.15}$$

Ainsi donc, dans le cas considéré, le polynôme $\pi(x)$ peut se mettre sous quatre formes différentes. Par exemple, plaçons-nous dans le cas où $k = 2iv$, $\pi(x) = ix + v$. On trouve :

⋆ La formule de $(2-7)$ nous donne :

$$\tau(x) = 2ix + 2v + 1.$$

⋆ La formule de $(2-3)$ nous donne :

$$\varphi(x) = x^v e^{ix}.$$

⋆ La formule de $k = \lambda - \pi^{'}(x)$ nous donne :

$$\lambda = k + \pi^{'}(x) = i(2v + 1).$$

⋆ Finalement, l'équation $(2-10)$ devient :

$$xy^{''}(x)+(2ix+2v+1)y^{'}(x)+i(2v+1)y(x)=0.$$

Remarque 2.1. :

1- Puisque l'équation $(2-1)$ ne change pas lorsqu'on multiplie $\sigma(x)$ et $\tilde{\tau}(x)$ par c et $\tilde{\sigma}(x)$ par c^2 (c étant une constante quelconque), on peut admettre que le coefficient affectant le terme de plus haut degré du polynôme $\sigma(x)$ est égal à un nombre donné. Cette remarque reste aussi vraie pour l'équation $(2-10)$.

2- Dans la suite, on peut se borner à considérer les cas où dans les équations $(2-1)$ et $(2-10)$, le polynôme $\sigma(x)$ n'admet pas de racines multiples. En effet, si le polynôme $\sigma(x)$ admet des racines multiples, c'est-à-dire, $\sigma(x)=(x-a)^2$, il suffit de faire le changement $x-a=\dfrac{1}{s}$ pour mettre l'équation $(2-1)$ sous la forme :

$$\frac{d^2\psi(x)}{ds^2}+\frac{2-s\tilde{\tau}\left(a+1/s\right)}{s}\frac{d\psi(x)}{ds}+\frac{s^2\tilde{\sigma}(x)\left(\dfrac{a+1}{s}\right)}{s^2}\psi(x)=0. \tag{2.16}$$

Les expressions $s\tilde{\tau}(x)\left(a+1/s\right)$ et $s^2\tilde{\sigma}(x)\left(\dfrac{a+1}{s}\right)$ sont deux polynômes de degré non supérieur à 1 et à 2 respectivement en s. Aussi l'équation $(2-16)$ est une équation du type $(2-1)$ dont le polynôme $\sigma(x)$ est égal à s et n'admet donc pas des racines multiples.

3- Pour $\sigma(x)=1$ et si l'expression $\left(\dfrac{\tilde{\tau}(x)}{2}\right)^2-\tilde{\sigma}(x)$ est un polynôme du premier degré, il n'est pas possible de réduire l'équation $(2-1)$ à une équation du type $(2-10)$. Dans ce cas, pour mettre l'équation $(2-1)$ à une forme plus simple, on peut choisir le polynôme $\pi(x)$ dans $(2-3)$ de la condition $\tau(x)=0$. Alors $\tilde{\sigma}(x)$ devient un polynôme du premier degré, et l'équation $(2-6)$ s'écrit sous la forme :

$$y^{''}(x)+(ax+b)y(x)=0. \tag{2.17}$$

4- Un autre cas particuliers des équations du type hypergéométrique est la solution d'un système d'équations différentielles du premier ordre :

$$\begin{cases} u_1^{'}(x)=a_{11}(x)u_1(x)+a_{12}(x)u_2(x), \\ u_2^{'}(x)=a_{21}(x)u_1(x)+a_{22}(x)u_2(x). \end{cases} \tag{2.18}$$

aux coefficients

$$a_{ik}(x) = \frac{\tau_{ik}(x)}{\sigma(x)},$$

où $\tau_{ik}(x)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1, et $\sigma(x)$ un polynôme de degré non supérieur à 2. En éliminant la fonction $u_2(x)$ entre les équations $(2-18)$, on obtient l'équation définissant $u_1(x)$:

$$u_1^{''}(x) - \left(a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}^{'}}{a_{12}}\right) u_1^{'}(x) + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} + a_{11}\frac{a_{12}^{'}}{a_{12}} - a_{11}^{'}\right) u_1(x) = 0, \quad (2.19)$$

Puisque

$$\frac{a_{12}^{'}(x)}{a_{12}(x)} = -\frac{\sigma^{'}(x)}{\sigma(x)} + \frac{\tau_{12}^{'}(x)}{\tau_{12}(x)},$$

L'équation $(2-19)$ sera une équation du type hypergéométrique pour $\tau_{12}^{'}(x) = 0$. Si $\tau_{12}^{'}(x) \neq 0$, on peut effectuer une transformation linéaire suivante :

$$\begin{cases} v_1(x) = \alpha u_1(x) + \beta u_2(x), \\ v_2(x) = \gamma u_1(x) + \delta u_2(x). \end{cases}$$

où α, β, γ et δ sont des constantes.
On obtient alors un système d'équations du type :

$$\begin{cases} v_1^{'}(x) = \tilde{a}_{11}(x)v_1(x) + \tilde{a}_{12}(x)v_2(x), \\ v_2^{'}(x) = \tilde{a}_{21}(x)v_1(x) + \tilde{a}_{22}(x)v_2(x). \end{cases} \quad (2.20)$$

où les fonctions $\tilde{a}_{ik}(x)$ sont des combinaisons linéaires des fonctions $a_{ik}(x)$ à coefficients constants dépendant de α, β, γ et δ, elles s'écrivent sous la forme :

$$\tilde{a}_{ik}(x) = \frac{\tilde{\tau}_{ik}(x)}{\sigma(x)}.$$

où $\tilde{a}_{ik}(x)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1.

En choisissant les coefficients α, β, γ et δ de façon à avoir $\tau_{12}^{'}(x) = 0$ (ce qui est toujours possible), on obtient, après avoir éliminé la fonction $v_2(x)$ entre les équations $(2-20)$, on obtient, une équation généralisée du type hypergéométrique pour la fonction $v_1(x)$.

Au cas où $\sigma(x)$ est un polynôme du premier degré, on peut passer de l'équation $(2-18)$ à l'équation généralisée du type hypergéométrique par un procédé différent, en choisissant les constantes α, β, γ et δ de telle façon que le coefficient $\tilde{a}_{12}(x)$ soit indépendant de x, i.e. $\tilde{\tau}_{12}(x) = v\sigma(x)$ (v étant une constante).

2.2 polynômes du type hypergéométrique

En considérant la nature des coefficients l'équation du type hypergéométrique (2.10), il est évident qu'on ne peut pas se douter quelle admet des solutions polynômiales.

Pour établir ces solutions nous partirons du fait remarquable que l'équation (2.10) admet une propriété fondamentale que les dérivées des solutions de cette équation satisfont à leur tour une équation du type hypergéométrique.

Pour prouver cela nous dérivons les deux membres de l'équation (2.10), nous obtenons :

$$\sigma(x)y^{'''}(x) + y^{''}(x)(\sigma^{'}(x) + \tau(x)) + y^{'}(x)(\tau^{'}(x) + \lambda) = 0.$$

On pose $v_1(x) = y^{'}(x)$, où $y^{'}(x)$ est la dérivée première de la fonction $y(x)$ par rapport à x, ce qui implique $v_1^{'}(x) = y^{''}(x)$, et $v_1^{''}(x) = y^{'''}(x)$, qui conduit à l'équation hypergéométrique pour $v_1(x) = y^{'}(x)$:

$$\sigma(x)v_1{''}(x) + \tau_1(x)v_1^{'}(x) + \mu_1 v_1(x) = 0, \tag{2.21}$$

où

$$\tau_1(x) = \tau(x) + \sigma^{'}(x), \tag{2.22}$$

et

$$\mu_1 = \lambda + \tau^{'}(x). \tag{2.23}$$

Nous remarquons que, $\tau_1(x)$ est un polynôme de degré non supérieur à 1, et que μ_1 ne dépend pas de x, et ça veux dire que μ_1 est une constante. L'équation $(2-21)$ est bien une équation du type hypergéométrique.

