Méthode de diffusion inverse : équation stationnaire de Schrödinger et équation intégrale de Gelfand-Levitan

A. Lesfari
Département de Mathématiques
Faculté des Sciences
Université Chouaïb Doukkali
B.P. 20, El-Jadida, Maroc.
E. mail : lesfariahmed@yahoo.fr

La méthode de diffusion inverse de résolution de certaines équations non-linéaires se base sur l'idée de l'étude de celles-ci sous forme d'une équation d'un certain opérateur et utilise une analogie avec la mécanique quantique. On exposera certaines notions mathématiques de cette mécanique et on se servira de la terminologie des physiciens pour décrire les propriétés des solutions de l'équation stationnaire de Schrödinger

$$\frac{\hbar}{2m}\psi'' + (\lambda - u(x))\psi = 0, \qquad ' \equiv \frac{d}{dx},$$

sans s'arrêter sur les motivations physiques des notions introduites. Nous verrons que la métode de diffusion inverse se réduit à la solution d'une équation intégrale linéaire de Gelfand-Levitan. Dans la suite, nous simplifierons les notations en utilisant un système d'unités dans lequel la constante de Planck est $\hbar = 1$ et la masse de la particule est $m = \frac{1}{2}$.

1 Equation stationnaire de Schrödinger

Considérons l'équation

$$\psi'' + (\lambda - u(x))\psi = 0, \qquad -\infty < x < \infty \tag{1.1}$$

où ψ (inconnue) est la fonction d'onde d'une particule, le paramètre spectral λ est l'énergie de la particule, la fonction $u(x)$ est le potentiel ou énergie potentielle de la particule. Lorsque la particule est libre (i.e., $u = 0$) et a une énergie positive (i.e., $\lambda = k^2$), alors l'équation (1.1) se réduit à

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \tag{1.2}$$

et admet deux solutions linéairements indépendantes e^{ikx} et e^{-ikx}.

Désignons par $E^{sr}_{(2)}$ (resp. $E^{sc}_{(2)}$) l'espace des solutions réelles (resp. complexes) de l'équation (1.1) et par $E^{sr}_{(3)}$ (resp. $E^{sc}_{(3)}$) l'espace des solutions réelles (resp. complexes) de l'équation (1.2). L'espace $E^{sr}_{(3)}$ (resp. $E^{sc}_{(3)}$) est muni de la base $(\cos kx, \sin kx)$(resp. (e^{ikx}, e^{-ikx})). Soit $[\alpha, \beta]$ le support borné de u. On définit l'opérateur de monodromie réel de l'équation (1.1), par

$$\mathcal{M} : E^{sr}_{(2)} \longrightarrow E^{sr}_{(2)}, \quad a\cos kx + b\sin kx \longmapsto \begin{cases} a\cos kx + b\sin kx & \text{si } x < \alpha \\ c\cos kx + d\sin kx & \text{si } x > \beta, \end{cases}$$

où a, b sont des constantes et $(c, d) = \mathcal{M}_u(a, b)$. Celà signifie qu'à chaque solution de l'équation (1.2) est associée :

(i) la solution de (1.1) qui se trouve à gauche de α ; dans cette région la solution de (1.2) est confondue avec celle de (1.1).

(ii) La solution de (1.1) qui se trouve à droite de β.

De même, on définit l'opérateur de monodromie complexe de l'équation (1.1) par

$$\mathcal{M} : E^{sc}_{(2)} \longrightarrow E^{sc}_{(2)}, \quad ae^{ikx} + be^{-ikx} \longmapsto \begin{cases} ae^{ikx} + be^{-ikx} & \text{si } x < \alpha \\ ce^{ikx} + de^{-ikx} & \text{si } x > \beta. \end{cases}$$

Proposition 1 *Soit W le plan de phase formé par les points représentatifs, i.e., des couples de nombres réels (ψ, ψ'). Soit*

$$\mathcal{B}^{x_1}_{(2)} : E^{sr}_{(2)} \longrightarrow W, \quad \psi \longmapsto \mathcal{B}^{x_1}_{(2)}\psi = (\psi(x_1), \psi'(x_1)),$$

un opérateur avec ψ une solution de l'équation (1.1) dont les conditions initiales pour $x = x_1 \in \mathbb{R}$ sont $(\psi(x_1), \psi'(x_1))$. Alors

a) L'espace $E^{sr}_{(2)}$ est isomorphe à W.

b) L'application (de phase) de x_1 à x_2 définie par

$$g^{x_2}_{x_1} \equiv \mathcal{B}^{x_2}_{(2)} \left(\mathcal{B}^{x_1}_{(2)}\right)^{-1} : W \longrightarrow W, \quad (\psi(x_1), \psi'(x_1)) \longmapsto (\psi(x_2), \psi'(x_2)),$$

est un isomorphisme linéaire.

