

PREMIER MINISTRE

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE

9.0

CALCUL DES VALEURS PROPRES $\lambda_{mn}^{(c)}$
DE L'EQUATION SPHEROIDALE

par

Jeanne-Marie DUFOUR

Centre d'Etudes de Limeil

Rapport CEA - R - 3711

1969

Da

SERVICE CENTRAL DE DOCUMENTATION DU C.E.A

C.E.N. - SACLAY B.P. n°2, 91 - GIF-sur-YVETTE - France

CEA-R-3711 - DUFOUR Jeanne-Marie

CALCUL DES VALEURS PROPRES $\lambda_{mn}(c)$ DE L'EQUATION SPHEROIDALE

Sommaire. - L'objet de ce rapport est de rechercher avec une très bonne approximation, une valeur propre $\lambda_{mn}(c)$ de l'équation différentielle sphéroïdale :

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{du}{dz} \right] + \left[\lambda - c^2 z^2 - \frac{m^2}{1 - z^2} \right] u = 0$$

obtenue par séparation des 3 variables de l'équation des ondes :

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

en coordonnées des ellipsoïdes de révolution allongés ou aplatis.

./.

CEA-R-3711 - DUFOUR Jeanne-Marie

CALCULATION OF PROPER VALUES $\lambda_{mn}(c)$ OF THE SPHEROIDAL EQUATION

Summary. - The aim of this report is to find, with a fair accuracy, a proper value $\lambda_{mn}(c)$ for the spheroidal differential equation :

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{du}{dz} \right] + \left[\lambda - c^2 z^2 - \frac{m^2}{1 - z^2} \right] u = 0$$

obtained by the separation of the three variables of the wave equation :

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

with rotational elongated or flattened ellipsoidal coordinates.

./.

Le programme établi calcule $\lambda_{mn}(c)$ quel que soit le jeu (mnc) choisi dans le domaine $0 \leq |m| \leq 10$ entier ; $|m| \leq n \leq 20$, n entier ; $0 \leq |c| \leq 30$; alors que les études précédentes portaient sur un domaine plus restreint. La fonction à résoudre par la méthode d'approximation du type NEWTON-RAPHSON et la valeur initiale, sont choisies de façon à converger vers la solution désirée.

1969

43 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

The program drawn up calculates $\lambda_{mn}(c)$ for any values of (mnc) chosen in the zones $0 \leq |m| \leq 10$, a whole number ; $|m| \leq n \leq 20$, n a whole number ; $0 \leq |c| \leq 30$; previous work has covered a smaller field of values. The function to be solved by the approximation method of the NEWTON-RAPHSON type, and the initial value, are chosen so as to converge towards the required solution.

1969

43 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

A partir de 1968, les rapports CEA sont classés selon les catégories qui figurent dans le plan de classification ci-dessous et peuvent être obtenus soit en collections complètes, soit en collections partielles d'après ces catégories.

Ceux de nos correspondants qui reçoivent systématiquement nos rapports à titre d'échange, et qui sont intéressés par cette diffusion sélective, sont priés de se reporter à la lettre circulaire CENS/DOC/67/4690 du 20 décembre 1967 que nous leur avons adressée, et qui précise les conditions de diffusion.

A cette occasion nous rappelons que les rapports CEA sont également vendus au numéro par la Direction de la Documentation Française, 31, quai Voltaire, Paris 7^e.

- Rapport CEA-R-3711 -

PLAN DE CLASSIFICATION

- | | |
|---|--|
| 1. APPLICATIONS INDUSTRIELLES DES ISOTOPES ET DES RAYONNEMENTS | 8. PHYSIQUE |
| 2. BIOLOGIE ET MEDECINE | 8. 1 Accélérateurs |
| 2. 1 Biologie générale | 8. 2 Electricité, électronique, détection des rayonnements |
| 2. 2 Indicateurs nucléaires en biologie | 8. 3 Physique des plasmas |
| 2. 3 Médecine du travail | 8. 4 Physique des états condensés de la matière |
| 2. 4 Radiobiologie et Radioagronomie | 8. 5 Physique corpusculaire à haute énergie |
| 2. 5 Utilisation des techniques nucléaires en médecine | 8. 6 Physique nucléaire |
| 3. CHIMIE | 8. 7 Electronique quantique, lasers |
| 3. 1 Chimie générale | 9. PHYSIQUE THEORIQUE ET MATHÉMATIQUES |
| 3. 2 Chimie analytique | 10. PROTECTION ET CONTROLE DES RAYONNEMENTS. TRAITEMENT DES EFFLUENTS |
| 3. 3 Procédés de séparation | 10. 1 Protection sanitaire |
| 3. 4 Radiochimie | 10. 2 Contrôle des rayonnements |
| 4. ETUDES DU DOMAINE DE L'ESPACE | 10. 3 Traitement des effluents |
| 5. GEOPHYSIQUE, GEOLOGIE, MINÉRALOGIE ET MÉTÉOROLOGIE | 11. SÉPARATION DES ISOTOPES |
| 6. MÉTAUX, CÉRAMIQUES ET AUTRES MATÉRIAUX | 12. TECHNIQUES |
| 6. 1 Fabrication, propriétés et structure des matériaux | 12. 1 Mécanique des fluides - Techniques du vide |
| 6. 2 Effets des rayonnements sur les matériaux | 12. 2 Techniques des températures extrêmes |
| 6. 3 Corrosion | 12. 3 Mécanique et outillage |
| 7. NEUTRONIQUE, PHYSIQUE ET TECHNOLOGIE DES RÉACTEURS | 13. UTILISATION ET DÉVELOPPEMENT DE L'ÉNERGIE ATOMIQUE |
| 7. 1 Neutronique et physique des réacteurs | 13. 1 Centres d'études nucléaires, laboratoires et usines |
| 7. 2 Refroidissement, protection, contrôle et sécurité | 13. 2 Divers (documentation, administration, législation, etc...) |
| 7. 3 Matériaux de structure et éléments classiques des réacteurs | 14. ETUDES ÉCONOMIQUES ET PROGRAMMES |

Centre d'Etudes de Limeil
Service de Mathématiques Appliquées
Section "Calcul Spéciaux"

CALCUL DES VALEURS PROPRES $\lambda_{mn}(c)$
DE L'EQUATION SPHEROIDALE

par

Jeanne-Marie DUFOUR

Thèse présentée au Conservatoire National des Arts et Métiers
pour obtenir le diplôme d'Ingénieur C.N.A.M.
spécialité : CALCUL AUTOMATIQUE
option : Calcul Scientifique

- Mai 1969 -

Les rapports du COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE sont, à partir du n° 2200, en vente à la Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VII^e.

The C.E.A. reports starting with n° 2200 are available at the Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VII^e.

Avant d'exposer ce travail, je tiens à exprimer ma reconnaissance à Messieurs les Professeurs du Conservatoire National des Arts et Métiers de PARIS, notamment à Messieurs NAMIAN, PARODI et SALMON, et ceux du centre associé de SACLAY, Messieurs BAGLIN et DELOBEAU pour l'excellent enseignement qu'ils m'ont dispensé pendant mes années d'études.

J'adresse mes vifs remerciements :

A Monsieur le Professeur HOCQUENGHEM, pour les stimulantes discussions sur ce sujet.

A Monsieur GUILLOUD, Chef du service de "MATHEMATIQUES APPLIQUEES", Messieurs FIGEAC et ZEMBRI qui m'ont permis d'effectuer ce travail dans le cadre de mes activités professionnelles.

A Monsieur SALVY, qui m'a confié la partie calcul numérique des problèmes de physique nucléaire faisant intervenir les fonctions sphéroïdales, pour les excellents conseils prodigués.

A toutes les personnes qui par leur travail m'ont permis de réaliser cette étude, en particulier à Madame MIT qui s'est aimablement chargée de la présentation définitive de mon mémoire.

CALCUL DES VALEURS PROPRES $\lambda_{mn}(c)$ DE L'EQUATION SPHEROÏDALE

INTRODUCTION

Par séparation des 3 variables de l'équation des ondes $\Delta u + k^2 u = 0$, en coordonnées des ellipsoïdes de révolution allongés ou aplatis, on obtient l'équation différentielle sphéroïdale :

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{du}{dz} \right] + \left[\lambda - c^2 z^2 - \frac{m^2}{1 - z^2} \right] u = 0$$

du type de STURM-LIOUVILLE où λ , m et c sont des constantes.

Elle admet des solutions uniformes et finies aux pôles $z = \pm 1$ du système sphéroïdal, pour une suite discrète, illimitée de valeurs propres $\lambda_{mn}(c)$, n étant le rang d'une valeur propre, tel que :

$$\left| \lambda_{mm}(c) \right| < \left| \lambda_{m,m+1}(c) \right| < \dots < \left| \lambda_{mn}(c) \right| < \left| \lambda_{m,n+1}(c) \right| < \dots$$

L'objet de ce mémoire est de calculer avec une très bonne approximation, une valeur propre $\lambda_{mn}(c)$, quel que soit le jeu (m , n , c) choisi dans le domaine :

$$(1) \quad \begin{cases} 0 \leq |m| \leq 10 & m \text{ entier} \\ |m| \leq n \leq 20 & n \text{ entier} \\ 0 \leq |c| \leq 30 \end{cases}$$

Des études ont été faites pour calculer $\lambda_{mn}(c)$ mais dans des domaines plus restreints [1] et bien souvent par continuité [4] sur c , partant du fait que lorsque $c = 0$, l'équation sphéroïdale se réduit à l'équation de LEGENDRE associée :

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{du}{dz} \right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1 - z^2} \right] u = 0$$

qui admet pour valeurs propres $\lambda_{mn}(c) = n(n+1) \quad n \geq m$.

Le programme que nous avons établi, permet aisément de dresser des tables dans tout ce domaine, mais est surtout intéressant sous forme de sous-programme pour la résolution de problèmes physiques lorsque les paramètres varient.

I - EQUATION SPHEROIDALE

1° - Séparation des variables de l'équation d'onde scalaire dans les systèmes de coordonnées sphéroïdales

Dans un système de coordonnées curvilignes orthogonales (u, θ, φ), l'équation d'onde scalaire :

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(u, \theta, \varphi) = 0$$

avec :

$$\psi(u, \theta, \varphi) = U(u) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi),$$

s'écrit : (e_u, e_θ, e_φ étant les unités de longueur locale, telles que :

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = e_u^2 du^2 + e_\theta^2 d\theta^2 + e_\varphi^2 d\varphi^2$$

$$e_u^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u}\right)^2, \dots\dots\dots)$$

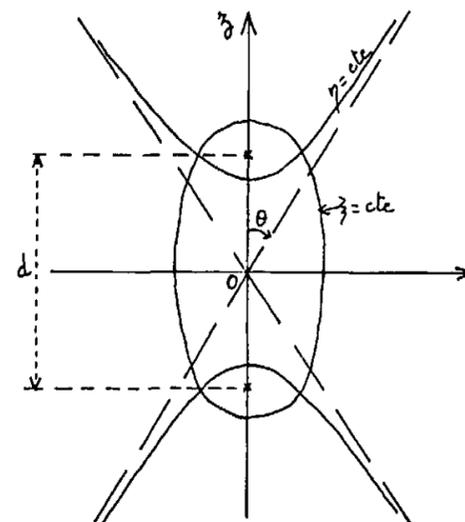
$$\frac{1}{e^2} \frac{U''}{U} + \frac{1}{e_u e_\theta e_\varphi} \frac{U'}{U} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{e_\theta e_\varphi}{e_u} \right) + \frac{1}{e_\theta^2} \frac{\Theta''}{\Theta}$$

$$+ \frac{1}{e_u e_\theta e_\varphi} \frac{\Theta'}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{e_u e_\varphi}{e_\theta} \right) + \frac{1}{e_\varphi^2} \frac{\Phi''}{\Phi} + \frac{1}{e_u e_\theta e_\varphi}$$

$$\frac{\Phi'}{\Phi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{e_u e_\theta}{e_\varphi} \right) + k^2 = 0$$

Les systèmes de coordonnées sphéroïdales : ellipsoïdes de révolution allongés ou aplatis, sont formés par la rotation d'un système de coordonnées elliptiques à 2 dimensions consistant en ellipses et hyperboles confocales, autour du grand ou du petit axe des ellipses. On a l'habitude de noter Oz, l'axe de révolution et d la distance focale.

a) Ellipsoïde de révolution allongé



Les coordonnées sont reliées aux coordonnées cartésiennes par la transformation :

$$(2) \begin{cases} x = \frac{d}{2} \sin \theta \operatorname{sh} u \cos \varphi \\ y = \frac{d}{2} \sin \theta \operatorname{sh} u \sin \varphi \\ z = \frac{d}{2} \cos \theta \operatorname{ch} u \end{cases}$$

On note :

$$\eta = \cos \theta$$

$$\xi = \operatorname{ch} u$$

et :

$$\psi(\eta, \xi, \varphi) = S(\eta) \cdot R(\xi) \cdot \Phi(\varphi)$$

dans le domaine :

$$\begin{cases} 0 \leq \varphi < 2\pi \\ -1 \leq \eta \leq 1 \\ 1 < \xi < \infty \end{cases}$$

En utilisant la méthode habituelle de séparation des variables et en posant :

$$c = \frac{kd}{2}$$

il vient :

$$\frac{(1-\eta^2)(\xi^2-1)}{\xi^2-\eta^2} \left[(\xi^2-1) \frac{R''}{R} + 2\xi \frac{R'}{R} + c^2 \xi^2 + (1-\eta^2) \frac{S''}{S} - 2\eta \frac{S'}{S} - c^2 \eta^2 \right] + \frac{\Phi''}{\Phi} = 0$$

le dernier terme ne dépend que de φ et tous les autres sont indépendants de cette variable, il doit donc être constant, soit :

$$a) \frac{\Phi''}{\Phi} = -m^2$$

m entier, pour invariance par rotation de Φ(φ), fonction uniforme et périodique.

