# Contribution to the study of the Schrödinger equation : inverse problem in a bounded domain and bilinear optimal control of an Hartree-Fock equation.

Lucie Baudouin

UNIVERSITÉ DE VERSAILLES-SAINT-QUENTIN

# THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

## DOCTEUR EN SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE VERSAILLES-SAINT-QUENTIN

**Mention :** Mathématiques et Applications

par

**Lucie BAUDOUIN**

# Contributions à l'étude de l'équation de Schrödinger :

## problème inverse en domaine borné et contrôle optimal bilinéaire d'une équation de Hartree-Fock.

Thèse soutenue le mardi 9 novembre 2004 devant le jury composé de

| | |
|---|---|
| Président : | M. Thierry Cazenave |
| Rapporteurs : | M. Eric Cancès |
| | M. Jean-Pierre Raymond |
| Examinateurs : | M. Jean-Michel Coron |
| | M. Otared Kavian |
| Directeur de thèse : | M. Jean-Pierre Puel |

# Un grand merci !

*Lors de ma première visite de l'université de Versailles, impromptue car je me croyais destinée aux classes préparatoires, je me suis tout de suite sentie bien dans l'environnement que le mois de septembre 1996 offrait à ma vue. Quelques jours plus tard, je suis me suis donc inscrite en première année de DEUG MIAS, grâce aux bons soins de M. Bertin. C'était il y a huit ans, et j'ai passé depuis a peine une année loin de ces lieux.*

*Je tenais à commencer cette page de remerciements par l'évocation de tout ce que je dois aux enseignants que j'ai croisés pendant toutes ces années, comme étudiante en premier lieu. Beaucoup m'ont fortement marquée, dès les premiers TD et les premiers cours. Je ne donnerai pas de nom, mais s'ils se souviennent de moi à mes 18-20 ans, ils savent que je parle d'eux. La découverte des mathématiques est loin de se faire sans l'engouement de ceux qui les transmettent. J'était motivée, vous avez décuplé mon énergie. Merci !*

*Je voudrais maintenant exprimer toute ma gratitude à Jean-Pierre Puel. Il a eu la finesse de me proposer, dès la fin du DEA, des sujets de recherche qui m'ont intéressée et a su encadrer ces trois années de thèse avec confiance et dynamisme. Ses qualités d'enseignant, même face aux plus délicates manipulations que la recherche impose, ont toujours été de mise. Il a accompagné jusqu'au bout mes travaux de thèse : jusqu'aux derniers rebondissements et même au bout du monde, La Serena... Merci enfin pour vos qualités humaines et votre disponibilité malgré les voyages.*

*Je remercie très chaleureusement Jean-Pierre Raymond et Eric Cancès d'avoir accepté de rapporter sur ma thèse et d'y avoir mis une énergie très appréciable. Je remercie également sincèrement Thierry Cazenave, Jean-Michel Coron et Otared Kavian de me faire l'honneur de participer au jury. Merci particulièrement à Otared pour son amabilité et sa disponibilité au long de ces années.*

*Merci aux amis thésards, Jean-Philippe, Muriel, Guillaume, Eric, Sergio, Jean-Maxime, Michael, Romain et tous ceux qui gravitent autour, pour la bonne humeur générale et leur patience face à mes emportements. Je tiens aussi à remercier chaleureusement Violaine, pour sa sympathie, sa relecture attentive et ses conseils avisés.*

*Merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'état d'esprit approprié pour ce travail de longue haleine, que ce soit par leur amitié ou par leurs encouragements. Un merci particulier à Camille, Dorothée et Ludivine, à Geoffroy et Aurélien... mais je n'oublie pas tous les autres.*

*Je ne trouverai pas les mots pour dire exactement à mes proches tout ce que je leur dois. A chaque pas et à chaque détour du chemin, ils sont là, avec sollicitude et affection, avec la confiance en moi qui en manque parfois... Merci à mes parents, à Elise et Arnaud, à toute ma famille. Et merci, Alexandre, du fond du coeur.*

## Résumé

L'objet de cette thèse est l'étude de quelques propriétés de l'équation d'évolution de Schrödinger. Dans un premier temps, on s'intéresse à un problème inverse concernant cette équation posée en domaine borné, avec potentiel, lequel dépend uniquement de la variable d'espace, et donnée de Dirichlet sur le bord. On démontre, à l'aide d'une inégalité de Carleman, que le problème inverse de la détermination du potentiel à partir de la mesure du flux de la solution à travers une partie du bord est un problème bien posé. Dans un deuxième temps, il est question de l'équation de Schrödinger considérée dans $\mathbb{R}^3$ avec un potentiel coulombien, localement singulier, et un potentiel électrique non borné, tous deux dépendant des variables d'espace et de temps. On montre successivement l'existence d'une unique solution régulière pour l'équation linéaire et pour l'équation avec non-linéarité de Hartree. Ce sont des étapes préliminaires à l'étude d'un système couplant à travers le potentiel coulombien, cette équation de Hartree-Fock et une équation issue de la dynamique newtonienne. Les résultats obtenus ici sont indispensables à l'étude finale des problèmes de contrôle optimal bilinéaire posés à partir de ces différentes équation, le contrôle de la solution étant effectué par le potentiel électrique. On démontre l'existence d'un contrôle optimal et on donne la condition d'optimalité correspondante dans les cas appropriés.

**Mots-clés :** Equation de Schrödinger, problème inverse, inégalité de Carleman, potentiel singulier, existence, régularité, équation de Hartree-Fock, dynamique newtonienne, contrôle optimal bilinéaire, condition d'optimalité.

**AMS classification codes :** 35R30, 31B20, 35B65, 35Q40, 35Q55, 34A12,49J20.

## Abstract

This thesis deals with some properties of the time dependent Schrödinger equation. On the one hand, we study an inverse problem about this equation set in a bounded domain, with time independent potential and Dirichlet boundary data. Using a Carleman estimate, we prove the well-posedness of the inverse problem of determining the potential from measurements of the normal derivative of the solution through a part of the boundary. On the other hand, we consider a Schrödinger equation set in $\mathbb{R}^3$ with a coulombian potential, locally singular, and an electric unbounded potential, both depending on space and time variables. We prove the existence of a unique solution, as regular as the initial data, for the linear equation and for an equation with Hartree nonlinearity. This is a first step for the study of a system where this Hartree-Fock equation is coupled with classical newtonian dynamics. Eventually, we consider bilinear optimal control problems of the solution of these different equations, the control being performed by the external electric potential. We prove the existence of optimal controls and give optimality conditions in the suitable cases.

**Keywords :** Schrödinger equation, inverse problem, Carleman inequality, singular potential, existence, regularity, Hartree-Fock equation, classical dynamics, bilinear optimal control, optimality condition.

# Table des matières

# Introduction

Les équations aux dérivées partielles permettent d'aborder d'un point de vue mathématique des phénomènes observés, par exemple dans les domaines de la physique et de la chimie. Les situations dépendant du temps se traduisent plus particulièrement par des équations d'évolution tenant compte d'éventuelles interactions entre objets et événements.

Pour être mathématiquement abordables, ces équations ont souvent été largement simplifiées et leurs propriétés les plus étudiées sont parfois fort éloignées des réalités physiques auxquelles elles correspondent. Les recherches actuelles tendent à minimiser les contraintes mathématiques pour se rapprocher des exigences des sciences directement concernées. Notre contribution à l'étude des équations aux dérivées partielles se partage entre ces deux courants. Nos premiers travaux (Parties I et II) sont éloignés des préoccupations physiques en ce qu'ils restent très théoriques et difficilement applicables à des situations concrètes. Ceux que nous avons ensuite effectués (Partie III) nous rapprochent significativement des attentes expérimentales, tant au niveau des propriétés démontrées qu'au niveau de la pertinence de l'équation étudiée.

Les travaux présentés dans cette thèse concernent l'équation de Schrödinger, issue de la physique quantique et dont la solution est appelée "fonction d'onde". Le lecteur trouvera au chapitre 3 une description des processus permettant d'obtenir l'expression mathématique de cette équation à partir de sa formulation mécanique première. Elle se présente donc dans ce manuscrit sous la forme suivante :

$$i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) = f(x,t,u(x,t)),\ (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T). \tag{1}$$

La fonction d'onde $u$ décrit ici l'état d'une particule quantique, $\partial_t u$ est sa dérivée en temps, $\Delta$ est l'opérateur de Laplace. Le terme $f(u)$ modélise l'ensemble des influences subies par la particule. La solution $u$ dépend des variables de temps $t$ appartenant à l'intervalle $[0,T]$ et d'espace $x$ évoluant dans $\Omega$ qui sera borné dans $\mathbb{R}^d$ $(d \in \mathbb{N}^\star)$ ou égal à $\mathbb{R}^3$. Il faut préciser que la notion de particule quantique peut aussi bien correspondre à un atome, à une molécule, qu'à un ou plusieurs électrons. Comme précisé ci-dessus, on considère selon les chapitres différents modèles auxquels correspondent différentes formes de $f$. Le terme $f(u)$ contient alors l'action de divers potentiels : électriques comme $q(x)$ et $V_1(x,t)$ pour une action extérieure, ou coulombien comme $V_0(x,t)$ pour l'attraction exercée par d'autres particules, ainsi que d'éventuelles interactions internes à la particule quantique modélisée, comme $(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$ qui correspond à un terme de champs moyen.

La préoccupation première du mathématicien confronté à une équation aux dérivées partielles est de lui donner un sens dans des espaces fonctionnels appropriés et d'y démontrer l'existence d'une solution. Cependant, au delà de ce problème majeur, ces équations sont l'objet de multiples études approfondies sur leurs diverses propriétés. Les questions d'unicité de la solution, de sa régularité en fonction des données (initiales, aux limites...) ou de son comportement asymptotique en sont des exemples, auxquels s'ajoutent les problèmes de contrôlabilité exacte ou approchée, de contrôle optimal ou l'étude de problèmes inverses. Nous décrirons plus loin les propriétés que nous avons étudiées au sujet de l'équation de Schrödinger. Il est évident qu'en ce qui concerne (1), beaucoup de choses dépendent de la nature du terme source $f$.

Dans un premier temps, nous avons travaillé sur un problème inverse de détermination de potentiel posé à partir de l'équation (1) avec $f(u) = -qu$ et $q = q(x)$, en domaine $\Omega$ borné dans $\mathbb{R}^d$ avec donnée de Dirichlet sur le bord. Dans cette situation, l'existence, l'unicité et la régularité de la solution sont bien connues. On en présente les grandes lignes dans le chapitre 1. La résolution de l'équation

$$\left\{ \begin{array}{ll} i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) + q(x)u(x,t) = 0, & x \in \Omega,\ t \in (0,T) \\ u(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T) \\ u(x,0) = u_0, & x \in \Omega \end{array} \right. \tag{2}$$

de solution $u$ et en supposant connus la donnée initiale $u_0$ et le potentiel $q$ est ce que l'on nomme le *problème direct*. Par contre, la détermination du potentiel $q$ dans l'équation (2) à partir des valeurs de la donnée initiale $u_0$ et du flux de la solution $u$ à travers une partie $\Gamma_0$ de $\partial\Omega$ est ce que l'on appelle le *problème inverse*. Sa résolution fait l'objet du chapitre 2 de la partie I.

Nous nous sommes ensuite intéressés à la démonstration de l'existence et la régularité de la solution $u$ de l'équation

$$\left\{ \begin{array}{ll} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a(t)|} + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u, & x \in \mathbb{R}^3,\ t \in (0,T) \\ u(x,0) = u_0, & x \in \mathbb{R}^3 \end{array} \right. \tag{3}$$

qui correspond à l'équation (1) dans le cas $f(u) = -\frac{u}{|x-a|} - V_1 u + (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$ et $\Omega = \mathbb{R}^3$ (chapitre 5). Les potentiels $V_0$ et $V_1$ dépendent tous les deux des variables d'espace et de temps, mais si $V_0 = \frac{1}{|x-a|}$ est localement singulier (c'est un potentiel coulombien), $V_1$ est non borné à l'infini. Par la suite, nous nous intéressons également à un système couplant l'équation (3) avec une équation différentielle ordinaire d'ordre deux en temps et d'inconnue $a = a(t)$ et nous donnerons les détails plus loin dans cette introduction. Etant donnée l'incompatibilité apparente des deux potentiels $V_0$ et $V_1$, il est apparu indispensable de démontrer d'abord, dans le chapitre 4, l'existence et la régularité des solutions de l'équation linéaire (c'est-à-dire sans le terme $(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$).

Nous avons finalement travaillé la question du contrôle optimal bilinéaire de la solution $u$ de l'équation (1) par le potentiel $V_1$, dans les cas linéaire, non-linéaire et couplé. Dans la perspective de l'étude du contrôle optimal (Partie III), il a été indispensable de démontrer d'abord l'existence et la régularité des solutions (Partie II).

Nos travaux se présentent donc en trois parties, la première étant distincte des deux suivantes. Nous allons présenter ici les principaux objectifs de chacune d'entre elles.

# Première partie :<br>Problème inverse de détermination de potentiel.

Dans la formulation d'un phénomène à l'aide des équation aux dérivées partielles, tous les paramètres (par opposition aux solutions comme $u$) qui interviennent ne sont pas toujours bien connus. Des mesures expérimentales sont alors nécessaires à leur détermination. La notion de problème inverse consiste en la possibilité de retrouver la valeur d'un paramètre à partir de mesures sur la solution du système considéré.

Le problème inverse auquel nous nous intéressons dans cette thèse concerne l'équation de Schrödinger avec potentiel, posée en domaine borné avec donnée de Dirichlet sur le bord. Il s'agit précisément de démontrer que la mesure du flux de la solution de l'équation, à travers une partie suffisamment grande de la frontière du domaine, permet de retrouver la valeur du potentiel indépendant du temps intervenant dans l'équation.

On décrit la situation de la manière suivante. Soient $T > 0$ et $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné de frontière $\partial\Omega$ de classe $C^2$. On considère l'équation

$$\begin{cases} i\partial_t y(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = 0, & x \in \Omega,\ t \in (0,T) \\ y(x,t) = h(x,t), & x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0, & x \in \Omega \end{cases} \tag{4}$$

et on suppose que $q$ est une fonction bornée sur $\Omega$.

On peut préciser ici la notion de problème *bien posé* introduite par Hadamard. Si on se donne deux espaces de Banach $E$ et $F$ et $\phi$ une application de $E$ dans $F$, le problème mathématique consistant à chercher, pour un $b$ donné dans $F$, un élément $a$ de $E$ tel que $\phi(a) = b$ est dit *bien posé* si on peut vérifier que :

$(i)$ la solution du problème existe toujours, $ie$
$\forall\, b \in F, \exists\, a \in E$ tel que $\phi(a) = b$,

$(ii)$ la solution du problème est unique, $ie$
$\forall\, a_1, a_2 \in E,\ \phi(a_1) = \phi(a_2) \Rightarrow a_1 = a_2$,

$(iii)$ la solution dépend continûment des données (on dit $\phi$ *stable*) $ie$
$\phi^{-1}$ est continue de $F$ dans $E$.

Le chapitre 1 précise dans quels espaces $E$ et $F$ le problème direct, consistant à chercher la solution $u$ de l'équation (4) étant donnés $y_0$, $h$ et $q$, est bien posé.

La plupart des problèmes inverses pour les équations aux dérivées partielles sont mal posés, le plus souvent car l'application considérée est *instable*. Nous allons tout d'abord formuler le problème inverse qui est étudié dans le chapitre 2. Nous préciserons ensuite comment nous répondons effectivement aux difficultés fréquemment liées à cette classe de problèmes.

**Problème inverse non linéaire :** Peut-on retrouver le potentiel $q = q(x)$ pour tout $x$ de $\Omega$ à partir d'une mesure de la dérivée normale

$$\left.\frac{\partial y}{\partial \nu}\right|_{\Gamma_0 \times (0,T)}$$

où $y$ vérifie l'équation (4) et $\Gamma_0$ est une partie de la frontière $\partial\Omega$ ?

Le vecteur $\nu$ est la normale unitaire sortante à la frontière de $\Omega$ et on rappelle que la dérivée normale est définie par $\dfrac{\partial y}{\partial \nu} = \nabla y \cdot \nu$. Ici et dans toute la suite de l'introduction, la notation $\nabla$ vaut pour le gradient par rapport aux variables d'espace : $\nabla v = \left(\dfrac{\partial v}{\partial x_1}, \dots, \dfrac{\partial v}{\partial x_d}\right)$.

L'application $\phi_1 \, : \, q \mapsto \dfrac{\partial y}{\partial \nu}$ considérée ici est non-linéaire et c'est pourquoi le problème inverse correspondant l'est aussi. Il est possible de faire deux autres remarques. D'une part, il faudra préciser la taille de $\Gamma_0$ et de fait, une condition géométrique sera nécessaire. D'autre part, la réponse que nous allons apporter à ce problème est locale. C'est en effet autour d'un potentiel connu $q$, c'est-à-dire pour des potentiels $p$ proches de $q$ dans une certaine norme, que nous allons définir les notions d'unicité et de stabilité de ce problème inverse répondant ainsi, d'une certaine manière, à la question posée.

Pour clarifier la situation, nous allons, dans un premier temps, travailler sur une version linéarisée du problème inverse. Plus précisément, on se donne un potentiel $q$, la solution $y(q)$ de (4) est alors connue et si l'on pose

$$\begin{cases} v = y(p) - y(q) \\ f = q - p \\ R = y(q), \end{cases}$$

alors $v$ vérifie l'équation suivante :

$$\begin{cases} i\partial_t v + \Delta v + (q - f)(x) v = f(x) R(x,t), & \text{dans } \Omega \times (0,T) \\ v = 0, & \text{sur } \partial\Omega \times (0,T) \\ v(0) = 0, & \text{dans } \Omega. \end{cases}$$

Travailler sur une version linéarisée du problème inverse consiste à considérer la solution $u$ de l'équation

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) + q(x) u(x,t) = f(x) R(x,t), & x \in \Omega,\ t \in (0,T) \\ u(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T) \\ u(x,0) = 0, & x \in \Omega. \end{cases} \tag{5}$$

On remarquera que les résultats d'existence et de régularité décrits dans le chapitre 1 permettent de donner au moins un sens faible aux solutions des équations (4) et (5) et à leurs dérivées normales dès lors que l'on se place dans un cadre approprié.

**Problème inverse linéaire :** Peut-on déterminer le terme source $f$ sur $\Omega$ connaissant le flux à travers la paroi

$$\frac{\partial u}{\partial \nu}\Big|_{\Gamma_0 \times (0,T)}$$

de la solution de l'équation (5) ?

Sans entrer dans les détails, l'application $\phi_2 \, : \, f \mapsto \dfrac{\partial u}{\partial \nu}$ correspondant à ce problème est linéaire et la question sous-jacente de l'*unicité* de la solution du problème inverse linéaire peut être mathématiquement formulée de la façon suivante :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \nu}\Big|_{\Gamma_0 \times (0,T)} = 0\right) \Rightarrow (f = 0 \text{ sur } \Omega) \text{ ?}$$

C'est-à-dire, dans le cas non-linéaire, est-ce que deux mesures égales du flux à travers $\Gamma_0$ pendant un temps $T$ donnent deux potentiels egaux sur $\Omega$ ?

Par ailleurs, la notion cruciale de *stabilité* d'un problème inverse doit être abordée. Les principales difficultés rencontrées dans la démonstration des théorèmes que nous allons énoncer se présentent effectivement lors de l'étude de la stabilité. Dans le cadre non-linéaire, il s'agit de vérifier qu'il est possible d'estimer la distance entre deux potentiels $p$ et $q$ par une norme convenable de la différence entre les mesures des deux flux correspondants :

$$\frac{\partial y(p)}{\partial \nu}\Big|_{\Gamma_0\times(0,T)} \text{ et } \frac{\partial y(q)}{\partial \nu}\Big|_{\Gamma_0\times(0,T)}.$$

En d'autres termes, dans le cadre linéaire, la *stabilité* du problème se traduit par la possibilité d'estimer la norme de $f$ par celle de $\frac{\partial u}{\partial \nu}\Big|_{\Gamma_0\times(0,T)}$ dans des espaces appropriés. Cela correspond à la continuité de l'application $\phi_2^{-1}$.

Les livres de V. ISAKOV [23, 24] et de A. L. BUKHGEIM [7] permettent d'aborder plusieurs techniques liées à la résolution de problèmes inverses posés pour diverses équations. Cependant, la plupart des résultats existants pour le type de problème inverse qui nous intéresse concernent l'équation des ondes. Par exemple, dans [41] et [53], J.-P. PUEL et M. YAMAMOTO, étudient la détermination du potentiel à partir d'une donnée de Dirichlet et une mesure de Neumann, comme dans la situation qui nous intéresse. O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO s'intéressent dans [20, 21] à la situation où l'équation des ondes est avec donnée de Neumann et l'on retrouve le potentiel à l'aide d'une mesure de Dirichlet. Tous ces articles sont basés sur des inégalités de Carleman, globales ou locales, et fournissent des résultats de stabilité.

Historiquement, c'est d'abord l'unicité dans les problèmes inverses qui est résolue. A ce sujet, le papier commun de A. L. BUKHGEIM et M.V. KLIBANOV publié en 1981 fait date : on y trouve pour la première fois une méthode basée sur les inégalités de Carleman. On peut ensuite évoquer [29] de KLIBANOV et les travaux [27] de A. KHAIDAROV.

Plus tard, on trouve dans l'article [41] de J.-P. PUEL et M. YAMAMOTO comment l'unicité du problème inverse pour l'équation des ondes implique la stabilité globale lipschtizienne pour des normes appropriées. Les auteurs sont cependant obligés de choisir des données très régulières et l'article plus récent de M. YAMAMOTO [53] affine le résultat, toujours en partant de l'unicité et d'une inégalité d'observabilité. Il reste que les résultats de stabilité, s'ils sont de plus en plus nombreux, sont plus rares que ceux d'unicité.

On peut enfin signaler la résolution de problèmes inverses posés sur des équations stationnaires par l'utilisation de "Dirichlet to Neuman map". Nous faisons référence à [9] et [45] par A. L. BUKHGEIM, J. SYLVESTER et G. UHLMANN, en signalant que leur formulation nécessite des observations pour toutes les données au bord, ce qui n'est pas notre cas. Par contre, nous avons besoin de mesures durant un temps d'observation $T > 0$ et cela constitue une autre forme de répétition des observations.

L'objet principal de l'article présenté dans le chapitre 2 est la démonstration du théorème suivant, qui répond au problème inverse non linéaire correspondant à l'équation (4).

**Résultat 1.** *Soient $\Omega$ un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$ et $\Gamma_0$ une partie de sa frontière. Soit $\mathcal{U}$ un sous ensemble borné de $L^\infty(\Omega)$ et soient $q \in L^\infty(\Omega)$ et $r_0 > 0$.*
*On considère la solution $y(q)$ de l'équation $(4)$ et on suppose que :*

$$\begin{aligned}
&\exists\, x_0 \in \mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega} \ \textit{ tel que } \ \{x \in \partial\Omega; (x - x_0).\nu(x) \geq 0\} \subset \Gamma_0,\\
&y(q) \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega)) \cap W^{2,1}(0,T,L^\infty(\Omega)),\\
&y_0 \ \textit{ est à valeurs réelles et } \ |y_0(x)| \geq r_0 \ \textit{ presque partout dans } \ \Omega.
\end{aligned}$$

*Alors il existe une constante $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty}, y_0, h, \mathcal{U}) > 0$ telle que quelque soit $p$ appartenant à $\mathcal{U}$ et vérifiant $q - p \in H_0^1(\Omega)$, on a*

$$C^{-1}\, \|q - p\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\, \|q - p\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

L'inégalité de droite traduit la dépendance continue de la dérivée normale par rapport au potentiel et découle des résultats classiques de régularité détaillés dans le chapitre 1. L'inégalité de gauche donne la stabilité et bien sûr l'unicité du problème inverse non linéaire que nous étudions. Ce dernier résultat découle principalement d'une inégalité de Carleman globale pour l'équation de Schrödinger avec potentiel, que nous allons présenter aussi dans le chapitre 1. L'intérêt de notre démonstration, comme ce que l'on peut lire dans [21] par O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO et par rapport à de nombreux travaux, comme [53] de YAMAMOTO, (pour ne citer que ceux là), est la preuve directe de l'inégalité de stabilité, sans passer au préalable par un résultat d'unicité.

Nous signalons que ce résultat est encore vrai si l'on remplace l'hypothèse "$y_0$ est à valeurs réelles" par "$y_0$ prends ses valeurs dans $i\mathbb{R}$". Par contre, si $y_0$ est plus général et prends ses valeurs dans $\mathbb{C}$ et si on considère l'équation $(4)$ sur $(-T, T)$, on saura estimer $\|q - p\|_{H_0^1(\Omega)}$ par $\left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|_{H^1(-T,T;L^2(\Gamma_0))}$.

Dans un premier temps, nous démontrons en fait un théorème répondant au problème inverse linéaire de détermination d'une partie d'un terme source.

**Résultat 2.** *Soient $\Omega$ un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$ et $\Gamma_0$ une partie de sa frontière. Soient $q \in L^\infty(\Omega)$ tel que $\|q\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M$ et $r_0 > 0$. On suppose que*

$$\begin{aligned}
&\exists\, x_0 \in \mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega} \ \textit{ tel que } \ \{x \in \partial\Omega; (x - x_0).\nu(x) \geq 0\} \subset \Gamma_0,\\
&R \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega)), \ R(0) \ \textit{ est à valeurs réelles et}\\
&|R(x,0)| \geq r_0 \ \textit{ presque partout dans } \ \Omega.
\end{aligned}$$

*Alors il existe une constante $C = C(\Omega, T, M, \|R\|_{W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))}) > 0$ telle que pour tout $f \in H_0^1(\Omega)$, si $u$ est la solution de l'équation $(5)$,*

$$C^{-1}\, \|f\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\, \|f\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

Nous travaillons essentiellement sur l'équation vérifiée par la dérivée en temps de $u$. La démonstration de l'inégalité de droite découle alors des résultats classiques de régularité et celle de gauche utilise l'inégalité de Carleman. L'idée principale est inspirée de l'article [21] de O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO. On pourra remarquer que contrairement à la double inégalité du Résultat 1, celle énoncée ici n'est pas symétrique.

Dans le résultat concernant le cas linéaire, toutes les constantes qui apparaissent dépendent uniquement de la norme $L^\infty$ du potentiel. C'est la clé de la démonstration du Résultat 1 à partir du Résultat 2. Ainsi, dès que $q \in \mathcal{U}$, où $\mathcal{U}$ est un borné de $L^\infty(\Omega)$, on se ramène pour l'équation vérifiée par $y(p) - y(q)$ à une situation similaire au cas linéaire. Il reste ensuite à symétriser la double inégalité obtenue. C'est un résultat obtenu à partir d'une inégalité d'observabilité, citée dans le chapitre 1 et démontrée dans le chapitre 2.

Une autre approche de l'unicité de la détermination de potentiel, pour un problème stationnaire, est considérée dans [9] par A. L. BUKHGEIM et G. UHLMANN, où l'on suppose connue l'application qui, à chaque donnée de Dirichlet, associe la valeur de la dérivée normale de la solution sur $\Gamma_0$. Dans le cas ou la mesure de la dérivée normale se fait sur la totalité de la frontière de $\Omega$, il faut citer le résultat d'unicité globale [45] de J. SYLVESTER et G. UHLMANN. Les résultats d'unicité obtenus par les auteurs de [9], outre la condition sur la partie $\Gamma_0$ de la frontière considérée, présentent de grandes analogies avec les nôtres. Nous faisons une unique mesure mais pendant un intervalle de temps $(0, T)$ tandis qu'ils font une infinité de mesures correspondant à chaque donnée au bord. L'utilisation d'une inégalité de Carleman et les conclusions obtenues rapprochent significativement nos travaux mais la comparaison des deux résultats reste une question ouverte intéressante.

Dans un deuxième temps, nous avons voulu nous rapprocher des préoccupations des mathématiques appliquées à la chimie quantique en nous intéressant au problème de contrôle optimal bilinéaire d'une équation de Schrödinger non-linéaire modélisant un atome d'Hélium.

## Deuxième partie :
## Existence et Régularité.

Nous répondrons précisément dans le chapitre 3 à la question de la modélisation d'un atome d'Hélium soumis à un champ électrique non homogène, dépendant du temps. Le système d'équations qui suit en est la conclusion. Nous considérons

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x - a(t)|} u + V_1(x,t)u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(x,0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2 a}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla \left( \dfrac{1}{|x-a|} \right) dx - \nabla V_1(a), & t \in (0,T) \\ a(0) = a_0, \ \ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0. \end{cases} \tag{6}$$

La variable $u$ est la fonction d'onde des deux électrons de l'atome et correspond en fait précisément à l'orbitale spatiale générant les spin-orbitales de chacune des deux particules quantiques. La variable $a$ est la position du noyau, considéré comme une particule classique et soumise aux règles de la dynamique newtonienne.

La première équation de ce système, appelée équation de Hartree-Fock, modélise le comportement des électrons soumis au potentiel coulombien d'attraction du noyau

$\dfrac{1}{|x-a|}$ et au potentiel électrique extérieur $V_1$. L'interaction entre les deux électrons est traduite par le second membre $(|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u$. La deuxième équation modélise la position du noyau soumis à un champ électrique à travers le terme $\nabla V_1(a)$ et interagissant avec le nuage électronique par le biais d'un potentiel dit de "Hellmann-Feynman" de la forme $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla(\frac{1}{|x-a|})\, dx$.

Nous faisons les hypothèses suivantes sur le potentiel électrique $V_1$ :

$$\begin{array}{rcl} (1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)), \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \text{ et} \\ \nabla V_1 & \in & L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right). \end{array} \tag{7}$$

Avant de travailler dans la troisième partie de cette thèse sur un problème de contrôle optimal bilinéaire lié à ces équations, nous présentons ici les résultats d'existence et de régularité des solutions de (6). Nous introduisons l'espace :

$$H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3) = \left\{ v \in H^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^2 |v(x)|^2\, dx < +\infty \right\}$$

qui est l'intersection de l'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^3)$ et de son image par la transformée de Fourier.

**Résultat 3.** *Soit $T > 0$ un temps arbitraire. Si $V_1$ vérifie l'hypothèse* (7)*, et si $u_0 \in H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3)$ et $(a_0, v_0) \in \mathbb{R}^2$, alors le système* (6) *possède au moins une solution*

$$(u,a) \in \left(L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3)) \cap W^{1,\infty}(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))\right) \times W^{2,1}(0,T).$$

Dans le cas particulier d'un champ laser où le champ $\nabla V_1$ peut être considéré comme homogène en espace ($V_1(x,t) = E(t)\cdot x$), E. CANCÈS et C. LE BRIS démontrent l'existence et l'unicité d'une solution globale $(u,a)$ au système correspondant. Ils utilisent ainsi dans [10] un changement d'inconnues qui permet d'éliminer le potentiel électrique et d'utiliser par la suite les résultats de K. YAJIMA, démontrés dans [51], sur l'équation de Schrödinger linéaire avec potentiel coulombien. Cette technique, dite de *changement de jauge*, à été précédemment exploitée par R. J. IORIO et D. MARCHESIN [22] dans des circonstances similaires. Les potentiels électriques que nous considérons sont plus généraux et ne permettent pas cette possibilité. Nous avons besoin d'un résultat central sur l'équation de Schrödinger *linéaire* avec potentiels singuliers $V_0 = \frac{1}{|x-a|}$ et $V_1$. Il permettra de lever certaines des difficultés rencontrées dans la démonstration de l'existence d'un couple $(u,a)$ solution.

Nous devons par ailleurs signaler que la démonstration de l'unicité de la solution de notre système reste un problème ouvert. Nous avons tenté d'utiliser une méthode directe (en écrivant le système vérifié par la différence de deux solutions) et une méthode par dualité. Dans les deux cas, les singularités apparaissant dans le système à considérer ne permettent pas d'écrire les plus simples estimations a priori. Il faut signaler que les espaces de Lorentz, utilisés dans [10] pour démontrer l'unicité dans le cas sans potentiel électrique, ne sont pas appropriés au potentiel $V_1$ et que c'est le changement de jauge qui donne à la fois existence et unicité pour le problème avec potentiel homogène en espace.

On trouvera la démonstration du Résultat 3 dans le chapitre 5. C'est l'aboutissement de plusieurs démarches. En premier lieu, comme nous l'avons suggéré plus haut, nous démontrons dans le chapitre 4 un résultat général d'existence et de régularité pour l'équation de Schrödinger linéaire contenant les potentiels $V_0 = \frac{1}{|x-a|}$ et $V_1$ dont les singularités sont de natures très différentes. Dans un deuxième temps, il s'agit de traiter la présence d'une non-linéarité dans cette équation pour finalement pouvoir aborder le couplage à travers le potentiel coulombien de l'équation de Hartree-Fock pour $u$ avec une équation différentielle ordinaire pour $a$.

On considère ainsi tout d'abord l'équation de Schrödinger linéaire :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a(t)|} + V_1(x,t)u = 0, & (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(x,0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{8}$$

où le potentiel $V_1$ est à valeurs réelles et vérifie avec $a$ les hypothèses :

$$\begin{array}{rcl} a & \in & W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3) \\ (1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \text{ et} \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)). \end{array} \tag{9}$$

L'article qui est présenté dans le chapitre 4 donne la démonstration du théorème d'existence et d'unicité de la solution de l'équation (8) que nous citons ici :

**Résultat 4.** *Si $u_0 \in H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3)$, alors l'équation (8) admet une unique solution $u \in L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3))$ telle que $\partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))$.*
*De plus, si on définit $\alpha > 0$ et $\rho > 0$ tels que*

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho \quad \textit{et} \quad \left\| \frac{d^2 a}{dt^2} \right\|_{L^1(0,T)} \leq \alpha,$$

*alors il existe une constante positive $C$ dépendant de $T$, $\alpha$ et $\rho$, telle que*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))} \leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)}.$$

Dans le cas où $V_1 = 0$, K. YAJIMA démontre que l'équation (8) étudiée dans $\mathbb{R}^d \times (0,T)$ avec $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^d)$ admet une unique solution $u \in C([0,T];H^2(\mathbb{R}^d)) \cap C^1([0,T];L^2(\mathbb{R}^d))$, en utilisant notamment les résultats de T. KATO (référence [26]). Mais la véritable difficulté que l'on rencontre lors de l'étude de l'équation de Schrödinger linéaire (8) est la présence simultanée de deux potentiels (coulombien et électriques) aux propriétés très différentes.

Dans le chapitre 4, où se trouve la démonstration du Résultat 4, nous travaillons sur une version régularisée de l'équation (8), de solution $u_\varepsilon$. Ceci permet de traiter des situations mettant en jeu des potentiels réguliers et de justifier un grand nombre des calculs effectués.

Dans un premier temps, nous démontrons un résultat d'existence et de régularité dans l'espace

$$H^1 \cap H_1(\mathbb{R}^3) = \left\{ v \in H^1(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|v(x)|^2\,dx < +\infty \right\}$$

sous des hypothèses moins fortes sur $a$ et $V_1$. Nous travaillons effectivement sur une version régularisée de l'équation (8) et démontrons l'existence de bornes uniformes en $\varepsilon$ de

$$\|\nabla u_\varepsilon\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \left\|(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}} u_\varepsilon\right\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

Un passage à la limite quand $\varepsilon$ tend vers $0$ permet de conclure.

Ensuite, pour démontrer le Résultat 4, nous poursuivons l'objectif d'écrire des bornes de l'énergie

$$E_\varepsilon(t) = \|(1+|x|^2)u_\varepsilon\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|\partial_t u_\varepsilon\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)}$$

du système régularisé qui soient également uniformes en $\varepsilon$. S'il est facile d'estimer le premier terme, il n'en est pas de même pour la norme de $\partial_t u_\varepsilon$. Nous devons donc travailler sur la dérivée en temps de l'équation régularisée. Pour ne pas être amenés à étudier une équation ayant dans le second membre un terme de la forme $\partial_t V_0^\varepsilon u_\varepsilon$, qui ne se trouve pas dans un espace pour lequel nous savons démontrer l'existence de solution et donner des estimations, nous allons avoir recours à un changement de variable avant la dérivation de l'équation.

Nous posons $y = x - a(t)$ et considérons l'équation vérifiée par la dérivée en temps de $v^\varepsilon(t,y) = u^\varepsilon(t,x)$. Il faut remarquer que dans l'équation vérifiée par $v^\varepsilon(t,y)$, le potentiel coulombien est maintenant $\frac{1}{|y|}$ et n'a pas de dérivée en temps. Nous sommes alors capable de démontrer une estimation de $\|\partial_t v^\varepsilon(t)\|_{L^2}$ qui nous permet d'obtenir l'estimation espérée de la norme $L^2$ de $\partial_t u_\varepsilon$. Nous signalons que nous avons pris soin de choisir les régularisations des termes $u_0$, $V_0$ et $V_1$ bornées par les normes de ceux -ci dans les espaces où ils sont définis.

Nous attirons l'attention sur le fait que notre démonstration ne convient pas à une situation où un système contenant deux noyaux serais modélisé, à cause précisément du changement de variable utilisé.

Finalement, nous sommes en mesure d'écrire une estimation de l'énergie $E_\varepsilon(t)$ puis de passer à la limite quand $\varepsilon$ tend vers $0$. La limite $u$ de $(u_\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ est la solution de (8) et vérifie effectivement

$$u \in L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3)) \text{ et } \partial_t u \in L^\infty(0,T; L^2(\mathbb{R}^3)).$$

L'unicité de la solution est démontrée grace à des estimations sur $L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))$. Outre tous les détails concernant cette démonstration, nous donnons également dans l'article présenté au chapitre 4, des résultats de continuité faible et forte, pour une donnée initiale $u_0$ dans $H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3)$ : $u \in C_{\mathrm{w}}([0,T]; H^2 \cap H_2(\mathbb{R}^3))$ et $u \in C([0,T]; H^1 \cap H_1(\mathbb{R}^3))$.

Il est commode, pour la suite, de présenter ce résultat sous la forme d'un corollaire contenant la notion de propagateur.

**Corollaire 5.** *Soient $a$ et $V_1$ vérifiant l'hypothèse* (9) *et soit $\rho > 0$ tel que*

$$\|(1+|x|^2)^{-1}V_1\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \|(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho.$$

*On définit la famille de Hamiltoniens $\{H(t), t \in [0,T]\}$ par*

$$H(t) = -\Delta - \frac{1}{|x-a|} - V_1.$$

*Alors il existe une unique famille d'opérateurs d'évolution* $\{U(t,s),(s,t)\in[0,T]^2\}$ *(appelée propagateur associé à* $H(t)$*) sur* $H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)$ *telle que pour tout* $u_0\in H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)$ *:*

$(i)$ $U(t,s)U(s,r)u_0=U(t,r)u_0$ *et*
$U(t,t)u_0=u_0$ *pour tout* $(s,t,r)\in[0,T]^3$;

$(ii)$ $(t,s)\mapsto U(t,s)u_0$ *est fortement continue de* $[0,T]^2$ *dans* $L^2(\mathbb{R}^3)$ *et*
$U(t,s)$ *est une isométrie de* $L^2$ : $\|U(t,s)u_0\|_{L^2}=\|u_0\|_{L^2}$;

$(iii)$ $U(t,s)\in\mathcal{L}(H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))$ *pour tout* $(s,t)\in[0,T]^2$ *et* $(t,s)\mapsto U(t,s)u_0$ *est faiblement continu de* $[0,T]^2$ *dans* $H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)$; *de plus, pour tout* $\alpha>0$, *il existe* $M_{T,\alpha,\rho}>0$ *tel que :* $\forall t,s\in[0,T],\ \forall f\in H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)$,

$$\|a\|_{W^{2,1}(0,T)}\le\alpha\ \Rightarrow\ \|U(t,s)f\|_{H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)}\le M_{T,\alpha,\rho}\|f\|_{H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)};$$

$(iv)$ *les égalités* $i\partial_t U(t,s)u_0=H(t)U(t,s)u_0$
*et* $i\partial_s U(t,s)u_0=-U(t,s)H(s)u_0$ *sont vérifiées dans* $L^2(\mathbb{R}^3)$.

On considère maintenant l'équation dite de *Hartree-Fock*, qui consiste en une équation de Schrödinger avec les potentiels électrique et coulombien et une non-linéarité de Hartree :

$$\begin{cases} i\partial_t u+\Delta u+\dfrac{u}{|x-a(t)|}+V_1(x,t)u=(|u|^2\star\dfrac{1}{|x|})u, & (x,t)\in\mathbb{R}^3\times(0,T)\\ u(x,0)=u_0(x), & x\in\mathbb{R}^3. \end{cases} \tag{10}$$

On précise le lien de cette équation avec le système couplé (6). Il est assez fréquent dans la littérature concernant les équations issues de la chimie quantique de simplifier la situation considérée en supposant connues les positions des noyaux (par exemple dans [14] ou [50]). On peut alors remarquer que si la position $a(t)$ du noyau est déjà connue, alors la modélisation de l'évolution d'un atome d'Hélium dans un champ électrique non-homogène correspond à l'équation (10).