Démonstration. a) Il est clair que $\mathcal{B}^{x_1}_{(2)}$ est linéaire. En outre, pour tout point représentatif $(\psi, \psi') \in W$, il existe d'après le théorème d'existence une solution ψ vérifiant sa condition initiale $(\psi(x_1), \psi'(x_1))$. Donc

$$\text{Im } \mathcal{B}^{x_1}_{(2)} \equiv \{\mathcal{B}^{x_1}_{(2)}\psi : \psi \in E^{sr}_{(2)}\} = W.$$

Enfin
$$\text{Ker } \mathcal{B}_{(2)}^{x_1} \equiv \{\psi : \psi \in E_{(2)}^{sr}, \mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\psi = 0\} = \{0\},$$
découle du théorème d'unicité car la solution vérifiant la condition initiale au point x_1 est égale à zéro.
b) Le résultat découle du fait que l'inverse d'un isomorphisme en est un. Plus précisément, si ψ_1 et ψ_2 sont deux solutions de l'équation (1.1), alors
$$\begin{aligned}(\psi(x_1), \psi'(x_1)) &= \mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\psi,\\ &= \mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\psi_1 + \mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\psi_2,\\ &= (\psi_1(x_1), \psi_1'(x_1)) + (\psi_2(x_1), \psi_2'(x_1)),\end{aligned}$$
et ceci équivaut à
$$\begin{aligned}\left(\mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\right)^{-1}((\psi_1(x_1), \psi_1'(x_1)) + (\psi_2(x_1), \psi_2'(x_1))) &= \left(\mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\right)^{-1}(\psi(x_1), \psi'(x_1)),\\ &= \psi,\\ &= \psi_1 + \psi_2,\\ &= \left(\mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\right)^{-1}(\psi_1(x_1), \psi_1'(x_1))\\ &\quad + \left(\mathcal{B}_{(2)}^{x_1}\right)^{-1}(\psi_2(x_1), \psi_2'(x_1)).\end{aligned}$$
Ceci achève la preuve de la proposition. □

De la même manière, on peut définir un opérateur $\mathcal{B}_{(3)}^{x_1}$ de $E_{(3)}^{sr}$ dans W qui associe à chaque solution de l'équation (1.2), sa condition initiale au point x_1. Dans ce cas au lieu d'application de phase, on aura un point de phase.

Rappelons qu'une particule se propageant à partir de $x = -\infty$, traverse une barrière potentielle avec un coefficient de transmission T et un coefficient de réflexion R si l'équation (1.1) où $\lambda = k^2$ admet une solution ψ telle que :
$$\psi = \begin{cases} Te^{ikx}, & \text{à droite de la barrière.}\\ e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{à gauche de la barrière.}\end{cases}$$

Proposition 2 *Si l'équation (1.1) où $\lambda = k^2$, possède une solution confondue avec ae^{ikx} pour $x \ll 0$ et avec be^{-ikx} pour $x \gg 0$, alors cette solution est nulle. En outre, pour tout $k > 0$ les ψ, T et R définis ci-dessus existent et sont uniques.*

Démonstration. Considérons dans l'espace $E_{(2)}^{sc}$ les formes hermitiennes $\langle ae^{ikx}, ae^{ikx}\rangle$, $\langle be^{-ikx}, be^{-ikx}\rangle$ et $\langle ae^{ikx}, ae^{-ikx}\rangle$. En désignant par $[.,.]$ le produit scalaire gauche, alors
$$\begin{aligned}\langle ae^{ikx}, ae^{ikx}\rangle &= \frac{i}{2}[ae^{ikx}, \overline{a}e^{-ikx}],\\ &= \frac{i}{2}\begin{vmatrix} a & ia\\ \overline{a} & -i\overline{a}\end{vmatrix},\\ &= |a|^2.\end{aligned}$$

De même, on a

$$\begin{aligned} \langle be^{-ikx}, be^{-ikx}\rangle &= -|b|^2,\\ \langle ae^{ikx}, ae^{-ikx}\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Dès lors, en posant

$$z = z_1e^{ikx} + z_2e^{-ikx},$$

où z_1 et z_2 sont les coordonnées du vecteur z dans la base (e^{ikx}, e^{-ikx}), on obtient

$$\langle z, z\rangle = |z_1|^2 - |z_2|^2,$$

i.e., $\langle ., .\rangle$ est du type $(1, 1)$. Puisque l'opérateur de monodromie conserve cette forme hermitienne, on en déduit que

$$|a|^2 = -|b|^2,$$

et donc $a = b = 0$. Considérons maintenant une particule allant vers $+\infty$ et soit e^{ikx} une solution à droite de la barrière. A gauche de la barrière cette solution devient

$$e^{ikx} \curvearrowright ae^{ikx} + be^{-ikx} \text{ à gauche de la barrière.} \tag{1.3}$$

D'après ce qui précède, le coefficient a est non nul. Donc pour avoir la solution cherchée, il suffit de diviser les deux membres de (1.3) par a,

$$\frac{1}{a}e^{ikx} \curvearrowright e^{ikx} + \frac{b}{a}e^{-ikx}.$$

En prenant $T = \dfrac{1}{a}$ et $R = \dfrac{b}{a}$, celà montre que T et R sont définis de façon univoque, ce qui achève la démonstration. □

Nous allons démontrer un théorème qui va nous être utile par la suite.