Par suite, en introduisant la constante de séparation λ :

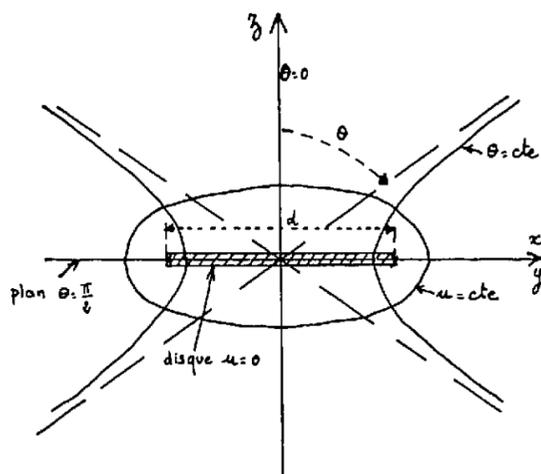
$$\beta) (1 - \eta^2) S'' - 2\eta S' + \left[\lambda - c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] S = 0$$

Fonctions angulaires .

$$\gamma) (\xi^2 - 1) R'' + 2\xi R' + \left[-\lambda + c^2 \xi^2 - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] R = 0$$

Fonctions radiales.

b) Ellipsoïde de révolution aplati



Coordonnées cartésiennes :

$$(3) \begin{cases} x = \frac{d}{2} \sin \theta \operatorname{ch} u \cos \varphi \\ y = \frac{d}{2} \sin \theta \operatorname{ch} u \sin \varphi \\ z = \frac{d}{2} \cos \theta \operatorname{sh} u \end{cases}$$

On notera :

$$\eta = \cos \theta$$

$$\xi = \operatorname{sh} u$$

et :

$$\psi(\eta, \xi, \varphi) = \mathcal{Y}(\eta) \cdot \mathcal{R}(\xi) \cdot \Phi(\varphi)$$

dans le domaine :

$$\begin{cases} 0 \leq \varphi < 2\pi \\ -1 \leq \eta \leq 1 \\ 0 < \xi < \infty \end{cases}$$

En procédant comme précédemment, on a :

$$\alpha) \frac{\xi''}{\xi} = -m^2 \quad m \text{ entier}$$

$$\beta) (1 - \eta^2) \mathcal{Y}'' - 2\eta \mathcal{Y}' + \left[\lambda + c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \mathcal{Y} = 0$$

$$\gamma) (\xi^2 + 1) \mathcal{R}'' + 2\xi \mathcal{R}' + \left[-\lambda + c^2 \xi^2 + \frac{m^2}{\xi^2 + 1} \right] \mathcal{R} = 0$$

On remarque que :

$$\mathcal{Y}_{\lambda, m}(c, \eta) = S_{\lambda, m}(-ic, \eta)$$

$$\mathcal{R}_{\lambda, m}(c, \xi) = R_{\lambda, m}(-ic, i\xi)$$

En effet :

- on passe des coordonnées de l'ellipsoïde allongé (2) à celles de l'ellipsoïde aplati (3) en remplaçant u par $u + i\frac{\pi}{2}$, x, y, z étant remplacés par ix, iy, iz .

$\operatorname{ch}(u + i\frac{\pi}{2}) = i \operatorname{sh} u$ correspondant à la transformation $\xi \rightarrow i\xi$.

- on passe de l'équation sphéroïdale à l'équation de BESSEL sphérique, en posant $c\xi = t$ puis faisant $c \rightarrow 0$. Pour satisfaire ce comportement, on retiendra la transformation c en $-ic$ des 2 possibilités $\pm ic$.

Ainsi, $S, R, \mathcal{Y}, \mathcal{R}$ sont solutions d'une même équation, l'équation sphéroïdale :

$$\frac{d}{dz} \left[(1 - z^2) \frac{du}{dz} \right] + \left[\lambda - c^2 z^2 - \frac{m^2}{1 - z^2} \right] u = 0$$

moynnant certaines restrictions sur le paramètre c et la variable z

c réel > 0 dans le cas "allongé"

c imaginaire dans le cas "aplatis"

2° - Equation différentielle sphéroïdale

a) Remarques

α - Equation de STURM-LIOUVILLE

Elle possède 2 singularités régulières en ± 1

et 1 singularité irrégulière pour $z = \infty$

Les solutions sous forme de développements en séries convergentes n'existent que pour un ensemble infini de λ_{mn} , valeurs propres, fonctions de c^2 .

β - Pour $c = 0$ ($d = 0$) système de coordonnées sphériques, l'équation définit

les fonctions associées de LEGENDRE.

b) Fonctions angulaires de première espèce $S_{mn}^{(1)}(c, \eta)$ finies en $\eta = \pm 1$

Elles sont solutions de :

$$(4) \quad [\mathcal{L}_{\eta}(c) + \lambda] S_{mn}^{(1)}(c, \eta) = 0$$

avec :

$$\mathcal{L}_{\eta}(c) = \frac{d}{d\eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \right] - (c^2 \eta^2 + \frac{m^2}{1 - \eta^2})$$

Remarque : Les fonctions associées de LEGENDRE de 1ère espèce, solutions de :

$$(5) \quad [\mathfrak{L}_\eta (c=0) + n(n+1)] P_n^m(\eta) = 0$$

possèdent le même type de singularité en $\eta = \pm 1$, et forment de plus un système complet pour m fixé entier $n \geq |m|$, liées par les relations de récurrence :

$$(2n+1)z P_n^m(z) = (n+m) P_{n-1}^m(z) + (n-m+1) P_{n+1}^m(z)$$

et :

$$z^2 P_n^m(z) = \frac{(n-m+1)(n-m+2)}{(2n+1)(2n+3)} P_{n+2}^m(z) + \frac{2n(n+1) - 2m^2 - 1}{(2n-1)(2n+3)} P_n^m(z) + \frac{(n+m-1)(n+m)}{(2n-1)(2n+1)} P_{n-2}^m(z)$$

On cherche donc une solution de la forme :

$$S_{mn}^{(1)}(c, \eta) = \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{mn}(c) P_{m+r}^m(\eta)$$

notation de FLAMMER [1] :

$\sum_{r=0,1}^{\infty}$ indique que la sommation sera faite seulement
- sur les valeurs paires de r si $(n-m)$ est pair
- sur les valeurs impaires de r si $(n-m)$ est impair

pour satisfaire :

$$S_{mn}^{(1)}(0, \eta) = P_n^m(\eta)$$

En reportant dans (4) et en tenant compte de (5), il vient :

$$[\mathfrak{L}_\eta (c=0) - c^2 \eta^2 + \lambda] \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{mn}(c) P_{m+r}^m(\eta) = 0$$

$$\sum_{r=0,1}^{\infty} [-(m+r)(m+r+1) - c^2 \eta^2 - \lambda] d_r^{mn}(c) P_{m+r}^m(\eta) = 0$$

Utilisant les relations de récurrence et égalant à zéro les coefficients d'un même $P_{m+r}^m(\eta)$, on obtient la relation de récurrence liant 3 coefficients $d_r^{mn}(c)$ consécutifs :

$$(6) \quad \frac{r(r-1)}{(2m+2r-3)(2m+2r-1)} c^2 d_{r-2}^{mn} + [(m+r)(m+r+1) - \lambda_{mn}(c^2)] d_r^{mn} + \frac{2(m+r)(m+r+1) - 2m^2 - 1}{(2m+2r-1)(2m+2r+3)} c^2 d_{r+2}^{mn} = 0$$

Pour $r \geq 0$, (on notera que $d_{-1}^{mn}(c) = 0$ pour $r = 1$
ou $d_{-2}^{mn}(c) = 0$ pour $r = 0$).

On peut la mettre sous la forme :

$$(7) \quad d_{r+2} + a(r) d_r + b(r) d_{r-2} = 0$$

avec :

$$a(r) = \frac{(2m+2r+3)(2m+2r+5)}{(2m+r+1)(2m+r+2)} \left[\frac{(m+r)(m+r+1) - \lambda}{d^2} + \frac{2(m+r)(m+r+1) - 2m^2 - 1}{(2m+2r-1)(2m+2r+3)} \right]$$

$$b(r) = \frac{r(r-1)(2m+2r+3)(2m+2r+5)}{(2m+2r-3)(2m+2r-1)(2m+r+1)(2m+r+2)}$$

c) Relation de récurrence à 3 termes et fraction continue

D'après les résultats de la théorie asymptotique des équations aux différences linéaires [7], on établit la convergence de la fraction continue correspondant à la relation de récurrence à 3 termes précédente (4) du type :

$$\begin{cases} y_{r+2} + a(r) y_r + b(r) y_{r-2} = 0 \\ r = 2, 4, \dots, (2p), \dots \\ \text{ou } 3, 5, \dots, (2p+1), \dots \end{cases} \quad \text{suivant la parité de } (n-m)$$

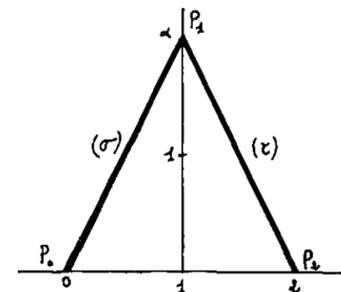
$b(r) \neq 0$

Quand $r \rightarrow \infty$ $a(r) \sim \frac{4}{c^2} r^2$ du type Ar^α avec $A = \frac{4}{c^2}$; $\alpha = 2$

$b(r) \rightarrow 1$ du type Br^β avec $B = 1$; $\beta = 0$
 A et $B \neq 0$ α, β réels.

Une généralisation du théorème de POINCARÉ, due à PERRON et KREUSER, permet de déterminer la structure asymptotique des solutions à l'aide du diagramme de NEWTON-PUISEUX, formé par les points :

$$P_0(0, 0), P_1(1, \alpha), P_2(2, \beta)$$



P_1 étant au-dessus de la droite joignant P_0 et P_2 , ce diagramme est constitué par la ligne brisée $\overline{P_0 P_1 P_2}$.

Désignons par :

. σ la pente de $\overline{P_0 P_1}$ $\sigma = 2 = \alpha$
. τ la pente de $\overline{P_1 P_2}$ $\tau = -2 = \beta - \alpha$

THEOREME (PERRON, KREUSER)

Si le point P_1 est au-dessus du segment de droite $\overline{P_0 P_2}$ (c'est à dire $\sigma > \tau$), l'équation aux différences a 2 solutions linéairement indépendantes $y_{r,1}$ et $y_{r,2}$, pour lesquelles :

$$\frac{y_{r+2,1}}{y_{r,1}} \sim -Ar^\sigma ; \quad \frac{y_{r+2,2}}{y_{r,2}} \sim -\frac{B}{A} r^\tau \quad \text{quand } r \rightarrow \infty$$

et la solution $f_r = y_{r,2}$ est une solution minimale.

$$\left(\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{y_{r,2}}{y_{r,1}} = 0 \right)$$

Par application de ce théorème, la relation de récurrence admet 2 solutions linéairement indépendantes $d_{r,1}$ et $d_{r,2}$ pour lesquelles :

$$\underbrace{\frac{d_{r+2,1}}{d_{r,1}} \sim -\frac{4}{c^2} r^2}_{\text{solution dominante}} ; \quad \underbrace{\frac{d_{r+2,2}}{d_{r,2}} \sim -\frac{c^2}{4} r^{-2}}_{\text{solution minimale à l'infini}}$$

Le problème est donc de déterminer cette solution minimale pour que le développement en série converge.