Soit, en effet $v_1(x)$ une solution de $(2-21)$, alors la fonction $y(x)$ est définie comme suit :

$$y(x) = -\frac{1}{\lambda}[\sigma(x)v_1^{'}(x) + \tau(x)v_1(x)]. \tag{2.24}$$

Nous avons prouvé que la fonction $y(x)$ obtenue par cette formule vérifie l'équation $(2-10)$ et que sa dérivée se confond avec $v_1(x)$.
On a

$$\lambda y^{'}(x) = -[\sigma(x)v_1^{''}(x) + \tau_1(x)v_1^{'}(x) + \tau^{'}(x)v_1(x)] = \lambda v_1(x). \tag{2.25}$$

Donc, effectivement $y^{'}(x) = v_1(x)$. En portant $v_1(x) = y^{'}(x)$ dans l'expression initiale de $y(x)$, on trouvons l'équation $(2-10)$ pour $y(x)$.

Nous dérivons les deux membres de l'équation $(2-10)$ deux fois, nous obtenons :

$$\sigma(x)y^{''''}(x)+(2\sigma^{'}(x)+\tau(z))y^{'''}(x)+(\sigma^{''}(x)+2\tau^{'}(x)+\lambda)y^{''}(x)=0, \tag{2.26}$$

avec $\tau^{''}(x)=0$, ($\tau(x)$ est un polynôme de premier degré).

On pose : $v_2(x)=y^{''}(x)$, ce qui implique $v_2{}'(x)=y^{'''}(x)$ et $v_2{}''(x)=y^{''''}(x)$, et nous obtenons l'équation hypergéométrique suivante pour $v_2(x)=y^{''}(x)$:

$$\sigma(x)v_2^{''}(x)+\tau_2(x)v_2^{'}(x)+\mu_2 v_2(x)=0, \tag{2.27}$$

où

$$\tau_2(x)=\tau(x)+2\sigma^{'}(x), \tag{2.28}$$

et

$$\mu_2=\lambda+2\tau^{'}(x)+\sigma^{''}(x). \tag{2.29}$$

Nous remarquons que, $\tau_2(x)$ est un polynôme de degré inférieur ou égal à 1, et que μ_2 est indépendant de x, c'est-à-dire, μ_2 est une constante.

De la même manière, nous dérivons l'équation $(2-22)$ n fois, nous obtenons l'équation hypergéométrique ci-dessous pour $v_n(x)=y^{(n)}(x)$, ($y^{(n)}(x)$ est la dérivée $n^{ième}$ de la fonction $y(x)$ par rapport à x) :

$$\sigma(x)v_n^{''}(x)+\tau_n(x)v_n^{'}(x)+\mu_n v_n(x)=0, \tag{2.30}$$

dans laquelle

$$\tau_n(x)=\tau(x)+n\sigma^{'}(x), \tag{2.31}$$

et

$$\mu_n=\lambda+n\tau^{'}(x)+\frac{n(n-1)}{2}\sigma^{''}(x). \tag{2.32}$$

où $\tau_n(x)$ est un polynôme de degré inférieur ou égal à 1, et que μ_n ne dépend pas de x, c'est-à-dire, μ_n est une constante.

Grâce à la propriété considérée, on peut construire la famille des solutions particulières de $(2-10)$ pour des valeurs déterminées de λ. En effet, pour $\mu_n=0$, l'équation $(2-30)$ admet une solution particulière $v_n(x)=const.$ étant donné que $v_n(x)=y^{(n)}(x)$. Cela revient à dire que pour :

$$\lambda=\lambda_n=-n\tau^{'}(x)-\frac{n(n-1)}{2}\sigma^{''}(x),\quad n=0,1,2,... \tag{2.33}$$

L'équation hypergéométrique admet une solution particulière $y(x) = y_n(x)$ qui est un polynôme de degré n. Ces solutions sont appelées des polynômes hypergéométriques.

Afin d'expliciter le polynôme $y_n(x)$, multiplions les équations $(2-10)$ et $(2-30)$ par des fonction $\rho(x)$ et $\rho_n(x)$ respectivement, nous obtenons les deux équations suivantes :

$$(\sigma(x)\rho(x)y^{'}(x))^{'} + \lambda\rho(x)y(x) = 0, \tag{2.34}$$

$$(\sigma(x)\rho_n(x)v_n^{'}(x))^{'} + \mu_n\rho_n(x)v_n(x) = 0. \tag{2.35}$$

Ici les fonctions $\rho(x)$ et $\rho_n(x)$ vérifient les équations différentielles suivantes :

$$(\sigma(x)\rho(x))^{'} = \tau(x)\rho(x), \tag{2.36}$$

et

$$(\sigma(x)\rho_n(x))^{'} = \tau_n(x)\rho_n(x). \tag{2.37}$$

En utilisant les équations $(2-31)$, $(2-36)$ et $(2-37)$, on obtient :

$$\frac{(\sigma(x)\rho_n(x))^{'}}{\rho_n(x)} = \frac{(\sigma(x)\rho(x))^{'}}{\rho(x)} + n\sigma^{'}(x). \tag{2.38}$$

Nous simplifions cette dernière équation, nous obtenons :

$$\frac{\rho_n^{'}(x)}{\rho_n(x)} = \frac{\rho^{'}(x)}{\rho(x)} + +\frac{n\sigma^{'}(x)}{\sigma(x)}. \tag{2.39}$$

Le calcul de l'intégrale de la dernière équation par rapport à la variable x donne l'expression suivante de la $\rho_n(x)$:

$$\rho_n(x) = \sigma^n(x)\rho(x), \tag{2.40}$$

Ce qui conduit à :

$$\rho_{n+1}(x) = \sigma(x)\rho_n(x), \tag{2.41}$$

cherchons maintenant l'expression explicite des polynômes du type hypergéométrique $y_n(x)$.

Comme $\rho_{n+1}(x) = \sigma(x)\rho_n(x)$ et $v_n(x) = y^{(n)}(x)$, l'équation $(2-35)$ se laisse transcrire sous la forme :

$$\rho_n(x)v_n(x) = -\frac{1}{\mu_n}(\rho_{n+1}(x)v_{n+1}(x))^{'}. \tag{2.42}$$

Pour $n = 0$, on a $v_0(x) = y^0(x) \equiv y(x)$ et $\rho(x) \equiv \rho_0(x)$, l'équation $(2-42)$ devient :

$$\rho(x)y(x) \equiv \rho_0(x)v_0(x) = -\frac{1}{\mu_0}\left(\rho_1(x)v_1(x)\right)' = \left(-\frac{1}{\mu_0}\right)\left(-\frac{1}{\mu_1}\right)\left(\rho_2(x)v_2(x)\right)'' \ldots =$$
$$= \frac{A_m}{A_n}\left(\rho_n(x)v_n(x)\right)^{n-m}, \tag{2.43}$$

où $m < n$, et

$$\mathrm{A}_n = (-1)^n \prod_{k=0}^{n-1} \mu_k, \ \mathrm{A}_0 = 1. \tag{2.44}$$

Si la fonction $y(x)$ est un polynôme de degré n, c'est-à-dire, $y(x) \equiv y_n(x)$. Alors, nous obtenons de l'équation $(2-43)$ la formule suivante pour $y_n(x)$:

$$y_n^{(m)}(x) = \frac{A_{mn}B_n}{\rho_m(x)}\left[\rho_n(x)\right]^{(n-m)}, \tag{2.45}$$

où $A_{mn} = A_m(\lambda)|_{\lambda=\lambda_n}$, $B_n = \dfrac{y_n^{(n)}(x)}{A_m}$.