Théorème 3 *(Liouville). Soient f un champ de vecteurs rapporté à des coordonnées orthonormales $x = (x_1, ..., x_n)$ et*

$$\dot{x} = f(x),$$

un système d'équations différentielles ordinaires dont les solutions sont prolongeables sur l'axe des temps tout entier. On pose

$$g^tx = x + f(x)t + o(t^2),$$

pour t petit et on désigne par D un domaine de l'espace de phase,

$$D(t) \equiv g^tD(0),$$

et par $v(t)$ le volume de $D(t)$. Si

$$\mathit{div}\ f=\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial f_j}{\partial x_j}=0,$$

alors $v(t)=v(0)$, i.e., g^t conserve le volume de tout domaine.

Démonstration. On a

$$v(t)=\int_{D(t)}dx=\int_{D(0)}\frac{\partial g^t x}{\partial x}dx,$$

où $\dfrac{\partial g^t x}{\partial x}$ est la matrice jacobienne,

$$\frac{\partial g^t x}{\partial x}=I+\frac{\partial f}{\partial x}t+o(t^2).$$

Le déterminant de l'opérateur $I+\dfrac{\partial f}{\partial x}t$ est égal au produit des valeurs propres. Celles-ci (en tenant compte de leurs multiplicités) sont égales à $1+t\dfrac{\partial f_j}{\partial x_j}$ où $\dfrac{\partial f_j}{\partial x_j}$ sont les valeurs propres de $\dfrac{\partial f}{\partial x}$. Donc

$$\det\frac{\partial g^t x}{\partial x}=1+t\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial f_j}{\partial x_j}+o(t^2)=1+t\ \mathrm{div}\ f+o(t^2).$$

Dès lors,

$$v(t)=\int_{D(0)}(1+t\ \mathrm{div}\ f+o(t^2))dx,$$

et

$$\dot{v}(t)|_{t=0}=\int_{D(0)}\mathrm{div}\ f dx.$$

Comme $t=t_0$ n'est pas plus mauvais que $t=0$, on a aussi

$$\dot{v}(t)|_{t=t_0}=\int_{D(t_0)}\mathrm{div}\ f dx,$$

et la preuve du théorème en découle. □

Remarque 1 *Le théorème de Liouville se généralise facilement au cas de systèmes non autonomes ($f=f(x,t)$). En effet, les termes de premier degré dans l'expression de $\dfrac{\partial g^t x}{\partial x}$ démeurent les mêmes. Or les termes de degré supérieur à un n'interviennent pas dans la démonstration. Autrement dit, le théorème de Liouville est un théorème de premier ordre. Ce sera précisément cette généralisation qui sera utile dans la suite.*

Proposition 4 *La matrice de l'opérateur de monodromie dans la base* $(\cos kx, \sin kx)$ *(resp.* (e^{ikx}, e^{-ikx})*) appartient au groupe* $SL(2,\mathbb{R})$ *(resp.* $SU(1,1)$*).*

Démonstration. Montrons que le déterminant de l'opérateur de monodromie de l'équation de Schrödinger est égal à un. L'espace $E^{sr}_{(3)}$ est muni de la base $(\cos kx, \sin kx)$. Or

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^x_{(3)} \cos kx &= (\cos kx, -k\sin kx), \\ \mathcal{B}^x_{(3)} \sin kx &= (\sin kx, k\cos kx), \end{aligned}$$

donc W est muni d'une base dans laquelle la matrice de l'opérateur (on utilise ici la même notation pour l'opérateur et la matrice) s'écrit

$$\mathcal{B}^x_{(3)} = \begin{pmatrix} \cos kx & \sin kx \\ -k\sin kx & k\cos kx \end{pmatrix},$$

d'où $\det \mathcal{B}^x_{(3)} = k$, indépendant de x. Désignons par x^+ le point x à gauche du support du potentiel et par x^- celui à droite. On a la situation suivante :