THEOREME DE PINCHERLE

La fraction continue :

$$\frac{b_2}{a_2} - \frac{b_4}{a_4} - \frac{b_6}{a_6} - \dots \quad \text{ou} \quad \frac{b_3}{a_3} - \frac{b_5}{a_5} - \frac{b_7}{a_7} - \dots$$

converge si, et seulement si, la relation de récurrence possède une solution minimale d_r , avec d_0 ou $d_1 \neq 0$.

De plus, en cas de convergence, on a :

$$\frac{d_r}{d_{r-2}} = -\frac{b_r}{a_r} - \frac{b_{r+2}}{a_{r+2}} - \dots \quad r = \begin{cases} 2, 4, 6, \dots (2p) \dots \\ 3, 5, 7, \dots (2p+1) \dots \end{cases}$$

suivant la parité $(n - m)$

Nous pouvons donc exprimer la relation (6) sous forme de fractions continues convergentes.

Posons :

$$N_r^m = \frac{(2m+r)(2m+r-1)}{(2m+2r-1)(2m+2r+1)} c^2 \frac{d_r}{d_{r-2}}$$

En divisant (6) par $d_r^{mn}(c)$, on peut la mettre sous la forme

$$N_{r+2}^m + \gamma_r^m - \lambda_{mn}(c) + \frac{\beta_r^m}{N_r^m} = 0$$

avec :

$$\gamma_r^m = (m+r)(m+r+1) + \frac{2(m+r)(m+r+1) - 2m^2 - 1}{(2m+2r-1)(2m+2r+3)} c^2$$

$$\beta_r^m = \frac{r(r-1)(2m+r)(2m+r-1)}{(2m+2r-1)^2(2m+2r-3)(2m+2r+1)} c^4$$

ou encore :

$$N_r^m = \frac{\beta_r^m}{\lambda - \gamma_r^m - N_{r+2}^m}$$

On pose :

$$(8) \quad N_{r+2}^m = \lambda - \gamma_r^m - \frac{\beta_r^m}{N_r^m} = U_1(\lambda) \quad \text{fraction continue finie.}$$

avec :

$$N_2^m = \gamma_0^m - \lambda_{mn} \quad \text{ou} \quad N_3^m = \gamma_1^m - \lambda_{mn}$$

et :

$$(9) \quad N_{r+2}^m = \frac{\beta_{r+2}^m}{\lambda - \gamma_{r+2}^m - N_{r+4}^m} = U_2(\lambda) \quad \text{fraction continue infinie convergente.}$$

(lim $N_{r+2}^m = 0$)
 $r \rightarrow \infty$)

d'où :

$$U_1(\lambda) = U_2(\lambda) \quad \text{en égalant les 2 rapports.}$$

La valeur propre $\lambda_{mn}(c^2)$ cherchée est donc la $n^{\text{ième}}$ des solutions rangées dans l'ordre de modules croissants, de l'équation transcendante en λ :

$$(10) \quad F_r(\lambda) = U_2(\lambda) - U_1(\lambda) = 0$$

pour m entier fixé et c donné dans le domaine (1).

II - RESOLUTION DE L'EQUATION $F_r(\lambda) = 0$

Diverses méthodes ont été essayées, qui se sont montrées ou peu convergentes ou divergentes et mal adaptées au c complexe.

- approximations successives sur les fractions continues
- parties proportionnelles ou Méthode de NEWTON modifiée
- méthode de partition (sur l'équation séculaire en λ)

1° - Méthode de NEWTON-RAPHSON

La méthode retenue, applicable à tous les types d'équations dont les coefficients intervenant dans le développement de la fonction caractéristique sont liés par une relation de récurrence à 3 termes (équation de MATHIEU [6], équation sphéroïdale d'ordre zéro [5]) est une méthode de NEWTON-RAPHSON qui aboutit à une formule d'itération du second ordre :

$$\lambda_{mn}^{(i+1)} = \lambda_{mn}^{(i)} - \frac{F_r(\lambda_{mn}^{(i)})}{F_r'(\lambda_{mn}^{(i)})}$$

$\lambda_{mn}^{(i)}$ étant le $i^{\text{ième}}$ approximant de la valeur exacte $\lambda_{mn}(c)$ cherchée.

Calculons $F_r'(\lambda) = U_2'(\lambda) - U_1'(\lambda)$

D'après (9) et (8) :

$$U_2'(\lambda) = \frac{dN_{r+2}^m}{d\lambda} = - \frac{(N_{r+2}^m)^2}{\beta_{r+2}^m} \left(1 - \frac{dN_{r+4}^m}{d\lambda} \right)$$

$$= - \frac{(N_{r+2}^m)^2}{\beta_{r+2}^m} \left(1 + \frac{(N_{r+4}^m)^2}{\beta_{r+4}^m} + \frac{(N_{r+4}^m)^2 \cdot (N_{r+6}^m)^2}{\beta_{r+4}^m \cdot \beta_{r+6}^m} + \dots \right)$$

$$U_1'(\lambda) = \frac{dN_r^m}{d\lambda} = 1 + \frac{\beta_r^m}{(N_r^m)^2} \frac{dN_r^m}{d\lambda}$$

$$= 1 + \frac{\beta_r^m}{(N_r^m)^2} + \frac{\beta_r^m \cdot \beta_{r-2}^m}{(N_r^m)^2 \cdot (N_{r-2}^m)^2} + \dots$$

$$(11) \quad \lambda_{mn}^{(i+1)}(c) = \lambda_{mn}^{(i)} + \frac{U_2(\lambda_{mn}^{(i)}) - U_1(\lambda_{mn}^{(i)})}{1 + \frac{\beta_r^m}{(N_r^m)^2} + \frac{\beta_r^m \beta_{r-2}^m}{(N_r^m)^2 (N_{r-2}^m)^2} + \dots + \frac{(N_{r+2}^m)^2}{\beta_{r+2}^m} + \frac{(N_{r+2}^m)(N_{r+4}^m)^2}{\beta_{r+2}^m \beta_{r+4}^m} + \dots}$$

Dénominateur toujours positif, > 1.

2° - Première approximation $\lambda_{mn}^{(1)}(c)$

a) c petit

Ecrivons (10) sous la forme :

$$(12) \quad \lambda = \gamma_r^m + \frac{\beta_r^m}{\lambda - \gamma_{r-2}^m} \frac{\beta_{r-2}^m}{\lambda - \gamma_{r-4}^m} + \dots + \frac{\beta_{r+2}^m}{\lambda - \gamma_{r+2}^m} \frac{\beta_{r+4}^m}{\lambda - \gamma_{r+4}^m} \dots$$

Si $c = 0$, nous savons que $\lambda_{mn}(0) = n(n+1)$ et que le seul terme du développement est $d_{n-m}^m P_n^m$ pour $r = n - m$.

Si c est petit, on fait un développement de $\lambda_{mn}(c)$ en puissance de c^2 :

$$\lambda_{mn}(c) = \sum_k l_{2k}^{mn} c^{2k}$$

En développant les fractions continues en élevant chaque dénominateur partiel jusqu'au numérateur associé par un développement binomial, on obtient :

$$l_0^{mn} = n(n+1)$$

$$l_2^{mn} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(2m-1)(2m+1)}{(2n-1)(2n+3)} \right]$$

$$l_4^{mn} = \frac{1}{2} \left[\frac{\beta_{n-m/c^4}}{2n-1} - \frac{\beta_{n-m+2/c^4}}{2n+3} \right]$$

$$l_6^{mn} = \frac{1}{4} \left[\frac{\beta_{n-m/c^4}}{(2n-1)^2} (\gamma_{n-m-2} - (n-2)(n-1) - l_2) + \frac{\beta_{n-m+2/c^4}}{(2n+3)^2} (\gamma_{n-m+2} - (n+2)(n+3) - l_2) \right]$$

D'autres termes ont été calculés que nous n'utiliserons pas, puisque le développement diverge pour les grandes valeurs de c.

On notera que :

- le développement en séries de puissance, pour les valeurs propres dans le système ellipsoïdal aplati $\lambda_{mn}(-ic)$, est obtenu tout simplement en remplaçant c^2 par $-c^2$.

- ce développement reste valable pour des c relativement grands lorsque n croît suffisamment par rapport à m.

b) c grand

On cherche un développement de la solution en puissance de $\frac{1}{c}$

α - cas ellipsoïdal allongé

Le comportement asymptotique des fonctions "allongées" étudiées par MEIXNER [3], [11] a conduit à la solution suivante :

$$S_{mn}^{(1)}(c, \eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} \sum_{r=-l}^{\infty} h_r^l D_{l+r}(\sqrt{2c} \eta) \quad l = n - m$$

avec :

$$D_r(\chi) = 2^{-\frac{r}{2}} e^{-\frac{\chi^2}{4}} H_r\left(\frac{\chi}{\sqrt{2}}\right) \quad \text{fonction de cylindre parabolique.}$$

En reportant dans l'équation différentielle, comme précédemment, on obtient une formule de récurrence à 5 termes. La valeur approchée de $\lambda_{mn}(c)$ a été calculée par la méthode d'identification (en utilisant, pour λ et les coefficients, des développements en puissance de $\frac{1}{c}$ tronqués aux premiers termes).

$$\lambda_{mn}(c) \sim qc + m^2 - \frac{q^2 + 5}{8} - \frac{q(q^2 + 11 - 32m^2)}{64c} - \frac{5(q^4 + 26q^2 + 21) - 384m^2(q^2 + 1)}{1024c^2} - \left[\frac{33q^5 + 1594q^3 + 5621q}{128^2} - \frac{m^2(37q^3 + 167q)}{128} - \frac{m^4q}{8} \right] \cdot \frac{1}{c^3} + \dots$$

avec $q = 2(n - m) + 1 = 2l + 1$

On notera que cette approximation est d'autant meilleure que m et n sont faibles comparativement à c.

β - cas ellipsoïdal aplati

Pour les fonctions "aplaties", [3], [11], le comportement asymptotique fait intervenir les polynômes associés de LAGUERRE :

$$S_{mn}(-ic, \eta) \sim (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} \sum_{S=-v}^{\infty} A_S^{mn} \left\{ e^{-c(1-\eta)} L_{v+S}^m [2c(1-\eta)] + (-1)^{n-m} e^{-c(1+\eta)} L_{v+S}^m [2c(1+\eta)] \right\}$$

où $v = \frac{1}{2}(n - m)$ si $(n - m)$ pair

$\frac{1}{2}(n - m - 1)$ si $(n - m)$ impair

La relation de récurrence à 3 termes du type de POINCARÉ, exprimée sous forme de fractions continues, permet d'obtenir le développement suivant :

$$\lambda_{mn}(-ic) = -c^2 + 2c(2v + m + 1) - (m + 1) + \sum_{k=1}^{\infty} \beta_k c^{-k}$$

$$\beta_1 = \frac{Q_0^2 - Q_1^2}{4}$$

$$\beta_2 = \frac{Q_0^2 R_{-1} + Q_1^2 R_1}{16}$$

$$\beta_3 = \frac{1}{16} \left[Q_0^2 \left(\frac{R_{-1}^2}{4} - \beta_1 + \frac{Q_{-1}^2}{8} \right) - Q_1^2 \left(\frac{R_1^2}{4} + \beta_1 + \frac{Q_2^2}{8} \right) \right]$$

avec :

$$Q_S = (S + v)(S + v + m)$$

$$R_S = 2S(2v + m + 1 + S)$$

On notera que, comme v est le même pour une valeur paire de $(n - m)$ et la valeur impaire suivante, quand c devient grand, les paires de valeurs propres successives se confondent. Cette fusion intervient d'autant plus rapidement que m et n sont faibles. Néanmoins, pour obtenir leurs valeurs exactes, on cherchera à les dissocier le plus loin possible.

c) m grand - cas ellipsoïdal allongé

ABRAMOWITZ a étudié [12] 2 développements asymptotiques des fonctions sphéroïdales "allongées".