On a $v_n(x) = y^{(n)}(x) = const$, et $\rho_n(x) = \sigma^n(x)\rho(x)$ et l'équation $(2-45)$ devient :

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\left[\sigma^n(x)\rho(x)\right]^{(n)}, \quad n = 0, 1, \ldots. \tag{2.46}$$

Pour $m = 0$, l'expression explicite des polynômes du type hypergéométrique $y_n(x)$:

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\left[\sigma^n(x)\rho(x)\right]^{(n)}. \tag{2.47}$$

La relation $(2-47)$ définit les solutions polynômiales de l'équation $(2-10)$ est appelée formule de *Rodrigues*, du nom de son auteur qui l'a établie en 1814 pour un cas particulier des polynômes du type hypergéométrique.

2.3 polynômes orthogonaux classiques

2.3.1 Définition et propriétés principales

Les polynômes du type hypergéométrique $y_n(x)$, sont les solutions de l'équation (2.10), données par la formule de *Rodrigues* (2.47) dans laquelle la fonction $\rho(x)$ vérifie l'équation différentielle (2.36).

En résolvant l'équation (2.36), nous trouvons trois formes possibles de la fonction $\rho(x)$

en fonction du degré du polynôme.

$$\rho(x) = \begin{cases} (b-x)^{\alpha}(x-a)^{\beta} & \text{pour} \quad \sigma(x) = (b-x)(x-a), \\ (x-a)^{\alpha}e^{\beta x} & \text{pour} \quad \sigma(x) = (x-a), \\ e^{\alpha x^2+\beta x} & \text{pour} \quad \sigma(x) = 1. \end{cases}$$

Tel que a, b, α et β sont des constantes (complexes dans le cas générale).

Par un changement linéaire de la variable indépendante, on peut donner aux expressions de $\sigma(x)$ et de $\rho(x)$ les formes canoniques suivantes (à un facteur constant près) :

$$\rho(x) = \begin{cases} (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta} & \text{pour} \quad \sigma(x) = 1-x^2, \\ x^{\alpha}e^{-x} & \text{pour} \quad \sigma(x) = x, \\ e^{-x^2+\beta x} & \text{pour} \quad \sigma(x) = 1. \end{cases}$$

Avec un tel changement les équations (2.10) et (2.36) se transforment en équations de même type, tandis que les polynômes correspondants du type hypergéométrique $y_n(x)$ restent des polynômes par rapport à la nouvelle variable et se définissent comme précédemment par la formule de *Rodrigues*.

En fonction de la forme de $\sigma(x)$, on obtient les systèmes de polynômes suivants :

1) polynômes de *Jacobi*

Soient $\sigma(x) = 1-x^2$, $\rho(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$. En ce cas :

$$\tau(x) = -(\alpha+\beta+2)x + \beta - \alpha.$$

Pour $n \in \mathbb{N}$, Les polynômes $y_n(x)$ pour un choix particulier $B_n = \dfrac{(-1)^n}{2^n n!}$ s'appellent polynômes de *Jacobi* et se notent $P_n^{(\alpha\,,\,\beta)}(x)$:

$$P_n^{(\alpha,\,\beta)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\,\frac{d^n}{dx^n}\left[(1-x)^{n+\alpha}(1+x)^{n+\beta}\right]. \qquad (2.48)$$

L'équation différentielle de *Jacobi* s'écrit sous la forme :

$$(1-x^2)y^{"}(x) + (\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)x)y^{'}(x) + n(n+\alpha+\beta+1)y(x) = 0, \qquad (2.49)$$

et les solutions polynômiales sont :

- $P_n^{(\alpha,\,\beta)}(x)$
$$= \sum_{r=0}^{n} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(\alpha+r+1)\Gamma(n+\beta-r+1)(n-r)!r!} \left(\frac{x-1}{2}\right)^r \left(\frac{x+1}{2}\right)^{n-r}.$$

- $$P_n^{(\alpha,\,\beta)}(x) = \sum_{r=0}^{n} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+r+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(\alpha+r+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)(n-r)!r!} \left(\frac{x-1}{2}\right)^r.$$

- $$P_n^{(\alpha,\,\beta)}(x) = \sum_{r=0}^{n} \frac{(-1)^{n-r}\Gamma(n+\beta+1)\Gamma(n+r+\alpha+\beta+1)}{\Gamma(\beta+r+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)(n-r)!r!} \left(\frac{x+1}{2}\right)^r.$$

On peut donner quelques cas explicites pour les polynômes de *Jacobi* $P_n^{(\alpha\,,\,\beta)}(x)$:

▶ Pour $n = 0$: $P_0^{(\alpha,\,\beta)}(x) = 1.$

▶ Pour $n = 1$: $P_1^{(\alpha,\,\beta)}(x) = \frac{1}{2}\left((1+\alpha)(1+x) - (1+\beta)(1-x)\right).$

▶ Pour $n = 2$:

$$P_2^{(\alpha,\,\beta)}(x) = \frac{1}{8}\Big((\alpha+2)(\alpha+1)(1+x)^2 + (\beta+2)(\beta+1)(1-x)^2 - 2(\beta+2)(\alpha+2)(1-x^2)\Big).$$

Donnons maintenant d'autres polynômes orthogonaux classiques qui sont des cas particuliers importants des polynômes de *Jacobi* :

a - Les polynômes de *Legendre* $\mathbf{P_n(z)}$

Les polynômes de *Legendre* sont un cas particulier des polynômes de *Jacobi* pour $(\alpha,\ \beta) = (0,\ 0)$, alors, $P_n(x) = P_n^{(0,\,0)}(x)$.

D'après la formule de *Rodrigues* :

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n, \tag{2.50}$$

et l'équation différentielle de *Legendre* est donnée par :

$$(1-x^2)y^{"}(x) - 2xy^{'}(x) + n(n+1)y(x) = 0. \tag{2.51}$$

On peut expliciter ses solutions par :

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}n} (-1)^r \frac{(2n-2r)!}{2^n r!(n-r)!(n-2r)!} x^{n-2r}. \tag{2.52}$$

Nous donnons quelques cas explicites pour les polynômes de *Legendre* $P_n(x)$:

▶ Pour $n = 0$, $P_0(x) = 1$.

▶ Pour $n = 1$, $P_1(x) = x$.

▶ Pour $n = 2$, $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$.

b - Les polynômes de *Tchébychev*

Les polynômes de *Tchébychev* sont un cas particulier des polynômes de *Jacobi*.

⋆ le polynôme de *Tchébychev* du première espèce $\mathbf{T_n(x)}$

Ils sont donnés par

$$T_n(x) = \frac{n!}{(1/2)_n} P_n^{(-1/2,\, -1/2)}(x). \tag{2.53}$$

On peut expliciter ses polynômes par :

$$T_n(x) = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}n} (-1)^r \frac{n!}{(2r)!(n-2r)!}(1-x^2)^r x^{n-2r}. \tag{2.54}$$

Nous donnons quelques cas explicites pour les polynômes de *Tchébychev* du première espèce $T_n(x)$:

▶ Pour $n = 0$, $T_0(x) = 1$.

▶ Pour $n = 1$, $T_1(x) = x$.

▶ Pour $n = 2$, $T_2(x) = 2x^2 - 1$.

⋆ le polynôme de *Tchébychev* du deuxième espèce $\mathbf{U_n(x)}$

Ils sont aussi donnés par

$$U_n(x) = \frac{(n+1)!}{(3/2)_n} P_n^{(1/2,\, 1/2)}(x). \tag{2.55}$$

On peut expliciter ses polynômes par :

$$U_n(x) = \sum_{r=0}^{\frac{(n-1)}{2}} (-1)^r \frac{n!}{(2r+1)!(n-2r-1)!}(1-x^2)^{r+\frac{1}{2}} x^{n-2r-1}. \tag{2.56}$$

Nous donnons quelques cas explicites pour les polynômes de *Tchébychev* du deuxième espèce $U_n(x)$:

▶ Pour $n = 0$, $U_0(x) = 0$.