$$\mathcal{M} : E^{sr}_{(3)} \to E^{sr}_{(3)}, \quad a\cos kx + b\sin kx \mapsto c\cos kx + d\sin kx, \quad (c,d) = \mathcal{M}_u(a,b),$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{x^-}_{(3)} : E^{sr}_{(3)} &\longrightarrow W, \\ a\cos kx + b\sin kx &\longmapsto (a\cos kx^- + b\sin kx^-, -ak\sin kx^- + bk\cos kx^-), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{x^+}_{(3)} : E^{sr}_{(3)} &\longrightarrow W, \\ c\cos kx + d\sin kx &\longmapsto (a\cos kx^+ + b\sin kx^+, -ak\sin kx^+ + bk\cos kx^+), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g^{x^+}_{x^-} \; : \; & W \longrightarrow W, \\ & (a\cos kx^- + b\sin kx^-, -ak\sin kx^- + bk\cos kx^-) \\ & \quad \longmapsto (a\cos kx^+ + b\sin kx^+, -ak\sin kx^+ + bk\cos kx^+). \end{aligned}$$

On vérifie directement que :

$$g^{x^+}_{x^-} o \mathcal{B}^{x^-}_{(3)} = \mathcal{B}^{x^+}_{(3)} o \mathcal{M},$$

et puisque

$$\det \mathcal{B}^{x^+}_{(3)} = \mathcal{B}^{x^-}_{(3)},$$

on a donc

$$\det \mathcal{M} = \det g^{x^+}_{x^-}.$$

Or g^x conserve les aires d'après le théorème 3 de Liouville et la remarque 1. En effet, en posant $\psi_1 = \psi$, $\psi_2 = \psi'$, on récrit l'équation (1.1) sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_1' &= \psi_2 \equiv f_1, \\ \psi_2' &= (u(x) - \lambda)\psi_1 \equiv f_2. \end{aligned}$$

Ici, on a $f = (f_1, f_2)$, $t = x$ et

$$\text{div } f = \frac{\partial \psi_2}{\partial \psi_1} + \frac{\partial (u(x) - \lambda)\psi_1}{\partial \psi_2} = 0.$$

Dès lors, $\det g_{x^-}^{x^+} = 1$ et par conséquent $\det \mathcal{M} = 1$. Pour le cas de $SU(1,1)$, nous allons montrer que la matrice (notée également $\mathcal{M}$) d'un opérateur est réelle et unimodulaire dans la base $(\cos kx, \sin kx)$ si et seulement si elle est spéciale $(1,1)$-unitaire dans la base conjuguée complexe (e^{ikx}, e^{-ikx}). En posant comme dans la preuve de la proposition 2,

$$z = z_1 e^{ikx} + z_2 e^{-ikx},$$

où z_1 et z_2 sont les coordonnées du vecteur z dans la base (e^{ikx}, e^{-ikx}), on obtient

$$\langle z, z \rangle = |z_1|^2 - |z_2|^2,$$

i.e., $\langle ., . \rangle$ est du type $(1,1)$. L'opérateur de monodromie conserve cette forme hermitienne. Dire que $\mathcal{M}$ est réelle et unimodulaire dans la base $(\cos kx, \sin kx)$ équivaut à $\mathcal{M} \in GL(2, \mathbb{R}) \cap SL(2, \mathbb{C})$ ou ce qui revient au même $\mathcal{M} \in SU(1,1)$ ou encore $\mathcal{M}$ est $(1,1)$-unitaire et unimodulaire dans la base (e^{ikx}, e^{-ikx}). Ceci achève la preuve de la proposition. $\square$

Remarque 2 *Il est bien connu que la somme des coefficients de transmission et de réflexion est égale à un. Cette propriété générale et importante de l'équation de Schrödinger peut être obtenue comme corollaire de la proposition précédente et donc sans l'utilisation de la théorie des probabilités. En effet, on utilise la définition de l'opérateur de monodromie,*

$$\begin{aligned} e^{ikx} + Re^{-ikx} &\longmapsto Te^{ikx}, \\ e^{-ikx} + \overline{R}e^{ikx} &\longmapsto \overline{T}e^{-ikx}. \end{aligned}$$

Divisons la première expression par $T \neq 0$ et la seconde par $\overline{T} \neq 0$, on obtient

$$\begin{pmatrix} e^{ikx} \\ e^{-ikx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T} & \frac{\overline{R}}{\overline{T}} \\ \frac{R}{T} & \frac{1}{\overline{T}} \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} e^{ikx} \\ e^{-ikx} \end{pmatrix}.$$

Donc dans la base (e^{ikx}, e^{-ikx}), la matrice de l'inverse de l'opérateur de monodromie est

$$\mathcal{M}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} & \frac{\overline{R}}{\overline{T}} \\ \frac{R}{T} & \frac{1}{\overline{T}} \end{pmatrix},$$

et par conséquent, la matrice de l'opérateur de monodromie dans la base (e^{ikx}, e^{-ikx}) *est*