α - m grand et c petit

$$S_{mn}(c, \eta) \sim (1 - \eta^2)^{m/2} \sum_{r=-l}^{\infty} a_{l+r} H_{l+r}(\sqrt{m+1} \eta) \quad l = n - m$$

Nous obtenons pour les premiers termes :

$$\lambda_{mn}(c) \sim (2l + m)(m + 1) + l(l - 1) + \frac{c^2(2l + 1)}{2(m + 1)} + \dots$$

β - m grand et c grand de sorte que $\frac{c}{m+1}$ reste fini

$$S_{mn}(c, \eta) \sim (1 - \eta^2)^{m/2} \cdot e^{\frac{m+1}{2} \eta^2} \sum_{r=-l}^{\infty} b_{l+r} D_{l+r}(2k\sqrt{m+1} \eta)$$

avec :

$$k^4 = \frac{1}{4} \left[1 + \frac{c^2}{(m+1)^2} \right]$$

$$\lambda_{mn}(c) \sim m^2 - 1 - \frac{1}{2} (\ell^2 + \ell - \frac{1}{2}) + (2\ell + 1) \sqrt{(m+1)^2 + c^2} - \frac{(m+1)(2\ell + 1)}{\sqrt{(m+1)^2 + c^2}} + \frac{3}{4} \frac{(2\ell^2 + 2\ell + 1)(m+1)^2}{(m+1)^2 + c^2} + \dots$$

Ce dernier développement reste encore valable lorsque c est faible. Ces 2 dernières approximations ne sont valables également que si l reste faible devant m et c.

3° - Choix de l'approximation initiale $\lambda_{mn}^{(1)}(c)$

a) Comportement des approximations

Les développements précédents donnent de très bonnes valeurs approchées dans certains domaines toutefois mal définis. Leurs rayons de convergence sont actuellement peu ou pas connus, du fait de l'influence des 3 paramètres m, n et c.

SCHAFKE [10] donne quelques résultats sur le développement de $\lambda_{mn}(c)$ en puissance de c^2 , pour c faible. Il estime que :

$$R_{n=0} \geq 6$$

$$R_{n=1} \geq 10$$

$$R_n \geq 4n - 2 \quad n = 2, 3, \dots$$

Le rayon de convergence semble croître avec n et pouvoir se mettre sous la forme :

$$R_n^m = an^2 + b_n + c + o(n^{-1})$$

avec pour $m = 0$: $a = 2,042$, $b = 0,71$, $0 < c < 1,5$. a, b, c étant fonctions de m, a variant peu pour $m \neq 0$.

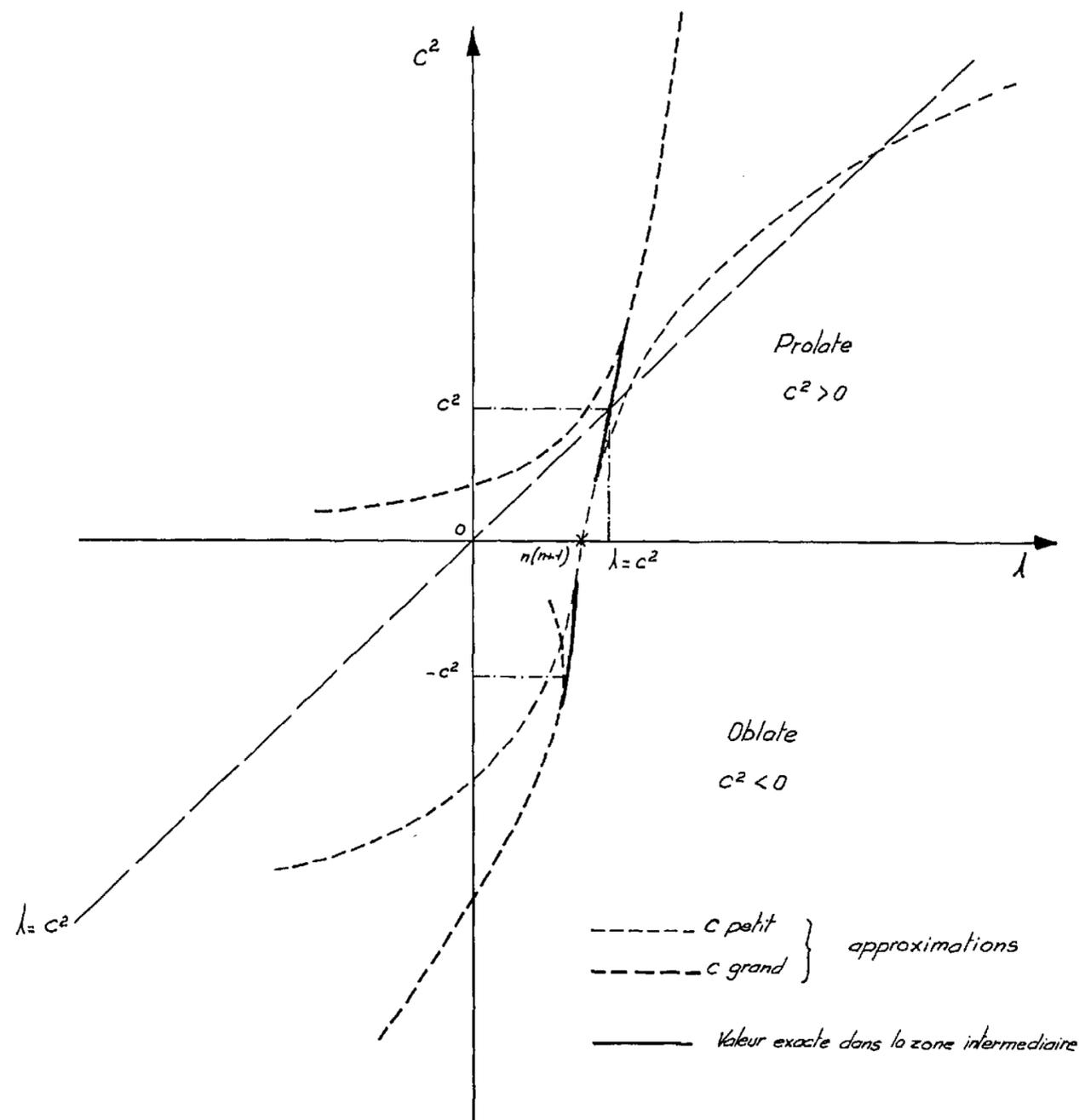
Comme il nous était nécessaire de connaître avec une très grande précision, la valeur $\lambda_{mn}(c)$ pour un jeu (m, n, c) donné dans le domaine (1), et que des approximations pour les valeurs intermédiaires des paramètres n'ont pas été trouvées, nous avons dû raccorder et souvent étendre légèrement les différents domaines où les approximations précédentes étaient certainement valables.

Pour cela, nous avons cherché à déterminer une ligne de coupure entre les 2 domaines principaux, |c| grand et |c| petit, en nous basant sur le comportement de chacun des développements tronqués obtenus, et sur les résultats d'un calcul de $\lambda_{mn}(c)$ par continuité sur c^2 .

(Sachant que pour $c = 0$

$$\lambda = n(n+1) \text{ et } \left(\frac{d\lambda}{dc^2} \right)_{c^2=0} = \frac{\ell}{2} \frac{mn}{2} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{4m^2 - 1}{(2n-1)(2n+3)} \right]$$

puis, par extrapolation, on calcule une valeur d'essai $\tilde{\lambda}_{mn}(c)$.



Comportement des approximations

b) Ligne de séparation $\lambda_{mn}(c^2) = c^2(m, n)$

La disposition des approximations par rapport à la solution exacte suggère de choisir comme ligne de coupure, la droite :

$$\lambda_{mn}(c^2) = c^2 \quad \text{dans la zone } c \text{ "allongé"}$$

Nous avons déterminé par programme les solutions de l'équation $\lambda_{mn}(c) - c^2 = 0$ dans le domaine fixé, par la méthode des parties proportionnelles (jusqu'à $m = 15, n = 25$)

On notera que les racines sont aisément calculables pour $m = 1$. Faisons le changement de fonction :

$$S_{1n}(c, \eta) = (1 - \eta^2)^{-1/2} u_{1n}(\eta) \text{ dans (1)}$$

on obtient :

$$(1 - \eta^2) \frac{d^2 u_{1n}(\eta)}{d\eta^2} + \left[\lambda_{1n} - c^2 \eta^2 \right] u_{1n} = 0$$

Si nous posons :

$$\lambda_{1n} = c^2, \text{ alors : } u_{1n}(\eta) = \begin{cases} \cos c \eta \text{ si } (n - m) \text{ pair} \\ \sin c \eta \text{ si } (n - m) \text{ impair} \end{cases}$$

et comme $S_{1n}(\eta)$ doit être fini à $\eta = \pm 1$, il faut que :

$$c = p \frac{\pi}{2}, \quad p \text{ de la parité de } n.$$

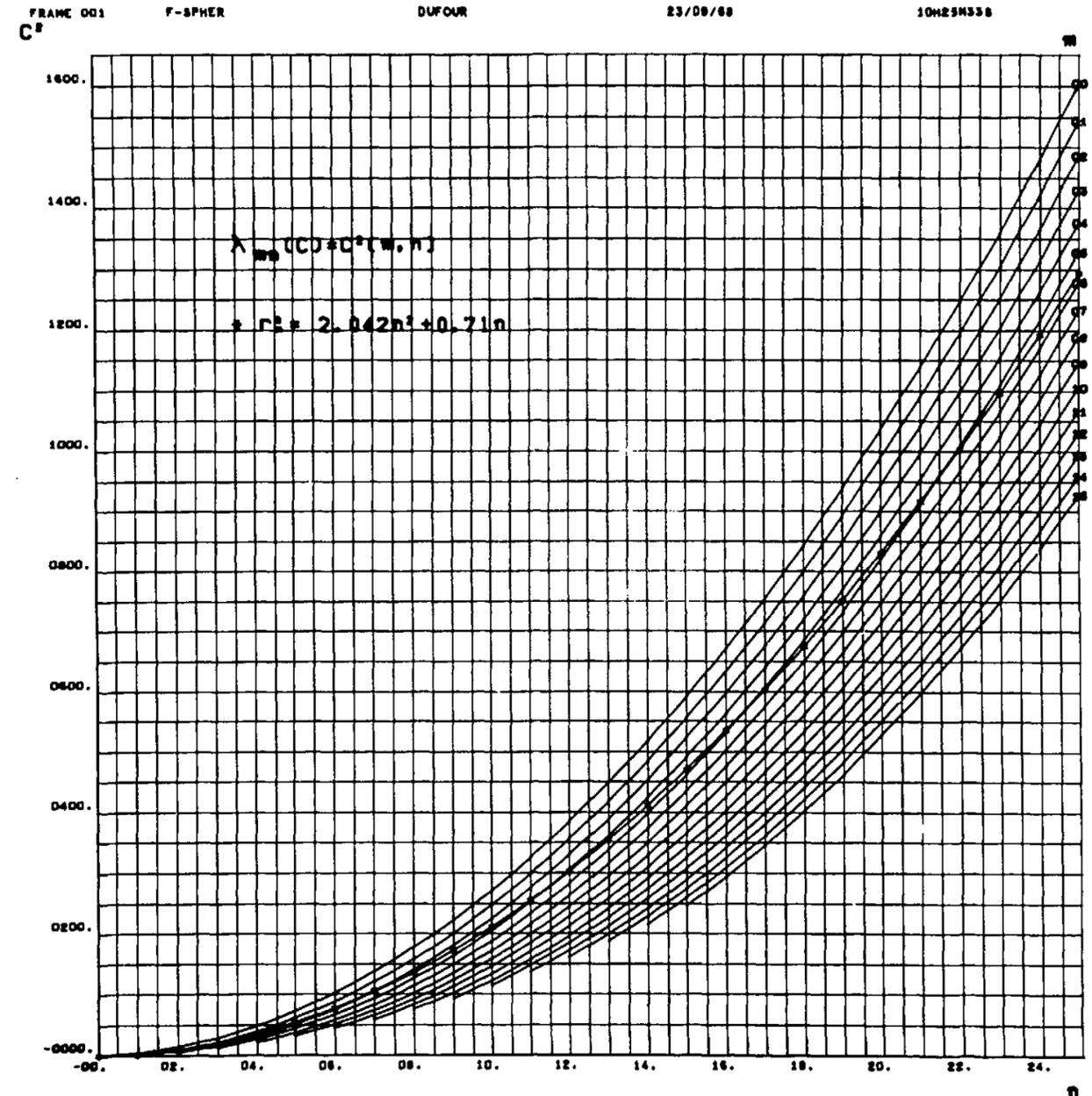
Le réseau de courbes ainsi obtenu a été lissé par la méthode des moindres carrés en développant :

$$\lambda_{mn}(c) = c^2(m, n) = f(m, n)$$

sur les fonctions de base affectées des coefficients contenus dans le tableau suivant :

Fonctions	Coefficients
1	0,45578987
m	- 0,93329024
n	2,0866084
mn	- 2,0937930
m ²	0,68971525
n ²	2,4757559
$\frac{m^2}{mn^2}$	- 0,96920979.10 ⁻²
$\frac{m^2}{n}$	0,96413884.10 ⁻³
$\frac{m^2}{n^2}$	0,41332468.10 ⁻³

(13)



Pour $n = 1$, cela correspond pratiquement à la valeur exacte :

$$\lambda_{1m}(c) = \frac{\pi^2}{4} n^2 = 2,4674011 n^2$$

Les erreurs relatives les plus grandes ($10^{-2} < \epsilon < 10^{-1}$) intervenant pour les petites valeurs de n , m étant fixé, il est inutile de rechercher une précision plus grande qui contribuerait à augmenter le nombre de termes du développement (13).