On démontre le théorème suivant dans le chapitre 5.

**Résultat 6.** *Si* $u_0\in H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)$ *et si* $a$ *et* $V_1$ *vérifient* (7)*, alors l'équation* (10) *admet une unique solution*

$$u\in L^\infty(0,T;H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))\ \text{ telle que }\ \partial_t u\in L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3)).$$

*De plus, il existe une constante positive* $C$ *telle que :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))}+\|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))}\le C\|u_0\|_{H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)}.$$

Ce théorème est démontré à partir du Corollaire 5 et d'un théorème de point fixe de Picard. Un lemme permettant de traiter la non-linéarité, qui s'avère être localement lipschitzienne dans les bons espaces, permet de conclure pour un $T>0$ suffisamment petit. Nous nous appuyons ensuite sur des estimations *a priori* pour étendre ce résultat aux temps $T>0$ quelconques.

Pour la démonstration du Résultat 3, on montrera tout d'abord deux lemmes concernant les deux équations en jeu séparément l'une de l'autre, et par un argument de point fixe de Schauder, la preuve du théorème pour un temps $T>0$ suffisamment petit. Une estimation a priori, valable pour toute solution de la bonne classe, permet ensuite de démontrer le Résultat 3 pour un temps $T$ arbitraire. On démontre en effet :

**Proposition 7.** *Soit* $(u,a)$ *une solution du système couplé* (6) *dans la classe*

$$\left[W^{1,\infty}(0,T;L^2(\mathbb{R}^3)) \cap L^\infty(0,T;H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))\right] \times W^{2,1}(0,T).$$

*Si* $\rho > 0$ *vérifie*

$$\|(1+|x|^2)^{-1}V_1\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \|(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho$$

*alors il existe une constante* $R > 0$ *qui dépend de* $\rho$ *telle que* $\|a\|_{C([0,T])} \leq R$ *et si* $\rho_1 > 0$ *est tel que*

$$\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{W^{1,1}(0,T;L^\infty)} + \left\|\frac{\nabla V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B(0,R)))} \leq \rho_1$$

*alors il existe une constante positive* $K$ *dependant de* $T$*,* $\rho_1$*,* $\|u_0\|_{H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3)}$*,* $|a_0|$ *et* $|v_0|$*, telle que :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2(\mathbb{R}^3))} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))} + m\ \left\|\frac{d^2a}{dt^2}\right\|_{L^1(0,T)} + m\ \left\|\frac{da}{dt}\right\|_{C([0,T])}$$
$$+ \sup_{t\in[0,T]} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \left(|u(t,x)|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \leq K.$$

Avec les résultats présentés ici et démontrés dans la deuxième partie de ce manuscrit, nous avons en partie répondu aux questions fondamentales d'existence, d'unicité et de régularité des solutions de quelques équations de Schrödinger. Mais nous avons également procédé à la mise en place des pré-requis à l'étude de problèmes de contrôle optimal liés à ces équations et présentés maintenant.

# Troisième partie :<br>Contrôle optimal bilinéaire.

L'optimisation d'un processus consiste à se donner une modélisation de la situation étudiée sous forme d'équations d'état, un contrôle qui permet d'agir sur ces équations et enfin une fonction de coût correspondant à ce que l'on tentera de minimiser. On parle alors de contrôle optimal, et il s'agit précisément de minimiser une fonctionnelle dépendant de la solution d'une équation aux dérivées partielles et de caractériser son minimum par un système d'équations appelé système d'optimalité. On trouvera des travaux très exhaustifs à ce sujet dans [33] par J.-L. Lions. Les problèmes considérés peuvent être très différents selon que l'application *contrôle* $\mapsto$ *état* est linéaire ou non-linéaire. Nous allons étudier ici un cas où cette application est non-linéaire.

D'un point de vue général, au delà d'une démonstration de l'existence d'un contrôle optimal, on retiendra deux idées. La première concerne l'obtention d'une condition d'optimalité qui nécessite le calcul du gradient de la fonctionnelle de coût : il faudra dériver la variable d'état du système par rapport à la variable de contrôle et cela peut s'avérer délicat, voire problématique (surtout en cas d'absence d'unicité de la solution de l'équation d'état). La seconde est l'une des idées majeures de la théorie du contrôle. C'est la notion d'état adjoint, les opérateurs intervenant dans sa définition étant les adjoints des opérateurs de l'équation d'état, qui permet de simplifier considérablement l'expression du gradient de la fonctionnelle de coût et de reformuler par la suite la condition d'optimalité associée.

Notre objectif dans cette dernière partie de la thèse est l'étude du problème de contrôle optimal bilinéaire posé avec le système d'équations couplées (6). On définit l'espace fonctionnel

$$\mathcal{H} = \left\{ V, (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;\mathcal{W}) \text{ et } \nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)\right) \right\}$$

où $\mathcal{W}$ est un espace de Hilbert tel que $\mathcal{W} \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$. On présente alors le problème de contrôle optimal bilinéaire suivant : soit $(u,a)$ une solution du problème couplé (6) et soient $r > 0$ un poids quelconque et $J$ la fonctionnelle de coût définie par

$$J(V_1,u) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(T)-u_1|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V_1\|^2_{\mathcal{H}}.$$

Le potentiel $V_1$ est notre paramètre de contrôle et l'objectif est d'amener la fonction d'onde $u$ des électrons le plus près possible d'un état cible $u_1$ en minimisant la fonctionnelle $J$ par rapport à $V_1$ dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$.

La particularité du contrôle optimal étudié tient au fait que la variable de contrôle $V_1$ multiplie la variable d'état $u$ dans l'équation (10). La dénomination *bilinéaire* est ainsi expliquée et la non-linéarité de l'application $V_1 \mapsto u$ influe particulièrement sur les démonstrations. On démontre dans le dernier chapitre du manuscrit le théorème qui suit :

**Résultat 8.** *Il existe un contrôle optimal $V_1$ dans $\mathcal{H}$ tel que*

$$J(V_1,u) = \inf\{J(V,u), V \in \mathcal{H}\}.$$

Dans la démonstration de ce résultat, on fera remarquer que dans l'espace $\mathcal{H}$ choisi plus haut on peut en fait remplacer l'hypothèse $\nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)\right)$ par la suivante : $\nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right)$. Dans la fonctionnelle $J$, il faut alors remplacer $\|V_1\|^2_{\mathcal{H}}$ par $\left\|(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1\right\|^2_{H^1(0,T;\mathcal{W})} + \|\nabla V_1\|^2_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))}$ où $B_R$ est la boule $B(0,R)$ de $\mathbb{R}^3$. La Proposition 7 permet en effet d'affirmer que sans aucune hypothèse sur $\nabla V_1$, que l'on considère appliqué au point $a$ dans les équations, on peut borner la solution $a$ dans $C([0,T])$.

C'est ainsi que, pour obtenir une condition d'optimalité, on va pouvoir travailler dans l'espace de Hilbert :

$$\widetilde{\mathcal{H}} = \left\{ V, (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;H^3 \oplus \text{Sp}\{\psi_1\}) \cap L^2\left(0,T;H^4 \oplus \text{Sp}\{\psi_1\}\right) \right\}$$

où $\psi_1 \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \setminus H^3$ et $\nabla\psi_1 \in W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$. Plus précisément nous donnerons une interprétation de la condition d'optimalité dans le cas particulier $\psi_1 = \mathbb{1}$. On remarquera par ailleurs que

$$\widetilde{\mathcal{H}} \subset \left\{ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;\mathcal{W}) \text{ et } \nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right) \right\}$$

En effet, $H^3(\mathbb{R}^3) \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ et le poids $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}$ n'est influent qu'à l'infini donc $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1(t) \in H^4$ implique $V_1(t) \in W^{2,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$.

Ensuite, si $V_1$ est le contrôle optimal correspondant à la fonctionnelle $J$ contenant le terme $\|V_1\|_{\widetilde{\mathcal{H}}}$ alors $DJ(V_1) = 0$ dans $\mathcal{L}\left(\widetilde{\mathcal{H}}\right)$. Ainsi, pour pouvoir calculer la différentielle de $J$ par rapport à $V_1$, puisque $\widetilde{\mathcal{H}}$ est un espace de Hilbert, il ne reste qu'à démontrer la différentiabilité de la fonctionnelle

$$\Phi : V_1 \longmapsto (u(V_1), a(V_1))$$

à valeur dans $C([0,T]; L^2(\mathbb{R}^3)) \times C^1([0,T])$. On peut déjà remarquer que $\Phi$ n'est pas bien définie dès lors que l'unicité de la solution du système (6) n'est pas démontrée. Ce que l'on peut donc proposer ensuite n'est que formel mais permet de mieux cerner les difficultés qu'il faudrait affronter pour faire une démonstration rigoureuse.

Si on suppose $\Phi$ bien définie et différentiable et si l'on note, pour $\delta V_1 \in \widetilde{\mathcal{H}}$

$$D\Phi(\delta V_1) = (z, b)$$

alors $(z(x,t), b(t))$ doit vérifier le système couplé :

$$\begin{cases} i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z = \nabla V_0 \cdot b\, u - \delta V_1 u + (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})z + 2(Re(u\overline{z}) \star \dfrac{1}{|x|})u, \\ z(0) = 0, \\ m\dfrac{d^2 b}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} \left(-|u|^2 \nabla(\nabla V_0) \cdot b + 2Re(u\overline{z})\nabla V_0\right) dx - \nabla \delta V_1(a) - \nabla(\nabla V_1).b(a), \\ b(0) = 0,\ \dfrac{db}{dt}(0) = 0 \end{cases}$$

dans $[0,T] \times \mathbb{R}^3$ et avec $V_0(x,t) = \dfrac{1}{|x - a(t)|}$. Le système adjoint, que l'on peut alors obtenir formellement, s'écrit

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + V_0 p + V_1 p = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})p + 2i\,(Im(u\overline{p}) \star \dfrac{1}{|x|})\overline{u} + 2i\,\overline{u}\nabla V_0 \cdot \varrho, \\ p(T) = u(T) - u_1, \\ m\dfrac{d^2 \varrho}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} (\nabla V_0\, Im(u\overline{p}) + 2u\, \nabla V_0\, \varrho \cdot \nabla u)\, dx - \nabla(\nabla V_1) \cdot \varrho(a), \\ \varrho(T) = 0,\ \dfrac{d\varrho}{dt}(T) = 0 \end{cases}$$

et $(p, \varrho) = (p(x,t), \varrho(t))$. L'espace $\widetilde{\mathcal{H}}$ étant un espace de Hilbert, la condition d'optimalité qui découle de

$$DJ(V_1) = 0, \ \text{ dans } \ \mathcal{L}\left(\widetilde{\mathcal{H}}\right)$$

s'écrit alors :

$$r\langle V_1, \delta V\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}} = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V u\overline{p}\, dxdt - \int_0^T \nabla \delta V(a) \varrho\, dt,\ \forall \delta V \in \widetilde{\mathcal{H}}. \tag{11}$$

On donne enfin un système d'optimalité, qui est une interprétation de (11) en terme d'équations aux dérivées partielles :

$$V_1(x,t) = \left(1 + |x|^2\right)^{\frac{1}{2}} \left((I - \Delta)^{-1} Y_1(x,t) + E_1(t)\right)$$

où $Y_1 \in H^1(0,T;H^1) \cap L^2(0,T;H^2)$ et $E_1 \in H^1(0,T)$ vérifient le système

$$\left\{\begin{array}{ll} r\Big[(I-\partial_t^2)+(I-\Delta)\Big](I-\Delta)Y_1 = (I-\Delta)^{-1}G & \text{dans } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T) = \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0) = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^3 \\ r\left(E_1 - \dfrac{d^2E_1}{dt^2}\right) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} G(x)\,dx & \text{sur } (0,T) \\ \dfrac{dE_1}{dt}(T) = \dfrac{dE_1}{dt}(0) = 0 & \end{array}\right. \tag{12}$$

$$\begin{array}{rcl} \text{où} \quad G(x,t) & = & Im\left(u(x,t)\overline{p(x,t)}\right)\sqrt{1+|x|^2} \\ & & + \varrho(t)\cdot\nabla\delta_{a(t)}(x)\sqrt{1+|a(t)|^2} - \dfrac{a(t)\cdot\varrho(t)}{\sqrt{1+|a(t)|^2}}\,\delta_{a(t)}(x) \end{array}$$

et où $\delta_a$ est la masse de Dirac au point $a \in \mathbb{R}^3$. On peut remarquer que la résolution de l'équation obtenue par transformée de Fourier (par rapport aux variables d'espace) du système (12) correspond, pour chaque $\xi$, à la résolution d'un système elliptique en dimension 1 (variable de temps).

La démonstration rigoureuse de la différentiabilité de la fonctionnelle $J$ est un problème ouvert, ainsi que la justification des écritures formelles obtenues ci-dessus. On trouvera cependant des détails sur ces calculs formels à la fin du dernier chapitre de la thèse.

Dans le souci d'être le plus complet possible sur l'étude du contrôle optimal bilinéaire concernant ce système d'équations, nous avons étudié en détail la situation où la position du noyau est connue. Nous considérons ainsi dans un premier article, au chapitre 6, un problème de contrôle optimal bilinéaire à propos de l'équation de Schrödinger linéaire. On y démontre l'existence d'un contrôle optimal. L'étude se poursuit jusqu'à la démonstration d'une condition d'optimalité dont la démarche ne sera pas décrite ici. Nous préférons détailler le problème de contrôle optimal bilinéaire traité au début du chapitre 7 concernant l'équation de Schrödinger non-linéaire (10) en posant

$$V_0 = \frac{1}{|x-a(t)|},\ a \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3) \text{ donné,}$$

$$\text{et } \ V_1 \in H = \Big\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;W)\Big\}$$

avec $W$ espace de Hilbert tel que $W \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$. Le potentiel $V_1$ est notre contrôle et l'objectif est d'amener l'état $u$, solution de (10), le plus près possible de l'état cible $u_1$ en minimisant la fonctionnelle de coût $J$ :

$$J(V_1) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(T)-u_1|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V_1\|_H^2.$$

E. CANCÈS, C. LE BRIS et M. PILOT démontrent dans [11], à l'aide d'un changement de jauge, l'existence d'un tel contrôle optimal bilinéaire dans le cas particulier d'un champ laser homogène en espace : $V_1(x,t) = E(t)\cdot x$. Nous démontrons un résultat plus général, en terme d'hypothèses sur le potentiel $V_1$ et plus complet, puisqu'il répond aux questions traditionnelles des problèmes de contrôle optimal que sont la définition d'un état adjoint et le calcul d'une condition d'optimalité. Plus précisément, on peut considérer

$$W = H^3 \oplus \text{Span}\{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m\}$$

avec $m \in \mathbb{N}$, et pour tout $i \in [\![1,m]\!]$, $\psi_i \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \setminus H^3(\mathbb{R}^3)$. Cela nous permet à la fois de traiter le cas évoqué dans la référence [11] et le cas avec potentiel électrique général $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1(t) \in H^2(\mathbb{R}^3)$ non-homogène en espace. Nous pouvons également signaler que nous répondons avec le Résultat 8 (démonstration au chapitre 7) à une remarque faite dans la note [11] sur l'existence d'un contrôle optimal pour un système couplant une équation de type (10) à la dynamique newtonienne.

Nous donnons maintenant le résultat complet répondant au problème du contrôle optimal bilinéaire de l'équation (10).

**Résultat 9.** *Il existe un contrôle optimal bilinéaire $V_1$ dans $H$,*

$$J(V_1) = \inf\{J(V),\ V \in H\}$$

*et le triplet $(u,p,V_1)$ vérifie l'équation d'état (10) :*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + V_0 u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{dans } \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

*le problème adjoint*

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + V_0 p + V_1 p = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})p + 2i(Im(u\overline{p}) \star \dfrac{1}{|x|})\overline{u}, & \text{dans } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ p(T) = u(T) - u_1 & \text{dans } \mathbb{R}^3 \end{cases}$$

*et la condition d'optimalité :*

$$r\langle V_1, \delta V\rangle_H = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V(x,t) u(x,t) \overline{p}(x,t)\, dxdt,\ \ \forall\, \delta V \in H.$$

Nous pouvons donner une interprétation de la condition d'optimalité dans le cas particulier où $W = H^3(\mathbb{R}^3) \oplus \text{Span}\{\mathbb{1}\}$ par le système d'optimalité suivant :

$$\begin{cases} r(I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1 = (I-\Delta)^{-1}\left(Im(u\overline{p})\sqrt{1+|x|^2}\right) & \text{dans } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ \partial_t(Y_1 - \Delta Y_1)(T) = \partial_t(Y_1 - \Delta Y_1)(0) = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^3 \\ 2\, r\left(E_1 - \dfrac{d^2E_1}{dt^2}\right) = Im \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\, dx & \text{sur } (0,T) \\ \dfrac{dE_1}{dt}(T) = \dfrac{dE_1}{dt}(0) = 0 \end{cases}$$

où

$$V_1(x,t) = \left(1+|x|^2\right)^{\frac{1}{2}} \left[(I-\Delta)^{-1} Y_1(x,t) + E_1(t)\mathbb{1}(x)\right]$$

avec

$$Y_1 \in H^1(0,T,H^1) \ \text{ et } \ E_1 \in H^1(0,T).$$

La démonstration de l'existence d'un contrôle optimal se fait de manière classique, en considérant une suite minimisante $(V_1^n)_{n\geq 0}$ dans $H$ pour la fonctionnelle $J$ et l'une des difficultés rencontrées est l'étude du terme $\|u_n(T) - u_1\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)}$. Elle nécessite les résultats de régularité obtenus dans la partie précédente. Nous pouvons signaler qu'il n'est pas envisageable ici d'éliminer le terme $\|V_1\|_H^2$ dans la fonctionnelle de coût, au risque de ne déjà pas pouvoir démontrer l'existence d'un contrôle optimal.

L'écriture d'une condition d'optimalité nécessite la démonstration de la différentiabilité de $J$. Pour montrer la proposition suivante, on utilise fortement la régularité de la solution $u$ de l'équation d'état (10).

**Proposition 10.** *Si u est la solution de* (10), *la fonctionnelle*

$$\begin{array}{rcl} \phi : H & \to & L^2(\mathbb{R}^3) \\ V_1 & \mapsto & u(T) \end{array}$$

*est différentiable. De plus, si $z$ est solution de l'équation :*

$$\begin{cases} i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z = -\delta V_1 u + (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})z + 2Re(u\overline{z} \star \dfrac{1}{|x|})u, \\ z(0) = 0, \end{cases}$$

*posée dans* $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$ *alors* $z \in C([0,T]; L^2(\mathbb{R}^3))$ *et* $D\phi(V_1)[\delta V_1] = z(T)$.

C'est un point délicat et on remarquera que l'on ne démontre la différentiabilité de $\phi$ qu'à valeurs dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Il faudrait pouvoir démontrer des résultats de régularité bien plus forts pour pouvoir étendre ces résultats à $H^1(\mathbb{R}^3)$ et nous pensons que cela n'est pas possible sous nos hypothèses. Cela signifie précisément que l'on ne peut pas mettre dans la fonctionnelle de coût $J$ de norme plus forte de $u(T) - u_1$ que la norme $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Par suite, la fonctionnelle $J$ est différentiable par rapport à $V_1$ et comme

$$J(V_1) = \frac{1}{2}\|u(T) - u_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \frac{r}{2}\|V_1\|_H^2$$

la condition $DJ(V_1) = 0$ dans $\mathcal{L}(H)$ peut être traduite à l'aide du problème adjoint.

Pour démontrer cette Proposition 10, on prendra soin de vérifier en premier lieu la continuité de $\phi$. Le travail pour la différentiabilité est beaucoup plus complexe que pour le problème de contrôle optimal pour l'équation de Schrödinger linéaire et est détaillé dans le chapitre 7.

Nous avons donné dans cette introduction les grandes lignes des travaux de cette thèse et les motivations nécessaires à la lecture des démonstrations qui sont données dans les différents chapitres de ce manuscrit. Nous avons choisi de présenter nos travaux sous la forme d'articles tels qu'ils ont été publiés ou soumis à la publication. Le lecteur rencontrera dans la partie I un premier chapitre contenant les pré-requis à l'étude du problème inverse qui occupe l'article présenté au chapitre 2. La partie II commence avec une introduction aux approximations en chimie quantique. Ce chapitre 3 décrit le processus qui rend mathématiquement abordable l'étude du comportement d'un atome d'Hélium soumis à un champ électrique et propose le système couplé (6). Les résultats d'existence et de régularité sont successivement démontrés dans les chapitres 4 et 5. Notre manuscrit se termine avec les problèmes de contrôle optimal bilinéaires résolus dans les deux derniers chapitres.

## Première partie

# Problème inverse de détermination de potentiel dans l’équation de Schrödinger en domaine borné

# Chapitre 1

# Introduction

## 1.1 Introduction à l'équation de Schrödinger en domaine borné

En vue de présenter par la suite notre étude d'un problème inverse de détermination de potentiel dans l'équation de Schrödinger posée en domaine borné, nous voulons tout d'abord préciser ici les résultats de régularité les plus basiques connus pour cette équation.

D'un point de vue mathématique, l'équation de Schrödinger a ceci de particulier qu'elle semble se situer à mi-chemin entre les équations paraboliques et hyperboliques. Elle est en effet réversible en temps comme l'équation des ondes, mais sa vitesse de propagation est infinie ce qui est le cas de l'équation de la chaleur. Dans nos travaux sur un problème inverse, présentés dans le chapitre suivant, les similitudes de démonstrations avec le même problème posé pour l'équation des ondes sont assez marquées, à ceci près que le temps d'observation $T$ pourra être choisi arbitrairement petit.

On trouvera dans les références [12], [13] et [15] l'étude de l'équation de Schrödinger linéaire, le plus souvent sans potentiel ou posée en domaine non borné. Dans [15], R. DAUTRAY et J.-L. LIONS utilisent la méthode de Galerkin et des raisonnements liés au lemme de Gronwall pour démontrer l'existence et la régularité de la solution de cette équation. D'autre part, les techniques de semi-groupe qui sont présentées par T. CAZENAVE et A. HARAUX dans [12] et [13] sont plus appropriées aux travaux présentés dans la deuxième partie de cette thèse en ce qu'ils sont applicables en domaine non borné, mais méritent néanmoins d'être évoqués ici.

Nous allons donner dans la suite les résultats précis concernant la situation qui nous intéresse, ainsi que quelques commentaires sur les démonstrations qui ne seront pas détaillées.

### 1.1.1 Existence et régularité pour l'équation avec donnée au bord homogène

Soient $N \in \mathbb{N}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ un ouvert borné de frontière $\partial\Omega$ de classe $C^2$ et $T > 0$. On suppose que $q \in L^\infty(\Omega)$ et on considère l'équation

$$\begin{cases} iy'(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = g(x,t), & x \in \Omega,\ t \in (0,T) \\ y(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \tag{1.1}$$

**Notations :** La dérivée première temporelle de $u$ est notée $u'$. $Imz$ est la partie imaginaire d'un nombre complexe $z$ et $\overline{z}$ son conjugué. Sur $\partial\Omega$, le vecteur normal unitaire extérieur à $\Omega$ est noté $\nu$.

**Lemme 1.** *Si $y_0 \in L^2(\Omega)$ et $g \in L^1(0,T,L^2(\Omega))$ alors l'équation (1.1) admet une unique solution $y \in C([0,T],L^2(\Omega))$ et il existe une constante $C > 0$ dépendant de $\Omega$, $T$ et $\|q\|_{L^\infty(\Omega)}$ telle que pour tout $t$ dans $[0,T]$,*

$$\|y(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\left(\|y_0\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^1(0,T,L^2(\Omega))}\right).$$

La démonstration est très simple et repose sur le calcul formel de "$Im\int_\Omega (1.1)\overline{y}\,dx$" et un lemme de Gronwall. Plus rigoureusement, une méthode de Galerkin basée sur les décomposition de Fourier permet de démontrer ce lemme (et le suivant). On peut aussi consulter [15], penser à la méthode variationnelle introduite par LIONS et MAGENES [35] ou encore appliquer la théorie de Hille-Yosida (présentation particulièrement adaptée aux applications dans [6]).

**Lemme 2.** *On suppose que $y_0 \in H_0^1(\Omega)$ et $g \in X$ où l'espace fonctionnel $X$ est $L^1(0,T,H_0^1(\Omega))$, $W^{1,1}(0,T,L^2(\Omega))$ ou bien $L^1(0,T,L^2(\Omega)) \cap W^{1,1}(0,T,H^{-1}(\Omega))$. Alors l'équation (1.1) admet une unique solution $y \in C([0,T],H_0^1(\Omega))$ et il existe une constante $C = C(\Omega,T,\|q\|_{L^\infty(\Omega)}) > 0$ telle que pour tout $t$ dans $[0,T]$,*

$$\|y(t)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\Big(\|y_0\|_{H_0^1(\Omega)} + \|g\|_X\Big).$$

De nouveau, l'utilisation du lemme de Gronwall sur des estimations formelles de la solution est une première approche. Une démonstration rigoureuse se fait par décomposition de Fourier, permettant de considérer des espaces de dimension finie et d'utiliser la méthode de Galerkin.

### 1.1.2 Identité des Multiplicateurs et application

**Lemme 3.** *Soit $\gamma = \gamma(x,t) \in C^2(\overline{\Omega \times (0,T)}, \mathbb{R}^n)$. L'identité suivante, dite des "multiplicateurs", est vérifiée pour toute solution de $(1.1)$ avec donnée initiale $y_0 \in H_0^1(\Omega)$ et terme source $g \in X$ (comme dans le lemme précédent) :*

$$\int_0^T \int_\Omega (\gamma \cdot \nu) \left| \frac{\partial y}{\partial \nu} \right|^2 d\sigma dt = Im \int_\Omega y(\gamma \cdot \nabla \overline{y})\, dx \Big|_0^T$$
$$+Re \int_0^T \int_\Omega y(\nabla(div\gamma) \cdot \nabla \overline{y})\, dxdt + 2Re \int_0^T \int_\Omega \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial \gamma_j}{\partial x_i} \frac{\partial y}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{y}}{\partial x_j}\, dxdt$$
$$-2Re \int_0^T \int_\Omega qy(\gamma \cdot \nabla \overline{y})\, dxdt - Re \int_0^T \int_\Omega q|y|^2 \mathrm{div}\gamma\, dxdt$$
$$+2Re \int_0^T \int_\Omega g(\gamma \cdot \nabla \overline{y})\, dxdt + Re \int_0^T \int_\Omega g\overline{y}\, \mathrm{div}\gamma\, dxdt.$$

Ce type d'identité a été introduit par RELLICH et ce lemme se démontre en calculant $''Re \int_0^T \int_\Omega (1.1)(\gamma.\nabla \overline{y} + \frac{1}{2}\overline{y} div\gamma)\, dxdt''$. Dans la référence [36], E. MACHTYNGIER donne un résultat similaire pour l'équation de Schrödinger sans potentiel. On peut aussi faire référence au livre [34] de J.-L. LIONS pour une identité similaire concernant l'équation des ondes. On trouvera également dans cet ouvrage la démonstration rigoureuse de l'existence d'un prolongement à $\mathbb{R}^N$ d'un champ de vecteurs normaux à la frontière d'un ouvert borné de classe $C^2$. On peut alors choisir $\gamma = \gamma(x) \in C^2\left(\overline{\Omega} \times [0,T], \mathbb{R}^n\right)$ tel que $\gamma = \nu$ sur la frontière de $\Omega$, qui est effectivement de classe $C^2$. Par suite, $\gamma.\nu = 1$ sur $(0,T) \times \partial\Omega$ et cette identité permet de démontrer le résultat de régularité suivant.

**Lemme 4.** *Si $y_0 \in L^2(\Omega)$ et $g \in X$ alors l'unique solution $y$ de l'équation (1.1) vérifie qu'il existe une constante $C = C(\Omega, T, \|q\|_{L^\infty(\Omega)}) > 0$ telle que pour tout $t$ dans $(0,T)$,*

$$\left\| \frac{\partial y}{\partial \nu}(t) \right\|_{L^2(\Gamma \times (0,T))} \leq C\left( \|y_0\|_{H_0^1(\Omega)} + \|g\|_X \right)$$

### 1.1.3 Equation avec données au bord non homogène

On considère maintenant l'équation plus générale

$$\begin{cases} iy'(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = g(x,t), \ x \in \Omega, & t \in (0,T) \\ y(x,t) = h(x,t), & x \in \partial\Omega, \ t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0(x), & x \in \Omega \end{cases} \tag{1.2}$$

avec toujours $q \in L^\infty(\Omega)$. On peut démontrer le résultat d'existence d'une solution très faible suivant.

**Lemme 5.** *On suppose que $y_0 \in L^2(\Omega)$, $g \in L^2((0,T) \times \Omega)$ et $h \in L^2((0,T) \times \partial\Omega)$. L'équation (1.2) admet alors une unique solution au sens très faible*

$$y \in C([0,T], H^{-1}\Omega)) \cap H^{-1}(0,T, L^2(\Omega)).$$

La démonstration se fait par transposition et on trouvera des détails dans [36] pour l'équation de Schrödinger sans potentiel et dans [34] pour l'équation des ondes. L'idée essentielle consiste à définir l'état adjoint à $y$ comme la solution $\varphi$ du système rétrograde

$$\begin{cases} i\varphi'(x,t) + \Delta\varphi(x,t) + q(x)\varphi(x,t) = f(x,t), & x \in \Omega, \ t \in (0,T) \\ \varphi(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega, \ t \in (0,T) \\ \varphi(x,T) = 0, & x \in \Omega. \end{cases}$$

Puisque l'équation de Schrödinger est réversible en temps, on connaît la régularité de $\varphi$ et de $\dfrac{\partial \varphi}{\partial \nu}$ d'après ce qui a été démontré précédemment. On dit alors que $y$ est une solution définie par transposition de l'équation (1.2) si et seulement si on peut donner un sens, quelque soit $f$, à

$$\langle \overline{f}, y\rangle = \int_0^T\!\!\int_\Omega g\overline{\varphi}\,dxdt + i\int_\Omega y_0\overline{\varphi}(0)\,dx + \int_0^T\int_{\partial\Omega} h\frac{\partial\overline{\varphi}}{\partial\nu}\,d\sigma dt$$

où $\langle\cdot,\cdot\rangle$ est un crochet de dualité à définir.
On définit ensuite l'application $\mathcal{L}(f) = \langle\overline{f}, y\rangle$ comme une forme linéaire continue sur un certain espace $E$ et cela permet de choisir la solution $y$ de (1.2) comme représentant de $\mathcal{L}$ dans le dual $E'$ de $E$, d'après le théorème de Riesz.

On va maintenant donner un sens à la dérivée normale de la solution $y$ de l'équation (1.2), qui joue un rôle important dans le problème inverse que nous détaillerons ensuite.

On considère $y_0 \in L^2(\Omega)$, $g \in L^2((0,T)\times\Omega)$ et $h \in L^2((0,T)\times\partial\Omega))$, qui donnent $y \in H^{-1}(0,T,L^2(\Omega))$. Il en découle directement $y' \in H^{-2}(0,T,L^2(\Omega))$, puisque $q = q(x) \in L^\infty(\Omega)$ on trouve $qy \in H^{-1}(0,T,L^2(\Omega))$ et d'après l'équation (1.2), $\Delta y \in H^{-2}(0,T,L^2(\Omega))$. On va utiliser un théorème de trace [35]. L'ouvert $\Omega$ étant suffisamment régulier, l'application définie par

$$\begin{array}{ccc} H^2(\Omega) & \longrightarrow & H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega)\times H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \\ w & \longmapsto & \left(w\,,\,\dfrac{\partial w}{\partial\nu}\right) \end{array}$$

est linéaire surjective et admet un relèvement, c'est à dire

$$\forall (h,k)\in H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega)\times H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega),\ \exists u\in H^2(\Omega) \text{ tel que } u|_{\partial\Omega} = h \text{ et } \frac{\partial u}{\partial\nu} = k.$$

Par suite, comme $H^2(\Omega)$ est dense dans l'espace $\{z \in L^2(\Omega)\ /\Delta z \in L^2(\Omega)\}$ auquel l'état $y$ appartient, on peut démontrer par dualité que $y|_{\partial\Omega} \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ et surtout, que $\left.\dfrac{\partial y}{\partial\nu}\right|_{\partial\Omega} \in H^{-\frac{3}{2}}(\partial\Omega)$.

## 1.2 Inégalité de Carleman et applications

### 1.2.1 Proposition

L'outil principal permettant de démontrer l'inégalité de stabilité qui nous intéresse est une estimation avec poids de la solution de l'équation en fonction du terme source, appelée *inégalité de Carleman*. La particularité de l'inégalité de Carleman pour l'équation de Schrödinger, que nous démontrons dans l'article formant le chapitre suivant, est d'être globale, c'est à dire concernant des intégrales définies sur $\Omega\times(-T,T)$. Cela a une grande importance dans l'utilisation qui en est ensuite faite. En effet, dès lors que nous travaillons à partir d'une inégalité de Carleman globale, nous avons les moyens d'aboutir à un résultat pour notre problème inverse de manière très directe, similaire à ce que font O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO dans [21]. Ce n'est par exemple pas le cas dans [53] où M. YAMAMOTO fait un raisonnement par unicité compacité, rendu nécessaire à cause de l'inégalité de Carleman locale utilisée.

On pose

$$Lv = iv' + \Delta v + qv, \;\; x_0 \in \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega} \;\; \text{ et } \;\; \psi(x) = |x - x_0|^2, \; \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Pour $s > 0$ et $\lambda > 0$ on définit sur $\Omega \times (-T, T)$ les fonctions $\theta$ et $\varphi$ par

$$\theta(x,t) = \frac{e^{\lambda\psi(x)}}{(T-t)(T+t)} \quad \text{et} \quad \varphi(x,t) = \frac{\alpha - e^{\lambda\psi(x)}}{(T-t)(T+t)}$$

où $\alpha$ est une constante strictement positive telle que $\varphi > 0$ sur $\Omega \times (-T, T)$. Enfin, on considère la partie $\Gamma_0$ de $\partial\Omega$ comme contenant $\{x \in \partial\Omega; \nabla\psi(x) \cdot \nu(x) \geq 0\}$

**Proposition 1 (Inégalité de Carleman Globale).** *Soit $q \in L^\infty(\Omega)$, $||q||_{L^\infty(\Omega)} \leq m$ et soient $\psi$, $\theta$ et $\varphi$ définis comme ci-dessus. Il existe $\Lambda_0 > 0$ tel que pour tout $\lambda > \Lambda_0$, il existe $s_0 > 0$ et une constante $M = M(\Omega, T, \Gamma_0, m, \Lambda_0, s_0) > 0$ tels que :*

$$\begin{aligned}
& s\lambda \int_{-T}^{T}\int_\Omega |\nabla v|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt + s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_\Omega |v|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt \\
& + \int_{-T}^{T}\int_\Omega \big(|\widetilde{P}_1 v|^2 + |\widetilde{P}_2 v|^2\big) e^{-2s\varphi}\,dxdt \\
\leq \;& M \int_{-T}^{T}\int_\Omega |Lv|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt + Ms\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \theta \left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2 e^{-2s\varphi}\nabla\psi\cdot\nu\,d\sigma dt
\end{aligned}$$

*pour tout $s > s_0$ et $v$ vérifiant*

$$\left|\begin{array}{l} v \in L^2(-T,T;H_0^1(\Omega)), \\ Lv \in L^2(\Omega \times (-T,T)), \\ \dfrac{\partial v}{\partial \nu} \in L^2(-T,T;L^2(\Gamma_0)), \end{array}\right.$$

*et où* $\left\{\begin{array}{l} \widetilde{P}_1 v = e^{s\varphi}\big(i\partial_t + \Delta + s^2|\nabla\varphi|^2\big)(e^{-s\varphi}v) \\ \widetilde{P}_2 v = e^{s\varphi}\big(is\varphi' + 2s\nabla\varphi.\nabla + s\Delta\varphi\big)(e^{-s\varphi}v) \end{array}\right.$ .

On peut se référer à [7] en ce qui concerne la méthode générale de démonstration d'une telle inégalité. Elle consiste à utiliser une technique de conjuguaison en posant $v = e^{s\varphi}w$ et en calculant

$$Pw = e^{-s\varphi}L(e^{s\varphi}w) = iw' + is\varphi' w + \Delta w + 2s\nabla\varphi.\nabla w + sw\Delta\varphi + s^2|\nabla\varphi|^2 w + qw.$$

Remarquons que si $v$ est régulier en $t$, alors $w(-T) = w(T) = 0$. On sépare alors les parties symétriques et antisymétriques de l'opérateur $P$ :

$$\begin{aligned} P_1 w = iw' + \Delta w + s^2|\nabla\varphi|^2 w = e^{-s\varphi}\widetilde{P}_1 v \;\; \text{et} \\ P_2 w = is\varphi' w + 2s\nabla\varphi.\nabla w + s\Delta\varphi w = e^{-s\varphi}\widetilde{P}_2 v. \end{aligned}$$

Par suite

$$\begin{aligned} \int_{-T}^{T}\int_\Omega |Pw - qw|^2\,dxdt = \int_{-T}^{T}\int_\Omega \Big(|P_1 w|^2 + |P_2 w|^2\Big)\,dxdt \\ + \; 2Re\int_{-T}^{T}\int_\Omega P_1 w\overline{P_2 w}\,dxdt \end{aligned}$$

et on travaille essentiellement sur la minoration du dernier terme. On démontre, à l'aide des propriétés de $w$ et d'intégrations par parties, une inégalité, similaire à celle de la proposition, en termes de $w$ et ne contenant donc pas explicitement le poids $e^{-2s\varphi}$. Il faut préciser que les propriétés de $\psi$, qui sont liées à la géométrie de $\Gamma_0$ sont primordiales dans les calculs effectués. Il suffit alors de traduire cette inégalité en fonction de la variable $v$ et la Proposition 1 sera donc démontrée.

Il faut remarquer que la restriction géométrique sur $\Gamma_0$ prend sa source dans la démonstration de cette proposition. La définition de $\Gamma_0$ que nous avons donnée est très usuelle et on la retrouve dans les travaux de E. MACHTYNGIER [36], R. TRIGGIANI, P.F. YAO et I. LASIECKA [31, 48, 49] pour l'équation de Schrödinger, mais aussi dans beaucoup de travaux sur l'équation des ondes comme [34], de J.-L. LIONS. On peut par contre remarquer que contrairement aux situations similaires concernant des équations hyperboliques, le temps $T > 0$ d'observation peut être choisi aussi petit que l'on veut.

Concernant les inégalités de Carleman, on peut penser au livre [7] de A.L. BUKHGEIM pour la méthode générale, et par exemple aux travaux de O. Yu. IMANUVILOV dans [19] pour l'équation des ondes avec donnée de Neumann.

Les applications de ce type d'inégalités sont multiples. Avant 1981, seuls des résultats d'unicité locale étaient démontrés pour le type de problème inverse que nous avons évoqué. La première utilisation d'une inégalité de Carleman pour démontrer l'unicité globale dans un problème inverse est due séparément à A.L. BUKHGEIM et M.V. KLIBANOV dans [8]. Dans la référence [29], elles sont appliquées par M.V. KLIBANOV à plusieurs types d'équations pour l'unicité de problèmes inverses. Pour l'équation de Schrödinger, l'unicité de la détermination du potentiel peut être lue dans [7] (encore faut-il pouvoir se procurer le livre !). Par ailleurs, V. ISAKOV utilise des inégalités de Carleman pour démontrer l'unicité de la solution de certains problèmes de Cauchy dans [23]. L'utilisation majeure de ces inégalités se fait dans la démonstration d'inégalités de stabilité dans les problèmes inverses comme ici, et il faut rappeler les travaux plus anciens de A. KHAIDAROV [27], ou plus récents de M. YAMAMOTO avec V. ISAKOV [25] ou avec O. Yu. IMANUVILOV [21] (où ils utilisent les travaux [19] de ce dernier). On les utilise aussi dans la résolution de problèmes de continuation unique, par exemple D.TATARU dans [47], A. RUIZ [42] et Y.M. KIM [28] (pour Schrödinger stationnaire).

L'application de cette inégalité de Carleman, développée dans le chapitre suivant, concerne la démonstration de la stabilité du problème inverse décrit dans l'introduction. On démontre dans un premier temps le Résultat 2 énoncé dans l'introduction et concernant le problème inverse linéaire. On peut alors remarquer que toutes les constantes qui apparaissent dans l'inégalité de Carleman, qui est le principal outil, dépendent uniquement de la norme $L^\infty$ du potentiel considéré dans l'équation. On verra dans le chapitre 2 que dès que l'on considère des potentiels bornés sur $\Omega$, la différence entre deux solutions de l'équation, avec deux potentiels distincts, correspondant au problème inverse non-linéaire vérifie une équation similaire à celle correspondant au problème inverse linéaire. L'intérêt de la linéarisation du problème inverse considéré au départ est donc principalement de simplifier les notations.