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\overline{T}} & -\frac{\overline{R}}{\overline{T}} \\ -\frac{R}{T} & \frac{1}{T} \end{pmatrix}.$$

Or d'après la proposition 4, on a $\mathcal{M} \in SU(1,1)$ *(*$\det \mathcal{M} = 1$*) et par conséquent*

$$|T|^2 + |R|^2 = 1.$$

2 Equation intégrale de Gelfand-Levitan

Définissons les solutions $\psi_1(x,\lambda)$ et $\psi_2(x,\lambda)$ de l'équation (1.1) par les conditions initiales :

$$\begin{array}{ll} \psi_1(0,\lambda) = 1, & \psi_1'(0,\lambda) = 0, \\ \psi_2(0,\lambda) = 0, & \psi_2'(0,\lambda) = 1. \end{array}$$

Pour le cas simple $u(x) = 0$, on a évidemment

$$\begin{cases} \psi_1(x,\lambda) & = \cos\sqrt{\lambda}x = 1 + \left(-\frac{1}{2}\lambda\right)x^2 + \left(\frac{1}{24}\lambda^2\right)x^4 + O\left(x^6\right), \\ \psi_2(x,\lambda) & = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\sin\sqrt{\lambda}x = x + \left(-\frac{1}{6}\lambda\right)x^3 + \left(\frac{1}{120}\lambda^2\right)x^5 + O\left(x^7\right). \end{cases} \tag{2.1}$$

Pour $\sqrt{\lambda}$, on peut choisir par exemple la détermination

$$\sqrt{\lambda} = \sqrt{r}e^{i\frac{\theta}{2}},$$

où $\lambda = re^{i\theta}$ avec $r > 0$ et $-\pi < \theta < \pi$. Soit α un nombre réel arbitraire. La fonction

$$\psi(x,\lambda) = \psi_1(x,\lambda) + \alpha\psi_2(x,\lambda),$$

est aussi solution de l'équation (1.1) et satisfait à la condition aux limites

$$\psi'(0,\lambda) - \alpha\psi(0,\lambda) = 0.$$

Pour $\alpha = 0$, on a $\psi(x,\lambda) = \psi_1(x,\lambda)$ et pour $\alpha = \infty$, on posera $\psi(x,\lambda) = \psi_2(x,\lambda)$. On suppose que pour $\lambda \in \mathbb{C}$ et $x \geq 0$, on a

$$\psi(x,\lambda) = \cos\sqrt{\lambda}x + \int_0^x K(x,t)\cos\sqrt{\lambda}t dt, \tag{2.2}$$

où K est une fonction à déterminer, soumise à la condition d'avoir des dérivées partielles d'ordre un et d'ordre deux continues dans l'ensemble des couples de réels (x,t) tels que : $0 \leq t \leq x$. Autrement dit, on cherche $\psi(x,.)$ comme une perturbation de la fonction

$$x \longmapsto \psi(x,\lambda) = \cos\sqrt{\lambda}x,$$

et de façon précise, comme une transformée $(I+K)\psi_1(x,.)$ où K est un opérateur de Volterra dans $[0,+\infty[$. Nous allons chercher les conditions auxquelles $K(x,t)$ doit satisfaire pour que la fonction (2.2) soit solution de l'équation différentielle (1.1). De l'équation (2.2), on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x,\lambda) &= -\lambda\cos\sqrt{\lambda}x + \frac{dK(x,x)}{dx}\cos\sqrt{\lambda}x \\
&\quad -\sqrt{\lambda}K(x,x)\sin\sqrt{\lambda}x + \left.\frac{\partial K(x,t)}{\partial x}\right|_{t=x}\cos\sqrt{\lambda}x \\
&\quad +\int_0^x \frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial x^2}\cos\sqrt{\lambda}t dt. \qquad (2.3)
\end{aligned}$$

Calculons l'expression $\lambda\int_0^x K(x,t)\cos\sqrt{\lambda}tdt$, en faisant deux intégrations par parties, on obtient

$$\begin{aligned}
\lambda\int_0^x K(x,t)\cos\sqrt{\lambda}tdt &= \sqrt{\lambda}K(x,x)\sin\sqrt{\lambda}x \\
&\quad + \left.\frac{\partial K(x,t)}{\partial t}\right|_{t=x}\cos\sqrt{\lambda}x - \left.\frac{\partial K(x,t)}{\partial t}\right|_{t=0} \\
&\quad - \int_0^x \frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial t^2}\cos\sqrt{\lambda}tdt. \qquad (2.4)
\end{aligned}$$