On remarque que le coefficient de n^2 est légèrement supérieur à celui de SCHAFFKE, pour recouvrir en partie la zone intermédiaire.

Dans la zone, c "aplati" ($c^2 < 0$ sur les courbes) nous avons adopté la même coupure puisque le développement pour les petites valeurs de c est valable en remplaçant c^2 par $-c^2$.

Une difficulté venait du fait que le développement pour les grandes valeurs de c , s'il convenait pour les valeurs propres telles que $n - m = 2l' + 1$, n'était pas suffisamment approché pour les valeurs propres telles que $n - m = 2l'$ et cela entraînait souvent la convergence vers une racine de rang inférieur, $2l' - 2$ généralement.

L'expérience a montré qu'il fallait, quand $(n - m) = 2l'$, calculer une approximation telle que :

$$\tilde{\lambda}_{m, m+2l'-1} < \tilde{\lambda}_{m, m+2l'} \leq \tilde{\lambda}_{m, m+2l'+1}$$

qui tienne compte de ce que $\lambda_{m, m+2l'}$ et $\lambda_{m, m+2l'+1}$ se confondent d'autant plus rapidement que m et n sont faibles.

On a représenté les 2 approximations supérieure et inférieure à la coupure et la solution exacte pour $m = 10$, $10 \leq n \leq 20$ en "allongé" et "aplati".

4° - Choix du $r^{\text{ième}}$ développement de $F_r(\lambda)$

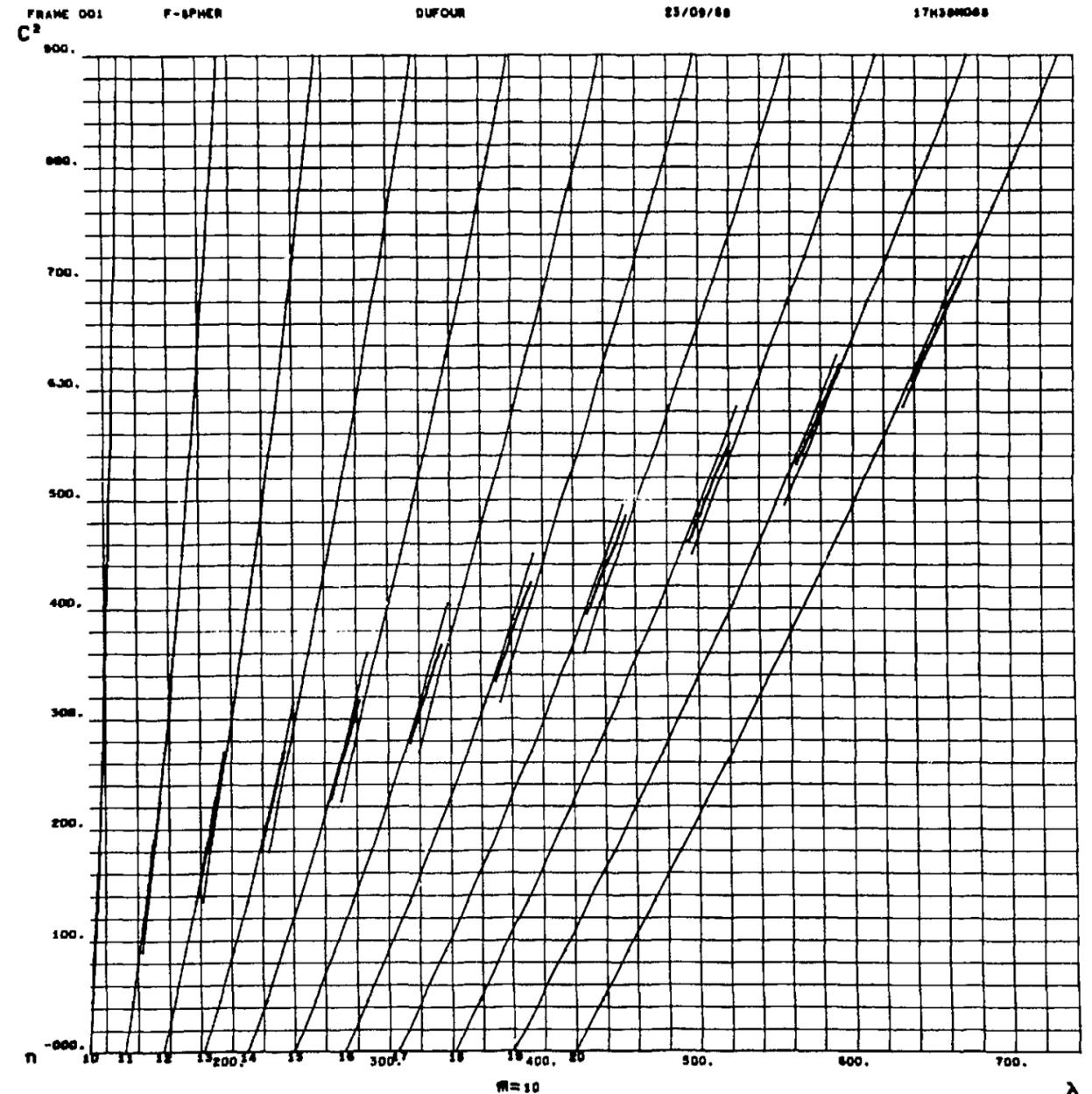
Dans nos essais, nous avons toujours remarqué que la procédure itérative de NEWTON-RAPHSON était convergente. Cependant, nous avons constaté que cette convergence n'allait pas toujours vers la $n^{\text{ième}}$ racine désirée de $F_r(\lambda)$ [8], [9]. Cela arrive particulièrement dans le cas "aplati", même si l'approximation de départ est relativement bonne.

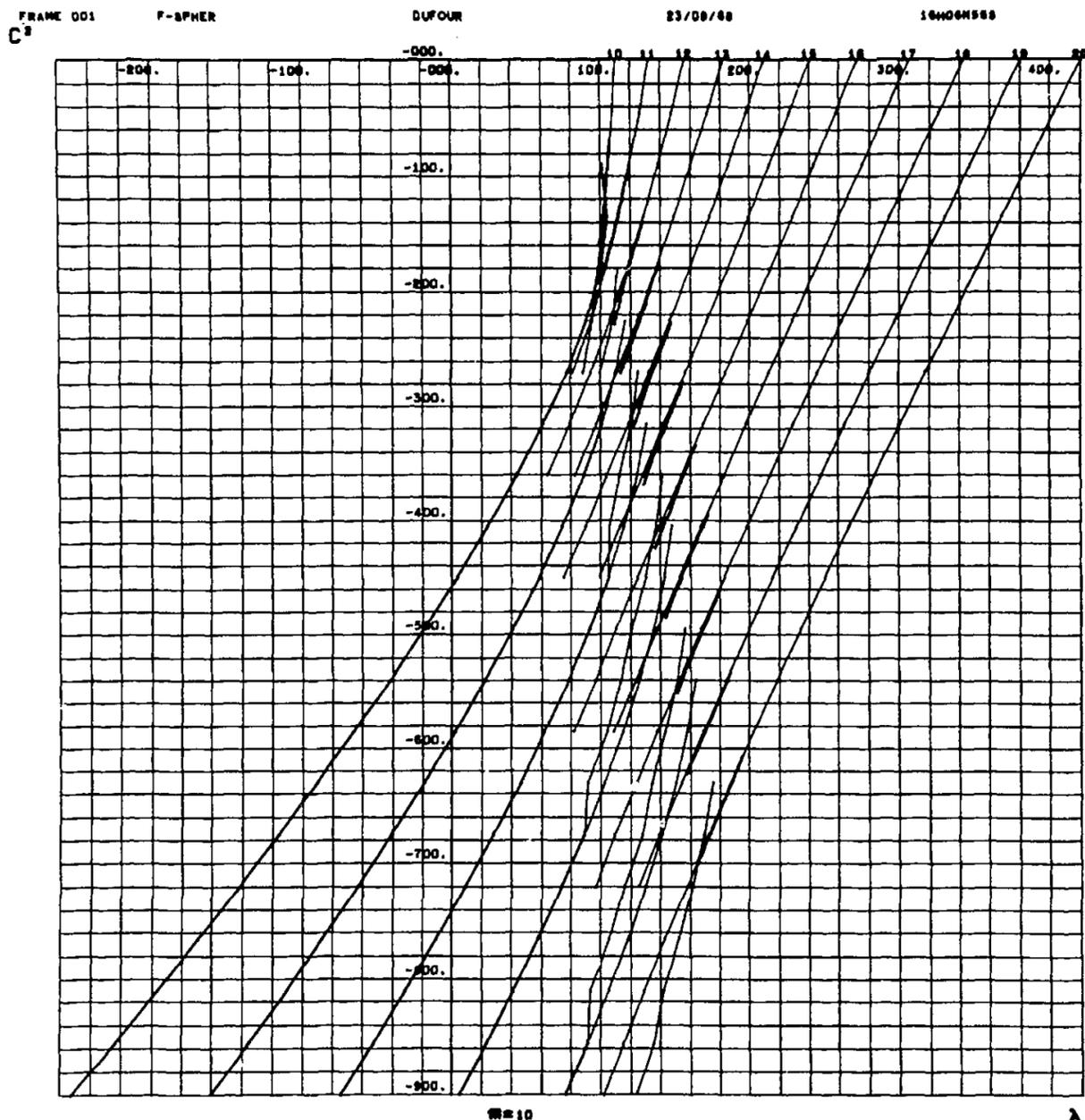
Un autre contrôle possible est le choix du $r^{\text{ième}}$ développement de $F_r(\lambda)$ qui semble fortement dépendant de celui de la première approximation.

Comme le problème possède une infinité de solutions pour m et c donnés, "n" n'apparaissant pas dans la relation (12), il importe de choisir "r" de façon à converger plus sûrement vers la solution désirée.

Il semble évident qu'au moins pour les petites valeurs de c , ce soit justement la $(n-m)^{\text{ième}}$ valeur propre $\lambda_{mn}(c)$ qui puisse être calculée en prenant $r = n - m$, puisqu'alors

$$(12') \quad \lambda = \gamma_{n-m}^m + \dots$$





se traduit par :

$$\lambda = n(n+1) + \ell \frac{mn}{2} c^2 + \dots$$

De plus, le plus grand coefficient de tous les $d_r^{mn}(c)$ est précisément d_{n-m}^{mn} , correspondant à la fonction propre $P_n^m(\eta)$ de valeur propre $n(n+1)$, terme unique si $c = 0$.

Cependant, lorsque les 3 paramètres $m, n, |c|$ varient, il se trouve que le coefficient prépondérant peut être d'indice r , supérieur ou inférieur à $(n-m)$, indice de la valeur propre recherchée.

Parmi les $r = \begin{cases} 0, 2, \dots \\ 1, 3, \dots \end{cases}, \dots, (n-m), (n-m+2), (n-m+4), (n-m+6),$

nous avons préféré choisir le r pour lequel $|F_r(\lambda^{(1)})|$ est minimum.

Pour cela, nous calculons les rapports N_{r+2}^m autour de $r = n-m$ par la fraction continue finie (8) et par la fraction continue infinie (9) et comparons les résultats.

Nous ne pouvons pas formuler un critère absolu du choix de ce "meilleur développement" cependant, comme nous avons déjà noté que $|F_r(\lambda^{(1)})|$ est toujours plus grand que l'unité, (11), quel que soit l'indice du développement et que $F_r(\lambda^{(1)})$ est choisi le plus petit possible, dans :

$$\lambda^{(2)} = \lambda^{(1)} + \frac{F_r(\lambda^{(1)})}{|F_r(\lambda^{(1)})|}$$

la correction apportée à $\lambda^{(1)}$ a plus de chance de laisser $\lambda^{(2)}$ dans son voisinage et donc d'éviter le risque d'aller converger vers une racine non désirée, plus éloignée de l'approximation $\lambda_{mn}^{(1)}(c)$.