Nous allons donner maintenant une autre application de cette inégalité de Carleman, essentiellement pour montrer le lien étroit qu'il peut y avoir entre problèmes inverses et contrôlabilité.

### 1.2.2 Application à la contrôlabilité exacte

Dans le cadre des équations aux dérivées partielles dépendant du temps, la notion de contrôlabilité correspond à la possibilité pour la solution d'une équation d'atteindre un état cible en un certain temps $T$ sous le contrôle d'un paramètre du problème. L'élément de contrôle peut être un terme source (second membre de l'équation), une condition aux limites (terme de bord), un potentiel (terme multipliant l'inconnue dans l'équation)...

On parlera de contrôlabilité exacte si l'on peut trouver un contrôle $v$ tel que la solution $y_v$ de l'équation atteint au temps $T$ l'état cible de manière précise.

L'inégalité de Carleman que nous avons obtenue permet de démontrer de manière très directe une inégalité d'observabilité. Cette inégalité, encore appelée inégalité inverse, est traditionnellement un élément clef de la démonstration de la contrôlabilité exacte d'une équation aux dérivées partielles par la méthode d'unicité Hilbertienne (HUM) introduite par J.L. LIONS dans [34]. On trouvera à la fin du chapitre suivant une autre utilisation de l'inégalité d'observabilité, mentionnée ci-dessus. On peut aussi signaler l'utilisation pour l'équation des ondes de la contrôlabilité exacte pour l'étude d'un problème inverse dans [40] par J.-P. PUEL et M. YAMAMOTO.

On peut évoquer plusieurs références autour de la contrôlabilité exacte de l'équation de Schrödinger, à commencer par les travaux de E. MACHTYNGIER [36], C. FABRE [16] et de I. LASIECKA et R. TRIGGIANI [31] pour le contrôle interne et frontière utilisant HUM et des techniques de multiplicateurs. Nous signalons le livre [30] de V. KOMORNIK qui décrit entre autre la méthode des multiplicateurs pour la démonstration d'inégalité inverse.

Dans un problème concernant l'équation des plaques, X. ZHANG [54] utilise une inégalité de Carleman et des estimations d'énergie usuelles pour démontrer la contrôlabilité exacte, méthode similaire à celle que nous utilisons ici pour traiter la situation qui nous intéresse. Il faut également signaler la référence [18] où M.A. HORN et W. LITTMAN étudient le contrôle frontière d'une équation de Schrödinger avec coefficients non constants, sans utiliser HUM.

Dans [32], G. LEBEAU généralise les résultat de C. BARDOS, G. LEBEAU et J. RAUCH [1, 2] sur la contrôlabilité exacte des problèmes hyperboliques au cadre d'équation d'évolution de type Schrödinger. On notera également que la partie $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ vérifie la "condition géométrique sur les rayons" formulée dans [2]. Un article de K.-D. PHUNG rappelle par ailleurs la position étrange de l'équation de Schrödinger entre les équations d'ondes et de la chaleur en travaillant sur la contrôlabilité et l'inégalité inverse. On fera finalement référence à [55] où E. ZUAZUA rassemble des considérations générales sur la contrôlabilité de l'équation de Schrödinger.

Nous allons brièvement donner ici le problème de contrôlabilité que notre inégalité de Carleman permet de résoudre indirectement. Il faut préciser que la situation que nous considérons ci-après est exactement celle résolue par E. MACHTYNGIER dans [36] (quoique pour une équation de Schrödinger sans potentiel) par une méthode des multiplicateurs pour la démonstration de l'inégalité inverse.

On considère l'équation suivante

$$\left\{\begin{array}{lll} iy' + \Delta y + qy = 0, & \text{dans} & \Omega \times (0,T), \\ y = v, & \text{sur} & \Gamma_0 \times (0,T), \\ y = 0, & \text{sur} & \partial\Omega \setminus \Gamma_0 \times (0,T), \\ y(0) = y_0, & \text{dans} & \Omega. \end{array}\right. \tag{1.3}$$

La variable $v$ est notre contrôle frontière et la partie $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ sur laquelle il agit vérifie toujours la même condition géométrique : $\exists\, x_0 \in \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega}$ tel que

$$\Gamma_0 \supset \{x \in \partial\Omega; (x - x_0) \cdot \nu(x) \geq 0\}.$$

On rappelle que $v \in L^2(\Gamma_0 \times (0,T))$ et $y_0 \in L^2(\Omega)$ impliquent l'existence d'une unique solution $y \in C([0,T], H^{-1}\Omega)) \cap H^{-1}(0,T,L^2(\Omega))$. On peut formuler deux problèmes de contrôlabilité exacte pour la solution de l'équation (1.3) :

**Problème de contrôlabilité à zéro :** Etant donné un temps $T > 0$, peut on trouver un contrôle $v \in L^2(\Gamma_0 \times (0,T))$ tel que la solution $y$ de l'équation (1.3) vérifie $y(T) = 0$ ?

**Problème de contrôlabilité exacte :** Etant donnés un temps $T > 0$ et une cible $y_1 \in L^2(\Omega)$, peut on trouver un contrôle $v \in L^2(\Gamma_0 \times (0,T))$ tel que $y(T) = y_1$ ?

Il est connu que l'équation de Schrödinger est réversible en temps, au sens où les opérateurs $i\partial_t + \Delta$ et $i\partial_t - \Delta$ définissent tous deux des équations de Schrödinger. On peut alors démontrer que ces deux problèmes sont en fait équivalents puisque l'application $v \mapsto y(T)$ est linéaire. Il s'agit alors uniquement de résoudre le problème de contrôlabilité à zéro.

La méthode introduite dans [34] montre que l'on peut ramener notre étude à la démonstration d'une inégalité d'observabilité concernant le problème adjoint. En effet, dans un premier temps, la réversibilité de l'équation fait correspondre le problème adjoint à l'équation d'état elle-même, mais sans le terme de contrôle :

$$\left\{\begin{array}{lll} i\varphi' + \Delta\varphi + q\varphi = 0, & \text{dans} & \Omega \times (0,T), \\ \varphi = 0, & \text{sur} & \partial\Omega \times (0,T), \\ \varphi(0) = \varphi_0, & \text{dans} & \Omega. \end{array}\right. \tag{1.4}$$

On définit ensuite l'application linéaire et continue

$$\begin{array}{rcl} \Lambda : H_0^1(\Omega) & \longmapsto & H^{-1}(\Omega) \\ \varphi_0 & \longrightarrow & -iy(0) \end{array}$$

où $y = y(x,t)$ est solution du problème rétrograde

$$\left\{\begin{array}{lll} iy' + \Delta y + qy = 0, & \text{dans} & \Omega \times (0,T) \\ y = \dfrac{\partial\varphi}{\partial\nu}, & \text{sur} & \Gamma_0 \times (0,T) \\ y = 0, & \text{sur} & \partial\Omega \setminus \Gamma_0 \times (0,T) \\ y(T) = 0, & \text{dans} & \Omega. \end{array}\right.$$

Si on démontre que $\Lambda$ est un isomorphisme alors le problème de contrôlabilité à zéro est résolu avec $v = \left.\dfrac{\partial\varphi}{\partial\nu}\right|_{\Gamma_0}$ où $\varphi$ est solution de (1.4) avec $\varphi_0 = \Lambda^{-1}(-iy_0)$.

Soient $\varphi_0$ et $\widetilde{\varphi}_0 \in H_0^1(\Omega)$. On note $\varphi$ et $\widetilde{\varphi}$ les solutions de (1.4) correspondantes et on pose :

$$a(\varphi_0, \widetilde{\varphi}_0) = \langle \Lambda(\varphi_0), \widetilde{\varphi}_0 \rangle_{H^{-1} \times H_0^1}.$$

Il est aisé de démontrer que $a(\varphi_0, \widetilde{\varphi}_0) = \displaystyle\int_0^T \int_{\Gamma_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \nu} \cdot \overline{\frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \nu}}\, d\sigma dt$ et il suffit d'appliquer le théorème de Lax-Milgram à la forme bilinéaire $a(\cdot, \cdot)$ pour obtenir que $\Lambda$ est un isomorphisme. La continuité découle des résultats de régularité connus et la coercivité correspond précisément au résultat suivant.

**Proposition 2 (Inégalité d'observabilité).** *On suppose que $q \in L^\infty(\Omega),\ \varphi_0 \in H_0^1(\Omega)$ et $\Gamma_0 \supset \{x \in \partial\Omega,\ (x - x_0) \cdot \nu(x) \geq 0\}$. Si $\varphi$ est la solution faible du système*

$$\begin{cases} i\varphi' + \Delta\varphi + q\varphi = 0, & \Omega \times (0, T) \\ \varphi = 0, & \partial\Omega \times (0, T) \\ \varphi(0) = \varphi_0, & \Omega \end{cases}$$

*alors il existe une constante $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, ||q||_{L^\infty(\Omega)}) > 0$ telle que*

$$||\varphi_0||_{H_0^1(\Omega)} \leq C \left|\left| \frac{\partial \varphi}{\partial \nu} \right|\right|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma_0))}.$$

La démonstration utilisant l'inégalité de Carleman décrite précédemment se trouve dans la dernière partie de l'article reproduit dans le chapitre suivant.

Pour terminer, nous tenons à signaler les résultats obtenus par A. OSSES dans [37] et initiés dans [38] autour d'une méthode de multiplicateurs tournants permettant de morceler la partie de frontière observée dans l'inégalité inverse pour l'équation des ondes. Nous avions conjointement travaillé en juin 2002 sur cette même idée pour l'adapter au niveau de l'inégalité de Carleman pour l'équation de Schrödinger, sans succès à ce jour.

# Chapitre 2

# Uniqueness and Stability in an Inverse Problem for the Schrödinger Equation.

L'article qui suit est paru fin 2002 dans la revue **Inverse Problem**,
Volume 18, pages 1537 à 1554. Avec J.-P. Puel.

ABSTRACT : We study the Schrödinger equation $iy' + \Delta y + qy = 0$ in $\Omega \times (0,T)$ with Dirichlet boundary data $y|_{\partial\Omega\times(0,T)}$ and real valued initial condition $y|_{\Omega\times\{0\}}$ and we consider the inverse problem of determining the potential $q(x),\ x \in \Omega$ when $\frac{\partial y}{\partial \nu}|_{\Gamma_0\times(0,T)}$ is given. Here $\Omega$ is an open bounded domain of $\mathbb{R}^N$, $\Gamma_0$ is an open subset of $\partial\Omega$ satisfying a suitable geometrical condition and $T > 0$. More precisely, from a global Carleman estimate we prove a stability inequality between $\|p - q\|$ and $\left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|$ with appropriate norms.

**Keywords :** Inverse problem, Schrödinger equation, Dirichlet boundary conditions.
*AMS Classification :* 35R30, 31B20

Une note aux **Comptes Rendus à l'Académie des Sciences de Paris**
est précédemment parue en mars 2002, Série I, 334 pages 967 à 972.

RÉSUMÉ : On étudie l'équation de Schrödinger $iy' + \Delta y + qy = 0$ sur $\Omega \times (0,T)$ avec donnée de Dirichlet $y|_{\partial\Omega\times(0,T)}$ et condition initiale à valeurs réelles $y|_{\Omega\times\{0\}}$. On s'intéresse au problème inverse qui consiste à déterminer le potentiel $q(x),\ x \in \Omega$ à partir de la donnée du flux de la solution $\frac{\partial y}{\partial \nu}|_{\Gamma_0\times(0,T)}$, où $\Gamma_0$ est une partie ouverte de la frontière $\partial\Omega$ du domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ et vérifie une condition géométrique appropriée. Plus précisément, à partir d'une inégalité de Carleman, nous démontrons une inégalité de stabilité entre $\|p-q\|$ et $\left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|$ pour des normes appropriées.

## 2.1 Introduction

Let $N \in \mathbb{N}$, $T > 0$ and let $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ be a bounded domain with $C^2$-boundary $\partial\Omega$. Let $\Gamma_0$ be an open subset of $\partial\Omega$.

Throughout this paper, we use the following notations :

$$\nabla v = \left(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial v}{\partial x_N}\right), \ D^2 v = \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_j}\right)_{1 \le i,j \le N},$$

$$\Delta v = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}, \ v' = \frac{\partial v}{\partial t} \ and \ v'' = \frac{\partial^2 v}{\partial t^2},$$

$\nu \in \mathbb{R}^N$ denotes the unit outward normal vector to $\partial\Omega$,

$\dfrac{\partial v}{\partial \nu} = \nabla v.\nu$ is the normal derivative.

We consider the Schrödinger equation :

$$\begin{cases} iy'(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = 0, \ x \in \Omega, \ t \in (0,T) \\ y(x,t) = h(x,t), \ x \in \partial\Omega, \ t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0(x), \ x \in \Omega. \end{cases} \tag{2.1}$$

This paper treats two kinds of inverse problems which can be stated as follows.

**Non linear inverse Problem :** Is it possible to retrieve the potential $q = q(x), \ x \in \Omega$ from measurement of the normal derivative

$$\left.\frac{\partial y}{\partial \nu}\right|_{\Gamma_0 \times (0,T)}$$

where $y$ is the solution to (2.1) ?

In this direction, we will answer to two more precise problems.

**Uniqueness** : Under geometrical conditions on $\Gamma_0$, does the equality $\dfrac{\partial y(q)}{\partial \nu} = \dfrac{\partial y(p)}{\partial \nu}$ on $\Gamma_0 \times (0,T)$ imply $q = p$ on $\Omega$ ?

**Stability** : Under geometrical conditions on $\Gamma_0$, is it possible to estimate $\|q-p\|_{L^2(\Omega)}$ or better, a stronger norm of $(p-q)$, by a suitable norm of $\left(\dfrac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \dfrac{\partial y(p)}{\partial \nu}\right)|_{\Gamma_0 \times (0,T)}$ ?

Indeed, we will only give a local answer about the determination of $q$. We will first work on a linearized version of the problem and consider the following Schrödinger equation :

$$\begin{cases} iu'(x,t) + \Delta u(x,t) + q(x)u(x,t) = f(x)R(x,t), \ x \in \Omega, \ t \in (0,T) \\ u(x,t) = 0, \ x \in \partial\Omega, \ t \in (0,T) \\ u(x,0) = 0, \ x \in \Omega \end{cases} \tag{2.2}$$

**Linear inverse problem :** Is it possible to determine $f(x), \ x \in \Omega$ from the knowledge of the normal derivative

$$\left.\frac{\partial u}{\partial \nu}\right|_{\Gamma_0 \times (0,T)}$$

where $R$ and $q$ are given and $u$ is the solution to (2.2) ?

In the case of the wave equation, the uniqueness result for the linear inverse problem has been proved by M.V. KLIBANOV in [29] and a stability result of M. YAMAMOTO, deriving from it, can be read in [53].

Here we set $y = y(q)$ the weak solution to (2.1) and $u = u(f)$ the one to (2.2). If we formally linearize equation (2.1) around a non stationary solution, we obtain equation (2.2). In fact, we notice here that if we set $f = q - p$, $u = y(p) - y(q)$ and $R = y(q)$ on $\Omega \times (0, T)$, we obtain (2.2) after substraction of (2.1) with potential $q$ from (2.1) with potential $p$ and linearization.

In our inverse problem, we have to determine a coefficient of a lower order term in a Schrödinger equation from a single time dependent observation of Neumann data on a part $\Gamma_0$ of the boundary. On the other hand, there is another formulation for stationnary inverse problems knowing the Dirichlet to Neumann map and the relation between the two problems is not really clear. In this latter direction, results are given in [9] for the stationnary Schrödinger equation which appear to be similar to ours.

Assuming that $q \in L^\infty$ is a given function, we are concerned with the stability around $q$. That is to say $q$ and $y(q)$ are known while $p$ is unknown. Later in section 5, we will give a meaning to equation (2.1) when $y_0 \in L^2(\Omega)$ and $h \in L^2(\partial\Omega \times (0, T))$. Of course, additional assumptions will be required on $y_0$ and $h$ in order to obtain our main result which states as follows.

**Theorem 1.** *Let $\mathcal{U}$ be a bounded subset of $L^\infty(\Omega)$, $q \in L^\infty(\Omega)$ and $y$ be a solution of equation* $(2.1)$.
*We assume*

$$\exists\, x_0 \in \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega} \textit{ such that } \Gamma_0 \supset \{x \in \partial\Omega; (x - x_0).\nu(x) \geq 0\},$$

$$y(q) \in W^{1,2}(0, T, L^\infty(\Omega)),$$

$$y_0 \textit{ is real valued and } \ |y_0| \geq r_0 > 0, \ ae \ in \ \overline{\Omega}.$$

*There exists a constant $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty(\Omega)}, y_0, h, \mathcal{U}) > 0$ such that if*

$$\frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \in H^1(0, T; L^2(\Gamma_0))$$

*then $\forall\, p \in \mathcal{U}$,*

$$\|q - p\|_{L^2(\Omega)} \leq C \left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))}. \tag{2.3}$$

**Remarks : 1)** We have the same result if $y_0$ takes its values in $i\mathbb{R}$.
**2)** If we consider equation $(2.1)$ on $(-T, T)$ and with $y_0$ taking its values in $\mathbb{C}$, then, under the formalism of Theorem 1, we can prove the estimate

$$\|q - p\|_{L^2(\Omega)} \leq C \left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|_{H^1(-T,T;L^2(\Gamma_0))}.$$

A regularity result in the linear case, obtained in section 4, implies that the right hand side of inequality (2.3) is finite under some additional regularity on $y(q)$.

**Corollary 2.** *Let $\mathcal{U}$ be a bounded subset of $L^\infty(\Omega)$ and $q \in L^\infty(\Omega)$.*
*We assume :*

$$\exists\, x_0 \in \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega} \text{ such that } \Gamma_0 \supset \{x \in \partial\Omega; (x - x_0).\nu(x) \geq 0\},$$

$$y(q) \in W^{1,2}(0, T, W^{1,\infty}(\Omega)),$$

$$y_0 \text{ is real valued and } \quad |y_0| \geq r_0 > 0,\ ae\ in\ \overline{\Omega}.$$

*Then there exists a constant $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty}, y_0, h, \mathcal{U}) > 0$ such that $\forall\, p \in \mathcal{U}$ verifying $q - p \in H_0^1(\Omega)$,*

$$C^{-1}\|q - p\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\|q - p\|_{H_0^1(\Omega)}. \qquad (2.4)$$

The condition on $y(q)$ requires sufficient smoothness on $q$, $y_0$ and $h$ and compatibility conditions for $y_0$ and $h$ on $\partial\Omega \times \{0\}$. In particular, $|h(x, 0)| \geq r_0 > 0,\ x \in \partial\Omega$ must be satisfied since $|y_0(x)| \geq r_0 > 0,\ ae$ in $\overline{\Omega}$ and $h(0)$ has to be real valued.

The first inequality of Corollary 2 in (2.4) shows the stability of the nonlinear inverse problem and gives uniqueness while the second inequality gives the continuous dependance of the normal derivative of the solution with respect to the potential.

Many of the results we can refer to concern the wave equation. They are related to the same kind of inverse problems of determining a potential, some of them ([41], [53]) with a Dirichlet boundary data and a Neumann measurement and others with a Neumann boundary data and a Dirichlet measurement ([20], [21]). These references are all based upon local or global Carleman estimates. Nevertheless, in our approach, as in [21] for example, in order to prove Theorem 1, we do not use any of the compactness-uniqueness arguments which are required in [53] for the same kind of situation. Indeed, our present proof is based upon a global Carleman estimate (Proposition 3) which leads to the result in a direct way.

Up to our knowledge, the result of determination of a time independent potential in Schrödinger equation from a single time dependent measurement on a suitable part of the boundary is new. Let us notice that in the different context of Cauchy problem, V. ISAKOV in [23] uses local Carleman estimates for the Schrödinger equation to prove uniqueness of the solution.

This paper is organized as follows :

We first establish a global Carleman estimate for a Schrödinger equation with a potential (Section 2). This estimate leads us to show a theorem describing uniqueness and stability of the linear inverse problem (Section 3). The idea is inspired by O. Yu. IMANUVILOV and M. YAMAMOTO [21].

Then, after recalling some classical properties of regularity concerning our equations we prove a two sided inequality in the linear case (Section 4).

In section 5, we complete the proof of Theorem 1 and Corollary 2 from the results obtained for the linear problem. In section 6, under additional hypotheses, we finally improve the result of Theorem 1 by showing stability for a stonger norm of $(p - q)$, using there an observability estimate proved from the same Carleman estimate.

## 2.2 A global Carleman estimate

In this step, we will show a global Carleman estimate concerning a function $v = v(x,t)$ equals to zero on $\partial\Omega \times (-T,T)$ and solution of a Schrödinger equation with a bounded potential.

First, we assume that it is possible to find a regular and positive weight function $\psi = \psi(x)$ defined on $\mathbb{R}^N$ and pseudo- convex with respect to the Schrödinger operator. Indeed, we will suppose that $\psi$ verifies the following properties.

- $\psi \in C^4(\mathbb{R}^N)$,
- $\psi(x) \geq 0, \ \forall x \in \Omega$,
- $|\nabla\psi(x)| \geq \beta > 0, \ \forall x \in \Omega$,
- $\exists\, \Lambda_1 > 0, \ \exists\, \varepsilon > 0$ *such that* $\forall\, \xi \in \mathbb{R}^N, \ \forall\, \lambda > \Lambda_1$,
  $$\lambda|\nabla\psi .\, \xi|^2 + D^2\psi\left(\xi, \overline{\xi}\right) \geq \varepsilon\, |\xi|^2 \tag{2.5}$$
- $\nabla\psi.\nu < 0, \ \forall x \in \partial\Omega \setminus \Gamma_0$.

A classical answer to the problem of choosing a weight $\psi$ and a geometrical condition upon $\Gamma_0$ is the following :

$$\begin{aligned} x_0 &\in \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega} \\ \psi &= |x - x_0|^2 \\ \Gamma_0 &\supset \{x \in \partial\Omega, \ (x - x_0).\nu(x) \geq 0\} \end{aligned} \tag{2.6}$$

In this case all the required conditions are satisfied.

Then, for $s > 0$ and $\lambda > 0$ we define on $\Omega \times (-T,T)$ the functions $\theta$ and $\varphi$ by

$$\theta(x,t) = \frac{e^{\lambda\psi(x)}}{(T-t)(T+t)} \quad \text{and} \quad \varphi(x,t) = \frac{\alpha - e^{\lambda\psi(x)}}{(T-t)(T+t)}$$

where $\alpha > \|e^{\lambda\psi}\|_{L^\infty(\Omega)}$. We also set $Lv = iv' + \Delta v + qv$.

**Proposition 3 (Carleman Estimate).** *Let $q \in L^\infty(\Omega)$, $\|q\|_{L^\infty} \leq m$ and let $\psi$, $\theta$ and $\varphi$ satisfy the above conditions. There exists $\Lambda_0 > 0$, $s_0 > 0$ and a constant $M = M(\Omega, T, \Gamma_0, \beta, \varepsilon, m, \Lambda_0, s_0) > 0$ such that*
*for all $\lambda > \Lambda_0$ and for all $s > s_0$,*

$$\begin{aligned} & s\lambda \int_{-T}^{T}\int_\Omega |\nabla v|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt + s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_\Omega |v|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt \\ + & \int_{-T}^{T}\int_\Omega \left(|\widetilde{P}_1 v|^2 + |\widetilde{P}_2 v|^2\right) e^{-2s\varphi}\, dxdt \\ \leq & \ M \int_{-T}^{T}\int_\Omega |Lv|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt + Ms\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \theta \left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2 e^{-2s\varphi}\nabla\psi.\nu\, d\sigma dt. \end{aligned} \tag{2.7}$$

*for all $v$ satisfying*

$$\left|\begin{array}{l} Lv \in L^2(\Omega \times (-T,T)), \\ v \in L^2(-T,T; H_0^1(\Omega)), \\ \dfrac{\partial v}{\partial\nu} \in L^2(-T,T; L^2(\Gamma_0)), \end{array}\right.$$

*where* $\widetilde{P}_1$ *and* $\widetilde{P}_2$ *will be defined later by* (2.8) *and* (2.9).

**Proof :**
We can refer to [7] for the general method. The main idea consists in setting $v = e^{s\varphi}w$ and calculating

$$Pw = e^{-s\varphi}L(e^{s\varphi}w).$$

Thus we have

$$Pw = iw' + is\varphi' w + \Delta w + 2s\nabla\varphi.\nabla w + sw\Delta\varphi + s^2|\nabla\varphi|^2 w + qw,$$

and we set

$$P_1 w + P_2 w = Pw - qw$$

where

$$\begin{aligned} P_1 w &= iw' + \Delta w + s^2|\nabla\varphi|^2 w, \\ P_2 w &= is\varphi' w + 2s\nabla\varphi.\nabla w + s\Delta\varphi w. \end{aligned}$$

We just have represented $Pw - qw$ as the sum of adjoint $(P_1)$ and skew-adjoint $(P_2)$ operators. Then,

$$\begin{aligned} \int_{-T}^{T}\int_\Omega |Pw - qw|^2\,dxdt &= \int_{-T}^{T}\int_\Omega |P_1 w|^2\,dxdt + \int_{-T}^{T}\int_\Omega |P_2 w|^2\,dxdt \\ &\quad +2Re\int_{-T}^{T}\int_\Omega P_1 w\overline{P_2 w}\,dxdt, \end{aligned}$$

where $\overline{z}$ is the conjugate of $z$ and $Re(z)$ its real part.
As $v \in L^2(-T,T;H_0^1(\Omega))$ and $v' \in L^2(-T,T;H^{-1}(\Omega))$ (because $Lv \in L^2(\Omega \times (-T,T))$), we have $v \in C([-T,T];L^2(\Omega))$ and $w \in C([-T,T];L^2(\Omega))$ with $w(x,\pm T) = 0$.

We will first look for lower bounds for

$$Re\int_{-T}^{T}\int_\Omega P_1 w\overline{P_2 w}\,dxdt,$$

reminding that

$$\begin{aligned} P_1 w &= iw' + \Delta w + s^2|\nabla\varphi|^2 w, \\ \overline{P_2 w} &= -is\varphi'\overline{w} + 2s\nabla\varphi.\nabla\overline{w} + s\Delta\varphi\overline{w}. \end{aligned}$$

We multiply each term of $P_1 w$ by each term of $\overline{P_2 w}$. The properties of $w$ and some integrations by parts allow to write the following equalities.

$$I_{11} = Re\int_{-T}^{T}\int_\Omega iw'(-is\varphi'\overline{w})\,dxdt = -\frac{s}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \varphi''|w|^2\,dxdt.$$

Writing $Im(z)$ for the imaginary part of $z \in \mathbb{C}$, we have $Im(z) - Im(\overline{z}) = 2Im(z)$

and taking $z = 2s\lambda \, Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta \nabla\psi \nabla\overline{w} w' \, dxdt$, we show that :

$$
\begin{aligned}
I_{12} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} iw'(2s\nabla\varphi.\nabla\overline{w}) \, dxdt \\
&= s\lambda \, Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(\Delta\psi + \lambda|\nabla\psi|^2) w\overline{w'} \, dxdt \\
&\quad - s\lambda \, Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta' w \nabla\psi.\nabla\overline{w} \, dxdt.
\end{aligned}
$$

Moreover, since $Im\, z = -Im\, \overline{z}$, then :

$$
I_{13} = Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} iw'(s\Delta\varphi\overline{w}) \, dxdt = -s\lambda \, Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(\Delta\psi + \lambda|\nabla\psi|^2) w\overline{w}' dxdt
$$

and since $Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \varphi' \nabla\overline{w}.\nabla w \, dxdt = 0$,

$$
I_{21} = Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \Delta w(-is\varphi'\overline{w}) \, dxdt = s\lambda \, Im \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta' \overline{w} \nabla\psi.\nabla w \, dxdt.
$$

The next inequality uses the fact that $\nabla w = \dfrac{\partial w}{\partial \nu}.\, \nu$ on $\partial\Omega \times (0,T)$ because $w = 0$ on $\partial\Omega \times (0,T)$ :

$$
\begin{aligned}
I_{22} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \Delta w(2s\nabla\varphi.\nabla\overline{w}) \, dxdt \\
&= -\, s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(\Delta\psi + \lambda|\nabla\psi|^2)|\nabla w|^2 \, dxdt \\
&\quad - s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left|\frac{\partial w}{\partial \nu}\right|^2 \nabla\psi.\nu \, d\sigma dt \\
&\quad + 2s\lambda^2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta|\nabla\psi.\nabla w|^2 \, dxdt \\
&\quad + 2s\lambda \, Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial\psi}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial w}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{w}}{\partial x_j} \, dxdt.
\end{aligned}
$$

Using integrations by parts we obtain :

$$
\begin{aligned}
I_{23} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \Delta w(s\Delta\varphi\overline{w})\,dxdt \\
&= s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(\Delta\psi + \lambda|\nabla\psi|^2)|\nabla w|^2\,dxdt \\
&\quad - \frac{s\lambda}{2}\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta\Delta^2\psi|w|^2\,dxdt \\
&\quad - \frac{s\lambda^2}{2}\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(|\Delta\psi|^2 + 2\nabla\psi.\nabla(\Delta\psi) + \Delta(|\nabla\psi|^2))|w|^2\,dxdt \\
&\quad - s\lambda^3\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta(|\nabla\psi|^2\Delta\psi + \nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2))|w|^2\,dxdt \\
&\quad - \frac{s\lambda^4}{2}\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta|\nabla\psi|^4|w|^2\,dxdt,
\end{aligned}
$$

and we obviously have

$$
\begin{aligned}
I_{31} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} s^2|\nabla\varphi|^2 w(is\varphi'\overline{w})\,dxdt = 0, \\
I_{32} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} s^2|\nabla\varphi|^2 w(2s\nabla\varphi.\nabla\overline{w})\,dxdt \\
&= s^3\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3(|\nabla\psi|^2\Delta\psi + \nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2))|w|^2\,dxdt \\
&\quad + 3s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3|\nabla\psi|^4|w|^2\,dxdt,
\end{aligned}
$$

and

$$
\begin{aligned}
I_{33} &= Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} s^2|\nabla\varphi|^2 w(s\Delta\varphi\overline{w})\,dxdt \\
&= -s^3\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3|\nabla\psi|^2\Delta\psi|w|^2\,dxdt - s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3|\nabla\psi|^4|w|^2\,dxdt.
\end{aligned}
$$

These four last equalities explain why we required $\psi \in C^4(\mathbb{R}^n)$.

Thereafter, we obtain :

$$
\begin{aligned}
& Re \int_{-T}^{T}\int_\Omega P_1 w\overline{P_2 w}\, dxdt = \\
- \ & \frac{s}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \varphi''|w|^2\, dxdt - 2s\lambda\, Im \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta' w\nabla\psi.\nabla\overline{w}\, dxdt \\
- \ & s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left|\frac{\partial w}{\partial\nu}\right|^2 \nabla\psi.\nu\, d\sigma dt + 2s\lambda^2 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta|\nabla\psi.\nabla w|^2\, dxdt \\
+ \ & 2s\lambda\, Re \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta D^2\psi(\nabla w, \nabla\overline{w})\, dxdt - \frac{s\lambda}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta\Delta^2\psi|w|^2\, dxdt \\
- \ & \frac{s\lambda^2}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta(|\Delta\psi|^2 + 2\nabla\psi.\nabla(\Delta\psi) + \Delta(|\nabla\psi|^2))|w|^2\, dxdt \\
- \ & s\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta(|\nabla\psi|^2\Delta\psi + \nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2))|w|^2\, dxdt \\
- \ & \frac{s\lambda^4}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta|\nabla\psi|^4|w|^2\, dxdt + s^3\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta^3\nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2)|w|^2\, dxdt \\
+ \ & 2s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta^3|\nabla\psi|^4|w|^2\, dxdt.
\end{aligned}
$$

We call $X_1$ the terms which are neglectible within respect to
$s\lambda^2 \displaystyle\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta|\nabla\psi.\nabla w|^2\, dxdt$ or $s^3\lambda^4 \displaystyle\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta^3|\nabla\psi|^4|w|^2\, dxdt.$
Then :

$$
\begin{aligned}
X_1 \ = \ & -\frac{s}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \varphi''|w|^2\, dxdt - 2s\lambda\, Im \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta' w\nabla\psi.\nabla\overline{w}\, dxdt \\
- \ & \frac{s\lambda}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta\Delta^2\psi|w|^2\, dxdt \\
- \ & \frac{s\lambda^2}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta(|\Delta\psi|^2 + 2\nabla\psi.\nabla(\Delta\psi) + \Delta(|\nabla\psi|^2))|w|^2\, dxdt \\
- \ & s\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta(|\nabla\psi|^2\Delta\psi + \nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2))|w|^2\, dxdt \\
- \ & \frac{s\lambda^4}{2}\int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta|\nabla\psi|^4|w|^2\, dxdt + s^3\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta^3\nabla\psi.\nabla(|\nabla\psi|^2)|w|^2\, dxdt.
\end{aligned}
$$

Now, we can notice that :

$$
\begin{aligned}
1) \quad & s\lambda\, Im \int_{-T}^{T}\int_\Omega \theta' w\nabla\psi.\nabla\overline{w}\, dxdt \le s\lambda \int_{-T}^{T}\int_\Omega (\theta')^{\frac{1}{2}}|\nabla\psi.\nabla w|^2\, dxdt \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad + s\lambda \int_{-T}^{T}\int_\Omega (\theta')^{\frac{3}{2}}|w|^2\, dxdt, \\
2) \quad & \alpha \textit{ is such that } \varphi > 0 \textit{ on } \Omega\times(-T,T), \\
3) \quad & |\theta| \le C\theta^3,\ |\theta'| \le C\theta^2 \textit{ and } |\varphi''| \le C\theta^3 \textit{ on } (-T,T)\times\Omega,\ C = C(T) > 0.
\end{aligned}
$$

Then,

$$\begin{aligned} |X_1| \quad \leq \quad & Cs\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta |\nabla\psi.\nabla w|^2 \, dxdt + Cs\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta |w|^2 \, dxdt \\ & + Cs^3\lambda^3 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3 |w|^2 \, dxdt. \end{aligned}$$

We can also write :

$$\begin{aligned} Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} P_1 w \overline{P_2 w} \, dxdt \quad \geq \quad & X_1 + 2s\lambda^2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta |\nabla\psi.\nabla w|^2 \, dxdt \\ & + 2s\lambda \, Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta D^2\psi(\nabla w, \nabla \overline{w}) \, dxdt \\ & + 2s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3 |\nabla\psi|^4 |w|^2 \, dxdt \\ & - s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left| \frac{\partial w}{\partial\nu} \right|^2 \nabla\psi.\nu \, d\sigma dt. \end{aligned}$$

Moreover,

$$\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw - qw|^2 \, dxdt \leq 2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw|^2 \, dxdt + 2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} q^2 |w|^2 \, dxdt.$$

Therefore, from these two last inequalities and if we impose

$$|\nabla\psi(x)| \geq \beta > 0, \quad \forall x \in \Omega,$$

we obtain :

$$\begin{aligned} & 4s\lambda^2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta |\nabla\psi.\nabla w|^2 \, dxdt + 4s\lambda \, Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta D^2\psi(\nabla w, \nabla \overline{w}) \, dxdt \\ & + 4s^3\lambda^4\beta^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3 |w|^2 \, dxdt + \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |P_1 w|^2 + |P_2 w|^2 \, dxdt \\ \leq \quad & 2\,|X_1| + 2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw|^2 \, dxdt + 2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} q^2 |w|^2 \, dxdt \\ & + 2s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left| \frac{\partial w}{\partial\nu} \right|^2 \nabla\psi.\nu \, d\sigma dt. \end{aligned}$$

Hence, it is clear that if we take $\lambda > \Lambda_2$ and $s > s_0$ large enough, then $\int_{-T}^{T}\int_{\Omega} q^2 |w|^2 \, dxdt$ and all the terms of $X_1$ will be absorbed by the two dominating terms of the left hand side. Then, we see there exists $M_1 > 0$ depending on $\Omega, T, m, \beta, \Lambda_2, s_0$ and independant of $s$ and $\lambda$ such that

$$\begin{aligned} & s\lambda^2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta |\nabla\psi.\nabla w|^2 \, dxdt + s\lambda \, Re \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta D^2\psi(\nabla w, \nabla \overline{w}) \, dxdt \\ + \quad & s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3 |w|^2 \, dxdt + \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} (|P_1 w|^2 + |P_2 w|^2) \, dxdt \\ \leq \quad & M_1 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw|^2 \, dxdt + M_1 \, s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left| \frac{\partial w}{\partial\nu} \right|^2 \nabla\psi.\nu \, d\sigma dt. \end{aligned}$$

At this step, applying condition (2.5) on $\psi$, we obtain that $\forall\ \lambda > \Lambda_0$, where $\Lambda_0 = \max(\Lambda_2, \Lambda_1)$,

$$\begin{aligned}
&\varepsilon\ s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta|\nabla w|^2\,dxdt + s^3\lambda^4\beta^4\ \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \theta^3|w|^2\,dxdt \\
+&\ \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |P_1 w|^2\,dxdt + \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |P_2 w|^2\,dxdt \\
\leq&\ M_1\ \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw|^2\,dxdt + M_1\ s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\partial\Omega} \theta \left|\frac{\partial w}{\partial \nu}\right|^2 \nabla\psi.\nu\,d\sigma dt.
\end{aligned}$$

Let us remark that $\theta > 0$ on $(-T,T)\times\Omega$ and $\nabla\psi.\nu < 0$ on $\partial\Omega\setminus\Gamma_0$. Then, by modifying the constant $M_1$ into $M_2 = M_2(\Omega, T, m, \beta, \varepsilon, \Lambda_0, s_0) > 0$ we obtain :

$$\begin{aligned}
&s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |\nabla w|^2\,dxdt + s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |w|^2\,dxdt \\
&+ \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} (|P_1 w|^2 + |P_2 w|^2)\,dxdt \\
&\leq M_2 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Pw|^2\,dxdt + M_2\ s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \theta \left|\frac{\partial w}{\partial \nu}\right|^2 \nabla\psi.\nu\,d\sigma dt.
\end{aligned}$$

We can now rewrite our inequality with $v$ instead of $w$. We have

$$\begin{aligned}
&|v|^2 e^{-2s\varphi} = |w|^2, \\
&e^{-2s\varphi}|\nabla v|^2 = |\nabla w + s\nabla\varphi w|^2 \leq 2|\nabla w|^2 + 2s^2|\nabla\varphi|^2|w|^2, \\
&\left|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right|^2 e^{-2s\varphi} = \left|\frac{\partial w}{\partial \nu}\right|^2 \text{ on } \partial\Omega, \\
&Pw = e^{-s\varphi} L(v),
\end{aligned}$$

and defining

$$\widetilde{P}_1 v = e^{s\varphi} P_1 w, \tag{2.8}$$
$$\widetilde{P}_2 v = e^{s\varphi} P_2 w, \tag{2.9}$$

we finally show (2.7) : $\exists M = M(\Omega, T, \Gamma_0, \beta, \varepsilon, m, \Lambda_0, s_0)$ such that $\forall\ s > s_0$, $\forall\ \lambda > \Lambda_0$,

$$\begin{aligned}
&s\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |\nabla v|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt + s^3\lambda^4 \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |v|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt \\
+&\ \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} \left(|\widetilde{P}_1 v|^2 + |\widetilde{P}_2 v|^2\right) e^{-2s\varphi}\,dxdt \\
\leq&\ M \int_{-T}^{T}\int_{\Omega} |Lv|^2 e^{-2s\varphi}\,dxdt + Ms\lambda \int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \theta \left|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right|^2 e^{-2s\varphi}\nabla\psi.\nu\,d\sigma dt.
\end{aligned}$$

Hence the end of the proof of Proposition 3. □

**Remark :** Under the conditions upon $\psi$, we can notice that $\theta e^{-2s\varphi}$ and $\nabla\psi.\nu$ are bounded on $(-T,T)\times\Gamma_0$ and replace

$$\int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \theta \left|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right|^2 e^{-2s\varphi}\nabla\psi.\nu\,d\sigma dt \ \text{ by }\ C \int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0} \left|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right|^2 d\sigma dt$$

We knew, from counter-examples that a geometrical condition was necessary and the choice of $\Gamma_0$ given in (2.6) is very usual. Indeed, E. MACHTYNGIER [36], R. TRIGGIANI, P.- F. YAO and I. LASIECKA in references [31], [48] and [49] used that kind of open set of the boundary. In [36], E. MACHTYNGIER shows an observability inequality which estimates initial data by boundary Neumann data for a Schrödinger equation without a potential on $\Gamma_0 = \{x \in \partial\Omega; (x-x_0).\nu(x) \geq 0\}$ using a multiplier identity and Holmgren's uniqueness theorem. Moreover, observability inequalities are technically related to our inverse problem (see [53] and section 2.6). The reference [48] is based on Carleman estimates, that R. TRIGGIANI proved for a more general kind of coupled Schrödinger equation and applied it to exact controllability. However, both of them are not directly applicable to obtain the result we are expecting.