Pour calculer l'expression (1.1), on y substitue (2.3) et (2.4),

$$\begin{aligned}
0 &= \psi'' + (\lambda - u(x))\psi \\
&= \frac{dK(x,x)}{dx}\cos\sqrt{\lambda}x + \left(\frac{\partial K(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial K(x,t)}{\partial x}\right)_{x=t}\cos\sqrt{\lambda}x \\
&\quad - \left.\frac{\partial K(x,t)}{\partial t}\right|_{t=0} - u(x)\cos\sqrt{\lambda}x \\
&\quad + \int_0^x\left(\frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial t^2} - u(x)K(x,t)\right)\cos\sqrt{\lambda}tdt.
\end{aligned}$$

On a

$$\frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial x^2} - u(x)K(x,t) = \frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial t^2}, \qquad (2.5)$$

avec les conditions aux limites

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial K(x,t)}{\partial t}\right|_{t=0} &= 0, \qquad (2.6)\\
\frac{dK(x,x)}{dx} &= \frac{1}{2}u(x). \qquad (2.7)
\end{aligned}$$

Pour les conditions initiales, on a

$$\psi(0,\lambda) = 1,$$

et

$$\psi'(0,\lambda)=K(0,0).$$

Comme

$$\psi'(0,\lambda)-\alpha\psi(0,\lambda)=0,$$

alors

$$K(0,0)=\alpha.$$

Par conséquent,

$$K(x,x)=\alpha+\frac{1}{2}\int_0^x u(t)dt. \tag{2.8}$$

Si $u(x)$ possède une dérivée continue, alors il existe une solution unique de (2.5), satisfaisant aux conditions (2.6) et (2.8). D'où, il existe une fonction $K(x,t)$ satisfaisant (2.2). Résolvons l'équation (2.2) en tant qu'équation de Volterra, nous obtenons

$$\cos\sqrt{\lambda}x=\psi(x,\lambda)-\int_0^x K_1(x,t)\psi(t,\lambda)dt, \tag{2.9}$$

et de la même manière que précédemment, on montre que $K_1(x,t)$ est solution de l'équation

$$\frac{\partial^2 K_1(x,t)}{\partial x^2}=\frac{\partial^2 K_1(x,t)}{\partial t^2}-u(t)K_1(x,t),$$

avec les conditions

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial K_1}{\partial t}-\alpha K_1\right)_{t=0} &= 0,\\ K(x,x) &= \alpha+\frac{1}{2}\int_0^x u(t)dt.\end{aligned}$$

Pour le cas $\alpha=\infty$, on cherche $\psi(x,\lambda)$ comme une perturbation de la fonction

$$x\longmapsto\psi(x,\lambda)=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\sin\sqrt{\lambda}x,$$

de (2.1) ou ce qui revient au même comme une transformée $(I+K)\psi_1(x,.)$ où K est un opérateur de Volterra dans $[0,+\infty[$. Autrement dit, on pose pour $\lambda\in\mathbb{C}$ et $x\geq 0$,

$$\psi(x,\lambda)=\frac{\sin\sqrt{\lambda}x}{\sqrt{\lambda}}+\int_0^x L(x,t)\frac{\sin\sqrt{\lambda}x}{\sqrt{\lambda}t}dt, \tag{2.10}$$

où L est une fonction à déterminer, soumise à la condition d'avoir des dérivées partielles d'ordre un et d'ordre deux continues dans l'ensemble des couples de réels (x,t) tels que : $0 \leq t \leq x$. En raisonnant comme précédemment, on obtient la relation

$$\frac{\partial^2 L(x,t)}{\partial x^2} - u(x)L(x,t) = \frac{\partial^2 L(x,t)}{\partial t^2},$$

avec les conditions

$$\begin{aligned} L(x,x) &= 0, \\ L(x,x) &= \frac{1}{2}\int_0^x u(t)dt. \end{aligned}$$

En résolvant l'équation (2.10), on obtient

$$\frac{\sin\sqrt{\lambda}x}{\sqrt{\lambda}} = \psi(x,\lambda) + \int_0^x L_1(x,t)\psi(t,\lambda)dt. \tag{2.11}$$

Les fonctions $L(x,t)$ et $L_1(x,t)$ possèdent les mêmes propriétés que les fonctions $K(x,t)$ et $K_1(x,t)$ obtenues précédemment.