▶ Pour $n = 1$, $U_1(x) = \sqrt{(1 - x^2)}$.

▶ Pour $n = 2$, $U_2(x) = \sqrt{(1 - x^2)2x}$.

Remarque 2.2. : $T_n(x)$ et $U_n(x)$ sont deux solutions linéairement indépendantes de l'équation de *Tchébychev* :

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - x\frac{dy}{dx} + n^2y = 0.$$

c - Les polynômes de *Gegenbauer* $\mathbf{C_n^\lambda(x)}$

Les polynômes de *Gegenbauer* sont un cas particulier des polynômes de *Jacobi* et ils donnés par

$$C_n^\lambda(x) = \frac{(2\lambda)_n}{(\lambda+1/2)_n} P_n^{(\lambda-1/2\,,\,\lambda-1/2)}(x), \tag{2.57}$$

avec, λ est une constante quelconque.

L'équation différentielle de *Gegenbauer* est donnée par :

$$(1-x^2)y^{"}(x) - (2\lambda+1)xy^{'}(x) + n(n+2\lambda)y(x) = 0. \tag{2.58}$$

2) Les polynômes de *Laguerre*

Soient $\sigma(x) = x$, $\rho(x) = x^\alpha e^{-x}$. Dans ce cas :

$$\tau(x) = -x + \alpha + 1.$$

Pour $n \in \mathbb{N}$, Les polynômes $y_n(x)$ pour un choix particulier $B_n = \dfrac{1}{n!}$ s'appellent les polynômes de *Laguerre* et se notent $L_n^\alpha(x)$:

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!}e^x x^{-\alpha}\frac{d^n}{dx^n}(x^{\alpha+n}e^{-x}). \tag{2.59}$$

L'équation différentielle de *Laguerre* est sous la forme :

$$xy^{"}(x)(-x+1\alpha)y^{'}(x) + ny(x) = 0. \tag{2.60}$$

On peut expliciter ses solutions polynômiales par :

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{r=0}^{n}(-1)^r\frac{(n+\alpha)!}{r!(n-r)!(\alpha+r)!}x^r. \tag{2.61}$$

Nous donnons quelques cas explicites pour les polynômes de *Laguerre* $L_n^\alpha(x)$:

- ► Pour $n = 0$, $L_0^\alpha(x) = 1$.
- ► Pour $n = 1$, $L_1^\alpha(x) = 1 - x$.
- ► Pour $n = 2$, $L_2^\alpha(x) = 1 - \dfrac{(\alpha+2)!}{(\alpha+1)!}x + \dfrac{(\alpha+2)!}{\alpha!(2!)^2}x^2$.

3) Les polynômes d'*Hermite*

Soient $\sigma(x) = 1$, $\rho(x) = e^{-x^2}$. Dans ce cas :

$$\tau(x) = -2x.$$

Pour $n \in \mathbb{N}$, Les polynômes $y_n(x)$ pour un choix particulier $B_n = (-1)^n$ s'appellent polynômes d'*Hermite* et se notent $H_n(x)$:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}). \tag{2.62}$$

L'équation différentielle d'*Hermite* s'écrit sous la forme :

$$y^{"}(x) - 2xy^{'}(x) - 2ny(x) = 0. \tag{2.63}$$

On peut expliciter ses solutions polynômiales par :

$$H_n(x) = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}n} (-1)^r \frac{n!}{r!(n-2r)!}(2x)^{n-2r}. \tag{2.64}$$

Nous donnons quelques cas explicites pour les polynômes d'*Hermite* $H_n(x)$:

- ▶ Pour $n = 0$, $H_0(x) = 1$.
- ▶ Pour $n = 1$, $H_1(x) = 2x$.
- ▶ Pour $n = 2$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$.

Nous avons omis de considérer le cas où le polynôme $\sigma(x)$ admet des racines multiples, $\sigma(x) = (x-a)^2$. Parmi les polynômes du type hypergéométrique qui correspondent à ce cas, les plus connus sont les polynômes de *Bessel* pour lesquels :

$$\sigma(x) = x^2, \;\; \tau(x) = 2(x+1), \;\; \rho(x) = e^{-2/x}, \tag{2.65}$$

et la formule de *Rodrigues* s'écrit sous la forme :

$$y_n(x) = 2^{-n} e^{2/x} \frac{d^n}{dx^n}(x^{2n} e^{-2/x}). \tag{2.66}$$

Les polynômes de *Bessel* vérifient la condition de normalisation $y_n(0) = 1$.

Les polynômes du type hypergéométrique correspondant à $\sigma(x) = (x-a)^2$ peuvent être exprimés au moyen des polynômes de *Laguerre* à l'aide de la remarque 2 du 2.1.

Nous avons vu, en effet, que pour $\sigma(x) = (x-a)^2$ le changement $s = 1/(x-a)$ transforme l'équation généralisée du type hypergéométrique :

$$\psi^{''}(x) + \frac{\tilde{\tau}(x)}{\sigma(x)}\psi^{'}(x) + \frac{\tilde{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)}\psi(x) = 0, \tag{2.67}$$

en une équation de même type pour laquelle $\sigma(s) = s$.

En particulier, l'équation différentielle :

$$\sigma(x)y^{''}(x) + \tau(x)y^{'}(x) + \lambda_n y(x) = 0, \quad \left(\lambda_n = -n\tau^{'}(x) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma^{''}(x)\right). \tag{2.68}$$

Pour les polynômes du type hypergéométrique dans le cas de $\sigma(x) = (x-a)^2$ se conduit à :

$$\frac{d^2y(x)}{ds^2} + \frac{2 - s\tau\ (a + 1/s)}{s}\frac{dy(x)}{ds} + \frac{\lambda_n}{s^2}y(x) = 0, \tag{2.69}$$

à la suite du changement $s = 1/(x-a)$. On a vu en outre, dans le paragraphe 2.1, que le changement $y(x) = \varphi(s)\psi(x)$ permet de réduire cette équation à une équation du type hypergéométrique, à condition de choisir convenablement la fonction $\varphi(s)$. Une des formes possibles de $\varphi(s)$ est $\varphi(s) = 1/s^n$. Puisque

$$\tau(x) = \tau(a) + \tau^{'}(x)(x-a).$$

On a $\tau(a + 1/s) = \tau(a) + \tau^{'}(x)/s$, l'on trouve l'équation suivante pour la fonction $\psi(s)$:

$$s\psi^{''}(s) - \left[s\tau(a) + \tau^{'}(x) + 2(n-1)\right]\psi^{'}(s) + n\tau(a)\ \psi(s) = 0. \tag{2.70}$$

Puisque $\psi(s) = s^n y(x)$, et la fonction $y(x)$ est un polynôme de degré n en $x = a + 1/s$, la fonction $\psi(s)$ est un polynôme de degré n en s. Ainsi donc, la fonction $\psi(s)$ est un polynôme du type hypergéométrique. Comme, dans le cas considéré, la fonction $\rho(s)$, définissant les polynômes du type hypergéométrique d'après la formule de *Rodrigues*, se définit sous la forme :

$$\rho(s) = s^{-\tau^{'}(x) - 2n\ + 1} e^{-\tau(a)s}. \tag{2.71}$$

Les polynômes $\psi(s) = \psi_n(s)$ se confondent à un facteur de normalisation près, pour $\tau(a) \neq 0$, avec les polynômes de *Laguerre* $L_n^{\alpha}(t)$, où $\alpha = -\tau^{'}(x) - 2n + 1$, $t = \tau(a)s$.