## 2.3 Stability in the linear case

We first consider the linear inverse problem and give the following result.

**Theorem 4.** *Let $q \in L^\infty(\Omega)$ and $u$ be a solution of equation $(2.2)$.*
*We assume that*

$$\Gamma_0 \;\; \textit{satisfies} \;\; (2.6),$$

$$R \in W^{1,2}(0,T,L^\infty(\Omega)),$$

$$R(0) \;\; \textit{is real valued and} \;\; |R(x,0)| \geq r_0 > 0, \;\; \textit{ae in} \;\; \overline{\Omega}.$$

*There exists a constant $C = C(\Omega, T, \|q\|_{L^\infty(\Omega)}, R) > 0$ such that if*

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} \in H^1(0,T;L^2(\Gamma_0)),$$

*then,*

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} \leq C \left\| \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))}. \tag{2.10}$$

**Proof :**
As we need to estimate $\dfrac{\partial u}{\partial \nu}$ in $H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))$ norm, we work on the equation satisfied by $v = u'$ :

$$\begin{cases} iv'(x,t) + \Delta v(x,t) + q(x)v(x,t) = f(x)R'(x,t), \; x \in \Omega, \; t \in (0,T) \\ v(x,t) = 0, \; x \in \partial\Omega, \; t \in (0,T) \\ v(x,0) = -if(x)R(x,0), \; x \in \Omega \end{cases} \tag{2.11}$$

The Carleman inequality we just obtained is the key of the proof. We extend the function $v$ on $\Omega \times (-T,T)$ by the formula $v(x,t) = -\overline{v}(x,-t)$ for every $(x,t) \in \Omega \times (-T,0)$. Since $R(0)$ and $f$ are real valued, $v \in C([-T,T];H_0^1(\Omega))$ and $\dfrac{\partial v}{\partial \nu} \in L^2((-T,T) \times \Gamma)$. We also extend $R$ on $\Omega \times (-T,T)$ by the formula $R(x,t) = \overline{R}(x,-t)$ for every $(x,t) \in \Omega \times (-T,0)$ and if we denote the extention of $R'$ by the same notation, then $R' \in L^2(-T,T;W^{1,\infty}(\Omega))$. Thus, $v$ satisfies the same equation (2.11), set in $(-T,T)$.

We set $w = e^{-s\varphi}v$, $P_1 w = iw' + \Delta w + s^2|\nabla\varphi|^2 w$ and $e^{-s\varphi}\widetilde{P}_1 v = P_1 w$ as in section 2.2 and we define :

$$I = Im \int_{-T}^{0}\int_\Omega \widetilde{P}_1 v \, e^{-2s\varphi}\overline{v}\, dxdt.$$

On the one hand,

$$\begin{aligned}
I &= Im \int_{-T}^{0}\int_\Omega P_1 w\overline{w}\, dxdt \\
&= Im \int_{-T}^{0}\int_\Omega \left(iw' + \Delta w + s^2|\nabla\varphi|^2 w\right)\overline{w}\, dxdt \\
&= Re \int_{-T}^{0}\int_\Omega w'\overline{w}\, dxdt - Im \int_{-T}^{0}\int_\Omega \left(|\nabla w|^2 - s^2|\nabla\varphi|^2|w|^2\right)\, dxdt \\
&= \frac{1}{2}\int_{-T}^{0}\int_\Omega \left(|w|^2\right)'\, dxdt \\
&= \frac{1}{2}\int_\Omega |w(x,0)|^2\, dx \\
&= \frac{1}{2}\int_\Omega |f(x)|^2|R(x,0)|^2 e^{-2s\varphi(x,0)}\, dx
\end{aligned}$$

On the other hand, Cauchy-Schwarz inequality and Carleman estimate stated as in Proposition 3 in section 2.2, give :

$$\begin{aligned}
I &\leq \left(\int_{-T}^{T}\int_\Omega |\widetilde{P}_1 v|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{-T}^{T}\int_\Omega |v|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq s^{-\frac{3}{2}}\left(M\int_{-T}^{T}\int_\Omega |fR'|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt + Ms\int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0}\theta\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2 e^{-2s\varphi}\nabla\psi.\nu\, d\sigma dt\right)
\end{aligned}$$

Then, $\varphi(x,t) = \dfrac{\alpha - e^{\lambda\psi(x)}}{(T-t)(T+t)}$ is such that $e^{-2s\varphi(x,t)} \leq e^{-2s\varphi(x,0)}$ for all $x \in \Omega$ and $t \in (-T,T)$ and it is easy to see that under the conditions satisfied by $\psi$, $\theta e^{-2s\varphi}$ and $\nabla\psi.\nu$ are bounded on $(-T,T)\times\Gamma_0$. Therefore

$$I \leq s^{-\frac{3}{2}}\left(M\int_{-T}^{T}\int_\Omega |fR'|^2 e^{-2s\varphi(x,0)}\, dxdt + Ms\int_{-T}^{T}\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2 d\sigma dt\right).$$

Moreover, using the definition of the extensions of $v$ and $R'$, we easily get

$$I \leq s^{-\frac{3}{2}}\left(M\int_{0}^{T}\int_\Omega |fR'|^2 e^{-2s\varphi(x,0)}\, dxdt + Ms\int_{0}^{T}\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2 d\sigma dt\right).$$

From $R \in W^{1,2}(0,T,L^\infty(\Omega))$ and $|R(x,0)| \geq r_0 > 0$ $ae\ in\ \overline{\Omega}$, we deduce that :

$$\exists\, g_0 \in L^2(0,T),\ |R'(x,t)| \leq g_0(t)|R(x,0)|,\ \forall x\in\Omega,\ t\in(0,T).$$

Hence we have :

$$\begin{aligned}\int_\Omega |f|^2|R(0)|^2 e^{-2s\varphi(0)}\,dx &\leq Ms^{-\frac{3}{2}}\int_0^T\int_\Omega |f|^2|g_0|^2|R(0)|^2e^{-2s\varphi(0)}\,dxdt\\ &+ Ms^{-\frac{1}{2}}\int_0^T\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2\,d\sigma dt.\end{aligned}$$

But $g_0 \in L^2(0,T) \Rightarrow \int_0^T |g_0(t)|^2\,dt \leq K < +\infty$ and so we write

$$\left[\int_\Omega |f(x)|^2|R(x,0)|^2e^{-2s\varphi(x,0)}\,dx\right]\left(1-\frac{MK}{s^{\frac{3}{2}}}\right) \leq Ms^{-\frac{1}{2}}\int_0^T\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2\,d\sigma dt.$$

Then, if $s$ is large enough, ($s > (MK)^{\frac{2}{3}}$), we see that there exist a constant $C = C(M,s) > 0$ such that :

$$\int_\Omega |f(x)|^2|R(x,0)|^2e^{-2s\varphi(x,0)}\,dx \leq C\int_0^T\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2\,d\sigma dt.$$

Since $|R(x,0)| \geq r_0 > 0,\ ae\ in\ \overline{\Omega}$ and $e^{-2s\varphi(x,0)} \geq e^{-2s\frac{\alpha-1}{T^2}} > 0,\ \forall x \in \Omega$, we obtain

$$\int_\Omega |f(x)|^2\,dx \leq C\int_0^T\int_{\Gamma_0}\left|\frac{\partial v}{\partial\nu}\right|^2\,d\sigma dt,$$

and it is (2.10) :

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} \leq C\left\|\frac{\partial u}{\partial\nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))}.$$

Therefore, Theorem 4 has been proved. □

**Remark :** if we replace the assumption "$R(0)$ *is real valued*" by the following "$R(0)$ *takes its values in* $i\mathbb{R}$", using the same idea, but with a different extension of $v$ and $R$, we will be able to prove the same result.

**Corollary 5.** *Let $u$ be the solution of equation $(2)$ and $\Gamma_0$ given by (2.6).*
*We assume :*

$$q \in L^\infty(\Omega),\ R \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega)),$$
$$R(0) \textit{ is real valued and } |R(x,0)| \geq r_0 > 0\ ae\ in\ \overline{\Omega}.$$

*Then, there exists a constant $C = C(\Omega,T,\|q\|_{L^\infty(\Omega)},R) > 0$ such that for all $f \in H_0^1(\Omega)$ :*

$$C^{-1}\|f\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\|\frac{\partial u}{\partial\nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\|f\|_{H_0^1(\Omega)}. \tag{2.12}$$

The proof will be given in the following section.

**Remark :** It follows from Theorem 4 that

$$\left(\frac{\partial u}{\partial\nu} = 0 \text{ on } (0,T)\times\Gamma_0\right) \Rightarrow (f = 0 \text{ on } \Omega)$$

and it corresponds to the uniqueness result, for the linear case, proposed in section 2.1. In the non linear situation, we easily show uniqueness by choosing $f = q - p$, $u = y(p) - y(q)$ and $R = y(p)$ on $\Omega\times(0,T)$.
This result can be writen in the following way :

**Theorem 6.** *Let $p \in L^\infty(\Omega)$ and $q \in L^\infty(\Omega)$. We assume that $y(p)$ or $y(q)$ belongs to $W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))$, $y_0$ is real valued and $|y_0(x)| \geq r_0 > 0$ almost everywhere in $\overline{\Omega}$.*

$$If \;\; \frac{\partial y(q)}{\partial \nu} = \frac{\partial y(p)}{\partial \nu} \; on \; (0,T)\times\Gamma_0, \;\; then \;\; q = p \; on \; \Omega.$$

## 2.4 Existence and regularity properties

The estimates we will need to prove Corollary 5 can be summed up by the following lemmas.

**Lemma 7.** *Let us consider*

$$\left\{ \begin{array}{l} iy'(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = g(x,t), \; x \in \Omega, \; t \in (0,T) \\ y(x,t) = 0, \; x \in \partial\Omega, \; t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0(x), \; x \in \Omega \end{array} \right. \tag{2.13}$$

*where $q \in L^\infty(\Omega)$, $y_0 \in H_0^1(\Omega)$ and $g \in X$, with $X = L^1(0,T,H_0^1(\Omega))$ or $X = W^{1,1}(0,T,L^2(\Omega))$. This equation admits a unique weak solution $y \in C([0,T],H_0^1(\Omega))$ such that the mapping $(g,y_0) \to \frac{\partial y}{\partial \nu}$ is linear and continuous from $X \times H_0^1(\Omega)$ to $L^2(\Gamma\times(0,T))$ and $\exists\, C = C(\Omega,T,\|q\|_{L^\infty(\Omega)}) > 0$ such that :*

$$\forall\, t \in (0,T), \;\; \|y(t)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\left(\|y_0\|_{H_0^1(\Omega)} + \|g\|_X\right) \tag{2.14}$$

$$\left\|\frac{\partial y}{\partial \nu}\right\|_{L^2(\Gamma\times(0,T))} \leq C\left(\|y_0\|_{H_0^1(\Omega)} + \|g\|_X\right) \tag{2.15}$$

**Proof :**
Concerning estimate (2.14), we can refer to [15]. It is a classical result which can be formally obtained by two manipulations using Gronwall inequality. In a first time we have to work on "$Im\displaystyle\int_\Omega (2.13).\overline{y}\,dx$" and show that if $y_0 \in L^2(\Omega)$ and $g \in L^1(0,T,L^2(\Omega))$ then $(2.13)$ admits a unique solution $y \in C([0,T],L^2(\Omega))$ such that $\forall\, t \in (0,T)$,

$$\|y(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\left(\|y_0\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^1(0,T,L^2(\Omega))}\right).$$

Then, in a second time, working on "$Re\displaystyle\int_\Omega (2.13).\overline{y'}\,dx$", we manage to obtain (2.14) in both of the two cases for space $X$.

Estimate (2.15) can be deduced from this other result :

**Lemma 8.** *Let $\gamma = \gamma(x,t) \in C^2(\overline{\Omega\times(0,T)},\mathbb{R}^n)$. Under the same hypothesis as in the preceding lemma, the following multipliers identity holds for every weak solution of $(2.13)$ with initial data $y_0 \in H_0^1(\Omega)$ and $g \in X$ :*

$$\begin{aligned} \int_0^T\int_\Gamma \gamma.\nu|\frac{\partial y}{\partial \nu}|^2\,d\sigma dt &= Im\int_\Omega y\gamma.\nabla\overline{y}\,dx\Big|_0^T \\ &+Re\int_0^T\int_\Omega y\nabla(\mathrm{div}\gamma).\nabla\overline{y}\,dxdt + 2Re\int_0^T\int_\Omega \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial\gamma_j}{\partial x_i}\frac{\partial y}{\partial x_i}\frac{\partial\overline{y}}{\partial x_j}\,dxdt \\ &-2Re\int_0^T\int_\Omega qy\gamma.\nabla\overline{y}\,dxdt - Re\int_0^T\int_\Omega q|y|^2\,\mathrm{div}\gamma\,dxdt \\ &+2Re\int_0^T\int_\Omega g\gamma.\nabla\overline{y}\,dxdt + Re\int_0^T\int_\Omega g\overline{y}\,\mathrm{div}\gamma\,dxdt. \end{aligned}$$

We first obtain this identity for very regular data $g \in W^{1,1}(0,T,\mathcal{D}(\Omega))$ and $y_0 \in \mathcal{D}(\Omega)$ by calculating

$$'' \; Re \int_0^T \int_\Omega (2.13).(\gamma.\nabla\overline{y} + \frac{1}{2}\overline{y}\,\mathrm{div}\gamma)\,dxdt \; ''.$$

and the result holds by integration by parts. At this step, reference [36] gives a similar result for the Schrödinger equation without potential. Then, by density, the estimate holds true for every solution of (2.13) with initial data $y_0 \in H_0^1(\Omega)$ and $g \in X$.

We finally choose $\gamma = \gamma(x) \in C^2(\overline{\Omega \times (0,T)}, \mathbb{R}^n)$ such that $\gamma = \nu$ on the $C^2$-boundary $\partial\Omega$. Then $\gamma.\nu = 1$ on $(0,T) \times \partial\Omega$ and applying estimate (2.14) with Lemma 8, we manage to obtain estimate (2.15). $\square$

**Proof of Corollary 5 :**
Since $f \in H_0^1(\Omega)$ and $R \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))$, we have $fR' \in L^1(0,T,H_0^1(\Omega))$ and $fR(0) \in H_0^1(\Omega)$. Thereafter, we know that equation (2.11) has a solution $v \in C([0,T];H_0^1(\Omega))$ and it also implies $\dfrac{\partial v}{\partial \nu} \in L^2((0,T)\times\Gamma)$. Of course, the left inequality in (2.12) derives from Theorem 4. Besides, from Lemma 7 :

$$\begin{aligned} \left\|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)} &\leq \left\|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right\|_{L^2((0,T)\times\partial\Omega)} \\ &\leq C\left(\|fR(0)\|_{H_0^1(\Omega)} + \|fR'\|_{L^1(0,T,H_0^1(\Omega))}\right) \\ &\leq C\|f\|_{H_0^1(\Omega)} \end{aligned}$$

This proves the right hand side of inequality (2.12) and the proof of Corollary 5 is complete. $\square$

## 2.5 Proof of Theorem 1 and Corollary 2

We would like first to give a meaning to equation (1) we are studying.

**Lemma 9.** *Let $q \in L^\infty(\Omega)$, $y_0 \in L^2(\Omega)$ and $h \in L^2(\partial\Omega \times (0,T))$. Then, there exists a unique solution*

$$y \in C([0,T],H^{-1}(\Omega)) \cap H^{-1}(0,T,L^2(\Omega)),$$

*defined by transposition, of the problem* $(2.1)$ *:*

$$\begin{cases} iy'(x,t) + \Delta y(x,t) + q(x)y(x,t) = 0, \; x \in \Omega, \; t \in (0,T) \\ y(x,t) = h(x,t), \; x \in \partial\Omega, \; t \in (0,T) \\ y(x,0) = y_0(x), \; x \in \Omega. \end{cases}$$

**Proof :**
We define the adjoint system

$$\begin{cases} i\varphi' + \Delta\varphi + q\varphi = g, & \text{in } \Omega \times (0,T) \\ \varphi = 0, & \text{on } \partial\Omega \times (0,T) \\ \varphi(T) = 0, & \text{in } \Omega \end{cases}$$

It is well-known that we have the following regularity properties about this Schrödinger equation :

a) If $g \in L^1(0,T,H_0^1(\Omega))$ then $\varphi \in C([0,T],H_0^1(\Omega))$ and $\dfrac{\partial\varphi}{\partial\nu} \in L^2(\Gamma \times (0,T))$ (Lemma 7).

b) If $g \in H_0^1(0,T,L^2(\Omega)) \hookrightarrow W^{1,1}(0,T,L^2(\Omega))$ then $\varphi \in C([0,T],H^2(\Omega))$ and $\dfrac{\partial\varphi}{\partial\nu} \in C([0,T],H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega))$.
Indeed, we first have $\varphi \in C([0,T],L^2(\Omega))$. The study of the equation satisfied by $\varphi'$ gives $\varphi \in C^1([0,T],L^2(\Omega))$ and that leads to $\Delta\varphi = g - q\varphi - i\varphi' \in C([0,T],L^2(\Omega))$. Then $\varphi \in C([0,T],H^2(\Omega))$ and its normal derivative is in $C([0,T],H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega))$.

We say that $y$ is a solution of (1) in the transposition sense if and only if it is possible, for every $g$, to give a meaning to

$$\int_0^T \int_\Omega \overline{g}y\,dxdt = i\int_\Omega y_0\overline{\varphi}(0)\,dx + \int_0^T \int_{\partial\Omega} h\frac{\partial\overline{\varphi}}{\partial\nu}\,d\sigma dt.$$

We take $g \in \mathcal{D}(0,T,\mathcal{D}(\Omega))$. By density in $L^1(0,T,H_0^1(\Omega))$ and $H_0^1(0,T,L^2(\Omega))$ we are able to define $y \in L^\infty(0,T,H^{-1}(\Omega)) \cap H^{-1}(0,T,L^2(\Omega))$ with $q \in L^\infty(\Omega)$, $y_0 \in L^2(\Omega)$ and $h \in L^2(\partial\Omega \times (0,T))$.

We refer to [36] for the transposition method concerning the Schrödinger equation and the way to prove that we finally obtain $y \in C([0,T],H^{-1}(\Omega)) \cap H^{-1}(0,T,L^2(\Omega))$. Nevertheless, we would like to underline that the important point here is that we have a potential $q \in L^\infty(\Omega)$ and we have to give a meaning to $qy$ (indeed, we proved that $qy \in H^{-1}(0,T;L^2(\Omega))$, since $y \in H^{-1}(0,T;L^2(\Omega))$). Let us also notice that the regularity we obtain in $y$ implies $\dfrac{\partial y}{\partial\nu} \in H^{-2}(0,T;H^{-\frac{3}{2}}(\Gamma))$. $\square$

Thereafter, we define $u = y(p) - y(q)$, which verifies :

$$\left\{\begin{array}{l} iu' + \Delta u + pu = (q-p)y(q), \quad \text{in } \Omega \times (0,T) \\ u = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \times (0,T) \\ u(0) = 0, \quad \text{in } \Omega. \end{array}\right. \tag{2.16}$$

The key of our proof is that in the linear case, all the constants depend on the $L^\infty$ norm of the potential. Then, since $p \in \mathcal{U}$, where $\mathcal{U}$ is bounded in $L^\infty$, we are in fact, with (2.16) in a situation similar to the linear case (2.2).

**Proof of Theorem 1 :**
We have $y(q) \in W^{1,2}(0,T,L^\infty(\Omega))$ and we know that

$$W^{1,2}(0,T,L^\infty(\Omega)) \subset C([0,T],W^{1,\infty}(\Omega))$$

then we have $y(x,0) = y_0 \in L^\infty(\Omega)$. Thus, hypothesis $|y_0(x)| \geq r_0 > 0,\ ae\ in\ \overline{\Omega}$ makes sense and we can apply the result of Theorem 4, which leads to :

$$\|q-p\|_{L^2(\Omega)} \leq C\ \left\|\frac{\partial u}{\partial\nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))}.$$

And the proof of Theorem 1 is complete. □

**Proof of Corollary 2 :**
We assume that $y(q) \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))$ and $q-p \in H_0^1(\Omega)$. Then, it comes $(q-p)y(q) \in W^{1,2}(0,T,H_0^1(\Omega))$ and there exists a unique solution $u \in C([0,T],H_0^1(\Omega))$ to $(2.16)$.

We are in the same situation as in the linear case (2.2) and we can apply the result of Corollary 5 which leads to :

$$C^{-1}\|q-p\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\|\frac{\partial u}{\partial \nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\|q-p\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

It means that there exists a constant $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty}, y_0, h, \mathcal{U}) > 0$ such that for all $p \in \mathcal{U}$ satisfying $q-p \in H_0^1(\Omega)$,

$$C^{-1}\|q-p\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\|\frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\|q-p\|_{H_0^1(\Omega)},$$

and the proof is complete. □

**Remark :** The importance of Carleman estimate being global has to be underlined. It is also well shown, in reference [21], how a global Carleman estimate leads really faster to a conclusion in a non linear situation for the wave equation. We can refer to [53] for a situation using only a local estimate with a weaker result. Indeed, to prove a stability inequality in a non linear situation from the knowledge of the linear case, an observability inequality and a compactness-uniqueness argument are required. However, to improve our results, we will precisely use an observability estimate.

## 2.6 Improvement of the symetry of the two-sided estimates

It is known that for the wave equation, a symetric two sided estimate can be shown, for instance in [53]. The result obtained for the Schrödinger equation in Corollary 2 is not symetric in terms of the norms of $(p-q)$. We will here improve the result of Theorem 1 under slightly stronger regularity hypothesis on $y(q)$.

**Proposition 10 (Observability Estimate).** *We assume $q \in L^\infty$, $z_0 \in H_0^1(\Omega)$ and $\Gamma_0$ is given by* (2.6)*. If $z$ is the weak solution of*

$$\left\{\begin{array}{l} iz'(x,t) + \Delta z(x,t) + q(x)z(x,t) = 0,\ x \in \Omega,\ t \in (0,T) \\ z(x,t) = 0,\ x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T) \\ z(x,0) = z_0(x),\ x \in \Omega \end{array}\right. \tag{2.17}$$

*then, there exists a constant $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty}) > 0$ such that*

$$\|z_0\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C \left\|\frac{\partial z}{\partial \nu}\right\|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma_0))}. \tag{2.18}$$

**Proof :**
It is a well-known consequence of the Carleman estimate (Proposition 3).
Let $0 < T_0 < T_1 < T$. First of all, since all the needed conditions are satisfied (from Lemma 7), we can apply Proposition 3 to the weak solution $z$ of (2.17).

**Remark :** Some changes are made. We work on $[0, T]$ and with

$$\theta(x,t) = \frac{e^{\lambda\psi(x)}}{T(T-t)}, \;\; \varphi(x,t) = \frac{\alpha - e^{\lambda\psi(x)}}{T(T-t)}.$$

Then we have :

$$\int_0^T \int_\Omega |\nabla z|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt + s^2\lambda^3 \int_0^T \int_\Omega |z|^2 e^{-2s\varphi}\, dxdt \leq M \int_0^T \int_{\Gamma_0} \left|\frac{\partial z}{\partial \nu}\right|^2 d\sigma dt$$

and since $e^{-2s\varphi} \geq c > 0$ on $[T_0, T_1] \times \Omega$, it means that :

$$\|z\|_{L^2(T_0,T_1;H_0^1(\Omega))} \leq C \left\|\frac{\partial z}{\partial \nu}\right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)}$$

Let $\chi \in C^\infty(0, T)$ be a function such that $0 \leq \chi(t) \leq 1,\ \forall t \in [0, T]$, $\chi = 1$ on $[0, T_0]$ and $\chi = 0$ on $[T_1, T]$. Then, $\chi' = 0$ on $[0, T_0] \cup [T_1, T]$ and we obtain

$$\|\chi' z\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))} \leq C \left\|\frac{\partial z}{\partial \nu}\right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)}$$

with $C = C(\chi)$. Moreover, $w = \chi z$ satisfies :

$$\begin{cases} iw' + \Delta w + qw = i\chi' z, \quad \text{in } \Omega \times (0, T) \\ w = 0, \quad \text{on } \partial\Omega \times (0, T) \\ w(T) = 0, \quad \text{in } \Omega. \end{cases}$$

Then, applying again Lemma 7 and since $\chi' z \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, we have

$$\|w(t)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\, \|\chi' z\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}, \quad \forall\, t \in [0, T].$$

Therefore, with $t = 0$ and recalling that $w(0) = z_0$, we obtain :

$$\|z_0\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\, \|\chi' z\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))} \leq C \left\|\frac{\partial z}{\partial \nu}\right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)},$$

what proves the inverse inequality (2.18). □

Thereafter, we manage to obtain better stability results about our inverse problem. The main idea is to use this observability estimate and the price to pay is to assume more regularity on the given function $R$ and to obtain a result with non explicit constants that we had till now.

**Theorem 11.** *Let $q \in L^\infty(\Omega)$ and $u$ be a solution of equation* (2.2).
*Assume that*

$$\Gamma_0 \;\; \textit{satisfies} \;\; (2.6),$$
$$R \in W^{1,2}(0, T, W^{1,\infty}(\Omega)) \cap W^{2,1}(0, T; L^\infty(\Omega)),$$

$$R(0) \textit{ is real valued and } |R(x,0)| \geq r_0 > 0, \ ae \ in \ \overline{\Omega}.$$

*Then, there exists a constant* $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty(\Omega)}, R) > 0$ *such that for all* $f \in H_0^1(\Omega)$,

$$C^{-1} \|f\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \left\| \frac{\partial u}{\partial \nu} \right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C \|f\|_{H_0^1(\Omega)}. \tag{2.19}$$

**Proof :**
We work on equation (2.11), satisfied by $v = u'$ :

$$\begin{cases} iv'(x,t) + \Delta v(x,t) + q(x)v(x,t) = f(x)R'(x,t), \ x \in \Omega, \ t \in (0,T) \\ v(x,t) = 0, \ x \in \partial\Omega, \ t \in (0,T) \\ v(x,0) = -if(x)R(x,0), \ x \in \Omega \end{cases}$$

We introduce :

$$\begin{cases} iz' + \Delta z + qz = 0, & \text{in } \Omega \times (0,T) \\ z = 0, & \text{on } \partial\Omega \times (0,T) \\ z(0) = -ifR(0), & \text{in } \Omega \end{cases}$$

and

$$\begin{cases} i\varphi' + \Delta\varphi + q\varphi = fR', & \text{in } \Omega \times (0,T) \\ \varphi = 0, & \text{on } \partial\Omega \times (0,T) \\ \varphi(0) = 0, & \text{in } \Omega. \end{cases}$$

Then,

$$v(x,t) = z(x,t) + \varphi(x,t), \quad x \in \Omega, \ t \in (0,T).$$

On the one hand, as we have $R \in W^{2,1}(0,T,L^\infty(\Omega))$ and because of Lemma 7, we can write :

$$\left\| \frac{\partial \varphi}{\partial \nu} \right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)} \leq C \|fR'\|_{W^{1,1}(0,T;L^2(\Omega))} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

On the other hand, since $R \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))$ the observability inequality gives

$$\|fR(0)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C \left\| \frac{\partial z}{\partial \nu} \right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)}.$$

Moreover, we have to notice that if $R(0) \in W^{1,\infty}(\Omega)$ and $|R(x,0)| \geq r_0 > 0$, then $\dfrac{1}{R(0)} \in W^{1,\infty}(\Omega)$ and it yields

$$\|f\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\|fR(0)\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

We finally obtain :

$$\|f\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C \left\| \frac{\partial v}{\partial \nu} \right\|_{L^2((0,T)\times\Gamma_0)} + C \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

Then, writting this estimate with $u$ and applying Theorem 4 to take away the term $\|f\|_{L^2(\Omega)}$, we obtain the left hand side of (2.19).

To conclude, we can directly apply Lemma 7 to (2.11) since $f \in H_0^1(\Omega)$ and $R \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega))$. We then obtain :

$$\begin{aligned}\left\|\frac{\partial v}{\partial \nu}\right\|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma_0))} &\leq C\|fR(0)\|_{H_0^1(\Omega)} + C\|fR'\|_{L^1(0,T;H_0^1(\Omega))} \\ &\leq C\,\|f\|_{H_0^1(\Omega)}.\end{aligned}$$

Since $v = u'$, we actually know there exists a strictly positive constant $C$ depending on $\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty(\Omega)}$ and $R$ such that

$$C^{-1}\|f\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \left\|\frac{\partial u}{\partial \nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\|f\|_{H_0^1(\Omega)}$$

and the proof of Theorem 11 is complete. □

As for the proof of Theorem 1 and Corollary 2 in Section 2.5, we can derive from Theorem 11 the following one.

**Theorem 12.** *Let $\mathcal{U}$ be a bounded subset of $L^\infty(\Omega)$ and $q \in L^\infty(\Omega)$. Assume that*

$$\Gamma_0 \ \textit{satisfies} \ (2.6),$$

$$y(q) \in W^{1,2}(0,T,W^{1,\infty}(\Omega)) \cap W^{2,1}(0,T,L^\infty(\Omega)),$$

$$y_0 \ \textit{is real valued and} \ |y_0| \geq r_0 > 0, \ ae \ in \ \overline{\Omega}.$$

*Then, there exists a constant $C = C(\Omega, T, \Gamma_0, \|q\|_{L^\infty}, y_0, h, \mathcal{U}) > 0$ such that $\forall\ p \in \mathcal{U}\ verifying\ q - p \in H_0^1(\Omega)$,*

$$C^{-1}\,\|p-q\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \left\|\frac{\partial y(q)}{\partial \nu} - \frac{\partial y(p)}{\partial \nu}\right\|_{H^1(0,T;L^2(\Gamma_0))} \leq C\,\|p-q\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

# Deuxième partie

# Existence et Régularité de la solution d'une équation de Hartree-Fock dépendant du temps couplée à une équation de la dynamique classique

# Chapitre 3

# Introduction aux approximations en Chimie Quantique

## 3.1 Quelques notions de mécanique quantique

Par opposition à la mécanique classique qui concerne les corps macroscopiques, la mécanique quantique est la description du comportement de la matière et de la lumière à l'échelle atomique. C'est le début du XXème siècle qui marque les bouleversements profonds de la physique classique. Les "révolutions" relativistes et quantiques remettent en question la mécanique classique sur les corps matériels animés de très grandes vitesses pour l'une, sur les objets à l'échelle atomique pour l'autre. On pourra se référer à l'introduction de [3] (bibliographie à la fin du chapitre). Nous resterons dans le champ de la mécanique quantique non relativiste et seules quelques idées générales et un peu de vocabulaire quantique seront donnés ici.

Dans le cadre de cette mécanique de l'infiniment petit, les notions de trajectoire ou de vitesse n'existent pas. On rappelle le principe tiré des relations d'incertitude d'Heisenberg (1927) :

> On ne peut pas définir à un instant donné et avec une précision arbitraire
> à la fois la position et la vitesse d'un électron.

Il permet d'introduire l'idée que les entités élémentaires constitutives de la matière (molécules, atomes, électrons...) et de la lumière (photons) ne peuvent plus être décrites par les grandeurs de la mécanique classique. On peut alors leur associer la notion plus abstraite de probabilité de présence.

Mathématiquement, une particule quantique se voit associer une fonction d'onde $\Psi$ qui décrit son état. Cette fonction dépend du temps ainsi que de la position dans l'espace et du spin (moment magnétique intrinsèque) de la particule. $\Psi$ elle-même n'a pas de signification immédiate et n'est pas observable, mais $|\Psi|^2\,dx$ donne la probabilité de présence de la particule dans l'élément de volume $dx$. Il découle de cela une condition de normalisation

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x,t)|^2\,dx = 1. \tag{3.1}$$

En 1926, W. Heisenberg et E. Schrödinger développèrent deux théories différentes de la mécanique quantique, dont les résultats concordent cependant. Nous n'abordons pas ici le formalisme matriciel d'Heisenberg, mais la mécanique ondulatoire avec la formulation de l'équation de Schrödinger :

$$i\partial_t \Psi(x,t) = H(t)\Psi(x,t), \tag{3.2}$$

où $H$ est le Hamiltonien (que nous préciserons par la suite) du système quantique considéré, et $\Psi$ sa fonction d'onde. Les notions présentées ici ont été rassemblées et synthétisées à partir des ouvrages de références mécaniques [3], [7], [11] et [12] et chimiques [14] ainsi que les introductions de [6] et [13] (livres consacrés à la théorie de la fonctionnelle de densité).

La mise en place de cette branche de la physique est évidemment le fruit du travail et de l'ingéniosité de beaucoup d'hommes, et l'évocation des noms des plus grands d'entre eux (Borh, Born, de Broglie, Dirac, Heisenberg, Pauli, Planck, Schrödinger...) ne suffit pas à rendre compte de l'incroyable fertilité des années 1920 autour de la mécanique quantique.

Nous nous permettons de renvoyer à la lecture des passages appropriés des ouvrages non spécialisés en mécanique quantique [1] $(p\,357-359)$ et [10] (dernier chapitre, p198). Ces livres proposent une vue d'ensemble respectivement scientifique et historique qui donne corps à la naissance de cette théorie quantique. Les deux premiers chapitres de la référence [11] présentent également les origines de la théorie quantique et la formation de l'équation de Schrödinger dans un formalisme spécialisé. Il nous parait cependant important de signaler le manque de références d'ordre général, mais néanmoins approfondies, sur l'équation de Schrödinger *dépendant du temps*. La plupart des livres consultés se focalisent en effet très rapidement sur le cas stationnaire ou sur une approche de type scattering.

## 3.2 Objectif

La situation qui nous intéresse précisément dans cette partie de la thèse est celle d'un atome d'hélium (1 noyau et 2 électrons) soumis à un champ électrique non homogène et dépendant du temps. L'objectif que nous avons en vue est de préciser étape par étape la démarche conduisant de l'équation de Schrödinger générale

$$i\partial_t \Psi(t,x) = H(t)\Psi(t,x) - V_1(t,x)\Psi(t,x) \tag{3.3}$$

*où $\Psi$est la fonction d'onde de l'atome d'hélium, $H$ son hamiltonien (opérateur linéaire autoadjoint agissant sur l'espace de Hilbert des états physiques $\mathcal{H}$) et $V_1$ le potentiel électrique extérieur,*

au système que nous étudions effectivement par la suite

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a(t)|}u + V_1(x,t)u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & x \in \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2a}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla\left(\frac{1}{|x-a|}\right)\,dx - \nabla V_1(a,t), & t \in (0,T) \\ a(0) = a_0,\ \ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0 & \end{cases} \tag{3.4}$$

*où $u$ est la fonction d'onde des électrons et $a$ la position du noyau.*

Une première analyse rapide de ce système couplé permet de remarquer en premier lieu que seuls les électrons sont considérés comme des particules quantiques. En raison de son poids beaucoup plus grand que celui des électrons, le noyau est soumis à une dynamique newtonienne. Cela signifie qu'à chaque instant il est repéré, comme toute particule classique, par le couple position/vitesse $\big(a(t), \frac{da}{dt}(t)\big)$.

La première équation du système modélise le comportement de la fonction d'onde des deux électrons, soumis à l'attraction coulombienne du noyau ($\frac{1}{|x-a|}$) et au champ électrique extérieur (potentiel $V_1$). La non-linéarité de Hartree, que l'on trouve au second membre est une approximation du terme de champs moyen qui entre en jeu dès lors que l'on considère un système contenant au moins deux électrons. La deuxième équation correspond à la relation fondamentale de la dynamique, appliquée au noyau soumis au champ crée par la distribution électronique moyenne environnante et au champ électrique extérieur.

## 3.3 Approximation non adiabatique

Dans le but d'expliquer les différentes approximations permettant de passer de (3.3) à (3.4), nous allons tout d'abord considérer un système moléculaire *isolé* composé de $N$ électrons et de $M$ noyaux. Au cours de cet exercice, il faudra garder en mémoire que le système moléculaire sera ensuite soumis à un champ électrique extérieur, ce qui orientera le choix de certaines approximations. Ce système quantique est décrit par la fonction d'onde

$$\Psi = \Psi(t, \vec{x}_1, ..., \vec{x}_N, a_1, ..., a_M)$$

où $\vec{x}_i = (x_i, s_i)$ avec $x_i$ la position du $i$ème électron dans $\mathbb{R}^3$ et $s_i$ son spin (valant $\pm\frac{1}{2}$) et où $a_k$ est la position du $k$-ième noyau dont on néglige volontairement le spin car les noyaux vont être considérés comme des particules classiques par la suite.

L'évolution au cours du temps du système est alors régie par l'équation de Schrödinger (3.2) où le Hamiltonien est donné par

$$\begin{aligned} H \quad = \quad & -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Delta_i - \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{M}\frac{\Delta_{a_k}}{m_k} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M}\frac{z_k}{|x_i - a_k|} \\ & + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N}\frac{1}{|x_i - x_j|} + \sum_{k=1}^{M}\sum_{l>k}^{M}\frac{z_k z_l}{|a_k - a_l|} \end{aligned} \tag{3.5}$$

les notations $\Delta_i$ et $\Delta_{a_k}$ correspondant au Laplacien par rapport aux coordonnées du $i$ème électron et du $k$-ième noyau respectivement. La masse $m_k$ et la charge $z_k$ du $k$-ième noyau sont données dans le système des unités atomiques que nous préciserons plus tard. Les deux premiers termes correspondent à l'*énergie cinétique* des électrons et des noyaux. Le troisième terme modélise l'*attraction électrostatique* entre noyaux et électrons, tandis que les deux derniers, qui correspondent également à l'*énergie potentielle* d'interaction électrostatique, modélisent respectivement le potentiel de répulsion entre électrons et entre noyaux.

Cette équation, comme toutes les équations que nous allons mentionner par la suite, apparaît dans une forme simplifiée, c'est à dire précisément sans aucune constante fondamentale de la physique. C'est dans ce but que nous utilisons le système des unités atomiques, obtenu en exprimant les quantités physiques comme multiples ou combinaisons des constantes fondamentales et en imposant

$$m_e = 1,\ |e| = 1,\ \frac{h}{2\pi} = 1,\ 4\pi\varepsilon_0 = 1$$

où $m_e$ est la masse de l'électron, $|e|$ sa charge élémentaire, $h$ la constante de Planck et $\varepsilon_0$ la permittivité du vide.

L'équation considérée peut encore être simplifiée en tirant également avantage des différences significatives de masse entre un noyau et un électron. En effet, même le plus léger des noyaux, celui réduit à un unique proton (atome d'hydrogène), pèse environ $1800$ fois plus lourd qu'un électron. Par suite, un noyau se déplace beaucoup plus lentement qu'un électron. D'un point de vue pratique, nous pouvons alors considérer les noyaux comme des particules classiques ponctuelles dont on néglige la nature quantique et les électrons comme des particules quantiques se mouvant dans le champ coulombien crée par les noyaux. A l'instant $t$, l'état du système est ainsi décrit par

$$\left(\left\{a_k(t), \frac{da_k}{dt}(t)\right\}_{k\in[\![1,M]\!]}, \Psi_e(t)\right),$$

où $\left(a_k(t), \dfrac{da_k}{dt}(t)\right)$ est le couple position/vitesse du $k$-ième noyau et où $\Psi_e$ est la fonction d'onde électronique. Le mouvement des électrons répond alors à l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t\Psi_e(t, \vec{x}_1, ..., \vec{x}_N) = H_e(t)\Psi_e(t, \vec{x}_1, ..., \vec{x}_N), \tag{3.6}$$

où le Hamiltonien électronique s'écrit

$$H_e(t) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Delta_i - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M}\frac{z_k}{|x_i - a_k|} + \sum_{1\leq i<j\leq N}\frac{1}{|x_i - x_j|}.$$

De plus, nous sommes intéressés à terme par l'étude du contrôle optimal d'équations pouvant modéliser des particules prenant part à des réactions chimiques. Nous ne pouvons donc pas considérer les noyaux comme fixés et leurs déplacements sont alors décrits par l'équation différentielle d'ordre deux :

$$m_k\frac{da_k}{dt} = -\nabla_{a_k}\left(-\sum_{k=1}^{M}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{z_k\rho(x)}{|x - a_k|}\,dx + \sum_{1\leq k<l\leq N}\frac{z_kz_l}{|a_k - a_l|}\right), \tag{3.7}$$

où $\rho(t, x) = N\sum_{s_1\ldots s_N}\int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}}|\Psi_e(t, x, s_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N)|^2\,dx_2\ldots dx_N$ est la densité électronique. Chaque noyau se déplace donc selon les règles de la dynamique Newtonienne, dans le potentiel crée par les autres noyaux et par l'ensemble des électrons. Ce terme d'origine électronique est appelé potentiel d'Hellman-Feynman.