Exemple : $c = 7,95$ "aplatis" $m = 0$ $n = 4$

$r = 4 = n-m$ $\lambda_{mn}(c) = -21,235354$ (valeur correspondant à $n = 2$)

$r = 2$ $\lambda_{mn}(c) = -2,5737899$ (valeur désirée).

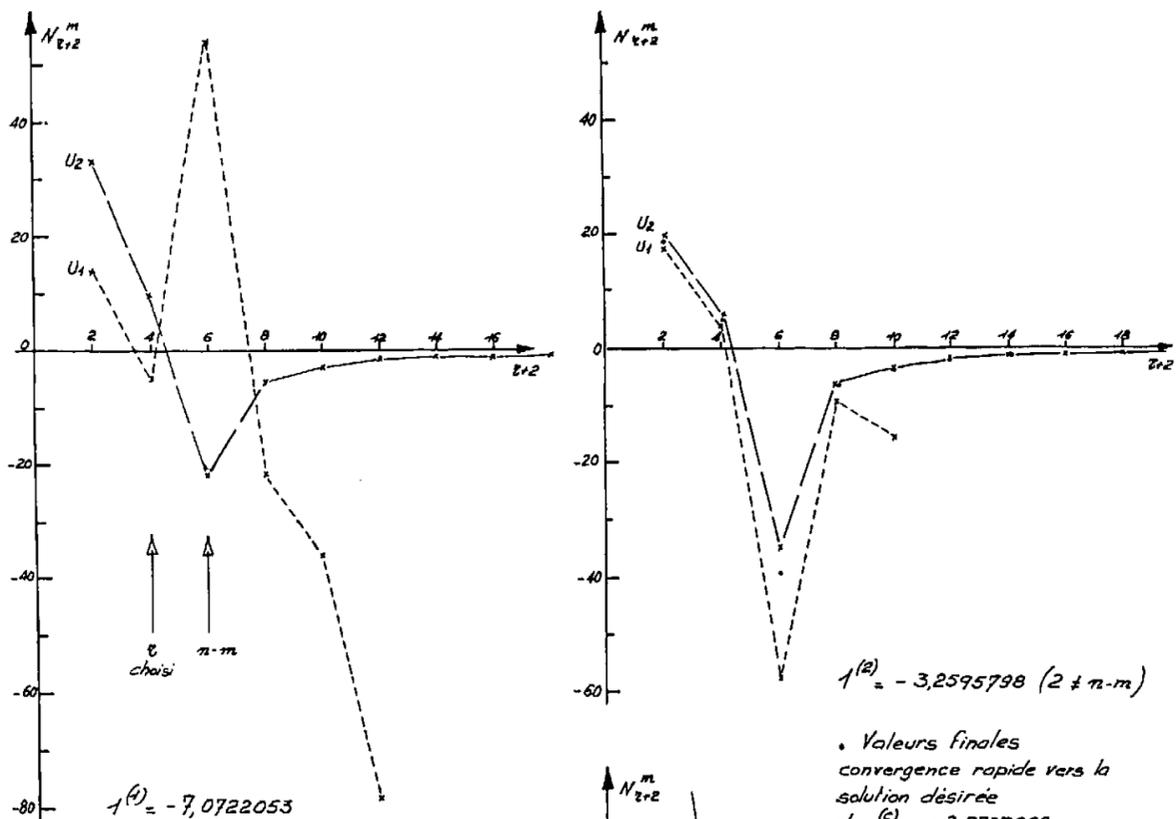
Sachant que $\lambda_{mn}^{(1)}(c) = -7,0722053$

5° - Résultats

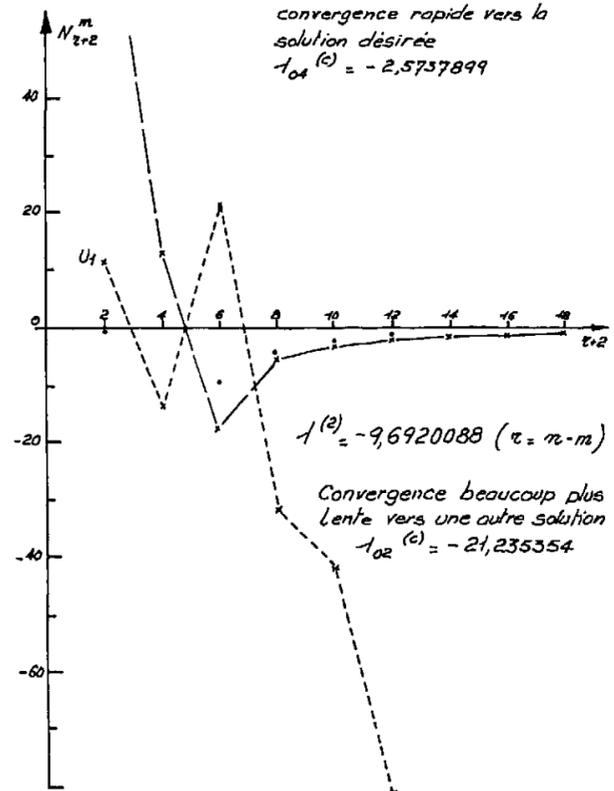
Dans les applications pratiques de la méthode, les γ_r^m et β_r^m sont calculés jusqu'à la valeur de r pour laquelle N_{r+2}^m peut être sûrement négligé dans le dénominateur de (9) (généralement moins de 10 rapports).

Exemple précédent : $c = 7,95$ "aplatis" $m = 0$ $n = 4$

N_6^m	r final
- 21,232694	10 $N_{12}^m \sim 0$
- 21,876640	12 $N_{14}^m \sim 0$



$m = 0$
 $n = 4$
 $c = 7,95$ obté



$\lambda^{(2)} = -3,2595798$ ($2 \pm n-m$)

• Valeurs finales
 convergence rapide vers la
 solution désirée
 $\lambda_{04}^{(c)} = -2,5737899$

$\lambda^{(2)} = -9,6920088$ ($r = n-m$)

Convergence beaucoup plus
 lente vers une autre solution
 $\lambda_{02}^{(c)} = -21,235354$

N_6^m	r final
- 21,892834	14 $N_{16}^m \sim 0$
- 21,893006	16 $N_{18}^m \sim 0$
- 21,383007	18 $N_{20}^m \sim 0$

puis les N_r^m sont calculés pour des r décroissants avec (9) et pour des r croissants à partir de 0 ou 1 avec (8).

Le calcul effectué sur ordinateur 7030-IBM à 14 chiffres décimaux, ne présente pas de problème particulier - la répercussion des erreurs d'arrondis étant pratiquement insensible.

La valeur finale de la valeur propre a été calculée avec une précision relative de l'ordre de 10^{-8} .

$$\frac{|\lambda^{(i+1)} - \lambda^{(i)}|}{|\lambda_{mn}^{i+1}(c)|} \ll 10^{-8}$$

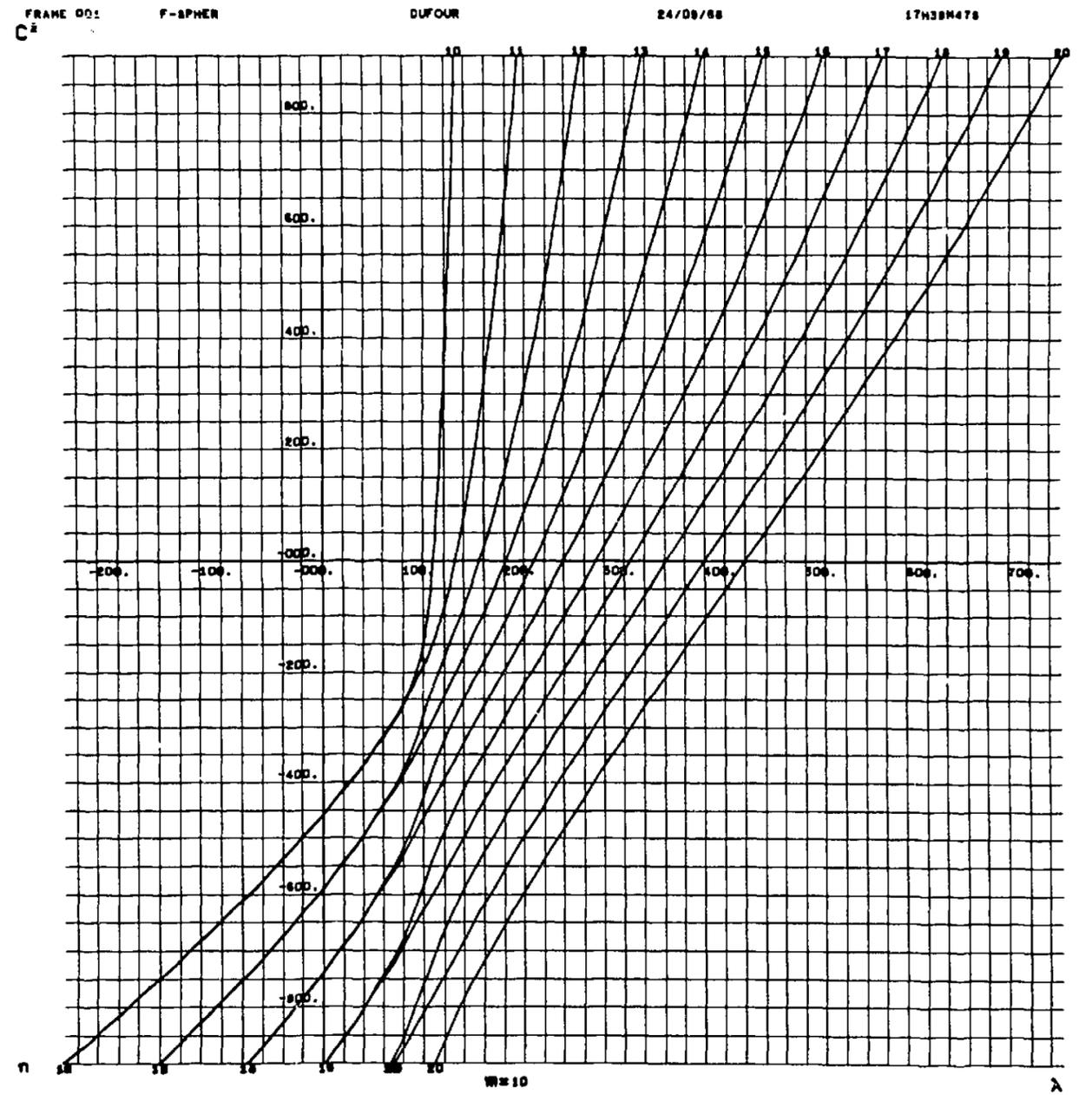
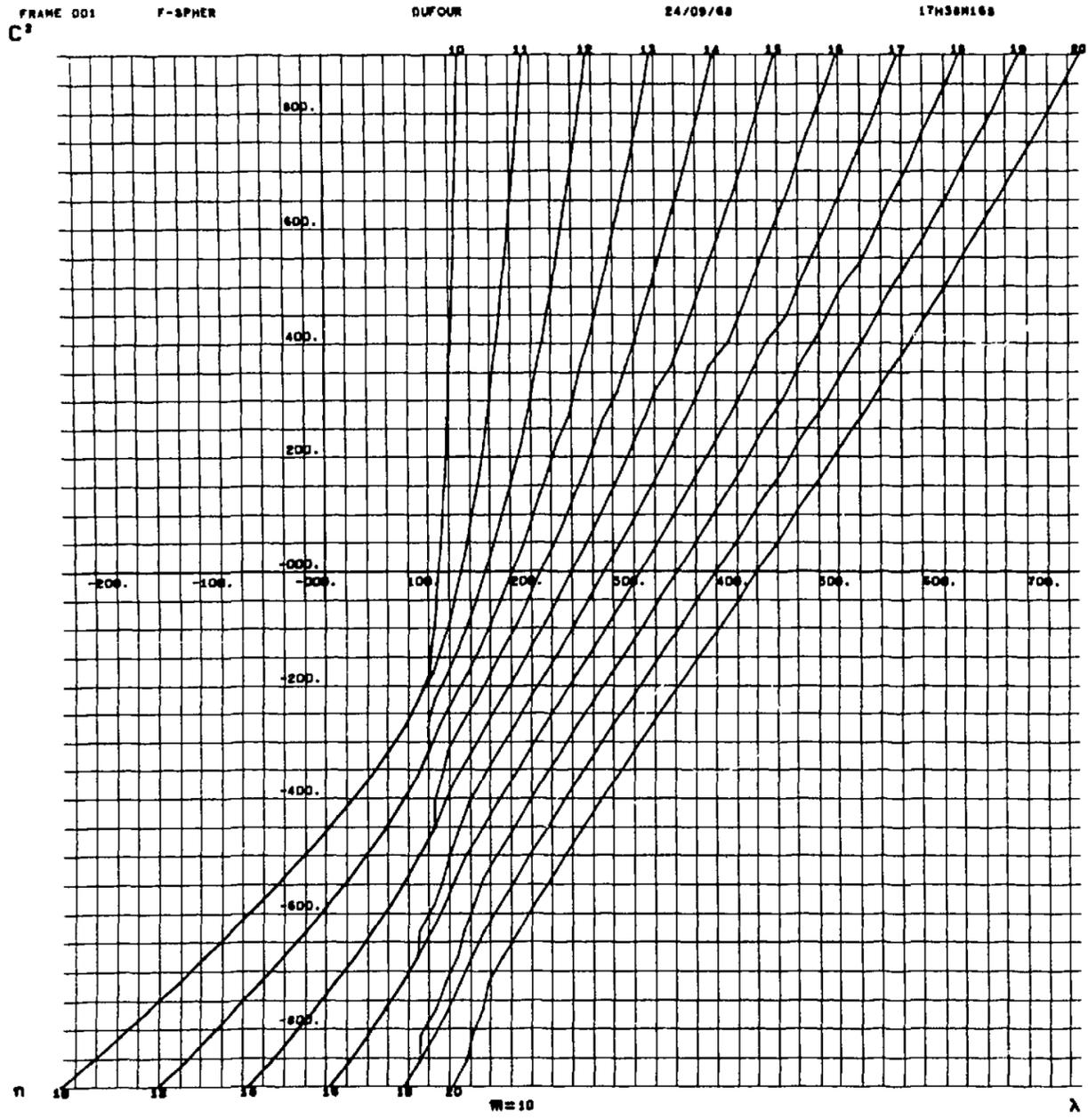
La méthode s'est montrée très efficace et la convergence est particulièrement rapide.