Les polynômes $y_n(x)$ sont donc liés aux polynômes de *Laguerre* par la relation suivante :

$$y_n(x) = C_n(x-a)^n\ L_n^{-\tau^{'}(x)\ -2n\ +1}\ \left(\frac{\tau(a)}{x-a}\right). \tag{2.72}$$

Cette formule reste vraie aussi pour $\tau(a) = 0$. Pour les polynômes de *Bessel*, elle s'écrira sous la forme :

$$y_n(x) = \frac{(-1)^n n!}{2^n}\ x^n\ L_n^{-\ (2n\ +\ 1)}\ \left(\frac{2}{x}\right). \tag{2.73}$$

2.3.2 Orthogonalité des polynômes du type hypergéométrique

En imposant certaines contraintes à la fonction $\rho(x)$, on met en évidence quelques propriétés spéciales des polynômes du type hypergéométrique $y_n(x)$.

Théorème 2.1. *Supposons que la fonction $\rho(x)$ vérifie, aux extrémités d'un intervalle (a, b), la condition :*

$$\sigma(x)\rho(x)x^k \mid_{x=a,\, b=0} = 0 \quad (k = 0, 1, \ldots). \tag{2.74}$$

Alors, les polynômes du type hypergéométrique $y_n(x)$ correspondant aux différentes valeurs de λ_n seront orthogonaux sur l'intervalle $]a, b[$ par rapport au poids $\rho(x)$, i.e.

$$\int_a^b y_n(x)y_m(x)\rho(x)dx = 0, \quad (\lambda_m \neq \lambda_n). \tag{2.75}$$

Démonstration. (voir [1]). □

Les caractéristiques énoncées des polynômes de *Jacobi* $P_n^{(\alpha,\,\beta)}(x)$, de *Laguerre* $L_n^\alpha(x)$ et d'*Hermite* $H_n(x)$ sont résumées dans le tableau suivant :

Polynômes de *Jacobi*, de *Laguerre* et d'*Hermite* (standardisation)

$y_n(x)$	$]a,b[$	$\rho(x)$	$\sigma(x)$	$\tau(x)$	λ_n	B_n
$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$	$(-1,1)$	$(1-x)^\alpha \times$ $\times(1+x)^\beta$	$1-x^2$	$-(\alpha+\beta+2)x+\beta-\alpha$	$n(n+\alpha+\beta+1)$	$\dfrac{(-1)^n}{2^n n!}$
$L_n^\alpha(x)$	$(0,\infty)$	$x^\alpha e^{-x}$	x	$-x+\alpha+1$	n	$\dfrac{1}{n!}$
$H_n(x)$	$(-\infty,\infty)$	e^{-x^2}	1	$-2x$	$2n$	$(-1)^n$

2.4 Quelques propriétés générales des polynômes orthogonaux

Les polynômes orthogonaux classiques présentent toute une série de propriétés qui découlent directement de leur propriété d'orthogonalité. Ils s'agira de polynômes quelconques qui sont orthogonaux sur un intervalle $]a, b[$ par rapport à un poids quelconque $\rho(x) > 0$.

Considérons quelques propriétés générales des polynômes $P_n(x)$ orthogonaux sur un intervalle $]a, b[$ par rapport à un poids $\rho(x)$ et vérifiant les égalités :

$$\int_a^b P_n(x)P_m(x)\rho(x)dx = 0, \quad (m \neq n). \tag{2.76}$$

Il sera supposé que le coefficient affectant le terme de plus haut degré du polynôme $P_n(x)$ est réel et distinct du zéro (n étant le degré du polynôme).

2.4.1 Développement d'un polynôme quelconque suivant des polynômes orthogonaux

Nous avons montrons qu'on peut toujours mettre un polynôme quelconque $q_n(x)$ de degré n sous forme d'une combinaison linéaire de polynômes orthogonaux $P_k(x)$, (k = 0, 1,. . . , n), i.e.

$$q_n(x) = \sum_{k=0}^{n} C_{kn} P_k(x). \tag{2.77}$$

Pour $n = 0$ la proposition est immédiate. Pour $n > 0$ quelconque, la démonstration sera faite par récurrence. Supposons qu'il existe, pour un polynôme quelconque $q_{n-1}(x)$, le développement :

$$q_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} C_{k,\, n-1} P_k(x). \tag{2.78}$$

Pour le polynôme $q_n(x)$, choisissons la constante C_{nn} de telle façon que le coefficient affectant le terme de plus haut degré du polynôme $q_n(x) - C_{nn}\ P_n(x)$ soit égal à zéro,i.e.

$$q_n(x) - C_{nn} P_n(x) = q_{n-1}(x).$$

En faisant intervenir le développement (2.78), on retrouve pour $q_n(x)$ le développement (2.77).

Les coefficients C_{kn} dans (2.77) se cherchent très facilement à l'aide de la propriété d'orthogonalité :

$$\int_a^b P_n(x) P_m(x) \rho(x) dx = 0, \quad (m \neq n). \tag{2.79}$$

Par la formule :

$$C_{kn} = \frac{1}{d_k^2} \int_a^b q_n(x) P_k(x) \rho(x) dx, \tag{2.80}$$

où

$$d_k^2 = \int_a^b P_k^2(x) \rho(x) dx.$$

est le carré de la norme.

Montrons que la relation d'orthogonalité (2.79) est équivalente à la relation :

$$\int_a^b P_n(x) x^m \rho(x) dx = 0, \quad (m < n). \tag{2.81}$$

En effet, en développant, dans l'intégrale (2.79), le polynôme $P_m(x)$ suivant les puissances de x, pour $m < n$, on prouve (2.79) à partir de (2.81). De même, en développant x^m suivant les polynômes orthogonaux $P_k(x)$, on prouve la relation (2.81) si la relation (2.79) est vraie.

Il ressort de la relation (2.81) que le polynôme $P_n(x)$ est orthogonal à un polynôme quelconque de degré plus petit.

2.4.2 Unicité d'un système des polynômes orthogonaux par rapport à un poids donné

On montre que la donnée d'un intervalle $]a,b[$ et d'un poids $\rho(x)$ suffit pour définir les polynômes $P_n(x)$, vérifiant la relation d'orthogonalité (2.81), de façon unique, à un facteur de normalisation près.

Supposons qu'il existe deux polynômes $P_n(x)$, $\tilde{P}_n(x)$ vérifiant (2.81), on a

$$\tilde{P}_n(x) = \sum_{k=0}^{n} C_{kn} P_k(x). \tag{2.82}$$

En vertu des relations (2.80) et (2.81), on a $C_{kn} = 0$ pour $k < n$, d'où la proportionnalité des polynômes $P_n(x)$ et $\tilde{P}_n(x)$.

Pour les polynômes $P_n(x)$, on a une expression explicite sous forme d'un déterminant :

$$P_n(x) = A_n \begin{vmatrix} C_0 & C_1 & \dots & C_n \\ C_1 & C_2 & \dots & C_{n+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{n-1} & C_n & \dots & C_{2n-1} \\ 1 & x & \dots & x^n \end{vmatrix}. \tag{2.83}$$

où A_n est une constante de normalisation, et $C_k = \int_a^b x^k \rho(x) dx$, est le moment de la fonction poids $\rho(x)$. On montre, en effet, que les polynômes (2.83) vérifient les relations d'orthogonalité (2.81).

En considérant la forme explicite (2.83) des polynômes $P_n(x)$, on voit que le polynôme $P_n(x)$ est un polynôme à coefficients réels.