L'approximation que nous venons d'effectuer est dite *non-adiabatique*. Nous tenons à préciser que l'on pourra trouver dans le premier chapitre de la thèse de E. Cancès [2] une vue plus large des différentes approximations envisageables pour un système quantique de $M$ noyaux et $N$ électrons, dans le cadre non-stationnaire comme dans le cadre stationnaire. Nous avons décidé de présenter ici uniquement le modèle applicable à la situation qui nous intéresse, à savoir un atome soumis à un champ électrique non-homogène et dépendant du temps. Il faut tout de même signaler que dans un cadre stationnaire, le fait d'utiliser le plus grand poids des noyaux comme argument pour simplifier la formulation du problème rappelle l'*approximation de Born-Oppenheimer*. Elle se généralise aux situations dépendant du temps en une approximation *adiabatique*, qui consiste d'un point du vue pratique à considérer que les électrons s'adaptent instantanément aux positions des noyaux. Cependant, cette dernière approximation n'est valable que sous certaines hypothèses physiques, précisément invalidées dans le cas de la présence d'un champ électrique extérieur du type de ceux que nous allons considérer.

## 3.4 Approximation de Hartree-Fock

Nous allons maintenant préciser les propriétés que la fonction d'onde des électrons se doit de vérifier pour décrire un état physiquement admissible du système. Nous décrirons ensuite comment, en accord avec ces propriétés, nous pouvons approcher le problème (3.6) en restreignant l'ensemble où $\Psi_e$ doit évoluer.

Nous avons déjà évoqué la première propriété, qui se déduit directement de l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde (cf (3.1)) :

$$\|\Psi_e(t)\|^2 = \sum_{s_1 \dots s_N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\Psi_e(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)|^2 \, dx_1 \dots dx_N = 1.$$

La deuxième propriété découle d'un postulat de symétrisation (pour plus de détails, voir [12]) qui permet de faire face au problème d'indiscernabilité des particules identiques :

> "Si un système contient N particules identiques, ses états dynamiques sont nécessairement ou tous symétriques ou tous antisymétriques par rapport aux permutations de ces N particules."

Les électrons, ou encore les noyaux ayant le même nombre de protons et le même nombre de neutrons, sont appelées *particules identiques*. Plus généralement, deux particules sont identiques si leur propriétés physiques sont rigoureusement les même, aucune observation ne permettant de les distinguer les unes des autres.

C'est la nature de ces particules qui détermine l'une ou l'autre prescription de symétrisation. Les bosons sont les particules dont les états sont symétriques et correspondent par exemple aux photons ou aux noyaux d'atomes composés d'un nombre pair de nucléons (le spin d'un boson est entier). A l'opposé, les électrons étant des particules de spin demi-entier, leur fonction d'onde doit être antisymétrique par rapport à l'échange des coordonnées d'espace et de spin de deux électrons :

$$\Psi_e(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \vec{x}_j, \dots, \vec{x}_N) = -\Psi_e(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_j, \vec{x}_i, \dots, \vec{x}_N). \tag{3.8}$$

L'analyse d'un système de $N$ fermions corrobore le principe d'exclusion de Pauli (1925) :

> "Deux fermions ne peuvent occuper le même état quantique individuel."

En d'autres termes, dans notre situation, on ne peut pas trouver au même instant et au même endroit de l'espace deux électrons de même spin. En effet (3.8) implique que s'il existe deux indices $i \neq j$ tels que $(x_i, s_i) = (x_j, s_j)$, alors nécessairement,

$$\Psi_e(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = 0.$$

Nous allons maintenant préciser l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_e$ des états physiques sur lequel l'hamiltonien électronique $H_e$ agit :

$$\mathcal{H}_e = \bigwedge_{i=1}^{N} L^2(\mathbb{R}^3 \times \{\pm\tfrac{1}{2}\}, \mathbb{C}),$$

et la fonction d'onde vérifie à chaque instant $t$, $\Psi_e(t) \in \{\Psi \in \mathcal{H}_e, \|\Psi\| = 1\}$. Nous sommes cependant encore confrontés à un choix trop grand de fonctions d'onde à $N$ électrons admissibles. La méthode de Hartree-Fock va nous permettre de définir un sous-espace correspondant à une approximation physiquement raisonnable des fonctions d'onde tout en étant utilisable en pratique.

Il s'agit, dans un premier temps, d'approcher $\Psi_e$ par un produit antisymétrique de $N$ fonctions monoélectroniques notées $\psi_i$. L'approximation de Hartree-Fock consiste à choisir les fonctions d'onde s'écrivant comme un déterminant de Slater :

$$\Psi_e(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_i(\vec{x}_j), (i,j) \in [\![1, N]\!]^2\}.$$

Les fonctions $\psi_i$ sont des spin-orbitales et on peut les écrire sous la forme

$$\psi_i(\vec{x}_j) = \phi_i(x_j)\sigma_i(s_j),$$

où $\phi_i$ est une orbitale moleculaire et $\sigma_i$ est une fonction de spin valant $\alpha$ "spin up" ou $\beta$ "spin down" où la famille $\{\alpha, \beta\}$ est orthonormale. Des précisions substantielles sur la notion de spin et sur $\alpha$ et $\beta$ sont données dans la référence [9]. On rappelle que toutes les fonctions utilisées sont, a priori, à valeurs complexes. Pour simplifier les calculs, les spin-orbitales sont elles-même choisies orthonormales, de manière que, $\delta_{ij}$ étant le symbole de Kronecker, on ait

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \{\pm\frac{1}{2}\}} \overline{\psi}_i(\vec{x})\psi_j(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{ij}.$$

On peut préciser que les orbitales atomiques sont telles que $|\psi_i(\vec{x})|^2 d\vec{x}$ est la probabilité de trouver le $i$ème électron de spin donné par $\sigma_i$ dans l'élément de volume $dx$.

Dans un deuxième temps, nous utilisons la formulation variationnelle de l'équation aux dérivées partielles (3.6) pour simplifier la formulation du Hamiltonien électronique. Nous obtenons ainsi $N$ équations d'inconnues les $N$ spin-orbitales en faisant évoluer la fonction d'onde $\Psi_e$ sur la variété des déterminants de Slater

$$\mathcal{S}_N = \Bigg\{ \Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left\{\psi_i(\vec{x}_j), (i,j) \in [\![1, N]\!]^2\right\}, \\ \psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}),\ \int_{\mathbb{R}^3 \times \{\pm\frac{1}{2}\}} \overline{\psi}_i \psi_j = \delta_{ij} \Bigg\}.$$

Nous utilisons le fait que

$$\forall \Psi_e \in \mathcal{S}_N,\ \int_0^T \langle i\partial_t \Psi_e + H_e(t)\Psi_e, \Psi_e \rangle \, dt = 0$$

et ne donnons que le résultat final. C'est le fruit d'une part de calculs usuels similaires au cas stationnaire bien connus des chimistes (opérateur de Fock), et d'autre part de la transformation d'une formulation variationnelle en plusieurs équations aux dérivées partielles (générant une matrice $(\lambda_{ij})$ hermitienne). Les équations vérifiées par les spin-orbitales s'écrivent alors de la manière suivante :

$$i\partial_t \psi_i = \mathcal{F}(t)\psi_i + \sum_{j=1}^{N} \lambda_{ij}\psi_j,\ i \in [\![1, N]\!]$$

où $\mathcal{F}$ est le Hamiltonien de Hartree-Fock (ou opérateur de Fock) et vaut

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{2}\Delta + \sum_{k=1}^{M} \frac{z_k}{|\cdot - a_k|} + \sum_{j=1}^{N} \left(|\psi_j|^2 \star \frac{1}{|x|}\right) - \sum_{j=1}^{N} \left(\overline{\psi}_j \cdot \star \frac{1}{|x|}\right) \psi_j.$$

Nous attirons l'attention sur le fait que cette approximation donne un Hamiltonien qui dépend des spin-orbitales et crée donc une non linéarité. On peut simplifier la formulation des équations vérifiées par les spin-orbitales et éliminer les $\lambda_{ij}$ en diagonalisant la matrice hermitienne $(\lambda_{ij})$ et en effectuant un changement adéquat des inconnues, pour finalement pouvoir écrire (les notations étant conservées) :

$$i\partial_t \psi_i = \mathcal{F}(t)\psi_i. \tag{3.9}$$

Pour donner une interprétation des deux derniers termes de l'opérateur de Fock (cf [6] et [15]), on regarde leur action sur $\psi_i$, que l'on multiplie par $\overline{\psi}_i$ et que l'on intègre (en spin-espace, donc sur $\mathbb{R}^3 \times \{\pm\frac{1}{2}\}$). Le premier calcul donne :

$$\sum_{j=1}^{N} \int \left(|\psi_j|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)(\vec{x}_1)|\psi_i(\vec{x}_1)|^2\, d\vec{x}_1 = \sum_{j=1}^{N} \iint \frac{|\psi_j(\vec{x}_2)|^2|\psi_i(\vec{x}_1)|^2}{|x_1 - x_2|}\, d\vec{x}_1 d\vec{x}_2.$$

C'est un terme déjà présent dans l'approximation de Hartree (qui consiste à écrire $\Psi_e$ comme un produit simple de spin-orbitales) et il correspond à l'action d'un potentiel local de *répulsion de Coulomb* appelé ainsi car il modélise la répulsion classique de type coulombien entre les nuages électroniques chargés $|\psi_i(\vec{x}_1)|^2$ et $|\psi_j(\vec{x}_2)|^2$. Le second calcul donne :

$$\begin{aligned} -\sum_{j=1}^{N} \int \left(\overline{\psi}_j \psi_i \star \frac{1}{|x|}\right)(\vec{x}_1)\psi_j(\vec{x}_1)\overline{\psi}_i(\vec{x}_1)\, d\vec{x}_1 \\ = -\sum_{j=1}^{N} \iint \frac{\overline{\psi}_j(\vec{x}_2)\psi_i(\vec{x}_2)}{|x_1 - x_2|} \psi_j(\vec{x}_1)\overline{\psi}_i(\vec{x}_1)\, d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \end{aligned}$$

et modélise l'action d'un opérateur non local d'*échange*, qui n'a pas d'interprétation classique. C'est un terme qui émerge à cause de la nature antisymétrique de la fonction d'onde. Il faut par ailleurs noter que le terme $\frac{1}{|x_1 - x_2|}$ ne dépend pas des variables de spin. Puisque les fonctions de spin $\alpha$ et $\beta$ sont orthonormées, l'intégration sur les variables de spin dans la formule ci-dessus peut être faite indépendamment. La contribution de ce terme d'échange n'existe ainsi que pour des électrons de même spin.

On peut enfin signaler que fort heureusement, dans la formule de l'opérateur de Fock, le cas $j = i$, où $i$ est l'indice de la spin-orbitale à laquelle l'opérateur va être appliqué, n'est pas absurde. En effet, en $j = i$ la somme des deux derniers termes modélise l'interaction de l'électron $i$ avec lui même ce qui est un non-sens, évité par l'adéquation des termes d'échange et de Coulomb qui s'annulent alors précisément l'un l'autre.

Nous pouvons maintenant formuler le système d'équations modélisant un système quantique constitué de $N$ électrons et de $M$ noyaux. Le système couplé finalement obtenu est le suivant avec $1 \leq i \leq N$ et $1 \leq k \leq M$ :

$$\begin{cases} i\partial_t \psi_i = -\dfrac{\Delta\psi_i}{2} + \displaystyle\sum_{k=1}^{M} \frac{z_k}{|\cdot - a_k|}\psi_i + \sum_{j=1}^{N}\left(|\psi_j|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)\psi_i - \sum_{j=1}^{N}\left(\overline{\psi}_j\psi_i \star \frac{1}{|x|}\right)\psi_j, \\ m_k \dfrac{d^2 a_k}{dt^2} = \displaystyle\sum_{k=1}^{M}\sum_{i=1}^{N}\left(\int_{\mathbb{R}^3} -|\psi_i(x)|^2 \nabla \frac{z_k}{|x-a_k|}\,dx\right) - \nabla_{a_k} \sum_{1 \leq l_1 < l_2 \leq N} \frac{z_{l_1} z_{l_2}}{|a_{l_1} - a_{l_2}|}, \\ \psi_i(0) = \psi_i^0,\ a_k(0) = a_k^0,\ \dfrac{da_k}{dt}(0) = v_k^0, \end{cases}$$

où $\psi_i$ est donc une spin-orbitale dépendant du temps, de la position spatiale et du spin de l'électron associé et où $a_k$ est la position dans $\mathbb{R}^3$ du $k$-ième noyau et ne dépend que du temps.

## 3.5 Méthode de Hartree-Fock restreinte

La dernière étape avant d'atteindre notre objectif repose essentiellement sur la parité du nombre d'électrons considérés dans le modèle chimique qui nous intéresse. Plus précisément, nous allons faire appel à la méthode de Hartree-Fock dite "restreinte" pour donner un système d'équations plus simple à traiter que celui donné ci-dessus, adapté à l'atome d'Hélium avec $M = 1$, $z_1 = 2$ et $N = 2$. A notre connaissance, [9] et [13] sont les références générales donnant le plus de précisions sur cette méthode.

L'idée générale est qu'un nombre $N$ pair d'électrons peut voir sa fonction d'onde globale $\Psi_e$ formulée comme le déterminant de Slater de $N$ spin-orbitales $\psi_i$ dont une moitié est choisie de la forme $\phi(x)\alpha(s)$ et l'autre moitié de la forme $\phi(x)\beta(s)$. Cela se justifie par le fait que les couches électroniques d'un atome se remplissent par paire d'électrons et ont ainsi chacune de leurs orbitales spatiales doublement occupées, c'est à dire permettant de construire deux spin-orbitales à l'aide de l'une et l'autre des fonctions de spin $\alpha$ et $\beta$.

Dès que l'on se trouve dans un cas approprié de parité du nombre d'électrons où l'on peut imposer cette double occupation des orbitales atomiques, il faut le faire dès le début des calculs procédant de la formulation de la fonction d'onde en déterminant de Slater. Il s'agit précisément de la méthode de Hartree-Fock Restreinte (RHF). Bien entendu, l'atome d'Hélium entre dans ce formalisme et si on note $a$ la position de son noyau et $u$ l'orbitale spatiale générant les spin-orbitales distinctes des deux électrons, on obtient finalement le système :

$$\begin{cases} i\partial_t u = -\dfrac{1}{2}\Delta u - \dfrac{2}{|x-a(t)|}u + (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & x \in \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2 a}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla \frac{2}{|x-a|}\,dx, & t \in (0,T) \\ a(0) = a_0,\ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0. \end{cases}$$

Il reste enfin à préciser que toutes les approximations effectuées restent valables si le système chimique considéré est soumis à un champ électrique non homogène et non stationnaire. Par soucis de simplicité, les constantes numériques sont ramenées à l'unité et le système d'équations à étudier est donc bien de la forme (3.4) :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & x \in \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2a}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \left(\frac{1}{|x-a|}\right) dx - \nabla V_1(a), & t \in (0,T) \\ a(0) = a_0,\ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0. & \end{cases}$$

## 3.6 Conclusion

Nous avons à ce stade justifié au mieux le choix du système d'équations couplées dont nous allons étudier certaines propriétés mathématiques dans cette deuxième partie du manuscrit. Il faut tout d'abord préciser que dans les articles [4] et [5], M. DEFRANCESCHI et C. LE BRIS soulignent l'intérêt très actuel d'étudier le comportement d'une molécule dans son environnement et par exemple de travailler sur l'influence d'un champ magnétique ou électrique.

Dans la référence [4], ce sont les modèles stationnaires qui sont évoqués. Les auteurs mentionnent la difficulté majeure rencontrée en présence d'un champ électrique, c'est à dire le fait que le potentiel extérieur qui intervient alors dans les équations ne s'annule pas à l'infini, contrairement au potentiel d'attraction coulombien. Effectivement, c'est la présence simultanée de deux potentiels aux caractéristiques si différentes qui soulève le plus de problèmes. Le chapitre 4 permettra néanmoins de donner un sens aux équations concernées pour des potentiels électriques très généraux. Au sujet des équations de Hartree-Fock stationnaires, nous tenons à signaler les travaux de P. L. LIONS (par exemple [8]) qui sous-tendent le cours qu'il a donné au Collège de France à l'automne 2003.

Par ailleurs, l'équation de Schrödinger dépendant du temps et ses approximations font l'objet d'un paragraphe dans la référence [5], article publié dans une revue de chimie quantique. Les auteurs donnent précisément l'approximation non-adiabatique d'une molécule obtenue à la fin de la section 3.4. Ils formulent aussi le souhait de stimuler la recherche en théorie du contrôle appliqué à la chimie quantique. Nous nous intéressons dans cette perspective au contrôle bilinéaire optimal de l'équation de Schrödinger dans les deux derniers chapitres. Nous présenterons en effet dans un premier temps les résultats d'existence et de régularité des solutions nécessaires à l'étude du contrôle optimal du système par le potentiel électrique extérieur.

# Bibliographie


[1] H. BREUER, *Atlas de la Physique*, Encyclopédies d'aujourd'hui, Le livre de poche, Edition française (1997).

[2] E. CANCÈS, *Simulation moléculaire et effets d'environnement. Une perspective mathématique et numérique*, Thèse (1997).

[3] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU et F. LANOË , *Mécanique Quantique*, Hermann, Paris, 1977.

[4] M. DEFRANCESCHI et C. LE BRIS, *Computing a molecule* J. of Math. Chem. 21 (1997) 1-30.

[5] M. DEFRANCESCHI et C. LE BRIS, *Computing a molecule in its environment* Int. J. of Quantum Chem. 71 (1999) 227-250.

[6] W. KOCH et M. C. HOLTHAUSEN, *A Chemist's Guide to Density Functionnal Theory*, Wiley-VCH, Weinheim, seconde édition (2001).

[7] L. LANDAU et E. LIFCHITZ, *Mécanique Quantique*, Physique théorique, Tome 3, 3ème édition, MIR Moscou (1975).

[8] P. L. LIONS *Solutions of Hartree-Fock equations for Coulomb systems*, Commun. Math. Phys. 109 (1987) 33-97.

[9] R. MCWEENY et B. T. SUTCLIFFE, *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, Academic Press (1976).

[10] J.-P. MAURY, *Une Histoire de la Physique sans les Equation*, Vuibert (2000).

[11] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, Tome 1, Dunod, Paris (1995).

[12] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, Tome 2, Dunod, Paris (1995).

[13] R. G. PARR et W. YANG, *Density-Functionnal Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New-York (1989).

[14] J.-L. RIVAIL, *Eléments de Chimie Quantique (à l'usage des chimistes)*, 2ème édition, Savoirs Actuels, CNRS Editions (1999).

[15] A. SZABO et N. S. OSTLUND *Modern Quantum Chemistry : introduction to advanced electronic Structure theory*, Macmillan (1982).

# Chapitre 4

# Regularity for a Schrödinger equation with a potential singular at finite distance and at infinity

L'article qui suit est actuellement soumis. Avec O. Kavian et J.-P. Puel.

ABSTRACT : We study the Schrödinger equation $i\partial_t u + \Delta u + V_0 u + V_1 u = 0$ on $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$, where $V_0(x,t) = \frac{1}{|x-a(t)|}$, $a \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$, is a coulombian potential, singular at finite distance, and $V_1$ is an electric potential, possibly unbounded. The initial condition $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^3)$ is such that $\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^2|u_0(x)|^2\,dx < \infty$. As $V_0$, the potential $V_1$ is real valued and may depend on space and time variables. We prove that if $V_1$ is regular enough and at most quadratic at infinity, this problem is well-posed and the regularity of the initial data is conserved for the solution.

**Keywords :** Schrödinger equation, singular potential, alternate direction, regularity, existence.
*AMS Classification :* 35B65

Une note aux **Comptes Rendus à l'Académie des Sciences de Paris**
est parue en 2003, Série I, 337 pages 705 à 710.

RÉSUMÉ : Nous étudions l'équation de Schrödinger $i\partial_t u + \Delta u + V_0 u + V_1 u = 0$ sur $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$ avec pour condition initiale $u_0 \in \{v \in H^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^2|v|^2\,dx < +\infty\}$ où $V_0(x,t) = \frac{1}{|x-a(t)|}$, $a \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$, est un potentiel coulombien, singulier à distance finie, et où $V_1$, potentiel dont dérive un champ électrique, peut être non borné. Comme $V_0$, le potentiel $V_1$ est réel et dépend des variables d'espace et de temps. Nous démontrons que si $V_1$ est assez régulier et presque quadratique à l'infini, cette équation d'évolution est bien posée et que la régularité de la condition initiale est conservée par la solution du problème.

## 4.1 Introduction

We work in $\mathbb{R}^3$ and throughout this paper, we use the following notations :

$$\nabla v = \left(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \frac{\partial v}{\partial x_2}, \frac{\partial v}{\partial x_3}\right), \quad \Delta v = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}, \quad \partial_t v = \frac{\partial v}{\partial t},$$

$Re$ and $Im$ are the real and the imaginary parts of a complex number,
$W^{2,1}(0,T) = W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$ and for $p \geq 1,\ L^p = L^p(\mathbb{R}^3)$,
the usual Sobolev spaces are $H^1 = H^1(\mathbb{R}^3)$ and $H^2 = H^2(\mathbb{R}^3)$.

We also define

$$\begin{aligned} H_1 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|v(x)|^2\, dx < +\infty \right\} \\ H_2 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^2|v(x)|^2\, dx < +\infty \right\}. \end{aligned}$$

One can notice that $H_1$ and $H_2$ are respectively the images of $H^1$ and $H^2$ under the Fourier transform.

We consider the following linear Schrödinger equation

$$\left\{ \begin{array}{l} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a(t)|} + V_1(x,t)u = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \end{array} \right. \tag{4.1}$$

where the potential $V_1$ takes its values in $\mathbb{R}$.

Actually, this equation could correspond to the linear modelling of a hydrogenoïd atom subjected to an external electric field, where $u$ is the wave function of the electron. Indeed, $\frac{1}{|x-a(t)|}$ is a coulombian potential, where $a(t)$ is the position of the nucleus at instant $t$ and $V_1$ is the electric potential (which may be unbounded at infinity) such that $E(t,x) = \nabla V_1(x,t)$ where $E$ is the electric field created by a laser beam.

Our main result is the following :

**Theorem 1.** *Let $T > 0$ be an arbitrary time and let $a$ and the potential $V_1$ satisfy*

$$\begin{array}{l} a \in W^{2,1}(0,T), \\ (1+|x|^2)^{-1}V_1 \in L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 \in L^1(0,T;L^\infty) \text{ and} \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 \in L^1(0,T;L^\infty) \end{array} \tag{4.2}$$

*and for some $\alpha > 0$ and $\rho > 0$,*

$$\|a\|_{W^{2,1}(0,T)} \leq \alpha \text{ and}$$
$$\|(1+|x|^2)^{-1}V_1\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \|(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho.$$

*Then there exists a non negative constant $C_{T,\alpha,\rho}$ depending on $T$, $\alpha$ and $\rho$ such that for any $u_0 \in H^2 \cap H_2$, equation* (4.1) *has a unique solution $u$ with*

$$u \in L^\infty(0,T;H^2\cap H_2) \text{ and } \partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2)$$

*which satisfies the estimate*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

This type of result has already been obtained in the particular case when the atom is subjected to an external uniform time-dependent electric field $I(t)$ such that in equation (4.1), one has $V_1 = -I(t) \cdot x$ as in reference [10] and [22]. They both use a change of unknown function and variables (gauge transformation) to remove the electric potential from the equation such that they only have to deal with the usual Schrödinger equation with a time dependent potential like $V_0$. Of course, we cannot use this technique here because of the generality of the potential $V_1$ we are considering. In the case $V_1 = 0$, K. YAJIMA [51] proved the $H^2(\mathbb{R}^d)$ regularity of the solution of equation (4.1) considered in $\mathbb{R}^d \times (0, T)$, using strongly T. KATO's results in reference [26]. We can also mention that K. YAJIMA and G. ZHANG prove in [52] a smoothing property for one dimensional time dependent Schrödinger equation with potentials superquadratic at infinity, like $V_1$.

In order to prove Theorem 1, we will first prove an existence and regularity result for the solution of equation (4.1) in the space $H^1 \cap H_1$, actually under weaker hypothesis on $V_1$ and $a$. In both proofs of the two theorems, we will regularize $V_0$ and $V_1$ by $V_0^\varepsilon$ and $V_1^\varepsilon$ and obtain accurate estimates, independent of $\varepsilon$. The key point in the proof of Theorem 1 is to find an $L^2$-estimate for the time derivative of the solution $u^\varepsilon$. Thus, we will use a change of variable $y = x - a(t)$ to get rid of the time derivative of the coulombian potential which appears in the time derivative of equation (4.1). We finally obtain the awaited estimate which is independent of $\varepsilon$.

We also prove in this paper continuity results for the solution $u$. Indeed, under the same hypothesis, we prove the weak continuity of the solution in $H^2 \cap H_2$ and the strong continuity in $H_1 \cap H^1$ :

**Theorem 2.** *Under assumption* (4.2)*, the solution $u$ to equation* (4.1) *with initial condition $u_0 \in H^2 \cap H_2$ satisfies*

$$u \in C([0,T]; H_1 \cap H^1) \text{ and } u \in C_{\mathrm{w}}([0,T]; H_2 \cap H^2).$$

## 4.2 Preliminary estimates

As we just explained, we are going to regularize the potential of the Schrödinger equation we consider. Therefore, we need a first classical proposition to ensure the existence of smooth solution when the potential is more regular. A first step is to show that the free Schrödinger semi-group acts continuously in the space $H^2 \cap H_2$ (resp. $H^1 \cap H_1$). To be more precise, consider the equation :

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) = 0, & x \in \mathbb{R}^3,\ t \in [0,T] \\ u(x,0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{4.3}$$

**Lemma 3.** *Let us denote by $(S(t))_{t\in\mathbb{R}}$ the free Schrödinger semi-group $\mathrm{e}^{it\Delta}$. Then for any $T > 0$ there exists a positive constant $C_T$ such that if $u_0 \in H^2 \cap H_2$, then $u(t) = S(t)u_0$ is the unique solution of equation* (4.3) *and satisfies $u \in C([0,T]; H^2 \cap H_2) \cap C^1([0,T]; L^2)$ and for all $t \in [0,T]$we have*

$$\|u(t)\|_{H^2 \cap H_2} \leq C_T \|u_0\|_{H^2 \cap H_2}.$$

**Proof.** This is a well-known result as far as the continuity in $H^2$ is concerned (see [12]), but obtaining the continuity in $H_2$ is not more difficult. Indeed denoting by $\widehat{u}$ the

Fourier transform of $u$, it is clear that $u(t)$ satisfies equation (4.3) if and only if

$$\widehat{u}(t,\xi) = \mathrm{e}^{it|\xi|^2}\widehat{u}_0(\xi).$$

From this relation, Parseval's identity and the fact that

$$\|\Delta u(t)\|_{L^2}^2 = \||\xi|^2\widehat{u}(t)\|_{L^2}^2 = \||\xi|^2\widehat{u}_0\|_{L^2}^2,$$

we infer that $t \mapsto S(t)u_0$ is continuous on $H^2$, that is $u \in C(\mathbb{R}, H^2) \cap C^1(\mathbb{R}, L^2)$ (in fact for any $s \in \mathbb{R}$ the group $S(t)$ is an isometry on $H^s$). On the other hand it is clear that

$$\||x|^2 u(t)\|_{L^2}^2 = \|\Delta\widehat{u}(t)\|_{L^2}^2.$$

Since $u_0 \in H^2 \cap H_2$ and

$$\Delta\widehat{u}(\xi,t) = \left[(6it - 4t^2|\xi|^2)\widehat{u}_0(\xi) + 4it\xi\cdot\nabla\widehat{u}_0(\xi) + \Delta\widehat{u}_0(\xi)\right]\mathrm{e}^{it|\xi|^2},$$

one sees that $t \mapsto |x|^2u(t)$ is continuous as a mapping from $\mathbb{R}$ into $L^2$. Therefore $u \in C(\mathbb{R}, H^2 \cap H_2)$ and the lemma is proved. □

**Remark :** The same result can be proved in the same way when $H^2 \cap H_2$ is replaced by $H^1 \cap H_1$.

Next we prove that when the potential $V \in L^\infty(0,T,C_b^2(\mathbb{R}^3))$ the following result holds (here $C_b^2(\mathbb{R}^3)$ denotes the space of bounded $C^2$ functions with bounded first and second derivatives) :

**Proposition 4.** *If $V \in L^\infty(0,T;C_b^2(\mathbb{R}^3))$ is real valued and if $u_0 \in H^2 \cap H_2$ then there exists a unique solution $u \in C([0,T];H^2 \cap H_2)$ of*

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) + V(x,t)u(x,t) = 0,\ x \in \mathbb{R}^3,\ t \in (0,T) \\ u(x,0) = u_0(x),\ x \in \mathbb{R}^3. \end{cases} \tag{4.4}$$

*If $\rho > 0$ is such that $\|V\|_{L^\infty(0,T,C_b^2(\mathbb{R}^3))} \leq \rho$ there exists a positive constant $C_{T,\rho}$ such that*

$$\|u\|_{C([0,T],H^2\cap H_2)} \leq C_{T,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

**Proof.** Denote by $Y = C([0,T], H^2 \cap H_2)$ endowed with the norm

$$\|u\|_Y = \sup_{t\in[0,T]} \mathrm{e}^{-\lambda t}\|u(t)\|_{H^2\cap H_2}$$

for $u \in Y$ ; here $\lambda > 0$ is a given positive number which will be fixed hereafter. The solution of equation (4.4) is obtained as a mild solution, that is a solution to the integral equation

$$u(t) = S(t)u_0 + i\int_0^t S(t-s)V(s)u(s)\,ds.$$

We are going to show that this equation has a unique solution in $Y$, what means the operator $\Phi$ defined as being

$$\Phi(u)(t) = S(t)u_0 + i\int_0^t S(t-s)V(s)u(s)\,ds$$

has a unique fixed point in a closed ball $B_R = \{u \in Y \; ; \; \|u\|_Y \leq R\}$ for $R$ suitably chosen.

Note that if $V \in L^\infty(0,T; C_b^2(\mathbb{R}^3))$ with $\|V\|_{L^\infty(0,T;C_b^2(\mathbb{R}^3))} \leq \rho$ and $\phi \in H^2 \cap H_2$, there exists a positive constant $c_0(\rho)$ such that

$$\|V(t)\phi\|_{H^2 \cap H_2} \leq c_0(\rho)\|\phi\|_{H^2 \cap H_2}.$$

Next we choose $\lambda > 2c_0(\rho)C_T$ where $C_T$ is given by Lemma 3. Then for $u \in B_R$, since we have

$$\|u(s)\|_{H^2 \cap H_2} \leq \mathrm{e}^{\lambda s}\|u\|_Y \leq R\mathrm{e}^{\lambda s},$$

by using twice Lemma 3 we obtain

$$\begin{aligned} \|\Phi(u)(t)\|_{H^2 \cap H_2} &\leq C_T \int_0^t \|V(s)u(s)\|_{H^2 \cap H_2} ds + C_T\|u_0\|_{H^2 \cap H_2} \\ &\leq C_T c_0(\rho) R \int_0^t \mathrm{e}^{\lambda s} ds + C_T\|u_0\|_{H^2 \cap H_2}. \end{aligned}$$

It follows that if $R > 0$ is large enough so that $C_T\|u_0\|_{H^2 \cap H_2} \leq \dfrac{R}{2}$, then

$$\|\Phi(u)\|_Y \leq \frac{c_0(\rho)C_T R}{\lambda} + C_T\|u_0\|_{H^2 \cap H_2} \leq R.$$

This means that $\Phi$ maps $B_R$ into itself. Also for $u_1, u_2 \in B_R$ it is clear that

$$\begin{aligned} \|(\Phi(u_1) - \Phi(u_2))(t)\|_{H^2 \cap H_2} &\leq C_T \int_0^t \|V(s)(u_1 - u_2)(s)\|_{H^2 \cap H_2} ds \\ &\leq C_T c_0(\rho) \int_0^t \mathrm{e}^{\lambda s} ds \|u_1 - u_2\|_Y \\ &\leq \lambda^{-1} c_0(\rho) C_T \mathrm{e}^{\lambda t}\|u_1 - u_2\|_Y, \end{aligned}$$

and since $\lambda$ has been appropriately chosen, this shows that $\Phi$ is a strict contraction from $B_R$ into itself as

$$\|(\Phi(u_1) - \Phi(u_2))\|_Y \leq \frac{c_0(\rho)C_T}{\lambda}\|u_1 - u_2\|_Y \leq \frac{1}{2}\|u_1 - u_2\|_Y,$$

and therefore $\Phi$ has a unique fixed point, yielding the solution of equation (4.4). One can notice that uniqueness is not only true in $B_R$ but also easily proved using the norm in $C([0,T], L^2)$. □

**Remarks : 1)** Following the same kind of arguments and the results in reference [51] of K. Yajima, we could also consider this proposition for potentials in $C^1([0,T]; L^\infty(\mathbb{R}^3))$.
**2)** Again, the same result can be proved in the same way when $H^2 \cap H_2$ is replaced by $H^1 \cap H_1$.

## 4.3 Existence and regularity result in $H^1 \cap H_1$

In this section, we will prove the following theorem, which first allowed us to consider an electric potential with a singularity at infinity in $(1 + |x|^2)$.

**Theorem 5.** *Let $T > 0$ be an arbitrary time and let $a$ and the potential $V_1$ satisfy*

$$\begin{aligned} & a \in W^{1,1}(0,T), \\ & (1+|x|^2)^{-1} V_1 \in L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3) \ \textit{and} \\ & (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 \in L^1(0,T;L^\infty). \end{aligned} \tag{4.5}$$

*and for some $\alpha_0 > 0$ and $\rho_0 > 0$ :*

$$\begin{aligned} \|a\|_{W^{1,1}(0,T)} \leq \alpha_0 \ \textit{and} \\ \|(1+|x|^2)^{-1}V_1\|_{W^{1,1}(0,T;L^\infty)} \leq \rho_0. \end{aligned}$$

*Then there exists a non negative constant $C_{T,\alpha_0,\rho_0}$ depending on $T$, $\alpha_0$ and $\rho_0$ such that for any $u_0 \in H^1 \cap H_1$ equation* (4.1) *has a unique solution*

$$u \in L^\infty(0,T;H^1\cap H_1)$$

*which satisfies the estimate*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^1\cap H_1)} \leq C_{T,\alpha_0,\rho_0}\|u_0\|_{H^1\cap H_1}.$$

**Proof.** First of all, we approach the potentials $V_1$ and $V_0 = \dfrac{1}{|x-a(t)|}$ by the real valued $V_0^\varepsilon$ and $V_1^\varepsilon \in C([0,T];C_b^2(\mathbb{R}^3))$. More precisely :
- on the one hand, we set $V_0^\varepsilon = \dfrac{1}{(\varepsilon^2+|x-a(t)|^2)^{\frac{1}{2}}}$ and we have

$$|V_0^\varepsilon(x,t)| \leq \frac{1}{|x-a(t)|} \quad \text{and} \quad |\partial_t V_0^\varepsilon(x,t)| \leq \left|\frac{da}{dt}(t)\right| \frac{1}{|x-a(t)|^2}$$

- on the other hand, we choose $\varrho_0 \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ and $\chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ such that for all $x$ in $\mathbb{R}^3$, $\varrho_0(x) \geq 0$, for all $t$ in $\mathbb{R}$, $\chi(t) \geq 0$ and $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} \varrho_0(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}} \chi(t)\,dt = 1$ and we define the truncation function

$$\begin{aligned} T_\varepsilon : \ \ \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ s &\longmapsto T_\varepsilon(s) = \frac{|s|}{s}\min(|s|,\frac{1}{\varepsilon}). \end{aligned}$$

Then, we set $\zeta_\varepsilon(x,t) := \dfrac{1}{\varepsilon^4}\,\chi\left(\dfrac{t}{\varepsilon}\right)\varrho_0\left(\dfrac{x}{\varepsilon}\right)$ and we define $V_1^\varepsilon := T_\varepsilon(V_1)\star\zeta_\varepsilon$ , where the convolution is meant in $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}$. We have actually

$$V_1^\varepsilon(x,t) = \int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}} T_\varepsilon\left(V_1(x+\varepsilon y, t+\varepsilon s)\right)\chi(s)\varrho_0(y)\,dsdy$$

and we point out that the norm of $V_1^\varepsilon$ is bounded by the norm of $V_1$ in the space where it is defined.

Then for $\varepsilon > 0$, we consider the solution $u_\varepsilon$ of

$$\begin{cases} i\partial_t u_\varepsilon + \Delta u_\varepsilon + V_0^\varepsilon u_\varepsilon + V_1^\varepsilon u_\varepsilon = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,T) \\ u_\varepsilon(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{4.6}$$

Thanks to Proposition 4 and the remark at the end of its proof, we know that there exists a unique solution $u_\varepsilon \in C([0,T]; H^1 \cap H_1)$. In the sequel, $C > 0$ denotes various constants which may depend on $T$ but are independent of $\varepsilon$.