Exemple : Nous avons choisi un point voisin de la coupure, dans la zone intermédiaire des approximations.

$$c^2 = 840 \text{ "allongé"} \quad m = 0 \quad n = 18 \quad n - m = 18 \quad r = 4$$

i	$\lambda^{(i)}$	$\Delta \lambda^{(i)}$	$F_4(\lambda^{(i)})$
1	827,51012	10,474651	99,646705
2	837,98477	2,7854576	18,212612
3	840,77023	$0,95965719 \cdot 10^{-1}$	0,58860065
4	840,86619	$0,95321691 \cdot 10^{-4}$	$0,58349316 \cdot 10^{-3}$
5	840,86629	$0,96279095 \cdot 10^{-10}$	$0,58935257 \cdot 10^{-9}$

Il est intéressant de noter qu'en même temps que la valeur propre, sont calculés les rapports de 2 coefficients $d_r^{mn}(c)$ consécutifs. On obtient donc très rapidement le vecteur propre $\{d_r^{mn}(c)\}$ que l'on doit ensuite normaliser.



6° - Remarques

a) Cas $m < 0$ (on notera $-m$ avec $m > 0$)

On cherche un développement de la fonction sphéroïdale sous la forme :

$$S_{-m, n}^{(1)}(c, \eta) = \sum_{r=0, 1}^{\infty} d_r^{-m, n}(c) P_{m+r}^{-m}(\eta)$$

En tenant compte des propriétés des fonctions de LEGENDRE associées

$$P_n^{-m}(z) = (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(z)$$

et en reportant dans l'équation sphéroïdale, on remarque que les coefficients $d_r^{-m, n}(c)$ satisfont la même équation aux différences que les d_r^{mn} . Par suite :

$$\lambda_{-m, n}(c) = \lambda_{mn}(c)$$

b) c complexe

Les calculs précédents ont été faits pour c "allongé" ou "aplatis" réels. Certains problèmes physiques font intervenir des c complexes.

L'intérêt de la méthode est qu'elle est encore valable dans ce cas, la valeur propre étant elle-même complexe.

Nous n'avons calculé des valeurs propres que pour des c "allongés" tels que :

$$\Re(c) \gg \text{Im}(c)$$

Exemple : $\Re(c) = 13$ $m = 0$ $n = 10$ $(\Re(c))^2 = 169$
 $(\Re(c))^2 \text{ coupure} = 268,89746$

approximation pour c petit.

Im(c)	$\lambda^{(1)}$		$\lambda_{mn}(c)$	
	λ	λ	λ	λ
0	203,05823	0	203,72711	0
1	202,25620	15,600004	202,78506	16,047490
2	199,85408	31,105187	199,95212	31,858306
3	195,86382	46,420882	195,33364	47,069104
4	190,30530	63,452733	189,47573	61,429201
5	183,20630	76,106846	182,92658	75,550542
6	174,60250	90,289944	175,12601	90,388027

Mais, on pourrait étendre quelque peu les applications, sachant que :

- on passe d'un c "aplatis" à -ic "allongé"

- $\lambda^*(c^*) = \lambda(c)$ puisque le développement de λ est une fonction de c^2 .

Néanmoins, on ne peut avec ces approximations envisager que des parties réelle ou imaginaire de c de modules très différents.

En effet, les approximations dans la zone intermédiaire sont assez mauvaises lorsque m et n augmentent tandis que $\frac{\text{Im}(c)}{\Re(c)} \rightarrow 1$. La ligne de coupure étudiée pour des c réels semble inapplicable.

III - LISTES SYMBOLIQUES FORTRAN DES SOUS-PROGRAMMES

intervenant dans le calcul d'une valeur propre $\lambda_{mn}(c)$

- SUBROUTINE LAGDEV

Extrait d'un sous-programme plus complet, calculant pour m, n, c donnés :

- . la valeur propre correspondante $\lambda_{mn}(c)$
- . les coefficients $d_{r,mn}^{mn}(c)$ du développement de $S_{mn}^{(1)}(c, \eta)$ en $P_{m+r}^m(\eta)$
- . les coefficients $d_{r,mn}^{mn}(c)$ et $d_{\rho/r}^{mn}$ du développement de $S_{mn}^{(2)}(c, \eta)$
- . les facteurs reliant les solutions développées en fonctions de LEGENDRE associées

et celles développées en fonctions de BESSEL sphériques.

Cet extrait calcule l'approximation $\lambda_{mn}^{(1)}(c)$ appropriée à $\lambda_{mn}(c)$

- FONCTION APOBL

Donne $\lambda_{mn}^{(1)}(c)$ dans le cas oblate, c grand.

- SUBROUTINE BEGA

Calcule les coefficients β_r^m et γ_r^m de la relation de récurrence à 3 termes.

- SUBROUTINE FU1

Calcule les rapports N_{r+2}^m successifs par (5)

- SUBROUTINE FU2

Calcule les rapports N_{r+2}^m successifs par (6)

- SUBROUTINE RLAMB

Calcul de $\lambda_{mn}(c)$ exact.

Remarque : en anglais,

- "prolate" pour ellipsoïdal allongé
- "oblate" pour ellipsoïdal aplati.

SUBROUTINE LAGDEV (M, L, C, XLAM, COEF, C2, C4, KK, D, KONT1, IFIN1, ALPHAM, BETAM, GAMMAM, TER, DD, KONT2, IFIN2, ALPHA, BETA, GAMMA, TERGA, COEF1, COEF2, S

2, ICA)

COMPLEX C, C2, C4, D, DD, COEF1, COEF2, S, XLP, XLAM, XLAMB, ST, XNORME, ZPUISM

COMPLEX ZPUSU, CI, APOBL

DIMENSION BETAM(50), GAMMAM(50), TER(50), D(50), XL(5), ALPHAM(50)

DIMENSION ALPHA(50), BETA(50), GAMMA(50), TERGA(50), DD(50)

MR(I)=2*I-KK

MMR(I)=M+MR(I)

C

C EXPRESSION DE LA COUPURE C2(M, N)

C

CC(FL)=0.45578997-0.93329024*FM+(2.0866084-2.0937930*FM)*FL+(0.689

171525+(0.96413884E-03+0.41332468E-03*FL)*FL*FM**2+(2.4757559-0.96

2920979E-02*FM)*FL**2

MRZERO=L-M

IROM1=MRZERO/2

COEF=1.

61 COF=1.

54 IF (MOD(MRZERO, 2)) 5, 6, 7

5 CALL EXIT

6 KK=2

GO TO 8

7 KK=1

8 CTE=(-1.)*IROM1*COF/COEF

IRZERO=IROM1+1

IFIN1=IRZERO+3

DO 2 I=1, IFIN1

2 CALL BEGA(M, MR(I), ALPHAM(I), BETAM(I), GAMMAM(I), TER(I),

C2=C*C

CAB=CABS(C)

GO TO (150, 151), ICA

150 CAB2=REAL(C)**2

GO TO 152

151 CAB2=AIMAG(C)**2

152 IF (CAB) 50, 3, 50

50 XLP=ZPUISM(C, M)

17 CO=M+1

```

FL=L
FM=M
FLM=MRZERO
67 IF (M.GT. 10) GO TO 48
C2COUP=CC(FL)
IF (CAB2-C2COUP) 47, 47, 63
63 GO TO (66, 68), ICA
C
C APPROXIMATION C GRAND PROLATE
C
66 CI=C
FL=2*MRZERO+1
FLM=FL**2
FM=M*M
XLAMB=CI*FL+FM-(FLM+5.)/8. -FL*(FLM+11. -32.*FM)/(64.*CI)-(5.*(FLM+
1 26.)*FLM+21. )-384.* FM*(FLM+1. ))/(1024.*CI*CI)-(((33.*FLM+1594. )*FL
2 M+5621. )*FL/128.**2-FM*(37.* FLM+167. )*FL/128.**+FM*2*FL/8.)/ZPUISM
3 C, 3)
GO TO 49
C APPROXIMATION C GRAND OBLATE
C
68 CI=(0. , 1. )*C
IF (M.LT. 3) GO TO 95
IF (CAB2-CC(FL+1. )) 47, 47, 96
96 XIT=1.
GO TO 97
95 XIT=0.
97 FLM=IROM1
IF (KK.EQ. 2) FL=FL+1.
XLAMB=APOBL(FLM, FM, FL, CO, CI)
GO TO (49, 90), KK
90 IF (IROM1.EQ. 0) GO TO 49
IK=IROM1
IF (IROM1.GT. 3) IK=3
DO 91 J=1, IK
XN=L+J
IF (CAB2-CC(XN+XIT)) 92, 92, 91
91 CONTINUE
GO TO 49
92 IF (MRZERO.LT. 12) GO TO 93

```

```

IK=1
GO TO 94
93 IK=2
94 XLAMB=XLAMB-(XLAMB-APOBL(FLM-1. , FM, FL-2. , CO, CI))/FLOAT(J+IK)
GO TO 49
48 IF (CAB-5. ) 70, 71, 71
C
C APPROXIMATION PROLATE M GRAND
C
70 XLAMB=(FLM+FL)*CO+FLM*(FLM-1. )+C2*(FLM+0. 5)/CO
GO TO 49
71 S=CO**2+C2
ST=ZPUISU(S, 0. 5)
XLAMB=FLOAT(M*M-1)-(FLM**2+FLM-0. 5)/2. +(2.*FLM+1. )*(ST-CO/ST)*0. 75
1*(2.*FLM*(FLM+1. )+1. )*CO**2/S
GO TO 49
C
C APPROXIMATION C PETIT
C
47 XLO=TER(IRZERO)
XL(1)=GAMMAM(IRZERO)
IF(IRZERO.NE. 1) GO TO 13
XL(2)=0.
XL(3)=0.
GO TO 12
13 GAMAM2=GAMMAM(IRZERO-1)-XL(1)
DELM1=2*L-1
BETAMR=BETAM(IRZERO)/DELM1
XL(2)=BETAMR
BETAMR=BETAMR/DELM1
XL(3)=BETAMR*GAMAM2
12 DELP3=2*L+3
BETAP2=BETAM(IRZERO+1)/DELP3
XL(2)=(XL(2)-BETAP2)/2.
GAMAP2=GAMMAM(IRZERO+1)-XL(1)
BETAP2=BETAP2/DELP3
XL(3)=(XL(3)+BETAP2*GAMAP2)/4.
XLAMB=CMPLX(XLO, 0. )
DO 4 I=1, 3
4 XLAMB=XLAMB+XL(I)*ZPUISM(C2, I)
49 XLAM=XLAMB