Exemple 2.2. Grâce à la propriété d'unicité des polynômes orthogonaux par rapport à un poids donné, on établit l'expression pour les polynômes de *Tchébychev* de première espèce $T_n(x)$ orthogonaux sur l'intervalle $]-1,1[$ par rapport au poids $(1-x^2)^{-1/2}$.
Faisons dans (2.79) le changement $x = \cos(x)\varphi(x)$. Il vient :

$$\int_0^\pi T_n(\cos(x)\varphi(x))\, T_m(\cos(x)\varphi(x))\, d\varphi(x) = 0, \quad (n \neq m).$$

On sait d'autre part que :

$$\int_0^\pi \cos(x)\ n\varphi(x)\ \cos(x)\ m\varphi(x)\ d\varphi(x) = 0, \quad (n \neq m).$$

Puisque $\cos(x)\ n\varphi(x)$ est un polynôme de degré n en $\cos(x)\varphi(x)$, il en ressort que les polynômes $\cos(x)\ n\varphi(x) = \cos(n\ \arccos(x))$ et $T_n(x)$ sont proportionnels entre eux. Comme

$T_n(1) = 1$, on a $T_n(x) = \cos(n \ \arccos(x))$. Le coefficient affectant la puissance de plus haut degré du polynôme $T_n(x)$ est égal à 2^{n-1}.

Les polynômes $\bar{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ sont largement utilisés dans les problèmes relatifs à l'approximation des fonctions et dans la théorie générale des méthodes itératives. Cela tient à ce que, de tous les polynômes $q_n(x)$ de degré n dont le coefficient du terme de plus haut degré est égal à l'unité, les polynômes $\bar{T}_n(x)$ s'écartent le moins du zéro sur le segment $[-1, 1]$; autrement dit, l'expression :

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |q_n(x)|,$$

admet son minimum sur les polynômes

$$\bar{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} \ \cos(x) \ n\varphi(x), \quad \varphi(x) = \arccos(x).$$

En effet, le polynôme $\bar{T}_n(x)$ prend dans les points $x_0, \ x_1, \ldots, \ x_n, \ \ x_k = \cos(x) \ \dfrac{k\pi}{n}$, $(k = 0, 1, \ldots, n)$, des valeurs alternées égales en module à

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |\bar{T}_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}.$$

De ce fait, si l'on suppose qu'il existe un polynôme $P_n(x)$ dont le terme de plus haut degré est affecté d'un coefficient unité et qui pour $x \in [-1, 1]$ vérifie la condition :

$$- \max_{-1 \leq x \leq 1} |\bar{T}_n(x)| \ < \ P_n(x) \ < \ \max_{-1 \leq x \leq 1} |T_n(x)|.$$

Le polynôme $\bar{T}_n(x) - P_n(x)$ de degré $n - 1$ admettrait en $x_0, x_1, \ldots, x_n$, des valeurs alternées et aurait n racines, ce qui est impossible.

On montre d'une façon analogue que le polynôme

$$\tilde{T}_n(x) = \frac{T_n(x)}{T_n(x_0)}, \quad \textit{pour} \quad x_0 \notin [-1, 1] \, .$$

s'écarte le moins du zéro sur $[-1, 1]$ parmi tous les polynômes $q_n(x)$ de degré n vérifiant la condition $q_n(x_0) = 1$.

2.4.3 La relation de récurrence

Soit $P_{n-1}(x)$, $P_n(x)$, $P_{n+1}(x)$ trois polynômes orthogonaux quelconques sont liés par une formule de récurrence :

$$xP_n(x) = \alpha_n P_{n+1}(x) + \beta_n P_n(x) + \gamma_n P_{n-1}(x), \tag{2.84}$$

en effet, $xP_n(x)$ est un polynôme de degré $(n+1)$ qui s'écrit sous la forme :

$$xP_n(x) = \sum_{k=0}^{n+1} C_k p_k(x), \tag{2.85}$$

où α_n, β_n, γ_n les constantes sont :

$$\alpha_n = \frac{a_n}{a_{n+1}},$$

$$\beta_n = \frac{b_n}{a_n} - \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}},$$

$$\gamma_n = \frac{a_{n-1}}{a_n}\frac{d_n^2}{d_{n-1}^2}$$

Démonstration. (voir [1]). □

2.5 Théorème de développement

Théorème 2.2. *Supposons que la fonction $f(x)$ soit continue pour $a < x < b$ et admette une dérivée continue par morceaux sur $]a, b[$; soient $y_n(x)$ des polynômes orthogonaux classiques par rapport au poids $\rho(x)$. Si les intégrales :*

$$\int_a^b f^2(x)\rho(x)dx, \quad et \qquad \int_a^b \left[f'(x)\right]^2 \sigma(x)\rho(x)dx.$$

sont convergentes, la fonction $f(x)$ admet le développement,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y_n(x), \tag{2.86}$$

où

$$C_n = \frac{1}{d_n^2}\int_a^b f(x)y_n(x)\rho(x)dx, \qquad d_n^2 = \int_a^b y_n^2(x)\rho(x).$$

sur l'intervalle $]a, b[$ suivant les polynômes $y_n(x)$ et la série (2.86) est uniformément convergente en x sur n'importe quel segment $[x_1, x_2] \subset\,]a, b[$.

Démonstration. (voir [1]). □

Les références essentielles pour toutes les notions utilisées dans ce chapitre sont [1, 2] et [4, 5].

CHAPITRE 3

APPLICATIONS

3.1 l'équation de *Schrödinger* pour l'oscillateur harmonique

l'équation de*Schrödinger* stationnaire est donnée par :

$$\mathbf{H}\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.1}$$

où $\mathbf{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$, est l'hamiltonien du système, $\hbar \equiv \dfrac{h}{2\pi}$, h est la constante de *Planck*.

On veut résoudre cette l'équation pour l'oscillateur harmonique, i.e. pour une particule mobile dans un champ d'énergie potentielle :

$$V(x) = \frac{1}{2}mw^2x^2, \tag{3.2}$$

où m étant la masse de la particule, x son écart de la position d'équilibre et w est la pulsation.

C'est-à-dire, on va chercher les valeurs propres de l'énergie E et les fonctions propres pour l'équation (3.1) dans le cas de l'oscillateur harmonique.

Le problème de l'oscillateur harmonique joue un rôle fondamental dans le développement de l'électrodynamique ; on en fait appel en étudiant des oscillations de toute nature dans les cristaux et les molécules.

l'équation de*Schrödinger* pour l'oscillateur harmonique s'écrit comme suit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}mw^2x^2\psi(x) = E\psi(x), \qquad (x \in \mathbb{R}). \tag{3.3}$$

La fonction $\psi(x)$ doit être bornée et vérifier la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1.$$

Pour résoudre l'équation (3.3), il y a intérêt à passer de la coordonnée x et de l'énergie E à des variables sans dimension ξ et ε :

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}\xi = \alpha\xi, \quad E = \hbar w \varepsilon.$$

On obtient alors l'équation :

$$\psi^{"}(\xi) + (2\varepsilon - \xi^2)\psi(\xi) = 0. \tag{3.4}$$

l'équation (3.4) est une l'équation généralisée du type hypergéométrique pour :

$$\sigma(\xi) = 1, \quad \tilde{\tau}(\xi) = 0, \quad \tilde{\sigma}(\xi) = 2\varepsilon - \xi^2.$$

Le problème proposé appartient à la classe de problèmes déjà étudiés par la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$. En effet, on a ici $\tilde{\rho}(\xi) = 1$. La condition du carré intégrable pour la fonction $\sqrt{\tilde{\rho}(\xi)}\psi(\xi)$ découle donc de la condition de normalisation.