In order to get an $H_1$-estimate of $u_\varepsilon$, we calculate the imaginary part of the product of equation (4.1) by $(1+|x|^2)\overline{u}_\varepsilon(x)$, integrated on $\mathbb{R}^3$. This gives

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|u_\varepsilon|^2\right) \leq \int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon|^2 + \int_{\mathbb{R}^3}|x|^2|u_\varepsilon|^2.$$

Then, we have to obtain an $H^1$-estimate of $u_\varepsilon$. On the one hand, we multiply equation (4.1) by $\partial_t \overline{u}_\varepsilon$, integrate on $\mathbb{R}^3$ and take the real part. After an integration by parts we obtain :

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon|^2 + Re\int_{\mathbb{R}^3} V_0^\varepsilon u_\varepsilon\, \partial_t \overline{u}_\varepsilon + Re\int_{\mathbb{R}^3} V_1^\varepsilon u_\varepsilon\, \partial_t \overline{u}_\varepsilon = 0$$

which is equivalent to

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon|^2 - \int_{\mathbb{R}^3}(V_0^\varepsilon + V_1^\varepsilon)\,\partial_t(|u_\varepsilon|^2) = 0.$$

Then,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon|^2 - \int_{\mathbb{R}^3}(V_0^\varepsilon + V_1^\varepsilon)\,|u_\varepsilon|^2\right)&\\ = -\int_{\mathbb{R}^3}(\partial_t V_0^\varepsilon + \partial_t V_1^\varepsilon)\,|u_\varepsilon|^2.&\end{aligned} \tag{4.7}$$

On the other hand, since $V_1$ satisfies assumption $(4.5)$, we have

$$-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t V_1^\varepsilon |u_\varepsilon|^2 \leq C\left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\|u_\varepsilon(t)\|_{H_1}^2$$

and from Hardy's inequality,

$$-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t V_0^\varepsilon|u_\varepsilon|^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3}\left|\frac{da}{dt}\right|\frac{|u_\varepsilon|^2}{|x-a|^2} \leq 4\left|\frac{da}{dt}(t)\right|\|u_\varepsilon(t)\|_{H^1}^2$$

We define $E_\lambda^\varepsilon$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$E_\lambda^\varepsilon(t) = \int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon(t,x)|^2\,dx + \lambda\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|u_\varepsilon(t,x)|^2\,dx$$

where $\lambda$ is a non-negative constant to be precised later. From now on, $C$ denotes various positive constants, independent of anything but $\lambda$ and $T$. We obviously have :

$$\begin{aligned}\frac{dE_\lambda^\varepsilon(t)}{dt} \quad \leq \quad & \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}(V_0^\varepsilon(t) + V_1^\varepsilon(t))\,|u_\varepsilon(t)|^2\right)\\ & + C\,\left(1 + \left|\frac{da}{dt}(t)\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)E_\lambda^\varepsilon(t)\end{aligned}$$

and if we integrate on $(0,t)$, we obtain

$$\begin{aligned} E_\lambda^\varepsilon(t) &\leq \int_{\mathbb{R}^3} \left(|V_0^\varepsilon(0)| + |V_1^\varepsilon(0)|\right)|u_0|^2 + \int_{\mathbb{R}^3}\left(V_0^\varepsilon(t) + V_1^\varepsilon(t)\right)|u_\varepsilon(t)|^2 \\ &+ C\int_0^t \left(1 + \left|\frac{da}{dt}(t)\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right) E_\lambda^\varepsilon(s)\,ds + E_\lambda^\varepsilon(0) \end{aligned}$$

Using Cauchy-Schwarz, Hardy and Young's inequalities, and since it is easy to show the conservation of the $L^2$-norm of $u_\varepsilon$, we prove that for all $\eta > 0$,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} |V_0^\varepsilon(t)||u_\varepsilon(t)|^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_\varepsilon(t)|^2}{|x-a(t)|} &\leq 2\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |u_\varepsilon(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \eta\|\nabla u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\eta}\|u_0\|_{L^2}^2 \end{aligned}$$

and we also have

$$\int_{\mathbb{R}^3} V_1^\varepsilon(t)|u_\varepsilon(t)|^2 \leq C\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)} \|u_\varepsilon(t)\|_{H_1}^2.$$

Moreover, $(1+|x|^2)^{-1}V_1 \in W^{1,1}(0,T,L^\infty)$ and $W^{1,1}(0,T) \hookrightarrow C([0,T])$, then we have $(1+|x|^2)^{-1}V_1(0) \in L^\infty$ and we have for the same reasons as above,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|V_0^\varepsilon(0)| + |V_1^\varepsilon(0)|\right)|u_0|^2 &\leq \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(0)|} + \left\|\frac{V_1(0)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)|u_0|^2 \\ &\leq C_{\rho_0}\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2. \end{aligned}$$

We also notice that

$$E_\lambda^\varepsilon(0) \leq C\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2.$$

Then, if we set $\eta = \dfrac{1}{2}$ and $\lambda = \dfrac{1}{2} + \left\|\dfrac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)}$ we get

$$\begin{aligned} E_\lambda^\varepsilon(t) &\leq C_{\rho_0}\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + \frac{1}{2}\|u_\varepsilon(t)\|_{H^1}^2 + \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\|u_\varepsilon(t)\|_{H_1}^2 \\ &+ C\int_0^t \left(1 + \left|\frac{da}{dt}(t)\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right) E_\lambda^\varepsilon(s)\,ds. \end{aligned}$$

We define $F^\varepsilon$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$F^\varepsilon(t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon(t,x)|^2\,dx + \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u_\varepsilon(t,x)|^2\,dx = \|u_\varepsilon(t)\|_{H^1\cap H_1}^2$$

and it is easy to see that we have, for all $t$ in $[0,T]$,

$$F^\varepsilon(t) \leq C_{\rho_0}\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + C\int_0^t \left(1 + \left|\frac{da}{dt}(t)\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right) F^\varepsilon(s)\,ds.$$

We obtain from Gronwall's lemma :

$$F^\varepsilon(t) \leq C_{T,\rho_0}\exp\left(\int_0^t \beta(s)ds\right)\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2.$$

where $\beta = 1 + \left|\dfrac{da}{dt}\right| + \left\|\dfrac{\partial_t V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} \in L^1(0,T)$.
Therefore, there exists a non-negative constant $C_{T,\alpha_0,\rho_0}$, independent of $\varepsilon$ and depending on the time $T$, on $\alpha_0$ and on $\rho_0$ such that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\|u_\varepsilon(t)\|^2_{H^1\cap H_1} \leq C_{T,\alpha_0,\rho_0}\|u_0\|^2_{H^1\cap H_1}.$$

Then we can make $\varepsilon$ tend to $0$ and pass to the limit in the distribution sense in equation (4.6). Indeed, this last estimate implies the convergence of a subsequence $(u_{\varepsilon'})$ in the following way :

$$u_{\varepsilon'} \rightharpoonup u \quad \text{in } L^\infty(0,T;H^1\cap H_1)\, w\star.$$

We also have these other convergences :

$$\begin{array}{lll} V_0^\varepsilon & \to & \dfrac{1}{|x-a(t)|} \quad \text{in } L^\infty(0,T;L^p+L^\infty), p\in[2,3[ \\ V_1^\varepsilon & \to & V_1 \quad \text{in } L^\infty(0,T;L^r_{\text{loc}}),\ r>1 \end{array}$$

Thus, $u$ is the solution of equation (4.1) in the sense of distribution and satisfies $u \in L^\infty(0,T;H^1\cap H_1)$ and we obtain

$$\|u(t)\|^2_{H^1\cap H_1} \leq C_{T,\alpha_0,\rho_0}\|u_0\|^2_{H^1\cap H_1}.$$

We will end the proof of Theorem 5 by the study of the uniqueness of the solution of equation (4.1).

Let $u_1$ and $u_2$ be two solutions of equation (4.1). We set $v = u_2 - u_1$ and it satisfies the following :

$$\left\{\begin{array}{l} i\partial_t v + \Delta v + \dfrac{v}{|x-a(t)|} + V_1(x,t)v = 0, \quad (x,t)\in\mathbb{R}^3\times(0,T) \\ v(x,0)=0, \quad x\in\mathbb{R}^3. \end{array}\right. \tag{4.8}$$

We then consider the function $\theta \in C_c^\infty(\mathbb{R})$, $0\leq\theta\leq 1$, such that :

$$\theta(x) = \left\{\begin{array}{ll} 1 & \forall x\in\mathbb{R},\ |x|\leq 1 \\ 0 & \forall x\in\mathbb{R},\ |x|\geq 2 \end{array}\right.$$

and we set

$$\theta_R(x) = \theta\left(\frac{x}{R}\right)$$

which is such that for all $x$ in $\mathbb{R}^3$, $|\nabla\theta_R(x)| \leq \dfrac{C}{R}$ where $C$ is a constant independent of $R>1$.

On the one hand, we calculate $Im\int_{\mathbb{R}^3}(4.8).\theta_R^2(x)\overline{v}(x,t)\,dx$ and we obtain, using Cauchy-Schwarz inequality :

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{d}{dt}\left(\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}\theta_R^2(x)|v(x,t)|^2\,dx\right) & = & -2\,Im\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}\nabla v(x,t)\nabla(\theta_R^2)(x)\overline{v}(x,t)\,dx \\ & \leq & C\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla v(x,t)||\theta_R(x)||\nabla\theta_R(x)||v(x,t)|\,dx \\ & \leq & \dfrac{C}{R}\|\nabla v\|_{L^\infty(0,T;L^2)}\left(\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}\theta_R^2(x)|v(x,t)|^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \end{array}$$

On the other hand, as we know that $v \in L^\infty(0,T;H^1 \cap H_1)$ we get, for all $R > 0$ and for all $t$ in $(0,T)$,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \theta_R^2(x)|v(x,t)|^2\,dx \leq \frac{C}{R}\int_0^t \left(\int_{\mathbb{R}^3} \theta_R^2(x)|v(x,s)|^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}} ds$$

Thus, from Gronwall's inequality, since $v(0) = 0$ we finally obtain

$$\int_{\mathbb{R}^3} \theta_R^2(x)|v(x,t)|^2\,dx = 0, \;\; \forall t \in (0,T), \; \forall R > 0.$$

Then, $v = 0$ and the proof of Theorem 5 is complete. □

## 4.4 Proof of Theorem 1

We use the same regularization as in the preceding section. Then for $\varepsilon > 0$ we consider the solution $u_\varepsilon$ of (4.6) :

$$\begin{cases} i\partial_t u_\varepsilon + \Delta u_\varepsilon + V_0^\varepsilon u_\varepsilon + V_1^\varepsilon u_\varepsilon = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u_\varepsilon(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases}$$

Thanks to Proposition 4, we know that $u_\varepsilon$ is unique in $C([0,T];H^2 \cap H_2)$.
We also remind that we set $\alpha > 0$ and $\rho > 0$ such that :

$$\|a\|_{W^{2,1}(0,T)} \leq \alpha \quad \text{ and}$$

$$\|(1+|x|^2)^{-1}V_1\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \|(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho.$$

### 4.4.1 First Step : Energy estimates

Again here, $C$ denotes various constants independent of $\varepsilon$. We first show the following estimate :

**Lemma 6.** *Let $V_0$ and $V_1$ satisfy assumption* (4.2) *and let $V_0^\varepsilon$, $V_1^\varepsilon$ and $u_0$ be defined as above. There exists $C > 0$ depending only on $\rho$ such that the solution $u_\varepsilon$ of* (4.6) *satisfies for all $t \in [0,T]$ :*

$$\|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} \leq C\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + C\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}.$$

**Proof.** Since $u_\varepsilon$ is the solution of (4.6), we have for all $t \in [0,T]$,

$$\begin{aligned} \|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} &\leq \|\Delta u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|u_\varepsilon(t)\|_{L^2} \\ &\leq \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|V_0^\varepsilon(t) u_\varepsilon(t)\|_{L^2} \\ &\quad + \|V_1^\varepsilon(t) u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|u_\varepsilon(t)\|_{L^2}. \end{aligned}$$

It is clear that

$$\|V_1^\varepsilon(t) u_\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C \left\| \frac{V_1(t)}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty} \|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}. \tag{4.9}$$

Next, from Hardy's and then Young's inequalities, we can prove that for all $\eta > 0$, there exists $C_\eta > 0$ such that

$$\begin{aligned} \|V_0^\varepsilon(t)u_\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq \left\|\frac{u_\varepsilon(t)}{|x-a(t)|}\right\|_{L^2} \leq 2\|\nabla u_\varepsilon(t)\|_{L^2} \\ &\leq \eta\|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} + C_\eta\|u_\varepsilon(t)\|_{L^2}. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Then, combining these results, we have

$$\begin{aligned} \|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} &\leq \eta\|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} + (C_\eta+1)\|u_\varepsilon(t)\|_{L^2} \\ &+ \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + C\left\|\frac{V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2} \end{aligned}$$

and if we choose $\eta$ small enough, we finally obtain that for all $t \in [0,T]$,

$$\|u_\varepsilon(t)\|_{H^2} \leq C\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2} + C_\rho\,\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}.$$

where $C$ and $C_\rho$ are independent of $\varepsilon$. □

**Lemma 7.** *With the above notations let $E_\varepsilon(t)$ be defined as being*

$$E_\varepsilon(t) = \|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2.$$

*Then there exists $C > 0$ depending only on $T$, $\alpha$ and $\rho$ such that for all $t \in [0,T]$ we have :*

$$\frac{d}{dt}\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}^2 \leq C\,E_\varepsilon(t). \tag{4.11}$$

**Proof.** Note that all the integrations by parts and all the calculations we are going to do are justified because of the regularity of the data we are manipulating.

Multiplying (4.6) by $|x|^4\overline{u}_\varepsilon(x)$, integrating by parts on $\mathbb{R}^3$ and taking imaginary parts, we obtain

$$Im\int_{\mathbb{R}^3} i|x|^4\overline{u}_\varepsilon\partial_t u_\varepsilon \leq \int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon.x||x|^2|u_\varepsilon|$$

and we deduce that

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|x|^4|u_\varepsilon|^2\right) \leq C\int_{\mathbb{R}^3}|x|^2|\nabla u_\varepsilon|^2 + C\int_{\mathbb{R}^3}|x|^4|u_\varepsilon|^2. \tag{4.12}$$

Besides, if we calculate the real part of equation (4.6) multiplied by $|x|^2\overline{u}_\varepsilon$ and integrated on $\mathbb{R}^3$, we get

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3}|x|^2|\nabla u_\varepsilon|^2 &\leq \int_{\mathbb{R}^3}|x||\nabla u_\varepsilon||u_\varepsilon| + \int_{\mathbb{R}^3}|V_1^\varepsilon||x|^2|u_\varepsilon|^2 \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3}|V_0^\varepsilon||x|^2|u_\varepsilon|^2 + \int_{\mathbb{R}^3}|\partial_t u_\varepsilon||x|^2|u_\varepsilon| \\ &\leq C\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u_\varepsilon|^2 + C\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^4)|u_\varepsilon|^2 + C\int_{\mathbb{R}^3}|\partial_t u_\varepsilon|^2 \\ &+ C\int_{\mathbb{R}^3}|V_1^\varepsilon|^2|u_\varepsilon|^2 + C\int_{\mathbb{R}^3}|V_0^\varepsilon|^2|u_\varepsilon|^2 \end{aligned}$$

From (4.9) and Hardy's inequalities, we obtain

$$\int_{\mathbb{R}^3} |V_0^\varepsilon|^2 |u_\varepsilon|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |V_1^\varepsilon|^2 |u_\varepsilon|^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon|^2 + C_\rho \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^4)|u_\varepsilon|^2$$

and therefore, we get

$$\int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 |\nabla u_\varepsilon|^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon|^2 + C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon|^2 + C_\rho \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^4)|u_\varepsilon|^2. \quad (4.13)$$

If we also calculate the real part of equation (4.6) multiplied by $\overline{u}_\varepsilon$ and integrated on $\mathbb{R}^3$, from the same kind of arguments we used to prove (4.9) and (4.10) , we have

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon|^2 &\leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon||u_\varepsilon| + C \int_{\mathbb{R}^3} (|V_0^\varepsilon| + |V_1^\varepsilon|)|u_\varepsilon|^2 \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon|^2 + C \int_{\mathbb{R}^3} |u_\varepsilon|^2 + C \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{|u_\varepsilon|^2}{|x-a(t)|} + |V_1^\varepsilon||u_\varepsilon|^2 \right) \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon|^2 + \eta \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon|^2 + C_{\eta,\rho} \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u_\varepsilon|^2. \end{aligned}$$

Then, if we choose $\eta$ small enough, we finally obtain that for all $t \in [0,T]$,

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u_\varepsilon|^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon|^2 + C_\rho \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u_\varepsilon|^2. \quad (4.14)$$

Plugging estimates (4.13)–(4.14) into (4.12) we can finally conclude that there exists $C > 0$, independent of $\varepsilon$ but depending on $\rho$ and $T$, such that

$$\frac{d}{dt}\left( \int_{\mathbb{R}^3} |x|^4 |u_\varepsilon|^2 \right) \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\partial_t u_\varepsilon|^2 + C \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^4)|u_\varepsilon|^2$$

and since

$$\frac{d}{dt}\left( \int_{\mathbb{R}^3} |u_\varepsilon|^2 \right) = 0,$$

we have completed the proof of (4.11). □

### 4.4.2 Second Step : $L^2$-estimate of the time derivative

Here we obtain appropriate estimates on $\partial_t u_\varepsilon$ :

**Lemma 8.** *Let $E_\varepsilon(t)$ be defined as being $E_\varepsilon(t) = \|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2$. There exists a constant $C > 0$ depending only on $T$, $\alpha$ and $\rho$ and a function $\gamma \in L^1(0,T)$ such that for all $t \in [0,T]$ we have :*

$$\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C\, \|u_0\|_{H^2 \cap H_2}^2 + \int_0^t \gamma(s) E_\varepsilon(s)\, ds \quad (4.15)$$

**Proof.** We make the change of variables $y = x - a(t)$ and we set

$$u_\varepsilon(x,t) = v_\varepsilon(y,t).$$

Then, we have

$$\partial_t v_\varepsilon(y,t) = \partial_t u_\varepsilon(x,t) + \frac{da}{dt}(t) \cdot \nabla u_\varepsilon(x,t) \quad (4.16)$$

and for all $i = 1, 2$ or $3$,

$$\frac{\partial v_\varepsilon}{\partial y_i}(y,t) = \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x_i}(x,t).$$

Therefore, the equation solved by $v_\varepsilon$ can be written in the following way :

$$\begin{cases} i\partial_t v_\varepsilon + \Delta v_\varepsilon + \dfrac{v_\varepsilon}{|y|} + V_1(y+a(t),t)v_\varepsilon = i\,\dfrac{da}{dt}(t)\cdot\nabla v_\varepsilon, & (y,t)\in\mathbb{R}^3\times(0,T) \\ v_\varepsilon(y,0) = u_0(y+a(0)), & y\in\mathbb{R}^3. \end{cases}$$

**Remark :** One can notice that as we use this change of variables to prove the regularity result, our method cannot be easily generalized to the situation where we consider more than one single nucleus.

Now, we set $w_\varepsilon(y,t) = \partial_t v_\varepsilon(y,t)$ and since

$$\partial_t[V_1(y+a(t),t)] = \partial_t V_1(y+a(t),t) + \frac{da}{dt}(t)\cdot\nabla V_1(y+a(t),t),$$

then $w$ satisfies the equation :

$$\begin{cases} i\partial_t w_\varepsilon + \Delta w_\varepsilon + \dfrac{w_\varepsilon}{|y|} + V_1(y+a(t),t)w_\varepsilon = i\,\dfrac{d^2a}{dt^2}(t)\cdot\nabla v_\varepsilon + i\,\dfrac{da}{dt}(t)\cdot\nabla w_\varepsilon \\ \qquad\qquad - \partial_t V_1(y+a(t),t)v_\varepsilon - \dfrac{da}{dt}(t)\cdot\nabla V_1(y+a(t),t)v_\varepsilon, \\ w_\varepsilon(y,0) = \left(i\Delta + \dfrac{i}{|y|} + iV_1(y+a(0),0) + \dfrac{da}{dt}(0)\cdot\nabla\right)u_0(y+a(0)). \end{cases} \tag{4.17}$$

If we multiply equation (4.17) by $\overline{w}_\varepsilon$, integrate on $\mathbb{R}^3$ and take the imaginary part we have :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3}|w_\varepsilon(y,t)|^2\,dy \\ &= Im\int_{\mathbb{R}^3} i\,\left(\frac{d^2a}{dt^2}(t)\cdot\nabla v_\varepsilon(y,t) + \frac{da}{dt}(t)\cdot\nabla w_\varepsilon(y,t)\right)\overline{w}_\varepsilon(y,t)\,dy \\ &- Im\int_{\mathbb{R}^3}\left(\partial_t V_1(y+a(t),t) + \frac{da}{dt}(t)\cdot\nabla V_1(y+a(t),t)\right)v_\varepsilon(y,t)\overline{w}_\varepsilon(y,t)\,dy \end{aligned}$$

and since

$$Im\int_{\mathbb{R}^3} i\,\frac{da}{dt}\cdot\nabla w_\varepsilon\overline{w}_\varepsilon\,dy = \int_{\mathbb{R}^3}\frac{da}{dt}\cdot Re(\overline{w}_\varepsilon\nabla w_\varepsilon)\,dy = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{da}{dt}\cdot\nabla(|w_\varepsilon|^2)\,dy = 0$$

we obtain

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3}|w_\varepsilon(y,t)|^2\,dy &\le \left|\frac{d^2a}{dt^2}(t)\right|\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla v_\varepsilon(y,t)||w_\varepsilon(y,t)|\,dy \\ &+ \left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\int_{\mathbb{R}^3}(1+|y+a(t)|^2)|v_\varepsilon(y,t)||w_\varepsilon(y,t)|\,dy \\ + \left\|\frac{da}{dt}\right\|_{L^\infty(0,T)}&\left\|\frac{\nabla V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\int_{\mathbb{R}^3}(1+|y+a(t)|^2)|v_\varepsilon(y,t)||w_\varepsilon(y,t)|\,dy. \end{aligned}$$

Moreover one can notice that

$$\int_{\mathbb{R}^3}(1+|y+a(t)|^2)^2|v_\varepsilon(y,t)|^2\,dy = \int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^2|u_\varepsilon(x,t)|^2\,dx = \|u_\varepsilon(t)\|^2_{H_2}$$

and after using Cauchy-Schwarz inequality and integrating in time variable on (0,t) we obtain

$$\|w_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + 2\int_0^t \left|\frac{d^2a}{dt^2}(s)\right| \|\nabla v_\varepsilon(s)\|_{L^2}\|w_\varepsilon(s)\|_{L^2}\,ds$$
$$+ 2\int_0^t \left(\left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} + \left\|\frac{da}{dt}\right\|_{L^\infty(0,T)}\left\|\frac{\nabla V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)\|u_\varepsilon(s)\|_{H_2}\|w_\varepsilon(s)\|_{L^2}\,ds$$

where $C>0$ is a constant independent of $\varepsilon$. Furthermore, using (4.16) and reminding Theorem 5 and the definition of $\rho_0$ and $\alpha$, we have

$$\begin{aligned}\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 &\leq 2\|\partial_t v_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + 2\left\|\frac{da}{dt}\right\|_{L^\infty(0,T)}^2 \|\nabla u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2\\ &\leq 2\|\partial_t v_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + C_{T,\alpha,\rho_0}\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2.\end{aligned}$$

Since $\partial_t v_\varepsilon = w_\varepsilon$ and since for all $t\in(0,T)$, $\|\nabla v_\varepsilon(t)\|_{L^2} = \|\nabla u_\varepsilon(t)\|_{L^2}$, we get

$$\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C_{T,\alpha,\rho_0}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + 4\int_0^t \left|\frac{d^2a}{dt^2}(s)\right| \|\nabla u_\varepsilon(s)\|_{L^2}\|\partial_t v_\varepsilon(s)\|_{L^2}\,ds$$
$$+ 4\int_0^t \left(\left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} + \alpha\left\|\frac{\nabla V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)\|u_\varepsilon(s)\|_{H_2}\|\partial_t v_\varepsilon(s)\|_{L^2}\,ds$$
$$\leq C_{T,\alpha,\rho_0}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + 2\int_0^t \left|\frac{d^2a}{dt^2}(s)\right| \left(\|\nabla u_\varepsilon(s)\|_{L^2}^2 + \|\partial_t v_\varepsilon(s)\|_{L^2}^2\right)\,ds$$
$$+ 2\int_0^t \left(\left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} + \alpha\left\|\frac{\nabla V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)\left(\|u_\varepsilon(s)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t v_\varepsilon(s)\|_{L^2}^2\right)\,ds$$
$$\leq C_{T,\alpha,\rho_0}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + 2\int_0^t \gamma(s)\left(\|u_\varepsilon(s)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t v_\varepsilon(s)\|_{L^2}^2\right)\,ds.$$

with
$$\gamma = \left|\frac{d^2a}{dt^2}\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} + \alpha\left\|\frac{\nabla V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} \in L^1(0,T).$$

Eventually, using (4.16) we also have

$$\|\partial_t v_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq 2\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + 2\left\|\frac{da}{dt}\right\|_{L^\infty(0,T)}^2 \|\nabla u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2$$

and for the same kind of reasons, we obtain

$$\|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + C\int_0^t \gamma(s)\left(\|u_\varepsilon(s)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(s)\|_{L^2}^2\right)\,ds.$$

where $C$, $C_{T,\alpha,\rho}$ and $\gamma$ are independent of $\varepsilon$. Hence the end of the proof of Lemma 8. $\square$

### 4.4.3 Third Step : Convergence and conclusion

Combining all the estimates of Lemma 7 and 8, we have finally shown that there exists a positive constant $C$ independent of $\varepsilon$ and depending on $T$, $\rho$ and $\alpha$ and a function $\gamma \in L^1(0,T)$, also independent of $\varepsilon$, such that for $t \in [0,T]$,

$$\begin{aligned} E_\varepsilon(t) &= \|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \\ &\leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 + \int_0^t \gamma(s) E_\varepsilon(s)\, ds. \end{aligned}$$

We apply the Gronwall lemma and obtain that for all $t$ in $[0,T]$,

$$E_\varepsilon(t) \leq C\, e^{\|\gamma\|_{L^1(0,T)}}\, \|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2.$$

Eventually, we proved that there exists $C_{T,\alpha,\rho} > 0$ independent of $\varepsilon$ such that

$$\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C_{T,\alpha,\rho}\, \|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2, \ \ \forall t \in [0,T].$$

Then, from Lemma 6, we derive that for all $t \in [0,T]$,

$$\|u_\varepsilon(t)\|_{H_2\cap H^2}^2 + \|\partial_t u_\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C_{T,\alpha,\rho}\, \|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2 \tag{4.18}$$

and for all $\varepsilon > 0$, as we already knew, the unique solution $u_\varepsilon$ satisfies

$$u_\varepsilon \in C([0,T], H^2 \cap H_2) \cap C^1([0,T], L^2).$$

Then we let $\varepsilon$ tend to $0$ and pass to the limit in the distribution sense in equation (4.6). Indeed, estimate (4.18), implies the convergence of a subsequence $(u_{\varepsilon'})$ in the following way :

$$\begin{aligned} u_{\varepsilon'} &\rightharpoonup u \quad \text{in } L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2)\ w\star \\ \partial_t u_{\varepsilon'} &\rightharpoonup \partial_t u \quad \text{in } L^\infty(0,T; L^2)\ w\star\,. \end{aligned}$$

We also have these other convergences :

$$\begin{aligned} V_0^\varepsilon &\to \frac{1}{|x-a(t)|} \quad \text{in } L^\infty(0,T; L^p + L^\infty), p \in [2,3[ \\ V_1^\varepsilon &\to V_1 \quad \text{in } L^\infty(0,T; L^r_{\text{loc}}),\ r > 1. \end{aligned}$$

Thus, $u$ is the solution of equation (4.1) in the sense of distribution and satisfies $u \in L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2)$ and $\partial_t u \in L^\infty(0,T; L^2(\mathbb{R}^3))$ and we obtain

$$\|u(t)\|_{H^2\cap H_2}^2 + \|\partial_t u(t)\|_{L^2}^2 \leq C_{T,\alpha,\rho}\, \|u_0\|_{H^2\cap H_2}^2, \ \ \forall t \in [0,T].$$

Uniqueness can easily be proved in $L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2)$.
Thus, the proof of Theorem 1 is complete. □

### 4.4.4 Continuity results

The first observation to point out is that actually, under the hypothesis of Theorem 1, we also have $u \in C_w([0,T]; H^2 \cap H_2)$. Indeed, we have proved that $u$ is bounded in $L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2)$ and since $u \in W^{1,\infty}(0,T; L^2)$ we also have $u \in C([0,T]; L^2)$. Hence the weak continuity result.

Another way to formulate the result of Theorem 1 is then the following.

**Corollary 9.** *Let $a$ and $V_1$ satisfy assumption* (4.2) *and $u_0 \in H^2 \cap H_2$. We define the family of Hamiltonians $\{H(t), t \in [0,T]\}$ by $H(t) = -\Delta - \frac{1}{|x-a|} - V_1$. Then, there exists a unique family of evolution operators $\{U(t,s), s,t \in [0,T]\}$ (the so called propagator associated with $H(t)$) on $H^2 \cap H_2$ such that for $u_0 \in H^2 \cap H_2$ :*

- $(i)$ $U(t,s)U(s,r)u_0 = U(t,r)u_0$ *and* $U(t,t)u_0 = u_0,$ *for all* $s,t,r \in [0,T]$;
- $(ii)$ $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is strongly continuous in* $L^2$ *on* $[0,T]^2$ *and* $U(t,s)$ *is an isometry on* $L^2,$ *that is* $\|U(t,s)u_0\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$;
- $(iii)$ $U(t,s) \in \mathcal{L}(H^2 \cap H_2)$ *for all* $(s,t) \in [0,T]^2$ *and* $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is weakly continuous from* $[0,T]^2$ *into* $H^2 \cap H_2$;
- $(iv)$ *the equalities* $i\partial_t U(t,s)u_0 = H(t)U(t,s)u_0$ *and* $i\partial_s U(t,s)u_0 = -U(t,s)H(s)u_0$ *hold in* $L^2$.

We will end this paper by the proof of Theorem 2.

Let $s$ and $t \in [0,T]$ be such that $s \to t$. We will prove that $u(s) \to u(t)$ strongly in $H^1 \cap H_1$. On the one hand, for any $R > 0$, we have :

$$\begin{aligned}
\|u(s)-u(t)\|_{H_1}^2 &\leq \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u(s)-u(t)|^2\,dx \\
&\leq \int_{|x|<R} (1+|x|^2)|u(s)-u(t)|^2\,dx \\
&\quad + \int_{|x|>R} (1+|x|^2)|u(s)-u(t)|^2\,dx \\
&\leq (1+R^2)\|u(s)-u(t)\|_{L^2}^2 \\
&\quad + \frac{2}{1+R^2}\int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^4)|u(s)-u(t)|^2\,dx.
\end{aligned}$$

On the other hand, as in the proof of Lemma 6, for all $\eta > 0$, there exists a constant $C_\eta > 0$ such that

$$\|u(s)-u(t)\|_{H^1}^2 \leq \eta\|u(s)-u(t)\|_{H^2}^2 + C_\eta\|u(s)-u(t)\|_{L^2}^2.$$

Therefore, if we fix $\eta > 0$ then we choose $R > 0$ so that $\dfrac{2}{1+R^2} < \eta$, and we may write

$$\begin{aligned}
\|u(s)-u(t)\|_{H^1\cap H_1}^2 &\leq \eta\|u(s)-u(t)\|_{H^2\cap H_2}^2 + C_\eta\|u(s)-u(t)\|_{L^2}^2 \\
&\leq 2\eta\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)}^2 + C_\eta\|u(s)-u(t)\|_{L^2}^2. \quad (4.19)
\end{aligned}$$

Since we have already proved that $u \in C([0,T];L^2)$, we have $\|u(s)-u(t)\|_{L^2}^2 \to 0$ when $s \to t$ and we deduce from (4.19) that $\|u(s)-u(t)\|_{H^1\cap H_1}^2 \overset{s\to t}{\longrightarrow} 0$ and obtain $u \in C([0,T];H^1 \cap H_1)$.

**Remark :** Actually, we can prove that if $u_0 \in H^2 \cap H_2$, the solution $u$ of equation (4.1) belongs to the space $C([0,T];H^s \cap H_s)$ for all $s < 2$ since one can prove :

$$\forall\eta > 0,\ \exists C_\eta > 0\ st\ \|u\|_{H^s} \leq \eta\|u\|_{H^2} + C_\eta\|u\|_{L^2}.$$

The proof of Theorem 2 is complete. □

# Chapitre 5

# Existence and regularity of the solution of a time dependent Hartree-Fock equation coupled with a classical nuclear dynamics

L'article qui suit est actuellement soumis.

ABSTRACT : We study an Helium atom (two electrons) submitted to a general time dependent electric field, modeled by the Hartree-Fock equation (whose solution is the wave function of the electrons) coupled with the classical Newtonian dynamics (for the position of the nucleus). We prove a result of existence and regularity for the Cauchy problem, where the main ingredients are a preliminary study of the regularity in a nonlinear Schrödinger equation with semi-group techniques and a Schauder fixed point theorem.

**Keywords :** Hartree-Fock equation, classical dynamics, regularity, existence.
*AMS Classification :* 35Q40, 35Q55, 34A12.

RÉSUMÉ : Nous étudions un atome d'Hélium (deux électrons) soumis à un champ électrique général dépendant du temps, modélisé par une équation de Hartree-Fock (dont la solution est la fonction d'onde des électrons), couplée à une équation de la dynamique Newtonienne (pour la position du noyau). Nous démontrons un résultat d'existence et de régularité pour le problème de Cauchy. L'étude préliminaire de la régularité de la solution d'une équation de Schrödinger non-linéaire avec des techniques de semi-groupe, ainsi qu'un théorème de point fixe de Schauder, sont les principaux ingrédients de la démonstration.

## 5.1 Introduction, notations and main results

We are interested in the mathematical study of a simplified chemical system, in fact an atom consisting in a nucleus and two electrons, submitted to an external electric field. We need very classical approximations used in quantum chemistry to describe the chemical system in terms of partial differential equations. We choose a non-adiabatic approximation of the general time dependent Schrödinger equation

$$i\partial_t \Psi(x,t) = H(t)\Psi(x,t) - V_1(x,t)\Psi(x,t)$$

where $H$ is the Hamiltonian of the molecular system

$\Psi$ its wave function, and $V_1$ the external electric potential

which allows, even under the effect of an electric field (see [10]), to neglect the quantum nature of the nucleus since it is much heavier than the electrons. On the one hand, we consider the nucleus as a point particle which moves according to the Newton dynamics in the external electric field and in the electric potential created by the electronic density (nucleus-electron attraction of Hellman-Feynman type). On the other hand, we obtain under the Restricted Hartree-Fock formalism, a time dependent Hartree-Fock equation whose solution is the wave function of the electrons.

Indeed, we consider the following coupled system :

$$\left\{\begin{array}{ll} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a|} + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2a}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla\left(\frac{1}{|x-a|}\right)\,dx - \nabla V_1(a), & \text{in } (0,T) \\ a(0) = a_0,\ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0 & \end{array}\right. \tag{5.1}$$

where $V_1$ is the external electric potential which takes it values in $\mathbb{R}$ and satisfy the following assumptions :

$$\begin{array}{rcl} (1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)), \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \text{ and} \\ \nabla V_1 & \in & L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right). \end{array} \tag{5.2}$$

Here, the time dependent Hartree-Fock equation is a Schrödinger equation (in the mathematical meaning) with a coulombian potential due to the nucleus, singular at finite distance, an electric potential corresponding to the external electric field, singular at infinity, and a nonlinearity of Hartree type in the right hand side. Next, the classical nuclear dynamics is the second order in time ordinary differential equation solved by the position $a(t)$ of the nucleus (of mass $m$ and charge equal to 1) responsible of the coulombian potential.

This kind of situation has already been studied in the particular case when the atom is subjected to a uniform external time-dependent electric field $I(t)$ such that in equation (5.1), one has $V_1 = -I(t)\cdot x$ as in reference [10]. The authors remove the electric potential from the equation, using a change of unknown function and variables (gauge transformation given in [22]). From then on, they have to deal with the nonlinear Schrödinger equation with only a time dependent coulombian potential. Of course, we cannot use this technique here because of the generality of the potential $V_1$ we are considering.

We work in $\mathbb{R}^3$ and throughout this paper, we use the following notations :

$$\nabla v = \left(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \frac{\partial v}{\partial x_2}, \frac{\partial v}{\partial x_3}\right), \quad \Delta v = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}, \quad \partial_t v = \frac{\partial v}{\partial t},$$

$Re$ and $Im$ are the real and the imaginary parts of a complex number,
$W^{2,1}(0,T) = W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$, for $p \geq 1$, $L^p = L^p(\mathbb{R}^3)$ and
the usual Sobolev spaces are $H^1 = H^1(\mathbb{R}^3)$ and $H^2 = H^2(\mathbb{R}^3)$.

We also define

$$\begin{aligned} H_1 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|v(x)|^2\,dx < +\infty \right\} \\ H_2 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^2|v(x)|^2\,dx < +\infty \right\}. \end{aligned}$$

One can notice that $H_1$ and $H_2$ are respectively the images of $H^1$ and $H^2$ under the Fourier transform.

The main purpose of this paper is to prove the following result.

**Theorem 1.** *Let $T$ be a positive arbitrary time. Under assumption* (5.2), *and if we also assume $u_0 \in H^2 \cap H_2$ and $a_0,\ v_0 \in \mathbb{R}$, system* (5.1) *admits a solution*

$$(u,a) \in \left(L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)\right) \times W^{2,1}(0,T).$$

The reader may notice at first sight that we do not give any uniqueness result for this coupled system. Actually, there is a proof of existence and uniqueness of solutions for the analogous system without electric potential in [10] (and also with a uniform electric potential, via the gauge transformation). Of course, their way of proving uniqueness cannot be applied here because the Marcinkiewicz spaces they used do not suit the electric potential $V_1$ we have. Even if one can be convinced that the solution in this class is unique, we do not have any proof of uniqueness yet. Nevertheless, for any solution of system (5.1) in the class given in Theorem 1, the following estimate holds :

**Proposition 2.** *Let $(u,a)$ be a solution of the coupled system* (5.1) *under assumption* (5.2) *in the class*

$$W^{1,\infty}(0,T;L^2) \cap L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2) \times W^{2,1}(0,T).$$

*If $\rho > 0$ satisfies*

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho,$$

*then there exists a constant $R > 0$ depending on $\rho$ such that $\|a\|_{C([0,T])} \leq R$ and if $\rho_1 > 0$ is such that*

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \leq \rho_1$$

*then there exists a non-negative constant $K^0_{T,\rho_1}$ depending on the time $T$, on $\rho_1$, on $\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$, on $|a_0|$ and on $|v_0|$, such that :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + m\left\|\frac{d^2a}{dt^2}\right\|_{L^1(0,T)} + m\left\|\frac{da}{dt}\right\|_{C([0,T])}$$
$$+\sup_{t\in[0,T]}\left(\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t,x)|^2\star\frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq K^0_{T,\rho_1}.$$

The proof of Theorem 1 will be given in a first step in the case when the time $T$ is small enough (section 5.3). Proposition 2 will then be useful to reach any arbitrary time $T$ and prove Theorem 1 (section 5.4).

Finally, we would like to point out that the result given in Theorem 1 is a necessary step towards the study of the optimal control linked with system (5.1), the control being performed by the external electric field. This mathematical point of view participates to the understanding of the optimal control of simple chemical reactions by means of a laser beam action. One can notice that Theorem 1 ensures the existence of solution to the coupled equations for a large class of control parameters since $V_1$ satisfies (5.2). The optimal control problem will be described and studied in chapter 6 and 7.

Before working on the situation described above, we will consider the position $a(t)$ of the nucleus as known at any time $t \in [0,T]$. Of course, this is too restrictive for the study of chemical reactions but the next section is only a first step which leads to the proof of Theorem 1. We can refer to [14] for the study of the well-posedness of the Cauchy problem for fixed nuclei, in the Hartree-Fock approximation for the electrons. This reference precisely describes the N-electrons situation where the position of the nucleus is known. We consider here the 2-electrons 1-nucleus system.

## 5.2 A nonlinear Schrödinger equation

In this section, we will consider the position $a$ of the nucleus as known at any moment and we will prove existence, uniqueness and regularity for the solution of the nonlinear Schrödinger equation of Hartree type which we are led to study. Indeed, we consider the following equation :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{5.3}$$

where $a$ and $V_1$ are given and satisfy the following assumption :

$$\begin{array}{rcl} a & \in & W^{2,1}(0,T), \\ (1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty), \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty). \end{array} \tag{5.4}$$

The study of this equation is submitted to the results known for the corresponding linear equation. We will use the main result given in the preceding chapter, about existence and regularity of the solution of the linear Schrödinger equation :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a|} + V_1 u = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3. \end{cases}$$

We set $\rho > 0$ such that

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho.$$

**Theorem 3.** *Let $u_0$ belong to $H^2 \cap H_2$, $a$ and $V_1$ satisfy assumption* (5.4)*. We define the family of Hamiltonians $\{H(t), t \in [0,T]\}$ by*

$$H(t) = -\Delta - \frac{1}{|x-a(t)|} - V_1(t).$$

*Then, there exists a unique family of evolution operators $\{U(t,s), s, t \in [0,T]\}$ (the so called propagator associated with $H(t)$) on $H^2 \cap H_2$ such that for all $u_0 \in H^2 \cap H_2$ :*

$(i)$ $U(t,s)U(s,r)u_0 = U(t,r)u_0$ *and* $U(t,t)u_0 = u_0$ *for all* $s, t, r \in [0,T]$;

$(ii)$ $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is strongly continuous in* $L^2$ *on* $[0,T]^2$ *and* $U(t,s)$ *is an isometry on* $L^2$ : $\|U(t,s)u_0\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$;

$(iii)$ $U(t,s) \in \mathcal{L}(H^2 \cap H_2)$ *for all* $(s,t) \in [0,T]^2$ *and* $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is weakly continuous from* $[0,T]^2$ *to* $H^2 \cap H_2;$ *moreover, for all* $\alpha > 0,$ *there exists* $M_{T,\alpha,\rho} > 0$ *such that :* $\forall t, s \in [0,T],\ \forall f \in H^2 \cap H_2,$
$$\|a\|_{W^{2,1}(0,T)} \leq \alpha \ \Rightarrow\ \|U(t,s)f\|_{H^2\cap H_2} \leq M_{T,\alpha,\rho}\|f\|_{H^2\cap H_2}.$$

$(iv)$ *The equalities* $i\partial_t U(t,s)u_0 = H(t)U(t,s)u_0$ *and* $i\partial_s U(t,s)u_0 = -U(t,s)H(s)u_0$ *hold in* $L^2$.

One shall notice that of course, in $(iii)$, the constant $M_{T,\alpha,\rho}$ depends on the norm of $V_1$ in the space where it is defined, via $\rho$.

We would like to underline that the main difficulty to prove this theorem is to deal at the same time with the two potentials which have very different properties. The main reference is a paper by K. YAJIMA [51] which treats the case where $V_1 = 0$, using strongly T. KATO's results in reference [26]. In our situation, we first regularize $V_0$ and $V_1$ by $V_0^\varepsilon$ and $V_1^\varepsilon$ and obtain accurate estimates, independent of $\varepsilon$. The key point is to find an $L^2$-estimate of the time derivative of the solution $u^\varepsilon$. We use a change of variable $y = x - a(t)$ and considering then the equation solved by the time derivative of $v^\varepsilon(t,y) = u^\varepsilon(t,x)$ we prove an estimate of $\|\partial_t u^\varepsilon(t)\|_{L^2}$. Making $\varepsilon$ tend to $0$ ends the proof of Theorem 3.