Rappelons que pour toute fonction $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$, on a l'identité de Parseval

$$\int_0^\infty f^2(x)dx = \int_{-\infty}^\infty F^2(\lambda).d\rho(\lambda),$$

où

$$F(\lambda) \equiv \mathcal{F}\{f(x)\} = \int_0^\infty f(x)\psi(x,\lambda)dx,$$

est la transformée de Fourier de $f(x)$ et $\rho(\lambda)$ une fonction monotone, bornée sur tout intervalle fini. La suite de fonctions

$$F_n(\lambda) = \int_0^n f(x)\psi(x,\lambda)dx,$$

converge en moyenne quadratique (pour la mesure spectrale $\rho(\lambda)$) vers $F(\lambda)$, i.e.,

$$\lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^\infty (F(\lambda) - F_n(\lambda))^2 d\rho(\lambda) = 0.$$

On choisit $\rho(\lambda)$ sous la forme

$$\rho(\lambda) = \begin{cases} \frac{2}{\pi}\sqrt{\lambda} + \sigma(\lambda) & \text{si } \lambda > 0 \\ \sigma(\lambda) & \text{si } \lambda < 0 \end{cases}$$

où $\sigma(\lambda)$ désigne une mesure à support compact avec $\int_{-\infty}^\infty |\lambda|.|d\sigma(\lambda)| < +\infty$. Pour $0 < b < y < a < x$, les fonctions $\int_a^x \psi(t,\lambda)dt$ et $\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt$ sont orthogonales par rapport à $\rho(\lambda)$. Autrement dit, on a la relation d'orthogonalité :

$$I \equiv \int_{-\infty}^\infty \left(\int_a^x \psi(t,\lambda)dt\right)\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)d\rho(\lambda) = 0.$$

En effet, en intégrant l'équation (2.9) de b à y, on obtient

$$\begin{aligned}
\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}t dt &= \int_b^y \psi(t,\lambda)dt - \int_b^y dt \int_0^t K_1(t,s)\psi(s,\lambda)ds, \\
&= \int_b^y \psi(t,\lambda)dt - \int_0^b \psi(s,\lambda)ds \int_b^y K_1(t,s)dt \\
&\quad - \int_b^y \psi(s,\lambda)dt \int_s^y K_1(t,s)dt.
\end{aligned}$$

Par définition, cette fonction s'exprime à l'aide de la transformée (en $\psi(t,\lambda)$) d'une fonction nulle en dehors de l'intervalle $]b,y[$. Comme $]b,y[\cap]a,x[=\emptyset$, on déduit donc de l'égalité de Parseval que l'on a $I=0$.

Pour obtenir l'équation intégrale de Gelfand-Levitan, on procède comme suit : d'après l'équation (2.2), on a

$$\begin{aligned}
\int_a^x \psi(t,\lambda)dt &= \int_a^x \cos\sqrt{\lambda}t dt + \int_a^x dt \int_0^t K(t,s)\cos\sqrt{\lambda}s ds, \\
&= \int_a^x \cos\sqrt{\lambda}t dt + \int_0^a \cos\sqrt{\lambda}s ds \int_a^x K(t,s)dt \\
&\quad + \int_a^x \cos\sqrt{\lambda}s ds \int_s^x K(t,s)dt,
\end{aligned}$$

en vertu du théorème de Lebesgue-Fubini. Dès lors,

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}t dt\right)\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}t dt\right) d\rho(\lambda) \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_0^a \cos\sqrt{\lambda}s ds \int_a^x K(t,s)dt + \int_a^x \cos\sqrt{\lambda}s ds \int_s^x K(t,s)dt\right) \\
&\quad \times \left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}t dt\right) d\rho(\lambda) = 0.
\end{aligned}$$

Cette expression peut s'écrire, en utilisant la définition de $\rho(\lambda)$, sous la forme

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)d\sigma(\lambda)\\
&+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^a \cos\sqrt{\lambda}sds\int_a^x K(t,s)dt+\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}sds\int_s^x K(t,s)dt\right)\\
&\times\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)d\sigma(\lambda)\\
&+\frac{2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)d\sigma(\lambda)\\
&+\frac{2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^a \cos\sqrt{\lambda}sds\int_a^x K(t,s)dt+\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}sds\int_s^x K(t,s)dt\right)\\
&\times\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}tdt\right)d\sigma(\lambda)=0.
\end{aligned}$$

Puisque $b<y<a<x$, alors compte tenu de l'identité de Parseval, le troisième terme vaut zéro tandis que le quatrième est égal à

$$\int_b^y\left(\int_0^a \cos\sqrt{\lambda}sds\int_a^x K(t,s)dt+\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}sds\int_s^x K(t,s)dt\right)ds$$

$$=\int_b^y ds\int_a^x K(t,s)dt.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{(\sin\sqrt{\lambda}x-\sin\sqrt{\lambda}a)(\sin\sqrt{\lambda}y-\sin\sqrt{\lambda}b)}{\lambda}d\sigma(s)\\
&+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^a \cos\sqrt{\lambda}sds\int_a^x K(t,s)dt+\int_a^x \cos\sqrt{\lambda}sds\int_s^x K(t,s)dt\right)\\
&\times\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}sds\right)d\sigma(\lambda)\\
&+\int_b^y ds\int_a^x K(t,s)dt=0.
\end{aligned}$$