Nous utiliserons la méthode de solution considérée précédemment, i.e. la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$. Réduisons l'équation pour la fonction $\psi(\xi)$ à une l'équation du type hypergéométrique :

$$\sigma(\xi)y^{"}(\xi) + \tau(\xi)y^{'}(\xi) + \lambda y(\xi) = 0, \tag{3.5}$$

en posant $\psi(\xi) = \varphi(\xi)y(\xi)$, où $\varphi(\xi)$ est solution de l'équation :

$$\frac{\varphi^{'}(\xi)}{\varphi(\xi)} = \frac{\pi(\xi)}{\sigma(\xi)}. \tag{3.6}$$

Le polynôme $\pi(\xi)$ s'écrira alors comme suit :

$$\pi(\xi) = \pm\sqrt{k - 2\varepsilon + \xi^2}. \tag{3.7}$$

La constante k sera choisie de façon que le radicande admette des racines multiples, i.e. $k = 2\varepsilon$. Des deux valeurs possibles du polynômes $\pi(\xi) = \pm\xi$, on choisira celle pour laquelle la fonction :

$$\tau(\xi) = \tilde{\tau}(\xi) + 2\pi(\xi). \tag{3.8}$$

admette une dérivée négative. Il en sera ainsi si l'on choisit $\tau(\xi) = -2\xi$, ce qui correspond à :

$$\pi(\xi) = -\xi, \quad \varphi(\xi) = e^{-\xi^2/2}.$$
$$\lambda = 2\varepsilon - 1, \quad \rho(\xi) = e^{-\xi^2}. \tag{3.9}$$

Alors on peut chercher les valeurs propres de l'énergie à l'aide de l'équation :

$$\lambda + n\tau^{'}(\xi) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma^{"}(\xi) = 0.$$

On obtient :

$$\varepsilon = \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}, \tag{3.10}$$

et donc

$$E = E_n = hw\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, \ldots). \tag{3.11}$$

Les fonctions propres $y_n(\xi)$ associées sont :

$$y_n(\xi) = B_n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}. \tag{3.12}$$

Elles se confondent, à un facteur prés, avec les polynômes d'*Hermite* $H_n(\xi)$. Pour la fonction d'onde $\psi(\xi)$, on obtient l'expression :

$$\psi_n(\xi) = C_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi), \quad x = \alpha\xi, \quad \alpha = \sqrt{\frac{h}{mw}}. \tag{3.13}$$

La constante C_n se définit par la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2(x)dx = 1.$$

3.2 l'équation de *Schrödinger* pour le potentiel *Coulombien*

Comme autre illustration de l'application de la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$, nous reprendrons le potentiel *Coulombien* qui concerne un électron de charge $-e$ se déplaçant dans le champ électrostatique du noyau *Coulombien*, si le noyau est un proton de charge positive e, le problème étudié est celui de l'atome d'hydrogène est constitué d'un électron se déplaçant dans un puits de potentiel sphérique en raison de l'attraction *Coulombienne* du proton. Ce système à deux particules (électron et proton) peut être converti en un système à une particule en considérant le mouvement de l'électron par rapport à celui du proton dans le repère du centre de masse des deux particules selon les principes de la théorie classique et mécanique.

Soit l'équation de*Schrödinger* en coordonnées sphériques donnée sous la forme :

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right]R(r) = 0. \tag{3.14}$$

L'énergie potentiel $V(r)$ de l'électron due à l'attraction *Coulombienne* du noyau est :

$$V(r) = -\frac{Ze'^2}{r}, \tag{3.15}$$

où $e' = e/\sqrt{4\pi\varepsilon_0}$, e est la charge et Z est le numéro atomique.

l'équation (3.14) pour le potentiel *coulombien* donné dans l'équation (3.15) devient :

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze'^2}{r} - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right]R(r) = 0. \tag{3.16}$$

Pour gagner du temps lors de l'écriture, nous définissons les constantes comme suite :

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e'^2} = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}. \tag{3.17}$$

l'équation (3.16) devient :

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{2E}{ae'^2} + \frac{2Z}{ar} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R(r) = 0. \tag{3.18}$$

Résolvons maintenant explicitement le problème de l'atome de type hydrogène en utilisant la méthode de $Nikiforov-Ouvarov$. Pour rendre nos calculs comparables à l'équation (2.1), nous choisissons une fonction sous la forme $R(r) \equiv \psi(x)$, où la transformation $r \to x$ est valide. Avec ce choix, nous obtenons la simplification commode de l'équation radiale donnée dans l'équation (3.18) :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{1}{x^2}\left[-\alpha x^2 + \beta x - \gamma\right]\psi(x) = 0 \tag{3.19}$$

où les quantités réduites sont données comme :

$$\alpha = \frac{-2E}{ae'^2}, \quad \beta = \frac{2Z}{a}, \quad \gamma = \ell(\ell+1). \tag{3.20}$$

Nous nous restreignons aux états liés d'énergie négative E. Cela signifie que le paramètre α est positif. l'équation (3.19) est maintenant comparable à l'équation (2.1) et les expressions suivantes sont alors obtenues :

$$\tilde{\tau}(x) = 2, \quad \sigma(x) = x, \quad \tilde{\sigma}(x) = -\alpha x^2 + \beta x - \gamma. \tag{3.21}$$

Nous sommes en mesure de trouver quatre solutions possibles du polynôme $\pi(x)$ comme suite. Pour ce faire, nous substituons les polynômes donnés par l'équation (3.21) dans l'équation (2.12) et donc le polynôme $\pi(x)$ est obtenu en fonction de k.

$$\pi(x) = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{4\alpha x^2 + (k-\beta)x + 1 + 4\gamma}. \tag{3.22}$$

l'équation de la forme quadratique sous le signe de la racine carrée de l'équation (3.22) doit être résolue en fixant le discriminant de ce quadratique égale à zéro, i.e. $\Delta = b^2 - 4ac$. Ce discriminant donne une nouvelle l'équation qui peut être résolue pour que la constante k obtienne les deux racines :

$$\Delta = 16(k-\beta)^2 - 16\alpha(1+4\gamma) = 0, \tag{3.23}$$

$$k^2 - 2k\beta + \beta^2 - \alpha(1+4\gamma) = 0, \tag{3.24}$$

$$k\pm = \beta \pm \sqrt{\alpha(1+4\gamma)}. \tag{3.25}$$

Lorsque les deux valeurs de k données dans l'équation (3.25), sont substituées dans l'équation (3.22), les quatre formes possibles de $\pi(x)$ sont obtenues comme suit :

$$\pi(x) = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\begin{cases} (2\sqrt{\alpha}x + \sqrt{1+4\gamma}), & \text{Si} \quad k_+ = \beta + \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} \\ (2\sqrt{\alpha}x - \sqrt{1+4\gamma}), & \text{Si} \quad k_- = \beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)}. \end{cases} \tag{3.26}$$

Afin que la dérivée du polynôme $\tau(x)$ soit négative, nous devons sélectionner la forme la plus appropriée du polynôme $\pi(x)$. Par conséquent, l'expression la plus appropriée de $\pi(x)$ est choisie comme suit :

$$\pi(x) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}(2\sqrt{\alpha}x - \sqrt{1+4\gamma}), \tag{3.27}$$

pour $k_- = \beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)}$. En utilisant $\pi(x)$ de l'équation (3.27) et sachant que $\tilde{\tau}(x) = 2$, $\tau(x)$ est donné par l'expression :

$$\tau(x) = 1 + \sqrt{1+4\gamma} - 2\sqrt{\alpha}x, \tag{3.28}$$

et la dérivée de cette expression serait négative, i.e. $\tau^{'}(x) = -2\sqrt{\alpha} < 0$. Les expressions $\lambda = k_- + \pi^{'}(x)$ et $\lambda_n = -n\tau^{'}(x) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma^{''}(x)$ dans l'équation (2.34) sont obtenus comme suit :

$$\lambda = \beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} - \sqrt{\alpha}, \tag{3.29}$$

$$\lambda_n = 2n\sqrt{\alpha}. \tag{3.30}$$

Lorsque nous comparons ces expressions, $\lambda = \lambda_n$, nous pouvons obtenir l'énergie de l'atome de type hydrogène :

$$\beta - \sqrt{\alpha(1+4\gamma)} - \sqrt{\alpha} = 2n\sqrt{\alpha}. \tag{3.31}$$