We finally give the existence result on the nonlinear Schrödinger equation (5.3) :

**Theorem 4.** *Let $T$ be a positive arbitrary time. Under assumption* (5.4)*, and if we also assume $u_0 \in H^2 \cap H_2$, then equation* (5.3) *has a unique solution $u \in L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2)$ which satisfies $\partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2)$ and there exists a constant $C_{T,\alpha,\rho} > 0$ depending on $T$, $\alpha$ and $\rho$ where*

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho \ \ and \ \ \left\| \frac{d^2 a}{dt^2} \right\|_{L^1(0,T)} \leq \alpha,$$

*such that :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

An analogous result has already been obtained in the particular case when the atom is subjected to an external uniform time-dependent electric field $I(t)$ such that in equation (5.3), one has $V_1 = -I(t)\cdot x$ as in reference [10] (but for a time $T$ small enough) and in reference [22] (for the linear case). They both use a gauge transformation to remove the electric potential from the two equations such that they only have to deal with the usual difficulty corresponding to a time dependent coulombian potential. The generality of potentials $V_1$ we are considering does not allow us to use this technique.

### 5.2.1 Local existence

We will begin with a local-in-time existence result for equation (5.3). We first need the following lemma to deal with the Hartree nonlinearity.

**Lemma 5.** *For $u \in H^1$, we define $F(u) = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$ and one has the following estimates :*
$\exists C > 0$ *such that* $\forall u, v \in H^1$,

$$\|F(u) - F(v)\|_{L^2} \leq C(\|u\|_{H^1}^2 + \|v\|_{H^1}^2)\|u - v\|_{L^2} \tag{5.5}$$

$\exists C_F > 0$ *such that* $\forall u, v \in H^2 \cap H_2$,

$$\begin{aligned} \|F(u) - F(v)\|_{H^2\cap H_2} &\leq C_F(\|u\|_{H^1}^2 + \|v\|_{H^2\cap H_2}^2)\|u - v\|_{H^2\cap H_2} &(5.6)\\ \|F(u)\|_{H^2\cap H_2} &\leq C_F\|u\|_{H^1}^2\|u\|_{H^2\cap H_2} &(5.7)\end{aligned}$$

We notice that everywhere in this paper, $C$ denotes a real non-negative generic constant. We may put in index a precise dependence of the constant (like $C_F$ or $C_{T,\alpha,\rho}$).

**Proof.** From Cauchy-Schwarz and Hardy inequalities, we have :

$$\begin{aligned} \|F(u) - F(v)\|_{L^2} &\leq \left\|(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u - (|v|^2 \star \frac{1}{|x|})v\right\|_{L^2} \\ &\leq \left\|(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u - v)\right\|_{L^2} + \left\|\left((|u|^2 - |v|^2) \star \frac{1}{|x|}\right)v\right\|_{L^2} \\ &\leq 2\|u\|_{L^2}\|\nabla u\|_{L^2}\|u - v\|_{L^2} \\ &\quad + 2\|v\|_{L^2}\left(\|\nabla u\|_{L^2} + \|\nabla v\|_{L^2}\right)\|u - v\|_{L^2} \\ &\leq C(\|u\|_{H^1}^2 + \|v\|_{H^1}^2)\|u - v\|_{L^2}\end{aligned}$$

which proves (5.5). Now, we have to establish (5.6) and (5.7). First of all we have

$$\begin{aligned} \|F(u) - F(v)\|_{H^2\cap H_2}^2 &= \|F(u) - F(v)\|_{L^2}^2 + \||x|^2F(u) - |x|^2F(v)\|_{L^2}^2 \\ &\quad + \|\Delta F(u) - \Delta F(v)\|_{L^2}^2. \end{aligned} \tag{5.8}$$

The first term of the right hand side is conveniently bounded in (5.5). We also use the same proof as for (5.5) to bound the second term :

$$\begin{aligned} &\left\||x|^2(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u - |x|^2(|v|^2 \star \frac{1}{|x|})v\right\|_{L^2} \\ \leq\ &\left\|(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})|x|^2(u - v)\right\|_{L^2} + \left\|((|u|^2 - |v|^2) \star \frac{1}{|x|})|x|^2v\right\|_{L^2} &(5.9)\\ \leq\ &C\|u\|_{L^2}\|\nabla u\|_{L^2}\|u - v\|_{H_2} + C\|v\|_{H_2}\left(\|\nabla u\|_{L^2} + \|\nabla v\|_{L^2}\right)\|u - v\|_{L^2} \\ \leq\ &C(\|u\|_{H^1}^2 + \|v\|_{H^1\cap H_2}^2)\|u - v\|_{H_2}\end{aligned}$$

Moreover

$$\begin{aligned}
&\|\Delta F(u)-\Delta F(v)\|_{L^2}\\
\leq\;& \left\|\Delta\left[(|u|^2\star\frac{1}{|x|})(u-v)\right]\right\|_{L^2}+\left\|\Delta\left[\left((|u|^2-|v|^2)\star\frac{1}{|x|}\right)v\right]\right\|_{L^2}\\
\leq\;& \left\|\Delta\left[(|u|^2\star\frac{1}{|x|})(u-v)\right]\right\|_{L^2}+\left\|\Delta\left[\left((|u|+|v|)||u|-|v||\star\frac{1}{|x|}\right)v\right]\right\|_{L^2}
\end{aligned}$$

However, for any arbitrary function $a$, $b$ and $c\in H^2$, we have

$$\Delta\left[(ab\star\frac{1}{|x|})c\right]=4\pi abc+2(b\nabla a\star\frac{1}{|x|})\nabla c+2(a\nabla b\star\frac{1}{|x|})\nabla c+(ab\star\frac{1}{|x|})\Delta c$$

and we thus obtain :

$$\left\|\Delta\left[(ab\star\frac{1}{|x|})c\right]\right\|_{L^2}\leq C\|a\|_{H^1}\|b\|_{H^1}\|c\|_{H^2}.$$

Using that result, it is easy to conclude :

$$\|\Delta F(u)-\Delta F(v)\|_{L^2}\;\leq\; C_F\left(\|u\|_{H^1}^2+\|v\|_{H^2}^2\right)\|u-v\|_{H^2}. \tag{5.10}$$

Then, using (5.8), (5.9) et (5.10), we finally prove (5.6) and $F$ is locally lipschitz in $H^2\cap H_2$. Therefore, taking $v=0$, we also get (5.7). $\square$

The proof of a local-in-time result is based on a Picard fixed point theorem and Theorem 3 and Lemma 5 are the main ingredients. We begin by fixing an arbitrary time $T>0$ and considering $\tau\in]0,T]$. We also consider the functional

$$\varphi: u\longmapsto U(\,.\,,0)u_0-i\int_0^{\cdot}U(\,.\,,s)F(u(s))\,ds,$$

where $U$ is the propagator given in Theorem 3, and the set

$$B=\{v\in L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2),\|v\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)}\leq 2M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}\}.$$

If $\tau>0$ is small enough, the functional $\varphi$ maps $B$ into itself and is a strict contraction in the Banach space $L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)$. Indeed, on the one hand, from estimate (5.7) of Lemma 5, if $u\in B$, we have for all $t\in[0,\tau]$ :

$$\begin{aligned}
\|\varphi(u)(t)\|_{H^2\cap H_2}\;\leq\;& \left\|U(t,0)u_0-i\int_0^t U(t,s)F(u(s))\,ds\right\|_{H^2\cap H_2}\\
\leq\;& M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}+\tau M_{T,\alpha,\rho}\|F(u)\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)}\\
\leq\;& M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}+\tau C_F M_{T,\alpha,\rho}\|u\|^2_{L^\infty(0,\tau;H^1)}\|u\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)}\\
\leq\;& M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}+8\tau C_F M^4_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^3_{H^2\cap H_2}.
\end{aligned}$$

Then, if we choose $\tau>0$ such that $8\tau C_F M^3_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2}<1$ we obtain $\|\varphi(u)\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)}\leq 2M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$ and $\varphi(u)$ belongs to $B$.

On the other hand, if $u \in B$ and $v \in B$, then for all $t$ in $[0, \tau]$ we have,

$$\|\varphi(u)(t) - \varphi(v)(t)\|_{H^2\cap H_2} = \left\| \int_0^t U(t,s)\left(F(u(s)) - F(v(s))\right)\, ds \right\|_{H^2\cap H_2}$$
$$\leq \; M_{T,\alpha,\rho} \int_0^t \|F(u(s)) - F(v(s))\|_{H^2\cap H_2}\, ds$$
$$\leq \; C_F M_{T,\alpha,\rho}\left( \|u\|^2_{L^\infty(0,\tau;H^1)} + \|v\|^2_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)}\right) \int_0^t \|u(s) - v(s)\|_{H^2\cap H_2}\, ds$$
$$\leq \; 8\tau C_F M^3_{T,\alpha,\rho} \|u_0\|^2_{H^2\cap H_2}\; \|u - v\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)},$$

with $8\tau C_F M^3_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} < 1$.

Therefore, we can deduce existence and uniqueness of the solution to the equation

$$u(t) = U(t,0)u_0 - i\int_0^t U(t,s)F(u(s))\, ds \tag{5.11}$$

in $B$, then in $L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)$ for $\tau > 0$ small enough. Moreover, $\partial_t u$ belongs to $L^\infty(0,\tau;L^2)$ since from equation (5.3), we can write

$$\partial_t u = i\Delta u + i\frac{u}{|x-a|} + iV_1 u - iF(u).$$

Indeed, $u \in L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)$ brings $F(u) \in L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)$ and $\Delta u \in L^\infty(0,\tau;L^2)$ and we can prove that $V_1 u \in L^\infty(0,\tau;L^2)$ and $\dfrac{u}{|x-a|} \in L^\infty(0,\tau;L^2)$ in the following way : it is clear that for all $t$ in $[0,\tau]$,

$$\|V_1(t)u(t)\|_{L^2} \leq \left\| \frac{V_1(t)}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty} \|u(t)\|_{H_2},$$

and from Hardy's inequality,

$$\left\| \frac{u(t)}{|x-a(t)|} \right\|_{L^2} \leq 2\|u(t)\|_{H^1}.$$

It is finally easy to prove that there exists a constant $C > 0$ depending on $\alpha$, $\rho$, $F$ and $T$ such that for all $t$ in $[0,\tau]$,

$$\|\partial_t u(t)\|_{L^2} \leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

The last point to prove is the uniqueness of the solution $u$ of (5.11) in the space $L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)\cap W^{1,\infty}(0,\tau;L^2)$. Let $u$ and $v$ be two solutions of (5.11) and $w$ equal to $u - v$. Then $w(0) = 0$ and

$$i\partial_t w + \Delta w + \frac{w}{|x-a|} + V_1 w = F(u) - F(v). \tag{5.12}$$

Calculating $Im\displaystyle\int_{\mathbb{R}} (5.12).\overline{w}(x)\, dx$ and using Lemma 5 we obtain

$$\frac{d}{dt}(\|w\|^2_{L^2}) \leq C\|w\|^2_{L^2}$$

and uniqueness follows by Gronwall lemma.

Hence the proof of uniqueness, existence and regularity of the solution of equation (5.3) in $\mathbb{R}^3 \times [0,\tau]$ for any time $\tau$ such that $8\tau C_F M^3_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} < 1$.

### 5.2.2 A priori Energy estimate

We will prove here an a priori energy estimate of the solution of equation (5.3) for any arbitrary time $T$. We set $\alpha_0 > 0$ and $\rho_0 > 0$ such that

$$\left\| \frac{da}{dt} \right\|_{L^1(0,T)} \leq \alpha_0 \ \text{ and } \ \left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} \leq \rho_0.$$

**Proposition 6.** *If $u$ is a solution of equation* (5.3) *in the space $W^{1,\infty}(0,T;L^2) \cap L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2)$, under assumption* (5.4) *for $a$ and $V_1$, then there exists a non-negative constant $C^0_{T,\alpha_0,\rho_0}$ depending on the time $T$, on $\rho_0$, $\alpha_0$ and on $\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$ such that for all $t$ in $[0,T]$,*

$$\|u(t)\|^2_{H^1\cap H_1} + \int_{\mathbb{R}^3} \left( |u(t,x)|^2 \star \frac{1}{|x|} \right) |u(t,x)|^2 \leq C^0_{T,\alpha_0,\rho_0}.$$

**Proof.** On the one hand, we multiply equation (5.3) by $\partial_t \overline{u}$, integrate over $\mathbb{R}^3$ and take the real part. After an integration by parts we obtain :

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u|^2 + Re \int_{\mathbb{R}^3} \frac{u\, \partial_t \overline{u}}{|x-a|} + Re \int_{\mathbb{R}^3} V_1 u\, \partial_t \overline{u} = +Re \int_{\mathbb{R}^3} (|u|^2 \star \frac{1}{|x|}) u\, \partial_t \overline{u}$$

which is equivalent to

$$-\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{1}{|x-a|} + V_1 \right) \partial_t(|u|^2) = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^3} (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})|u|^2.$$

Then,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left( \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u|^2 + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})|u|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{1}{|x-a|} + V_1 \right) |u|^2 \right) \\ = -\int_{\mathbb{R}^3} \left( \partial_t \frac{1}{|x-a|} + \partial_t V_1 \right) |u|^2. \qquad (5.13) \end{aligned}$$

On the other hand, since $V_1$ satisfies assumption $(5.4)$, we have

$$-\int_{\mathbb{R}^3} \partial_t V_1 |u|^2 \leq \left\| \frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty} \|u(t)\|^2_{H_1}$$

and from Hardy's inequality,

$$-\int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 \partial_t \frac{1}{|x-a|} \leq 4 \left| \frac{da}{dt}(t) \right| \|u(t)\|^2_{H^1}$$

In order to get an $H_1$-estimate of $u$, we then calculate the imaginary part of the product of equation (5.3) by $(1+|x|^2)\overline{u}(x)$, integrated over $\mathbb{R}^3$. This gives

$$\frac{d}{dt}\left( \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u|^2 \right) \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u|^2 + C \int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 |u|^2.$$

We define $E$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$\begin{aligned} E(t) \ = \ & \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(t,x)|^2\, dx + \lambda \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u(t,x)|^2\, dx \\ & + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \left( |u(t,x)|^2 \star \frac{1}{|x|} \right) |u(t,x)|^2 \end{aligned}$$

where $\lambda$ is a non-negative constant to be precised later. From now on, $C$ denotes various positive constants, independent of anything but $\lambda$. We obviously have :

$$\begin{aligned}\frac{dE(t)}{dt} &\leq \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(t)|}+V_1(t)\right)|u(t)|^2\right)\\ &\quad + C\left(1+\left|\frac{da}{dt}(t)\right|+\left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)E(t)\end{aligned}$$

and if we integrate over $(0,t)$, we obtain

$$\begin{aligned}E(t) &\leq \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(0)|}+|V_1(0)|\right)|u_0|^2+\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(t)|}+V_1(t)\right)|u(t)|^2\\ &+ C\int_0^t\left(1+\left|\frac{da}{dt}(s)\right|+\left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)E(s)\,ds+E(0)\end{aligned}$$

Using Cauchy-Schwarz, Hardy and Young's inequalities, we prove that for all $\eta>0$,

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|u(t)|^2}{|x-a(t)|} &\leq 2\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|u(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}}\\ &\leq \eta\|\nabla u(t)\|_{L^2}^2+\frac{1}{4\eta}\|u_0\|_{L^2}^2\end{aligned}$$

since it is easy to prove the conservation of the $L^2$-norm of $u$, and we also have

$$\int_{\mathbb{R}^3}V_1(t)|u(t)|^2\leq\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)}\|u(t)\|_{H_1}^2.$$

Moreover, $(1+|x|^2)^{-1}V_1\in W^{1,1}(0,T,L^\infty)$ and $W^{1,1}(0,T)\hookrightarrow C([0,T])$, then $(1+|x|^2)^{-1}V_1(0)\in L^\infty$ and we have for the same reasons as above,

$$\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(0)|}+|V_1(0)|\right)|u_0|^2\leq C_\rho\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2.$$

We also notice that

$$E(0)\leq C\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2+C\|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3.$$

Then, if we set $\eta=\dfrac{1}{2}$ and $\lambda=\dfrac{1}{2}+\left\|\dfrac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)}$ we get

$$\begin{aligned}E(t) &\leq C_\rho\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2+C\|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3+\frac{1}{2}\|u(t)\|_{H^1}^2\\ &+ \left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\|u(t)\|_{H_1}^2+C\int_0^t\left(1+\left|\frac{da}{dt}(s)\right|+\left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)E(s)\,ds.\end{aligned}$$

We define $F$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$\begin{aligned}F(t) &= \int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u(t,x)|^2\,dx+\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|u(t,x)|^2\,dx\\ &\quad+\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t,x)|^2\star\frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2\end{aligned}$$

and it is easy to see that we have, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\begin{array}{rcl} F(t) & \leq & C(\|u_0\|^2_{H^1\cap H_1} + \|u_0\|_{H^1}\|u_0\|^3_{L^2}) \\ & + & C\displaystyle\int_0^t \left(1 + \left|\frac{da}{dt}(s)\right| + \left\|\frac{\partial_t V_1(s)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right) F(s)\,ds. \end{array}$$

We obtain from Gronwall's lemma :

$$F(t) \leq C_T \exp\left(\int_0^t \beta(s)ds\right)\left(\|u_0\|^2_{H^1\cap H_1} + \|u_0\|_{H^1}\|u_0\|^3_{L^2}\right).$$

where $\beta = \left\|\dfrac{\partial_t V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty} + \left|\dfrac{da}{dt}\right| \in L^1(0,T)$.

Therefore, there exists a non-negative constant $C^0_{T,\alpha_0,\rho_0}$ depending on the time $T$, on the initial data $\|u_0\|_{H^1\cap H_1}$ and on $\alpha_0$, $\rho_0 > 0$, such that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\|u(t)\|^2_{H^1\cap H_1} + \int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t)|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)|u(t)|^2 \leq C^0_{T,\alpha_0,\rho_0}.$$

Hence the proof of Proposition 6. □

### 5.2.3 Global existence

Now, we can use Proposition 6 and equation (5.3) to obtain an a priori estimate of the solution in $W^{1,\infty}(0,T;L^2)\cap L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)$ for any arbitrary time $T$. Indeed, since equation (5.3) is equivalent to the integral equation

$$u(t) = U(t,0)u_0 - i\int_0^t U(t,s)F(u(s))\,ds,$$

we have, from Theorem 3 and from Lemma 5,

$$\begin{array}{rcl} \|u(t)\|_{H^2\cap H_2} & \leq & M_{T,\alpha,\rho}\,\|u_0\|_{H^2\cap H_2} + M_{T,\alpha,\rho}\displaystyle\int_0^t \|F(u(s))\|_{H^2\cap H_2}\,ds \\ & \leq & M_{T,\alpha,\rho}\,\|u_0\|_{H^2\cap H_2} + M_{T,\alpha,\rho}\displaystyle\int_0^t \|u(s)\|^2_{H^1}\,\|u(s)\|_{H^2\cap H_2}\,ds \\ & \leq & C^0_{T,\alpha,\rho}\left(1 + \displaystyle\int_0^t \|u(s)\|_{H^2\cap H_2}\,ds\right) \end{array}$$

where $C^0_{T,\alpha,\rho} > 0$ is a generic constant depending on the time $T$, on $\rho$, $\alpha$ and on $\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$. We obtain from Gronwall lemma and from equation (5.3), that

$$\forall t \in [0,T],\ \ \|u(t)\|_{H^2\cap H_2} + \|\partial_t u(t)\|_{L^2} \leq C^0_{T,\alpha,\rho}$$

Now, in view of SEGAL's theorem [43], the local solution we obtained previously exists globally because we have a uniform bound on the norm

$$\|u(t)\|_{H^2\cap H_2} + \|\partial_t u(t)\|_{L^2}.$$

Hence the proof of Theorem 4. □

## 5.3 Proof of Theorem 1 for a small time $\tau$

The position of the nucleus is now unknown but solution of classical dynamics. We recall the system we are concerned with, for $\tau \in (0,T)$ :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,\tau) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2a}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \dfrac{1}{|x-a|}\,dx - \nabla V_1(a), & \text{in } (0,\tau) \\ a(0) = a_0, \ \ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0. & \end{cases}$$

We are going to choose $\tau$ small enough in this section in order to prove first existence of solutions for this system. In the sequel we make assumption (5.2) :

$$\begin{aligned} &(1+|x|^2)^{-1}V_1 \in L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ &(1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 \in L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)), \\ &(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 \in L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \ \text{ and} \\ &\nabla V_1 \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right). \end{aligned}$$

### 5.3.1 Structure of the proof of local existence

Let $\alpha > 0$ and $\rho > 0$ be such that

$$\alpha = \max(|v_0|,1) \ \text{ and}$$

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho.$$

We define the following subsets

$$\mathcal{B}_{\mathsf{e}} = \Big\{ u \in L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)\cap W^{1,\infty}(0,\tau;L^2) / \\ \|u\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)} \leq 2M_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|_{H^2\cap H_2} \Big\}$$

and

$$\mathcal{B}_{\mathsf{n}} = \left\{ a \in W^{2,1}(0,\tau) / \left\| \frac{d^2a}{dt^2} \right\|_{L^1(0,\tau)} \leq \alpha \right\}$$

The indexes e and n stand for “electrons” and “nucleus”, while $u(x,t)$ correspond to the wave function of the electrons and $a(t)$ to the position of the nucleus.

We will prove here a local-in-time existence result for system (5.1), using a Schauder fixed point theorem. One can find a similar result in reference [10], where in a first time, $V_1 = 0$. We shall need the following lemmas, whose proofs are postponed until the next subsections.

On the one hand, we consider the wave function of the electrons as known and the second order differential equation which modelize the movement of the nucleus is to be solved :

**Lemma 7.** *Let $u_0 \in H^2 \cap H_2$, $a_0$, $v_0 \in \mathbb{R}$ and let $\tau > 0$ be small enough. We set $u \in \mathcal{B}_{\mathsf{e}}$ and we consider the equation*

$$m\,\frac{d^2 z}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \frac{x-z}{|x-z|^3}\,dx - \nabla V_1(z) \;\text{ in } (0,\tau) \tag{5.14}$$

*with initial data $z(0) = a_0$ and $\dfrac{dz}{dt}(0) = v_0$. Then equation* (5.14) *has a unique solution $z \in C([0,\tau])$ such that $z \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$.*

On the other hand, we know the position of the nucleus at any moment and we use the previous section to prove :

**Lemma 8.** *Let $a_0$, $v_0 \in \mathbb{R}$ and $u_0 \in H^2 \cap H_2$, and let $\tau > 0$ be small enough. We set $y \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ and we consider the equation*

$$i\partial_t u + \Delta u + \frac{u}{|x-y|} + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u \;\text{ in } \mathbb{R}^3 \times (0,\tau) \tag{5.15}$$

*with initial data $u(0) = u_0$. Then equation* (5.15) *has a unique solution $u \in L^\infty(0,\tau; H^2 \cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,\tau; L^2)$ such that $u$ belongs to $\mathcal{B}_{\mathsf{e}}$.*

From Lemma 7 and 8, the following mappings are well defined :

$$\begin{array}{rccc} \phi: & \mathcal{B}_{\mathsf{e}} & \longrightarrow & \mathcal{B}_{\mathsf{n}} \\ & u & \longmapsto & z, \end{array} \qquad \begin{array}{rccc} \psi: & \mathcal{B}_{\mathsf{n}} & \longrightarrow & \mathcal{B}_{\mathsf{e}} \\ & y & \longmapsto & u \end{array}$$

and we finally consider the application $\mathcal{G} = \phi \circ \psi$ which maps $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ into itself, where $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ is convex and bounded. We will also prove the following lemma later on.

**Lemma 9.** *The application $\mathcal{G} : \mathcal{B}_{\mathsf{n}} \to \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ is continuous and $\mathcal{G}(\mathcal{B}_{\mathsf{n}})$ is compact in $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$.*

Therefore, we will be allowed to apply the Schauder fixed point theorem and if $y \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ then, with $u = \psi(y)$ and $z = \mathcal{G}(y)$, it satisfies

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-y|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,\tau) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\dfrac{d^2 z}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-z|}\,dx - \nabla V_1(z), & \text{in } (0,\tau) \\ z(0) = a_0,\ \dfrac{dz}{dt}(0) = v_0. & \end{cases}$$

Then, there exists $a \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ such that $a = \mathcal{G}(a)$. Therefore $(\psi(a), a)$ is solution of (5.1) with $\psi(a) \in \mathcal{B}_{\mathsf{e}}$ and $a \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$. The proof of Theorem 1 for a small time $\tau$ will then be completed with the proofs of Lemma 7, Lemma 8 and Lemma 9. $\square$

### 5.3.2 Second order differential equation, proof of Lemma 7

We are considering an ordinary differential equation of type

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = G(t,z)$$

with two initial conditions. In order to construct the proof of Lemma 7, we need to prove a general lemma about existence and regularity of solution for this type of equation and to study the right hand side

$$G(t,z) = \int_{\mathbb{R}^3} -|u(t,x)|^2 \nabla \left( \frac{1}{|x-z|} \right) dx - \nabla V_1(t,z)$$

to make sure we can apply this general lemma to our situation. Although it is a rather classical result, we give a short proof of the following result

**Lemma 10.** *Let $\tau > 0$. We consider the differential equation*

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\varphi}{dt^2} = G(t,\varphi) & \text{in } (0,\tau) \\ \varphi(0) = \varphi_0, \ \dfrac{d\varphi}{dt}(0) = \psi_0. \end{cases} \tag{5.16}$$

*If $\tau$ is small enough and if $G \in L^1\left(0,\tau; W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right)$ then there exists a unique solution $\varphi \in C([0,\tau])$ to equation $(5.16)$.*

**Proof :** We consider the application $\Phi$ on $C([0,\tau])$ defined by

$$\Phi(\varphi)(t) = \varphi_0 + \psi_0 t + \int_0^t (t-s) G(s,\varphi(s))\, ds, \ \ \forall t \in [0,\tau]. \tag{5.17}$$

We will use a Picard fixed point theorem in the space $C([0,\tau])$ in order to prove existence and uniqueness of a solution to equation (5.17).

Let $R > 4$ be such that $|\varphi_0| \le \dfrac{R}{2}$. We also assume that $\tau > 0$ is small enough such that we have

$$\begin{cases} \tau \max(|\psi_0|, 1) < 1 \\ \tau \|G\|_{L^1(0,\tau;W^{1,\infty}(B_R))} < 1 \end{cases} \tag{5.18}$$

where $B_R = \{x \in \mathbb{R}^3, \ |x| \le R\}$.

- Let $\varphi \in C([0,\tau])$ be such that $\|\varphi\|_{C([0,\tau])} = \sup_{t\in[0,\tau]} |\varphi(t)| \le R$. Then, for all $t$ in $[0,\tau]$ we can write

$$\begin{aligned} |\Phi(\varphi)(t)| &\le |\varphi_0| + |\psi_0 t| + \int_0^t (t-s)|G(s,\varphi(s))|\, ds \\ &\le \frac{R}{2} + \tau|\psi_0| + \tau \int_0^\tau \|G(s)\|_{W^{1,\infty}(B_R)}\, ds \\ &\le \frac{R}{2} + \tau|\psi_0| + \tau\|G\|_{L^1(0,\tau;W^{1,\infty}(B_R))} \\ &\le \frac{R}{2} + 1 + 1 \le R \end{aligned}$$

and we obtain $\|\Phi(\varphi)\|_{C([0,\tau])} \le R$.

**-** We ensure here that $\Phi$ is a strict contraction in $C([0,\tau])$. Let $\|\varphi_1\|_{C([0,\tau])} \leq R$ and $\|\varphi_2\|_{C([0,\tau])} \leq R$. We have for all $t$ in $[0,\tau]$,

$$\begin{aligned}
|(\Phi(\varphi_1) - \Phi(\varphi_2))(t)| &\leq \int_0^t (t-s)\,|G(s,\varphi_1(s)) - G(s,\varphi_2(s))|\,ds \\
&\leq \tau \int_0^\tau \|G(s)\|_{W^{1,\infty}(B_R)}\,|\varphi_1(s) - \varphi_2(s)|\,ds \\
&\leq \tau \|G\|_{L^1(0,\tau;W^{1,\infty}(B_R))} \|\varphi_1 - \varphi_2\|_{C([0,\tau])}
\end{aligned}$$

and since from (5.18), $\tau > 0$ is small enough such that $\tau\|G\|_{L^1(0,\tau;W^{1,\infty}(B_R))} < 1$, then $\Phi$ is a strict contraction.

**-** We apply the Picard fixed point theorem to application $\Phi$. Thus, if $\tau > 0$ satisfies (5.18), there exists a unique $\varphi \in C([0,\tau])$ such that $\Phi(\varphi) = \varphi$. Moreover, equation (5.17) is an integral equation equivalent to (5.16), hence the end of the proof of Lemma 10. $\square$

**Proof of Lemma 7 :**

From Lemma 10, it is easy to deduce that if the mapping

$$(t,z) \mapsto \int_{\mathbb{R}^3} |u(t,x)|^2 \frac{x-z}{|x-z|^3}\,dx - \nabla V_1(t,z)$$

belongs to $L^1(0,\tau;W^{1,\infty}_{\text{loc}})$ then equation (5.14) of Lemma 7 has a unique solution in $C([0,\tau])$. Since we assume from the very beginning that $\nabla V_1 \in L^2(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}})$, we only have to work on $f(t,z) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u(t,x)|^2 \frac{x-z}{|x-z|^3}\,dx$.

**Lemma 11.** *We set* $u_1,\ u_2 \in H^2$ *and* $g(z) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u_1(x)\overline{u}_2(x)}{|x-z|^3}(x-z)\,dx$. *Then* $g \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ *and there exists a real constant* $C > 4$ *such that*

$$\begin{aligned}
\|g\|_{L^\infty} &\leq C\|\nabla u_1\|_{L^2}\|\nabla u_2\|_{L^2} \\
\|Dg\|_{L^\infty} &\leq C\|u_1\|_{H^2}\|u_2\|_{H^2}
\end{aligned}$$

**Proof :** From Cauchy-Schwarz and Hardy's inequality, for all $z \in \mathbb{R}^3$ we have,

$$\begin{aligned}
|g(z)| &\leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_1(x)||u_2(x)|}{|x-z|^2}\,dx \\
&\leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_1(x)|^2}{|x-z|^2}\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_2(x)|^2}{|x-z|^2}\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq 4\|\nabla u_1\|_{L^2}\|\nabla u_2\|_{L^2}
\end{aligned}$$

Therefore, $\|g\|_{L^\infty} \leq C\|\nabla u_1\|_{L^2}\|\nabla u_2\|_{L^2}$. Then we set, for all $z$ in $\mathbb{R}^3$,

$$h(z) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{u_1(x)\,\overline{u}_2(x)}{|x-z|}\,dx.$$

The function $h$ is well defined since $|h(z)| \leq C\|u_1\|_{L^2}\|\nabla u_2\|_{L^2}$ and one can notice that $g = \nabla h$ and $h = (u_1\overline{u}_2) \star \dfrac{1}{|x|}$. Then, we only have to prove that $h$ belongs to

$W^{2,\infty}(\mathbb{R}^3)$ with $\|D^2h\|_{L^\infty} \leq C\|u_1\|_{H^2}\|u_2\|_{H^2}$. We set $\partial_i = \dfrac{\partial}{\partial x_i}$ and from Cauchy Schwarz and Hardy's inequality, for all $i, j = 1, 2, 3$ we get :

$$\begin{aligned}
\|\partial_i h\|_{L^\infty} &\leq \left\|\partial_i(u_1\overline{u}_2) \star \frac{1}{|x|}\right\|_{L^\infty} \\
&\leq \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial_i u_1(y)\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} + \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u_1(y)\partial_i\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} \\
&\leq 4\|\nabla u_1\|_{L^2}\|\nabla u_2\|_{L^2}
\end{aligned}$$

and in the same way,

$$\begin{aligned}
\|\partial_i\partial_j h\|_{L^\infty} &\leq \left\|\partial_i\partial_j(u_1\overline{u}_2) \star \frac{1}{|x|}\right\|_{L^\infty} \\
&\leq \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial_i\partial_j u_1(y)\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} + \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u_1(y)\partial_i\partial_j\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} \\
&\quad + \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial_i u_1(y)\partial_j\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} + \left\|\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial_j u_1(y)\partial_i\overline{u}_2(y)}{|x-y|}\,dy\right\|_{L^\infty} \\
&\leq 2\|u_1\|_{H^2}\|\nabla u_2\|_{L^2} + 2\|\nabla u_1\|_{L^2}\|u_2\|_{H^2} + 8\|\nabla u_1\|_{H^1}\|\nabla u_2\|_{H^1} \\
&\leq 12\|u_1\|_{H^2}\|u_2\|_{H^2}.
\end{aligned}$$

Therefore, $h \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^3)$ and $g \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ with

$$\|Dg\|_{L^\infty} \leq C\|u_1\|_{H^2}\|u_2\|_{H^2},$$

hence the proof of Lemma 11. □

Thereafter, setting $u(t) = u_1 = u_2$, we get $f(t,z) = g(z)$ and we proved that $f(t) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ with $\|f(t)\|_{W^{1,\infty}} \leq C\|u(t)\|_{H^2}^2$. Then,

$$\|f\|_{L^\infty(0,T;W^{1,\infty})} \leq C\|u\|^2_{L^\infty(0,T;H^2)} \leq 4CM^2_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2}$$

and $f \in L^\infty(0,T;W^{1,\infty})$. Thus, if $\tau > 0$ is small enough, we have proved the existence of a unique solution $z \in C([0,\tau])$ for equation (5.14). More precisely, in this particular situation of equation (5.16) where the initial conditions are $\varphi(0) = a_0$ and $\dfrac{d\varphi}{dt}(0) = v_0$ and the right hand side is $G : (t,\varphi) \mapsto \dfrac{1}{m}\left(f(t,\varphi) - \nabla V_1(t,\varphi)\right)$, we obtain that actually, if $\tau > 0$ is small enough such that we have

$$\left\{\begin{array}{l} \tau\alpha < 1 \\ \dfrac{4C}{m}\tau M^2_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} + \dfrac{\sqrt{\tau}}{m}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} < \alpha, \end{array}\right. \tag{5.19}$$

where we recall that $\alpha = \max(|v_0|, 1)$, $R \geq \max(2|a_0|, 4)$ and $C > 4$, then assumption (5.18) is satisfied.

Eventually, in order to end the proof of Lemma 7, we only have to check that $z = \phi(u)$ belongs to $\mathcal{B}_\mathsf{n}$. We take $u \in \mathcal{B}_\mathsf{e}$ and we will prove here that

$$z = \phi(u) \in W^{2,1}(0,\tau) \text{ with } \left\|\frac{d^2z}{dt^2}\right\|_{L^1(0,\tau)} \leq \alpha.$$

We already have $z \in C([0,\tau])$ and $R$ is such that $\|z\|_{C([0,\tau])} \leq R$. We recall equation (5.14) :

$$m\,\frac{d^2z}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \frac{x-z}{|x-z|^3}\,dx - \nabla V_1(z) = f(z) - \nabla V_1(z)$$

and since $f \in L^\infty(0,T;W^{1,\infty})$ and $\nabla V_1 \in L^2(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}})$, we obtain $\dfrac{d^2z}{dt^2} \in L^2(0,\tau)$, thus $z \in W^{2,2}(0,\tau) \subset W^{2,1}(0,\tau)$. Moreover,

$$\begin{aligned} \left|\frac{d^2z}{dt^2}(t)\right| &\leq \frac{1}{m}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x,t)|^2}{|x-z(t)|^2}\,dx + \frac{1}{m}|\nabla V_1(t,z(t))| \\ &\leq \frac{4}{m}\|\nabla u\|^2_{L^\infty(0,\tau;L^2)} + \frac{1}{m}\|\nabla V_1(t)\|_{W^{1,\infty}(B_R)}. \end{aligned}$$

Using Cauchy-Schwarz inequality and the fact that $u \in \mathcal{B}_{\mathsf{e}}$, we get

$$\begin{aligned} \left\|\frac{d^2z}{dt^2}\right\|_{L^1(0,\tau)} &\leq \frac{4}{m}\tau\|\nabla u\|^2_{L^\infty(0,\tau;L^2)} + \frac{1}{m}\int_0^\tau \|\nabla V_1(s)\|_{W^{1,\infty}(B_R)}\,ds \\ &\leq \frac{4}{m}\tau\|\nabla u\|^2_{L^\infty(0,\tau;L^2)} + \frac{\sqrt{\tau}}{m}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \\ &\leq \frac{16}{m}\tau M^2_{T,\alpha,\rho}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} + \frac{\sqrt{\tau}}{m}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \end{aligned}$$

and if we choose $\tau > 0$ small enough to have (5.19), we obtain $\left\|\dfrac{d^2z}{dt^2}\right\|_{L^1(0,\tau)} \leq \alpha$ which means $z \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ and the proof of Lemma 7 is complete. □

### 5.3.3 Nonlinear Schrödinger equation, proof of Lemma 8

We already proved in section 5.2 that under assumption (5.4) for $V_1$ and if $a$ belongs to $W^{2,1}(0,T)$, then equation (5.3) :

$$i\partial_t u + \Delta u + \frac{u}{|x-a(t)|} + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{x})u \ \text{ in } \ \mathbb{R}^3 \times (0,T)$$

has a unique solution

$$u \in L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)$$

such that $u(0) = u_0 \in H^2 \cap H_2$ for any arbitrary time $T > 0$. The proof is based upon an existence and regularity result for the linear equation and on a fixed point argument. Fortunately, if $y \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ then $y \in W^{2,1}(0,\tau)$ and we obtain that equation (5.15) with initial condition $u(0) = u_0 \in H^2 \cap H_2$

$$i\partial_t u + \Delta u + \frac{u}{|x-y|} + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{x})u \ \text{ in } \ \mathbb{R}^3 \times (0,\tau)$$

has a unique solution $u \in L^\infty(0,\tau;H^2 \cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,\tau;L^2)$.

Following the proof of the local existence of a solution to equation (5.3) in paragraph 5.2.1, since $y \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ implies

$$\left\| \frac{dy}{dt} \right\|_{L^\infty(0,\tau)} \leq \alpha,$$

then, as soon as $8\tau C_F M^3_{T,\alpha,\rho} \|u_0\|^2_{H^2 \cap H_2} \leq 1$, we get

$$\|u\|_{L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)} \leq 2M_{T,\alpha,\rho} \|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

This means $u \in \mathcal{B}_{\mathsf{e}}$ if $\tau$ is small enough. Hence the proof of Lemma 8. □

### 5.3.4 Continuity and compactness, proof of Lemma 9

**First step -** Continuity of $\mathcal{G}$.

We consider $y \in \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ and a sequence $(y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ of elements of $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ such that

$$y_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} y \text{ in } W^{2,1}(0,\tau).$$

We aim at proving that

$$\mathcal{G}(y_n) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \mathcal{G}(y) \text{ in } W^{2,1}(0,\tau).$$

We recall that $\mathcal{G} = \phi \circ \psi$ where

$$\begin{array}{rccc} \phi: & \mathcal{B}_{\mathsf{e}} & \longrightarrow & \mathcal{B}_{\mathsf{n}} \\ & u & \longmapsto & z, \end{array} \qquad \begin{array}{rccc} \psi: & \mathcal{B}_{\mathsf{n}} & \longrightarrow & \mathcal{B}_{\mathsf{e}} \\ & y & \longmapsto & u \end{array}$$

and we set

$$\begin{array}{lcll} u & = & \psi(y), & \\ z & = & \mathcal{G}(y) = \phi(u), & \\ u_n & = & \psi(y_n), & \forall n \in \mathbb{N}, \\ z_n & = & \mathcal{G}(y_n) = \phi(u_n), & \forall n \in \mathbb{N}. \end{array}$$

Then, $z$ and $z_n$ satisfy on $(0,\tau)$ the equations

$$m\,\frac{d^2 z}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \left( \frac{1}{|x-z|} \right) dx - \nabla V_1(z), \text{ and}$$

$$m\,\frac{d^2 z_n}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} -|u_n(x)|^2 \nabla \left( \frac{1}{|x-z_n|} \right) dx - \nabla V_1(z_n),$$

and we will prove that $z_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} z$ in $W^{2,1}(0,\tau)$.