En posant

$$F(x,y)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\sqrt{\lambda}x\sin\sqrt{\lambda}y}{\lambda}d\sigma(\lambda),$$

et

$$G(x,s)\equiv\begin{cases}\int_a^x K(t,s)dt, & 0\le s\le a\\ \int_s^x K(t,s)dt, & a\le s\le x\\ 0, & s>x\end{cases}$$

l'équation ci-dessus devient

$$\begin{aligned} &F(x,y)-F(x,b)-F(a,y)+F(a,b)\\ &\qquad+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^x G(x,s)\cos\sqrt{\lambda}s ds\right)\left(\int_b^y \cos\sqrt{\lambda}s ds\right)d\sigma(\lambda)\\ &\qquad\qquad+\int_b^y ds\int_a^x K(t,s)dt=0. \end{aligned}$$

Cette dernière équation peut encore s'écrire, en faisant une intégration par parties et en remarquant que $G(x,x)=0$,

$$\begin{aligned} &F(x,y)-F(x,b)-F(a,y)+F(a,b)\\ &\qquad+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^x \frac{\partial G(x,s)}{\partial s}\frac{\sin\sqrt{\lambda}s}{\sqrt{\lambda}}ds\right)\left(\frac{\sin\sqrt{\lambda}y-\sin\sqrt{\lambda}b}{\sqrt{\lambda}}\right)d\sigma(\lambda)\\ &\qquad\qquad+\int_b^y ds\int_a^x K(t,s)dt=0. \end{aligned}\tag{2.12}$$

Or

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_0^x \frac{\partial G(x,s)}{\partial s}\frac{\sin\sqrt{\lambda}s}{\sqrt{\lambda}}ds\right)\left(\frac{\sin\sqrt{\lambda}y-\sin\sqrt{\lambda}b}{\sqrt{\lambda}}\right)d\sigma(\lambda),\\ &=\int_0^x\frac{\partial G(x,s)}{\partial s}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\sin\sqrt{\lambda}s\sin\sqrt{\lambda}y-\sin\sqrt{\lambda}s\sin\sqrt{\lambda}b}{\lambda}\right)d\sigma(\lambda)\right)ds,\\ &=\int_0^x\frac{\partial G(x,s)}{\partial s}\left(F(s,y)-F(s,b)\right)ds,\\ &=-\int_0^x G(x,s)\left(\frac{\partial F(s,y)}{\partial s}-\frac{\partial F(s,b)}{\partial s}\right)ds,\\ &=-\int_0^a\left(\frac{\partial F(s,y)}{\partial s}-\frac{\partial F(s,b)}{\partial s}\right)ds\left(\int_a^x K(t,s)dt\right)\\ &\qquad\qquad-\int_a^x\left(\frac{\partial F(s,y)}{\partial s}-\frac{\partial F(s,b)}{\partial s}\right)ds\left(\int_s^x K(t,s)dt\right),\\ &=\int_a^x dt\int_0^t\left(\frac{\partial F(s,y)}{\partial s}-\frac{\partial F(s,b)}{\partial s}\right)ds, \end{aligned}$$

donc l'équation (2.12) devient

$$\begin{aligned} &F(x,y)-F(x,b)-F(a,y)+F(a,b)+\int_a^x dt\int_0^t\left(\frac{\partial F(s,y)}{\partial s}-\frac{\partial F(s,b)}{\partial s}\right)ds\\ &\qquad\qquad+\int_b^y ds\int_a^x K(t,s)dt=0. \end{aligned}$$

En dérivant cette expression par rapport à y puis par rapport à x (la mesure σ est à support compact), on obtient

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} + \int_0^x K(x,s)\frac{\partial^2 F(s,y)}{\partial s \partial y} + K(x,y) = 0.$$

En posant

$$f(x,y) \equiv \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y},$$

on obtient finalement l'équation intégrale de Gelfand-Levitan pour la fonction $x \mapsto K(x,y)$ valable pour $0 < y < x$,

$$f(x,y) + K(x,y) + \int_0^x K(x,s)f(s,y)ds = 0, \qquad y \leq x. \tag{2.13}$$

Pour le cas $\alpha = \infty$, i.e., $\psi(x,\lambda) = \psi_2(x,\lambda)$, il suffit d'intégrer les deux membres de l'équation (2.11) de 0 à x et d'utiliser un raisonnement similaire. En vertu de l'hypothèse de continuité de K, l'équation (2.13) doit être vérifié pour $x = 0$ et $x = y$. Notons aussi que si on fixe x dans l'équation précédente, alors on aura ce qu'on appelle équation intégrale linéaire de Fredholm. On peut prouver que réciproquement, l'équation (2.13) admet une solution unique continue dans l'ensemble des couples de nombres réels tels que : $0 \leq t \leq x$.