```

```

69  C4=C2*C2
    CALL RLAMB(XLAM, M, IRZERO, C2, C4, KK, D, KONT1, IFIN1, ALPHAM, BETAM, GAMMA

1M, TER, DD)
    WRITE (6, 100) C, C2, CAB2, C2COUP
100  FORMAT (6E20, 8)
    WRITE (6, 101) XLAMB, XLAM
101  FORMAT (40X, 4E20, 8)
    GO TO 46
3    XLAMB=CMPLX(FLOAT(L*(L+1)), 0.)
    XLAM=XLAMB
46   RETURN
    END

    COMPLEX FUNCTION APOBL(FLM, FM, FL, CO, CI)
    DIMENSION XL(3)
    COMPLEX CI, ZPUISM
    Q(COF)=((COF+FLM)*(COF+FLM+FM)**2
    R(COF)=2.*COF*(FL+COF)
    APOBL=-CI*CI+2.*CI*FL-2.*FLM*(FLM+CO)-CO
    BETAMR=Q(0.)
    BETAP2=Q(1.)
    BETAM2=Q(-1.)
    GAMAP2=Q(2.)
    DELP3=R(1.)
    DELM1=R(-1.)
    XL(1)=(BETAMR-BETAP2)/4.
    XL(2)=- (BETAMR*DELM1+BETAP2*DELP3)/16.
    XL(3)=(BETAMR*(DELM1**2/4. -XL(1)+BETAM2/8.)-BETAP2*(DELP3**2/4. +XL
1(1)+GAMAP2/8. ))/16.
    DO 190I=1, 3
190  APOBL=APOBL+XL(I)/ZPUISM(CI, I)
    RETURN
    END

    SUBROUTINE BEGA (M, MR, ALFA, BETA, GAMMA, TERGA)
    M1=M+MR
    M2=2*M1
    ALFA=FLOAT((M1+M)*(M1+M-1))/FLOAT((M2-1)*(M2+1))
    BETA=FLOAT(MR*(MR-1))/FLOAT((M2-1)*(M2-3))*ALFA

```

```

    GAMMA=FLOAT(M2*(M1+1)-2*M*M-1)/FLOAT((M2+3)*(M2-1))
    TERGA=FLOAT(M1*(M1+1))
    RETURN
    END

    SUBROUTINE FU1(D, IFIN, XLAM, C2, C4, BETAM, GAMMAM, TER)
    COMPLEX D, XLAM, C2, C4
    DIMENSION D(50), BETAM(50), GAMMAM(50), TER(50)
    D(1)=XLAM-TER(1)-GAMMAM(1)*C2
    IF(IFIN.EQ. 1) RETURN
    DO 1 I=2, IFIN
1    D(I)=XLAM-TER(I)-GAMMAM(I)*C2-BETAM(I)*C4/D(I-1)
    RETURN
    END

    SUBROUTINE FU2(U2, IFIN, IFINI, XLAM, C2, C4, KK, M, ALPHAM, BETAM, GAMMAM, T
IER, ICODE)
    COMPLEX C2, C4, XLAM, U2, U1
    DIMENSION ALPHAM(50), BETAM(50), GAMMAM(50), TER(50)
    CALL FEDUMP(1, U2, JFIN, 2)
    JFINI=IFINI-1
3    JFIN=JFINI-IFIN+ICODE
    IF (ICODE.EQ. 0) GO TO 1
    MR=2*(JFINI+1)-KK
    U2=(0., 0.)
    GO TO 2
1    U2=XLAM-TER(JFINI)-GAMMAM(JFINI)*C2
    MR=- (2*JFINI+KK)
2    DO 7 J=1, JFIN
    I=JFINI-J+ICODE
    IF (ICODE.NE. 0) GO TO 4
    U2=XLAM-TER(I)-GAMMAM(I)*C2-BETAM(I)*C4/U2
    GO TO 7
4    U2=BETAM(I)*C4/(XLAM-TER(I)-GAMMAM(I)*C2-U2)
7    CONTINUE
    IF (JFINI.LT. IFINI) GO TO 5
    IF (CABS(U2-U1)) 8, 6, 8
8    IF (JFINI.GE. 50) GO TO 9
    CALL BEGA(M, MR, ALPHAM(JFINI+1), BETAM(JFINI+1), GAMMAM(JFINI+1), TER(
1JFINI+1))

```

```

5   JFINI=JFINI+1
    U1=U2
    GO TO 3
9   WRITE (6, 100) JFINI
100 FORMAT(5X, 6HJFINI=12, 5X, $DANS FU2$)
    CALL EXIT
6   IFINI=JFINI
    RETURN
    END

SUBROUTINE RLAMB(XLAM, M, IMILIE, C2, C4, KK, D, KONT1, IFIN1, ALPHAM, BETAM
1, GAMMAM, TER, DD)
COMPLEX XLAM, C2, C4, D, DU2, ZPUISM, DLAM, DU1, XLAMB, DD
DIMENSION D(50), ALPHAM(50), BETAM(50), GAMMAM(50), TER(50), DD(50)
IRZERO=IMILIE
I J=0
C
C FORMULE DE NEWTON RAPHSON CALCUL DE FPRIM
C9 I J=I J+1
   IROM1=IRZERO-1
   IROP3=IRZERO+3
   CALL FU1 (DD, IROP3, XLAM, C2, C4, BETAM, GAMMAM, TER)
   KONT1=IRZERO+1
   CALL FU2(D(KONT1), KONT1, IFIN1, XLAM, C2, C4, KK, M, ALPHAM, BETAM, GAMMAM,
1TER, 1)
   DU2=ZPUISM(D(KONT1), 2)/(BETAM(KONT1)*C4)
   DLAM=DU2
2   KONT1=KONT1+1
   CALL FU2(D(KONT1), KONT1, IFIN1, XLAM, C2, C4, KK, M, ALPHAM, BETAM, GAMMAM,
1TER, 1)
   DU2=ZPUISM(D(KONT1), 2)/(BETAM(KONT1)*C4)*DU2
   DLAM=DLAM+DU2
   IF (CABS(DU2)-0.5E-14*CABS(DLAM)) 1, 1, 2
1  DU1=(1., 0.)
   IF (IRZERO.EQ. 1) GO TO 3
   DO 5 I=1, IROM1
5  DU1=DU1*BETAM(I+1)*C4/ZPUISM(DD(I), 2)+1.
3  DU2=D(IRZERO+1)-DD(IRZERO)
   DU1=DU1+DLAM
   DIAM=DU2/DU1

```

```

IF ( IRZERO.EQ. 1) GO TO 15
DO 18 J=1, IROM1
I=IRZERO+1-J
18 D(I)=BETAM(I)*C4/(XLAM-TER(I)-GAMMAM(I)*C2-D(I+1))
15 IF (IJ.NE. 1) GO TO 12
C
C CHOIX DU R IEME DEVELOPPEMENT DE F
C
C DMAX=CABS(DU2)
DO 13 I=1, IROP3
DI=CABS(D(I+1)-DD(I))
IF (DI-DMAX) 14, 13, 13
14 DMAX=DI
IRZERO=I
13 CONTINUE
IF (IRZERO.NE. IMILIE) GO TO 9
12 XLAMB=XLAM+DLAM
IF (CABS(DLAM)-1.E-08*CABS(XLAMB)) 7, 7, 8
8 XLAM=XLAMB
IF (IJ.LT. 15) GO TO 9
WRITE (6, 101)
101 FORMAT (5X, $NE CONVERGE PAS$)
CALL EXIT
7 RETURN
END

```

CONCLUSION

Ce programme a permis de calculer les fonctions sphéroïdales "allongées" et "aplaties", angulaires et radiales sous différentes formes :

- développement en fonctions associées de LEGENDRE

$$P_n^m(z) \text{ et } Q_n^m(z)$$

- développement en fonctions de BESSEL sphériques $j_n(z)$, $n_n(z)$, $h_n^{(1)(2)}(z)$

- expression intégrale

pour m , n et c donnés, c pouvant être complexe.

Nous les avons utilisées dans 2 calculs de physique nucléaire :

1° - Diffusion des neutrons sur des noyaux déformés

On est amené à résoudre l'équation de SCHRODINGER dans un système de coordonnées sphéroïdales allongées :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = E_i \psi \quad E_i \text{ énergie incidente du neutron } > 0.$$

Dans le cas le plus simple d'un potentiel d'interaction constant à l'intérieur d'un ellipsoïde et nul en dehors, les fonctions d'ondes à utiliser sont très directement liées aux fonctions sphéroïdales qui sont les solutions de l'équation de SCHRODINGER dans les 2 régions "interne" et "externe".

Le potentiel fixe est généralement complexe :

$$V(\xi) = \begin{cases} -V_0 - iW_0 & \text{pour } \xi < \xi_0 \\ 0 & \text{pour } \xi > \xi_0 \end{cases}$$

a) Région externe $\xi > \xi_0$

$$\Delta \psi_e + \frac{2m}{\hbar^2} E_i \psi_e = 0$$

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

avec :

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_i > 0 \text{ en cas "prolate" réel.}$$

b) Région interne $\xi < \xi_0$

$$\Delta \psi_i + \frac{2m}{\hbar^2} (E_i + V_0 + iW_0) \psi_i = 0$$

$$\Delta \psi_i + \chi^2 \psi_i = 0$$

avec :

$$\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_i \left(1 + \frac{V_0}{E_i} + i \frac{W_0}{E_i} \right) \text{ complexe}$$

$$\text{Domaine utilisé } \begin{cases} c_e \text{ réel "allongé"} < 8,1 \\ c_i \text{ complexe "allongé"} |c_i| < 15 \quad \theta < 0,075 \text{ rd} \\ |m| \leq 10, \quad n \leq 22 \end{cases}$$

2° - Calcul des niveaux d'énergies des neutrons dans un puits de potentiel rectangulaire infini ou fini

On examine le cas d'un noyau de forme ellipsoïdale allongée ou aplatie et de déformation croissante.

$$\text{Domaine } \begin{cases} c \text{ varie de } 0 \text{ pour le cas sphérique à} \\ 22,7 \text{ pour le cas "allongé"} \\ 23,4 \text{ pour le cas "aplati"} \\ 0 \leq m, n \leq 8 \end{cases}$$

REFERENCES

- [1] C. FLAMMER
Spheroidal Wave Functions (Stanford University Press, 1957).
- [2] L. ROBIN
Fonctions Sphériques de Legendre et Fonctions Sphéroïdales, Tome III
(Gauthier - Villars, Paris, 1959).
- [3] J. MEIXNER und F.W. SCHAFKE
Mathiesche Funktionen und Spharoid-funktionen (Springer - Verlag, Berlin, 1954).
- [4] J.A. STRATTON, P.M. MORSE, L.J. CHU, J.D.C. LITTLE and J. CORBATO
Spheroidal Wave Functions (John Wiley et Sons, Inc., New York, 1956).
- [5] C.J. BOUWKAMP
"On Spheroidal Wave Functions of Order zero"
J. Math. Phys., 26, 79 (1947).
- [6] G. BLANCH
"On the computation of Mathieu Functions",
J. Math. Phys., 25, 1, (1946).
- [7] W. GAUTSCHI
"Computational Aspects of Three-Term Recurrence Relations",
Siam Review, 9, 1, 24, (1967).
- [8] J.D. SWALEN and L. PIERCE
"Remarks on the continued Fraction Calculation of Eigenvalues and Eigenvectors",
J. Math. Phys., 2, 5, 736 (1961).

- [9] L. PIERCE
"Calculation of the Eigenvalues of a Tridiagonal Hermitian Matrix"
J. Math., Phys., 2, 5, 740 (1961).
- [10] F.W. SCHAFKE und H. GROH
"Zur Berechnung der Eigenwerte der Spharoid-differentialgleichung"
Numerische Mathematik 4, 310, (1962).
- [11] J. MEIXNER
"Asymptotische Entwicklung der Eigenwerte und Eigenfunktionen der Differentialgleichungen der Spharoid-Funktionen und der Mathieschen Funktionen"
Z. angew, Math., Bd 28, Nr. 10 Okt 68.
- [12] M. ABRAMOWITZ
"Asymptotic expansions of Spheroidal Wave Functions"
Jour. O.Math. a.Phys., t. 28, 195 (1949).
- [13] L. M. MILNE-THOMSON
The Calculus of Finite Differences (Macmillan and Co, Ltd, London, 1951).
- [14] H.S. WALL
Analytic Theory of continued Fractions (D. Van Nostrand Company, Inc., 1948).
- [15] JAHNKE-EMDE-LOSCH,
Tables of Higher Functions. (B.G. Teubner Verlagsgesellschaft - Stuttgart, 1960).
- [16] P. M. MORSE and H. FESHLACH
Methods of Theoretical Physics
(Mc Graw-Hill Book Company, Inc., New-York, 1953).

FIN