$$\sqrt{\alpha}(1+2n+\sqrt{1+4\gamma}) = \beta. \tag{3.32}$$

$$\alpha = \frac{\beta^2}{(1+2n+\sqrt{1+4\gamma})^2}. \tag{3.33}$$

$$-\frac{2E_{n\ell}}{ae'^2} = \frac{(2Z/a)^2}{\left(1+2n+\sqrt{1+4\ell(\ell+1)}\right)^2}. \tag{3.34}$$

$$E_{n\ell} = -\frac{Z^2\mu e'^4}{2\hbar^2(1+n+\ell)^2}, \tag{3.35}$$

rappelant les quantités données dans l'équation (3.20), Ici $n \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$ et ℓ sont des entiers et nous définissons maintenant un nouveau entier n_p, appelé nombre quantique principal, par :

$$n_p = n + \ell + 1, \quad n_p = 1, 2, 3\ldots \tag{3.36}$$

Le nombre quantique ℓ doit satisfaire $\ell \leq n_p - 1$ et donc compris entre 0 et $n_p - 1$. Alors l'équation (3.35) devient :

$$E_{n_p} = -\frac{Z^2\mu e'^4}{2n_p^2\hbar^2}, \tag{3.37}$$

Cette expression représente les niveaux d'énergie aux états liés de l'atome de type hydrogène, et ces niveaux d'énergie sont discret. Trouvons maintenant les fonctions propres radiales. La solution polynômiale de la fonction de type hypergéométrique $y_n(x)$ dépend de la détermination de la fonction poids $\rho(x)$. Ainsi, en utilisant l'équation (2.3), nous obtenons :

$$\frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)} = \frac{d\varphi(x)}{d(x)}\frac{1}{\varphi(x)} = \frac{-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}(2\sqrt{\alpha}x - \sqrt{1+4\gamma})}{x}, \tag{3.38}$$

$$\frac{d\varphi(x)}{d(x)}\frac{1}{\varphi(x)} = \frac{-1+\sqrt{1+4\gamma}}{2x} - \sqrt{\alpha}, \tag{3.39}$$

$$\int \frac{d\varphi(x)}{\varphi(x)} = \int \left(\frac{-1+\sqrt{1+4\gamma}}{2x} - \sqrt{\alpha}\right) dx, \tag{3.40}$$

$$\log\varphi(x) = \frac{-1+\sqrt{1+4\gamma}}{2}\log x - \sqrt{\alpha}x, \tag{3.41}$$

$$\varphi(x) = x^{\frac{-1+\sqrt{1+4\gamma}}{2}} e^{-\sqrt{\alpha}x}, \tag{3.42}$$

$$\varphi(x) = x^{\ell} e^{-\sqrt{\alpha}x}, \tag{3.43}$$

où $\sqrt{1+4\gamma} = \sqrt{1+4\ell(\ell+1)} = 2(\ell+1/2)$ et $\sqrt{\alpha} = Z\mu e^{'2}/h^2 n_p$. D'autre part, pour trouver une solution $y_n(x)$, nous devons d'abord obtenir la fonction poids $\rho(x)$, qui est déjà substituée dans l'équation (2.37),qui peut être écrite sous une forme plus simple et obtenue par :

$$\frac{d\rho(x)}{d(x)}\frac{1}{\rho(x)} = \frac{\tau(x) - \sigma^{'}(x)}{\sigma(x)} = \frac{1+\sqrt{1+4\gamma} - 2\sqrt{\alpha}x - 1}{x}, \tag{3.44}$$

$$\frac{d\rho(x)}{d(x)}\frac{1}{\rho(x)} = \frac{\sqrt{1+4\gamma}}{x} - 2\sqrt{\alpha}, \tag{3.45}$$

$$\int \frac{d\rho(x)}{\rho(x)} = \int \left(\frac{\sqrt{1+4\gamma}}{x} - 2\sqrt{\alpha}\right) dx, \tag{3.46}$$

$$\log \rho(x) = \sqrt{1+4\gamma}\log x - 2\sqrt{\alpha}x, \tag{3.47}$$

$$\rho(x) = x^{\sqrt{1+4\gamma}} e^{-2\sqrt{\alpha}x}. \tag{3.48}$$

La substitution de $\rho(x)$ dans l'équation (2.48) permet d'obtenir le polynôme $y_n(x)$ comme suit :

$$y_n(x) = B_n e^{2\sqrt{\alpha}x} x^{-\sqrt{1+4\gamma}} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-2\sqrt{\alpha}x} x^{n+\sqrt{1+4\gamma}}\right). \tag{3.49}$$

On sait que d'après la formule de *Rodrigues* les polynômes de *Laguerre* vérifient :

$$L_n^{\delta}(x) = \frac{1}{n!} e^{x} x^{\delta} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^{n+\delta}\right), \tag{3.50}$$

c'est-à-dire

$$L_n^{2\ell+1}(2\sqrt{\alpha}x) = \frac{1}{n!} e^{2\sqrt{\alpha}x} x^{-(2\ell+1)} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-2\sqrt{\alpha}x} x^{n+2\ell+1}\right). \tag{3.51}$$

l'équation :

$$y_n(x) = B_n e^{2\sqrt{\alpha}x} x^{\delta} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-2\sqrt{\alpha}x} x^{n+\delta}\right),$$

où $\delta = \sqrt{1+4\ell(\ell+1)}/2 = 2\ell+1$. Ce qui donne $y_n(x) = L_n^{2\ell+1}(2\sqrt{\alpha}x)$, pour $B_n = \frac{1}{n!}$.

En utilisant $\psi(x) = \varphi(x) y_n(x)$, on a :

$$\psi_{n\ell}(x) = C_{n\ell} x^{\ell} e^{-2\sqrt{\alpha}x} L_n^{2\ell+1}(2\sqrt{\alpha}x), \tag{3.52}$$

où $C_{n\ell}$ est une constante de normalisation et $\psi_{n\ell}(x)$ la fonction d'onde radiale $R_{n\ell}(r)$ par la transformation $x \to r$.

Pour plus de détails concernant ces deux problèmes étudiés ici dans ce chapitre ainsi que toutes les notions utilisées voir [1] et [6].

CONCLUSION

Dans ce mémoire, nous avons présentées et étudiées la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$ pour résoudre des équations différentielles linéaires du second ordre du type hypergéométrique. Nous l'avons donné dans sa forme générale et nous avons essayé présenter quelques propriétés générales des polynômes orthogonaux classiques (polynômes de $Jacobi$, de *Laguerre* et d'$Hermite$). qui sont souvent appelés les fonctions spéciales de la physique mathématique.

Enfin, par des applications bien choisis, nous allons appliquées cette méthode, la méthode de $Nikiforov - Ouvarov$, pour résoudre l'équation de *Schrödinger*, pour deux types de potentiels : l'oscillateur harmonique et le potentiel $Coulombien$.

BIBLIOGRAPHIE

[1] A. NIKIFOROV, V. OUVAROV. Fonctions spéciales de la physique mathématique. OPU, office des publications universitaire, place centrale de Ben Aknoun (Alger).

[2] W. F. Trench. Elementary Differential Equations with Boundary Value Problems, (2013). Faculty Authored and Edited Books and CDs. 9. https ://digitalcommons.trinity.edu/mono/9.

[3] W. E. Boyce, R. C. Diprima : Equations différentielles, MC Graw-HIll, ISBN : 0-471-31999-6, pp218-222, 2001.

[4] W.W. BELL. Special functions for scientists and engineers, D.Van nostrand company LTD. LONDON.

[5] Elie Belorizky : Outils mathématiques à l'usage des scientifiques et ingénieurs, EDP sciences, 2007.

[6] M. R. Pahlavani : Theoretical Concepts of Quantum Mechanics, Ch 11, Application of the Nikiforov-Uvarov Method in Quantum Mechanics, C. Berkdemir. InTech Europe University Campus Step Rislavka Krautzeka 83/A 51000 Rijeka, Croatia