Since $y$ and $y_n$ belong to $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ for all $n \in \mathbb{N}$, then $u$ and $u_n$ belong to $\mathcal{B}_{\mathsf{e}}$ for all $n \in \mathbb{N}$. It implies that $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is bounded in $L^\infty(0,\tau; H^2 \cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,\tau;L^2)$ and thus, up to a subsequence, we get the strong convergence

$$u_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} u \text{ in } L^\infty(0,\tau;H^1_{\text{loc}}). \tag{5.20}$$

We use here the following result of J. SIMON [44] (Theorem 5) :

**Lemma 12.** *Let $X,\ B$ and $Y$ be Banach spaces and $p \in [1,\infty]$.*
*We assume that $X \hookrightarrow B \hookrightarrow Y$ with compact embedding $X \hookrightarrow B$.*
*If $\{f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^p(0,T;X)$ and if $\{\partial_t f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^p(0,T;Y)$ then $\{f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is relatively compact in $L^p(0,T;B)$ (and in $C([0,T];B)$ if $p = \infty$).*

In the same way, we have $z$ and $z_n$ belonging to $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ for all $n \in \mathbb{N}$ (since $\phi(\mathcal{B}_{\mathsf{e}}) = \mathcal{B}_{\mathsf{n}}$) and $(z_n)_{n\in\mathbb{N}}$ bounded in $W^{2,1}(0,\tau)$ implies, up to a subsequence, that

$$z_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} z \ \text{ in } W^{1,1}(0,\tau). \tag{5.21}$$

We notice that $z_n - z$ satisfies

$$\begin{aligned}\frac{d^2(z_n-z)}{dt^2} \quad &= \quad \frac{1}{m}\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(x)|^2\nabla\frac{1}{|x-z|} - |u_n(x)|^2\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\right)dx \\ &\quad + \frac{1}{m}\ \left(\nabla V_1(z) - \nabla V_1(z_n)\right).\end{aligned}$$

We first remark that since $\nabla V_1 \in L^2(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}})$, then for almost every $t$ in $[0,\tau]$, $\nabla V_1(t)$ is locally Lipschitz. And since there exists $R > 0$ such that we have $\|z\|_{C([0,\tau])} \le R$ and for all $n \in \mathbb{N}$, $\|z_n\|_{C([0,\tau])} \le R$ (as $z$ and $z_n$ belong to $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$), we obtain

$$|\nabla V_1(z) - \nabla V_1(z_n)| \le \|\nabla V_1(t)\|_{W^{1,\infty}(B_R)}|z_n(t) - z(t)|.$$

We also have

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{u}\,\nabla\frac{1}{|x-z|}\,dx - \int_{\mathbb{R}^3} u_n\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx \\ =\ &\int_{\mathbb{R}^3}(u-u_n)\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx - \int_{\mathbb{R}^3} u\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx \\ &+\int_{\mathbb{R}^3}\overline{(u-u_n)}u\,\nabla\frac{1}{|x-z|}\,dx + \int_{\mathbb{R}^3}\overline{u}_n u\,\nabla\frac{1}{|x-z|}\,dx \\ =\ &\int_{\mathbb{R}^3}(u-u_n)\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx + \int_{\mathbb{R}^3}\overline{(u-u_n)}u\,\nabla\frac{1}{|x-z|}\,dx \\ &+\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{u}_n\,\left(\nabla\frac{1}{|x-z|} - \nabla\frac{1}{|x-z_n|}\right)dx.\end{aligned}$$

On the one hand, we can prove that there exists a constant $C > 0$ such that

$$\left|\int_{\mathbb{R}^3} u(x,t)\overline{u}_n(x,t)\,\left(\nabla\frac{1}{|x-z(t)|} - \nabla\frac{1}{|x-z_n(t)|}\right)dx\right| \le C|z_n(t) - z(t)|.$$

Indeed, using Lemma 11, since $g$ is lipschitz (here, $u_1 = u(t)$ and $u_2 = u_n(t)$), we have for all $t$ in $[0,\tau]$,

$$\begin{aligned}&\left|\int_{\mathbb{R}^3}\frac{u(x,t)\overline{u}_n(x,t)}{|x-z_n(t)|^3}(x-z_n(t))\,dx - \int_{\mathbb{R}^3}\frac{\overline{u}_n(x,t)u(x,t)}{|x-z(t)|^3}(x-z(t))\,dx\right| \\ &\qquad = |g(z_n(t)) - g(z(t))| \le C\|u(t)\|_{H^2}\|u_n(t)\|_{H^2}|(z_n-z)(t)|,\end{aligned}$$

and since $u$ and $u_n$ belong to $\mathcal{B}_{\mathsf{e}}$, $\|u(t)\|_{H^2}$ and $\|u_n(t)\|_{H^2}$ are bounded independently of $n$.

On the other hand, we can deal with both of the two other terms in the same way. For instance, we have in fact for any $R > 0$, from Hardy's inequality,

$$\begin{aligned}
&\left|\int_{\mathbb{R}^3} (u-u_n)(x,t)\overline{u}_n(x,t)\,\nabla\frac{1}{|x-z_n(t)|}\,dx\right| \\
\leq\ & \int_{B(0,R)} \frac{|(u-u_n)(x,t)||u_n(x,t)|}{|x-z_n(t)|^2}\,dx + \int_{B(0,R)^C} \frac{|(u-u_n)(x,t)||u_n(x,t)|}{|x-z_n(t)|^2}\,dx \\
\leq\ & C\|(u-u_n)(t)\|_{H^1(B(0,R))}\|u_n(t)\|_{H^1} + \frac{C}{R^2}\|u_n(t)\|_{L^2}(\|u_n(t)\|_{L^2} + \|u(t)\|_{L^2})
\end{aligned}$$

and since $u$ and $u_n$ belong to $\mathcal{B}_{\mathsf{e}}$ for all $n \in \mathbb{N}$, then

$$\left|\int_{\mathbb{R}^3} (u-u_n)\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx\right| \leq C\|u-u_n\|_{L^\infty(0,\tau;H^1(B(0,R)))} + \frac{C}{R^2}.$$

Thus, for all $\varepsilon > 0$, there exists $R > 0$ such that $\dfrac{C}{R^2} \leq \dfrac{\varepsilon}{2}$ and from (5.20) there exists $N_0 \in \mathbb{N}$ such that

$$C\|u-u_n\|_{L^\infty(0,\tau;H^1(B(0,R))} \leq \frac{\varepsilon}{2},\ \forall n \geq N_0.$$

We get :

$$\forall\varepsilon > 0,\ \exists N_0 \in \mathbb{N},\ \forall n \geq N_0,\ \left|\int_{\mathbb{R}^3} (u-u_n)\overline{u}_n\,\nabla\frac{1}{|x-z_n|}\,dx\right| \leq \varepsilon.$$

Eventually, we obtain that for all $t$ in $(0,\tau)$ and for all $\varepsilon > 0$,

$$\left|\left(\frac{d^2z_n}{dt^2} - \frac{d^2z}{dt^2}\right)(t)\right| \leq C(1 + \|\nabla V_1(t)\|_{W^{1,\infty}(B_R)})|z_n(t) - z(t)| + 2\varepsilon,$$

then

$$\left\|\frac{d^2z_n}{dt^2} - \frac{d^2z}{dt^2}\right\|_{L^1(0,\tau)} \leq C_\tau(1 + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))})\|z_n - z\|_{L^\infty(0,\tau)} + 2\varepsilon.$$

Therefore, since we have the strong convergence (5.21) and $W^{1,1}(0,\tau) \hookrightarrow L^\infty(0,\tau)$, we obtain

$$\frac{d^2z_n}{dt^2} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \frac{d^2z}{dt^2}\ \text{ in } L^1(0,\tau)$$

what means $\mathcal{G}(y_n) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \mathcal{G}(y)$ in $W^{2,1}(0,\tau)$ and $\mathcal{G}$ is continuous.

**Second step -** Compactness of $\mathcal{G}(\mathcal{B}_{\mathsf{n}})$ in $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$.

We consider a sequence $(y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ of elements of $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$ and we aim at proving that $z_n = \mathcal{G}(y_n)$ is precompact in $\mathcal{B}_{\mathsf{n}}$. If we set

$$f_n(t,z) = \int_{\mathbb{R}^3} |u_n(t,x)|^2\,\frac{x-z(t)}{|x-z(t)|^3}\,dx,$$

then we have

$$\frac{d^2z_n}{dt^2}(t) = f_n(t,z_n(t)) - \nabla V_1(t,z_n(t)).$$

We will first prove that $\tilde{f}_n : t \mapsto f_n(t, z_n(t)) = \tilde{f}_n(t)$ is bounded in $C^{0,\frac{1}{2}}([0,\tau])$ as soon as $z_n \in \mathcal{B}_\mathsf{n}$. Let $t$, $h$ in $[0,\tau]$ be such that $t+h \in [0,\tau]$. Using again Lemma 11, we can write :

$$\begin{aligned}
\left|\tilde{f}_n(t+h) - \tilde{f}_n(t)\right| &= |f(t+h, z_n(t+h)) - f(t, z_n(t))| \\
&\leq \left|\int_{\mathbb{R}^3} (u_n(t+h) - u_n(t))\overline{u}_n(t+h)\, \nabla \frac{1}{|x - z_n(t+h)|}\, dx\right| \\
&\quad + \left|\int_{\mathbb{R}^3} (\overline{u}_n(t+h) - \overline{u}_n(t))u_n(t)\, \nabla \frac{1}{|x - z_n(t)|}\, dx\right| \\
&\quad + \left|\int_{\mathbb{R}^3} u_n(t)\overline{u}_n(t+h)\, \left(\nabla \frac{1}{|x - z_n(t)|} - \nabla \frac{1}{|x - z_n(t+h)|}\right) dx\right| \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_n(t+h) - u_n(t)||u_n(t+h)|}{|x - z_n(t+h)|^2}\, dx \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_n(t+h) - u_n(t)||u_n(t)|}{|x - z_n(t)|^2}\, dx \\
&\quad + C\|u_n(t)\|_{H^2}\|u_n(t+h)\|_{H^2}|(z_n(t+h) - z_n(t)| \\
&\leq C\|u_n\|_{L^\infty(0,\tau;H^1)}\|u_n(t+h) - u_n(t)\|_{H^1} \\
&\quad + C\|u_n\|^2_{L^\infty(0,\tau;H^2)}|(z_n(t+h) - z_n(t)|.
\end{aligned}$$

Moreover, on the one hand, since $(z_n)_{n\in\mathbb{N}}$ belongs $\mathcal{B}_\mathsf{n}$, we have

$$|(z_n(t+h) - z_n(t)| \leq h \left\|\frac{dz_n}{dt}\right\|_{L^\infty(0,\tau)} \leq C_{\tau,\alpha} h^{\frac{1}{2}}$$

and on the other hand, using the Fourier transform, we can prove that

$$\left\{\begin{array}{l} \|u_n(t+h) - u_n(t)\|_{L^2} \leq h\|\partial_t u_n\|_{L^\infty(0,\tau;L^2)} \\ \|u_n(t+h) - u_n(t)\|_{H^2} \leq 2\|u_n\|_{L^\infty(0,\tau;H^2)} \end{array}\right.$$

imply

$$\|u_n(t+h) - u_n(t)\|_{L^2} \leq C^0_{\tau,\alpha,\rho} h^{\frac{1}{2}}$$

where $C^0_{\tau,\alpha,\rho} > 0$ only depends on $\tau$, $\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$, $\rho$ and $\alpha$. Therefore,

$$\left|\tilde{f}_n(t+h) - \tilde{f}_n(t)\right| \leq C^0_{\tau,\alpha,\rho} h^{\frac{1}{2}} \;\text{ and }\; \tilde{f}_n \in C^{0,\frac{1}{2}}([0,\tau])$$

and we obtain $(\tilde{f}_n)_{n\in\mathbb{N}}$ bounded in $C^{0,\frac{1}{2}}([0,\tau])$. In addition, since $(z_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is bounded in $W^{2,1}(0,\tau)$ and since $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is bounded in $\mathcal{B}_\mathsf{e}$, we have, up to a subsequence,

$$z_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} z \;\text{ in }\; W^{1,1}(0,\tau) \cap C([0,T])$$

and

$$u_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} u \;\text{ in }\; L^\infty(0,\tau; H^1_{\text{loc}}).$$

Thereafter, the fact that we have the compact injection

$$C^{0,\frac{1}{2}}(0,\tau) \hookrightarrow C([0,\tau])$$

(from Ascoli's theorem), implies, up to a subsequence, the strong convergence

$$\tilde{f}_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \tilde{f} \;\text{ in }\; C([0,\tau]) \;\text{ where }\; \tilde{f}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} |u(t,x)|^2 \frac{x - z(t)}{|x - z(t)|^3}\, dx.$$

Finally, since $\nabla V_1 \in L^2(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}})$ and $z_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} z$ in $L^\infty(0,\tau)$, we also obtain, from

$$\|\nabla V_1(z_n) - \nabla V_1(z)\|_{L^2(0,T)} \leq \|\nabla V_1(t)\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B(0,\alpha)))}\|z_n - z\|_{L^\infty(0,\tau)}$$

that

$$\nabla V_1(z_n) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \nabla V_1(z) \text{ in } L^2(0,\tau).$$

Eventually, $\left(\dfrac{d^2 z_n}{dt^2}\right)_{n\in\mathbb{N}}$ converges in $L^2(0,\tau)$ as the sum of $\left(\tilde{f}_n\right)_{n\in\mathbb{N}}$ and $(\nabla V_1(z_n))_{n\in\mathbb{N}}$. Then, $(z_n = \mathcal{G}(y_n))_{n\in\mathbb{N}}$ is precompact in $W^{2,2}(0,\tau)$ thus in $\mathcal{B}_\mathsf{n}$.

Hence the end of the proof of Lemma 9. $\square$

## 5.4 Global existence of solutions

We recall the coupled system (5.1) for an arbitrary time $T$ :

$$i\partial_t u + \Delta u + \frac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u, \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \tag{5.22}$$
$$u(0) = u_0, \quad \text{on } \mathbb{R}^3$$
$$m\,\frac{d^2 a}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx - \nabla V_1(a), \quad \text{in } (0,T) \tag{5.23}$$
$$a(0) = a_0,\;\; \partial_t a(0) = v_0$$

and we consider a solution $(u,a)$ in $W^{1,\infty}(0,T;L^2)\cap L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)\times W^{2,1}(0,T)$. We will prove here Proposition 2.

The global approach is the same as for the a priori estimate of the energy for the non-linear Schrödinger equation with $a(t)$ known. Indeed, on the one hand, using equation (5.22) we have :

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u|^2 + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3}(|u|^2\star\frac{1}{|x|})|u|^2 - \int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a|}+V_1\right)|u|^2\right)$$
$$= -\int_{\mathbb{R}^3}\left(\partial_t\frac{1}{|x-a|} + \partial_t V_1\right)|u|^2 \tag{5.24}$$

and on the other hand, since $\nabla\dfrac{1}{|x-a|} = \dfrac{a-x}{|x-a|^3}$, when we multiply (5.23) by $\dfrac{da}{dt}$ we get :

$$\frac{m}{2}\frac{d}{dt}\left(\left|\frac{da}{dt}\right|^2\right) = \int_{\mathbb{R}^3}|u(x)|^2\frac{da}{dt}\cdot\frac{x-a}{|x-a|^3}\,dx - \nabla V_1(a)\cdot\frac{da}{dt}. \tag{5.25}$$

Now $\partial_t\left(\dfrac{1}{|x-a|}\right) = \dfrac{da}{dt}\cdot\dfrac{x-a}{|x-a|^3}$ and the sum of (5.24) and (5.25) gives :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u|^2+\frac{m}{2}\left|\frac{da}{dt}\right|^2+\frac12\int_{\mathbb{R}^3}(|u|^2\star\frac{1}{|x|})|u|^2-\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a|}+V_1\right)|u|^2\right)\\ = -\nabla V_1(a)\cdot\frac{da}{dt}-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t V_1|u|^2\\ = -\frac{dV_1}{dt}(a)+\partial_t V_1(a)-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t V_1|u|^2.\end{aligned}$$

Moreover, from assumption $(5.2)$, $V_1$ satisfies $\dfrac{\partial_t V_1}{1+|x|^2}\in L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3))$ and we have

$$\partial_t V_1(a)-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t V_1|u|^2\le\left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}(1+|a(t)|^2+\|u(t)\|^2_{H_1})$$

and in order to get an $H_1$-estimate of $u$, we then calculate the imaginary part of the product of equation (5.22) by $(1+|x|^2)\overline{u}(x)$, integrated over $\mathbb{R}^3$. This gives

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|u|^2\right)\le\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u|^2+\int_{\mathbb{R}^3}|x|^2|u|^2.$$

We define $E$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$\begin{aligned}E(t)=\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla u(t,x)|^2\,dx+\lambda\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|u(t,x)|^2\,dx+\frac{m}{2}\left|\frac{da(t)}{dt}\right|^2\\ +\frac12\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t,x)|^2\star\frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2\,dx\end{aligned}$$

where $\lambda$ is a non-negative constant to be precised later. We obviously have a constant $C>0$ depending on $\lambda$ such that :

$$\begin{aligned}\frac{dE(t)}{dt}&\le\frac{d}{dt}\left(-V_1(t,a(t))+\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(t)|}+V_1(t)\right)|u(t)|^2\right)\\ &+C\left(1+\left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\right)E(t)+\left\|\frac{\partial_t V_1(t)}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}(1+|a(t)|^2)\end{aligned}$$

and if we set $\beta=\left\|\dfrac{\partial_t V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^\infty}\in L^1(0,T)$ and integrate over $(0,t)$, we obtain

$$\begin{aligned}E(t)&\le E(0)+V_1(0,a_0)+\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a_0|}+|V_1(0)|\right)|u_0|^2\\ &+|V_1(t,a(t))|+\int_{\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a(t)|}+V_1(t)\right)|u(t)|^2\\ &+C\int_0^t(1+\beta(s))\,E(s)+\beta(s)(1+|a(s)|^2)\,ds\end{aligned}$$

Then, as shown in subsection 5.2.2, we have

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(t,x)|^2}{|x-a(t)|}\,dx \leq \eta \|\nabla u(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4\eta}\|u_0\|_{L^2}^2,\ \forall \eta > 0,$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} V_1(t,x)|u(t,x)|^2\,dx \leq \left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)} \|u(t)\|_{H_1}^2, \text{ and}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{1}{|x-a_0|} + |V_1(0,x)| \right) |u_0(x)|^2\,dx \leq \|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2.$$

Moreover, for all $t$ in $[0,T]$,

$$|V_1(t,a(t))| \leq \left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} (1+|a(t)|^2)$$

and we also notice that

$$E(0) \leq C\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + \frac{m}{2}|v_0|^2 + C\|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3.$$

Then, if we set $\eta = \dfrac{1}{2}$ and $\lambda = \dfrac{1}{2} + \left\| \dfrac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3)}$ we get

$$\begin{aligned} E(t) &\leq C\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + \frac{m}{2}|v_0|^2 + C\|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3 + C(1+|a_0|^2) \\ &+ \frac{1}{2}\|u(t)\|_{H^1}^2 + \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\|u(t)\|_{H_1}^2 + C(1+|a(t)|^2) \\ &+ C\int_0^t (1+\beta(s))\,E(s) + \beta(s)(1+|a(s)|^2)\,ds. \end{aligned} \tag{5.26}$$

We define $F$ at time $t$ of $[0,T]$ by

$$F(t) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(t,x)|^2\,dx + \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|u(t,x)|^2\,dx + m\left|\frac{da}{dt}(t)\right|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \left(|u(t,x)|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2$$

and it is easy to deduce from (5.26) that we have, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\begin{aligned} F(t) &\leq C\,(1+\|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + |a_0|^2 + |v_0|^2 + \|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3) \\ &+ C(1+|a(t)|^2) + C\int_0^t (1+\beta(s))\,F(s) + \beta(s)(1+|a(s)|^2)\,ds. \end{aligned}$$

Then, we set

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= (1+|a(t)|^2) + \int_0^t (1+\beta(s))\,F(s) + \beta(s)(1+|a(s)|^2)\,ds \\ &\quad + 1 + \|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + |a_0|^2 + |v_0|^2 + \|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3 \end{aligned}$$

and we have $F(t) \leq C\Psi(t)$, $\Psi(0) = 1 + \|u_0\|_{H^1\cap H_1}^2 + |a_0|^2 + |v_0|^2 + \|u_0\|_{H^1}\|u_0\|_{L^2}^3$ and since $C > 0$ denotes a generic constant,

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi}{dt}(t) &= 2|a(t)|\left|\frac{da}{dt}(t)\right| + (1+\beta(t))\,F(t) + \beta(t)(1+|a(t)|^2) \\ &\leq C\sqrt{\Psi(t)}\sqrt{F(t)} + C\,(1+\beta(t))\,\Psi(t) + \beta(t)\Psi(t) \\ &\leq C\,(1+\beta(t))\,\Psi(t). \end{aligned}$$

From Gronwall's lemma, we then get :

$$\Psi(t) \leq C_T \exp\left(\int_0^t \beta(s)ds\right)\Psi(0).$$

Therefore, there exists a non-negative constant $K^0_{T,\rho_0}$ depending on the time $T$, on the initial data $\|u_0\|_{H^1\cap H_1}$, $|a_0|$ and $|v_0|$ and on $\rho_0 > 0$, where

$$\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} \leq \rho_0,$$

such that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\|u(t)\|_{H^1\cap H_1} + m\left|\frac{da}{dt}(t)\right| + \left(\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t)|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)|u(t)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq K^0_{T,\rho_0}. \quad (5.27)$$

Notice that this estimate does not use any assumption on $\nabla V_1$. Of course, we also obtain that $a$ is bounded on $[0,T]$ which means that there exists $R>0$, depending on $T$, $\rho_0$, $\|u_0\|_{H^1\cap H_1}$, $|a_0|$ and $|v_0|$, such that for all $t$ in $[0,T]$, $|a(t)| \leq R$.

Moreover, from equation (5.23) and since $a$ is bounded, we have

$$\begin{aligned} m\left|\frac{d^2a}{dt^2}(t)\right| &\leq \int_{\mathbb{R}^3}\frac{|u(t,x)|^2}{|x-a(t)|^2}\,dx + |\nabla V_1(t,a(t))| \\ &\leq 4\,\|u(t)\|^2_{H^1} + \|\nabla V_1(t)\|_{W^{1,\infty}(B_R)} \end{aligned}$$

and if we define $\rho_1 > 0$ such that

$$\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\|\frac{\nabla V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \leq \rho_1,$$

we obtain from (5.27) that there exists a constant $K^0_{T,\rho_1} > 0$ depending on $T$, $\|u_0\|_{H^1\cap H_1}$, $|a_0|$, $|v_0|$ and $\rho_1$ such that

$$\begin{aligned} m\left\|\frac{d^2a}{dt^2}\right\|_{L^1(0,T)} &\leq 4T\,\|u\|^2_{L^\infty(0,T;H^1)} + \sqrt{T}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \\ &\leq 4T(K^0_{T,\rho_0})^2 + \sqrt{T}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \leq K^0_{T,\rho_1}. \end{aligned}$$

Now, we can use estimate (5.27) and equation (5.22) to obtain the estimate of Proposition 2. Indeed, since equations (5.22) is equivalent to the integral equation

$$u(t) = U(t,0)u_0 - i\int_0^t U(t,s)F(u(s))\,ds,$$

we have, from Theorem 3 and from Lemma 5,

$$\begin{aligned} \|u(t)\|_{H^2\cap H_2} &\leq M_{T,\alpha,\rho}\,\|u_0\|_{H^2\cap H_2} + M_{T,\alpha,\rho}\int_0^t \|F(u(s))\|_{H^2\cap H_2}\,ds \\ &\leq M_{T,\alpha,\rho}\,\|u_0\|_{H^2\cap H_2} + M_{T,\alpha,\rho}\int_0^t \|u(s)\|^2_{H^1}\,\|u(s)\|_{H^2\cap H_2}\,ds \end{aligned}$$

where $\alpha = \dfrac{K^0_{T,\rho_1}}{m}$. Therefore, we can deduce from estimate (5.27) that there exists a constant $C^0_{T,\rho_1}$ such that

$$\|u(t)\|_{H^2\cap H_2} \leq C^0_{T,\rho_1} \|u_0\|_{H^2\cap H_2} + C^0_{T,\rho_1} \int_0^t \|u(s)\|_{H^2\cap H_2}\, ds.$$

Eventually, from Gronwall lemma, we get

$$\forall t \in [0,T],\ \|u(t)\|_{H^2\cap H_2} \leq e^{C^0_{T,\rho_1} T} \|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

It is then easy to estimate $\|\partial_t u(t)\|_{L^2}$ using equation (5.22). Hence the end of the proof of Proposition 2. $\square$

We will conclude here the proof of Theorem 1. We begin by setting an arbitrary time $T > 0$. We already obtained the local-in-time existence of solutions for the coupled problem. Indeed, by now, we have a solution $(u,a)$ for the system (5.1) in the class

$$L^\infty(0,\tau;H^2\cap H_2)\cap W^{1,\infty}(0,\tau;L^2)\times \cap W^{2,1}(0,\tau)$$

where $\|a\|_{C([0,\tau])} \leq R$ and $\tau$ satisfies

$$\begin{cases} \tau\alpha < 1 \\ 8\tau C_F M^3_{T,\alpha}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} < 1 \\ \dfrac{4C}{m}\tau M^2_{T,\alpha}\|u_0\|^2_{H^2\cap H_2} + \dfrac{\sqrt{\tau}}{m}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} < \alpha \end{cases} \tag{5.28}$$

where $\alpha = \max(|v_0|,1)$ and $C > 4$.

Let us consider the maximal time $T_0$ such that (5.1) has a maximal solution defined on $[0,T_0[$ in the class mentioned above. From Proposition 2, we have a local uniform estimate on the following norm of $(u,a)$ :

$$\|u(t)\|_{H^2\cap H_2} + \|\partial_t u(t)\|_{L^2} + \left\|\frac{d^2a}{dt^2}\right\|_{L^1(0,T)} + \left|\frac{da}{dt}(t)\right|$$

which means that this quantity remains bounded for $t$ less or equal to $T$. Therefore, as one can read in [43], and in [10] and [14], global existence follows. Indeed, if $(u,a)$ is a maximal solution on $[0,T_0[$ with $T_0 < T$, then its norm in the ad'hoc class has to blow up when $t$ reaches the maximal time $T_0$. However, if we consider $s \in [0,T_0[$ close enough to $T_0$ and if we take $T^\star$ as the largest $\tau$ satisfying

$$\begin{cases} \tau\max(|v_s|,1) < 1 \\ 8\tau C_F M^3_{T,|v_s|}\|u_s\|^2_{H^2\cap H_2} < 1 \\ \dfrac{4C}{m}\tau M^2_{T,|v_s|}\|u_s\|^2_{H^2\cap H_2} + \dfrac{\sqrt{\tau}}{m}\|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} < \max(|v_s|,1), \end{cases}$$

where $\dfrac{da}{dt}(s) = v_s$ and $u(s) = u_s$, then we can bound the norm of $(u,a)$ for all $t$ in $[s, s+T^\star]$ which brings a contradiction since $T_0 \in [s,s+T^\star]$. The important point is that $T^\star$ only depends on the time $T$ since $\|u_s\|_{H^2\cap H_2}$ and $|v_s|$ are bounded by the local uniform estimate of Proposition 2. Thus, for any arbitrary time $T$ we have a solution $(u,a)$ to the system (5.1) such that

$$(u,a) \in L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)\cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)\times W^{2,1}(0,T)$$

and the proof of Theorem 1 in then complete. $\square$

# Troisième partie

# Contrôle optimal bilinéaire d’une équation de Hartree-Fock dépendant du temps

# Chapitre 6

# Bilinear optimal control problem on a Schrödinger equation with singular potentials

L'article qui suit est actuellement soumis.

ABSTRACT : We study the Schrödinger equation $i\partial_t u + \Delta u + V_0 u + V_1 u = 0$ on $\mathbb{R}^3 \times (0, T)$, where $V_0$ is a coulombian potential, singular at finite distance, and $V_1$ is an electric potential, possibly unbounded, with initial condition $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^3)$ such that $\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^2|u(x)|^2\,dx < \infty$. Both potentials $V_0$ and $V_1$ are real valued and may depend on space and time variables. We are interested by the optimal control of the solution $u$ by the external electric potential $V_1$. We proved in chapter 4 that this equation is well-posed and that the regularity of the initial data is conserved for the solution. This is a keypoint result to show here that there exists a bilinear optimal control $V_1$ and to give an optimality condition.

**Keywords :** Bilinear optimal control, Schrödinger equation, optimality condition.
*AMS Classification :* 49J20

RÉSUMÉ : Nous étudions l'équation de Schrödinger $i\partial_t u + \Delta u + V_0 u + V_1 u = 0$ sur $\mathbb{R}^3 \times (0, T)$, où $V_0$ est un potentiel coulombien, singulier à distance finie, $V_1$ est un potentiel électrique, éventuellement non-borné, et avec comme condition initiale $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^3)$ telle que $\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^2|u(x)|^2\,dx < \infty$. Les deux potentiels $V_0$ et $V_1$ sont à valeurs réelles et dépendent des variables d'espace et de temps. Nous nous intéressons ici au problème du contrôle optimal de la solution $u$ par le potentiel électrique extérieur $V_1$. Nous avons déjà démontré dans le chapitre 4 que l'équation considérée est bien posé et que la régularité de la condition initiale est conservée par la solution. C'est un résultat clef pour montrer ici qu'il existe un contrôle optimal bilinéaire $V_1$ et donner une condition d'optimalité.

## 6.1 Introduction

We work in $\mathbb{R}^3$ and throughout this paper, we use the following notations :

$$\nabla v = \left(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \frac{\partial v}{\partial x_2}, \frac{\partial v}{\partial x_3}\right), \quad \Delta v = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}, \quad \partial_t v = \frac{\partial v}{\partial t};$$

$Re$ and $Im$ stand for the real and the imaginary part of a complex number ;
$\langle \,.\,,\,.\,\rangle_H$ stands for the scalar product in the space $H$;
$\forall p \geq 1, L^p = L^p(\mathbb{R}^3)$ and for the usual Sobolev spaces
$H^1 = H^1(\mathbb{R}^3),\ H^2 = H^2(\mathbb{R}^3)$.

We also define

$$\begin{aligned} H_1 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|v(x)|^2\,dx < +\infty \right\} \\ H_2 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^2|v(x)|^2\,dx < +\infty \right\}. \end{aligned}$$

*Remark :* One can notice that $H_1$ and $H_2$ are respectively the images of $H^1$ and $H^2$ under the Fourier transform.

We consider the following linear Schrödinger equation

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a|} + V_1 u = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{6.1}$$

where $V_1$ depends on space and time variables and take its values in $\mathbb{R}$. We make the assumption :

$$\begin{aligned} a &\in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V_1 &\in L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \partial_t V_1 &\in L^1(0,T;L^\infty) \ \text{ and} \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \nabla V_1 &\in L^1(0,T;L^\infty). \end{aligned} \tag{6.2}$$

On the one hand, we are concerned with the problem of proving the existence of a bilinear optimal control governed by equation (6.1). The electric potential $V_1$ is the control, and if $u_1 \in L^2$ is a given target, the problem reads :

Find a minimizer $V_1 \in H$ for
$\inf \{J(V),\ V \in H\}$

where

$$H := \left\{ V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;W) \right\} \tag{6.3}$$

with $W$ an Hilbert space such that $W \hookrightarrow W^{1,\infty}$,

$$J(V) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(T)-u_1|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V\|_H^2 \ \text{ with } r>0,$$

and where $u$ is the solution of

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a|} + Vu = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0 & \text{in } \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

with $u_0 \in H^2 \cap H_2$.

On the other hand, we want to give an optimality condition for this bilinear optimal control problem. It means that if the optimal control problem described above is solved, then there exist $V_1 \in H$ such that $J(V_1) = \inf\{J(V),\ V \in H\}$ and we will prove that $V_1$ satisfies a first order optimality condition.

*Remark :* Since we have to prove the differentiability of the cost functionnal $J$, we chose the Hilbert space $H$ that makes it possible to differentiate the norm $\|\cdot\|_H$ that appears in $J$ and of course, $V_1 \in H$ satisfies $(6.2)$.

Let us now formulate the expected theorem.

**Theorem 1.** *There exists an optimal control $V_1$ satisfying* (6.2) *such that*

$$J(V_1) = \inf_{V \in H} J(V)$$

*where $H$ is defined by $(6.3)$ and the cost functional $J$ is given by*

$$J(V) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |u(T) - u_1|^2 \, dx + \frac{r}{2} \|V\|_H^2$$

*and it satisfies the optimality condition :*

$$\forall \delta V \in H,\ \ r\langle V_1, \delta V\rangle_H = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V(x,t) u(x,t) \bar{p}(x,t) \, dxdt$$

*with $u$ solution of the state equation* (6.1) *and $p$ solution of the adjoint problem*

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + \dfrac{p}{|x-a|} + V_1 p = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ p(T) = u(T) - u_1 & \text{in } \mathbb{R}^3. \end{cases} \tag{6.4}$$

*Remark :* We want to underline that a regularity result upon equation (6.1) is strongly needed in the proof of this theorem.

From a physical point of view, the problem linked with this situation is the laser control of chemical reactions. We are considering a single atom ; the coulombian potential $V_0$ corresponds to the attraction of the nucleus placed in $a(t)$ at instant $t$, $u$ is the wave function of the electron and $V_1$ is the electric potential induced by a laser beam. Actually, the atom is subjected to an external electric field, where the corresponding potential may be unbounded at infinity, and is such that $E(t,x) = \nabla V_1(x,t)$ where $E$ is the field created by the laser beam.

Of course, this is a very simplified model and the lack here may be the absence of the more realistic Hartree nonlinearity $F(u) = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$. Nevertheless, the proof of the analogous theorem for the nonlinear Schrödinger equation is similar to this one and can be read in the next chapter. Moreover, these results are a first step to study this kind of optimal control problem on a coupled system of equations : we consider now $a(t)$ as unknown but solution of classical nuclear dynamics and couple this with the nonlinear Schrödinger equation where $V_0 = \frac{1}{|x-a(t)|}$ and with source term $F(u)$.

A result of existence for a bilinear optimal control, governed by a Schrödinger equation with Hartree non-linearity $F(u)$, has been given in [11]. It deals with an electric potential $V_1 = -I(t) \cdot x$, whose field is homogeneous in space, while we take into account here more general electric potentials.

The end of this section contains the regularity result (proved in chapter 4) needed to consider these bilinear optimal control problems. The next section is devoted to the proof of Theorem 1 and one will also find at its end, for a particular case, an interpretation of the optimal condition in terms of partial differential equations.

The regularity result for equation (6.1) is the following.

**Theorem 2.** *For $T > 0$ given, let $a$ and the potential $V_1$ satisfy*

$$\begin{aligned} & a \in W^{2,1}(0,T), \\ & V_1 \ \text{ take its values in } \mathbb{R}, \\ & (1+|x|^2)^{-1} V_1 \in L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ & (1+|x|^2)^{-1} \partial_t V_1 \in L^1(0,T;L^\infty) \ \text{ and} \\ & (1+|x|^2)^{-1} \nabla V_1 \in L^1(0,T;L^\infty) \end{aligned} \tag{6.5}$$

*and be such that for some $\alpha > 0$ and $\rho > 0$ :*

$$\begin{gathered} \|a\|_{W^{2,1}(0,T)} \leq \alpha, \\ \|(1+|x|^2)^{-1} V_1\|_{W^{1,1}(0,T;L^\infty)} + \|(1+|x|^2)^{-1} \nabla V_1\|_{L^1(0,T;L^\infty)} \leq \rho. \end{gathered}$$

*Then there exists a non negative constant $C_{T,\alpha,\rho}$ such that for any $u_0 \in H^2 \cap H_2$, equation* (6.1) *has a unique solution $u$ such that*

$$u \in L^\infty(0,T;H^2\cap H_2) \ \text{ and } \ \partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2)$$

*which satisfies the estimate*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T,L^2)} \leq C_{T,\alpha,\rho} \|u_0\|_{H^2\cap H_2}.$$

*Moreover, we also have $u \in C_{\mathrm{w}}([0,T];H^2\cap H_2)$ and $u \in C([0,T];H_1\cap H^1)$.*

This type of result has already been obtained in the particular case when the atom is subjected to an external uniform time-dependent electric field $I(t)$ such that in equation (6.1), $V_1(x,t) = -I(t)\cdot x$ as in reference [10]. In the case $V_1 = 0$, K. YAJIMA [51] proved the $H^2(\mathbb{R}^d)$ regularity of the solution of equation (6.1) considered in $\mathbb{R}^d \times (0,T)$.

Another way to formulate the result of Theorem 2 is the following.

**Corollary 3.** *Let $a$ and $V_1$ satisfy assumption* (6.5) *and $u_0 \in H^2 \cap H_2$. We define the family of Hamiltonians $\{H(t), t \in [0,T]\}$ by $H = -\Delta - \dfrac{1}{|x-a|} - V_1$. Then, there* *exists a unique family of evolution operators* $\{U(t,s), s,t \in [0,T]\}$ *(the so called propagator associated with* $H(t)$*) on* $H^2 \cap H_2$ *such that for* $u_0 \in H^2 \cap H_2$ *:*

$(i)$ $U(t,s)U(s,r)u_0 = U(t,r)u_0$ *and* $U(t,t)u_0 = u_0$ *for all* $s,t,r \in [0,T]$;

$(ii)$ $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is strongly continuous in* $L^2$ *on* $[0,T]^2$ *and* $U(t,s)$ *is an isometry on* $L^2$, *that is* $\|U(t,s)u_0\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$;

$(iii)$ $U(t,s) \in \mathcal{L}(H^2 \cap H_2)$ *for all* $(s,t) \in [0,T]^2$ *and* $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is weakly continuous from* $[0,T]^2$ *into* $H^2 \cap H_2$;

$(iv)$ *the equalities* $i\partial_t U(t,s)u_0 = H(t)U(t,s)u_0$ *and* $i\partial_s U(t,s)u_0 = -U(t,s)H(s)u_0$ *hold in* $L^2$.

This formulation of our regularity result on equation (6.1) is more adapted to give a meaning to the equations encountered in the continuation of this paper.

## 6.2 Bilinear Optimal Control

We consider $u_0 \in H^2 \cap H_2$ and $V_0$ and $V_1$ satisfying assumption (6.2). Since it implies (6.5) (notice the power $-\frac{1}{2}$ in assumption (6.2)) we know there exists a unique solution $u$, such that $u \in C_{\mathrm{w}}([0,T]; H^2 \cap H_2)$, $\partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2)$ and $u \in C([0,T]; H_1 \cap H^1)$, to equation (6.1) :

$$\begin{cases} i\partial_t u(x,t) + \Delta u(x,t) + \dfrac{u(x,t)}{|x-a(t)|} + V_1(x,t)u(x,t) = 0, \ (x,t) \in \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(x,0) = u_0(x), \ x \in \mathbb{R}^3. \end{cases}$$

We recall that we consider the space

$$H = \left\{ V, \ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;W) \right\},$$

where $W$ is an Hilbert space such that $W \hookrightarrow W^{1,\infty}$, and the functional $J$ defined by

$$J(V) = \frac{1}{2}\|u(T) - u_1\|_{L^2}^2 + \frac{r}{2}\|V\|_H^2$$

with $u$ solution of (6.1) with potential $V_1 = V$.

### 6.2.1 Existence of an optimal control

We will prove here the first part of Theorem 1. It means that we have to prove the existence of an optimal control $V_1 \in H$ such that

$$J(V_1) = \inf\{J(V), \ V \in H\}.$$

We consider a minimizing sequence $(V_1^n)_{n\geq 0}$ in $H$ for the functional $J$. It means that

$$\inf_H J(V) = \lim_{n\to\infty} J(V_1^n)$$

and then, $(V_1^n)_{n\geq +\infty}$ is bounded in $H$, independently of $n$. Up to a subsequence, we have $V_1^n \rightharpoonup V_1$ weakly in $H$ and

$$\|V_1\|_H \leq \underline{\lim}\|V_1^n\|_H.$$

The difficulty comes from the term $\|u(T) - u_1\|^2_{L^2}$. We have to consider the solution $u_n$ of equation

$$\begin{cases} i\partial_t u_n + \Delta u_n + \dfrac{u_n}{|x-a|} + V_1^n u_n = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u_n(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{6.6}$$

If we can prove that

$$u_n(T) \longrightarrow u(T) \text{ in } L^2,$$

then we obviously obtain

$$\lim_{n\to+\infty} \|u_n(T) - u_1\|^2_{L^2} = \|u(T) - u_1\|^2_{L^2}. \tag{6.7}$$

From Theorem 2, we have :

$$\|u_n\|_{L^\infty(H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u_n\|_{L^\infty(L^2)} \leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$$

where $C$ is independent of $n$ since $(V_1^n)_{n\geq 0}$ is bounded in $H$. Then $(u_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $L^\infty(0,T;H^2\cap H_2) \cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)$ and using the following compacity lemma (whose proof can be found in Theorem 5 of reference [44]), up to a subsequence we also have the strong convergence $u_n \to u$ in $C([0,T];H^1_{\text{loc}})$.

**Lemma 4.** *Let $X,\ B$ and $Y$ be Banach spaces.*
*We assume that $X \hookrightarrow B \hookrightarrow Y$ with compact embedding $X \hookrightarrow B$.*
*If $\{f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^\infty(0,T;X)$ and if $\{\partial_t f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^\infty(0,T;Y)$ then $\{f_n, n\in\mathbb{N}\}$ is relatively compact in $C([0,T];B)$.*

Therefore, we can conclude that in the sense of distribution, the limit $u$ of the sequence $(u_n)$ is the solution of equation (6.1). Then, we divide $\|u_n(T) - u(T)\|^2_{L^2}$ in

$$\|u_n(T) - u(T)\|^2_{L^2(B(0,R))} + \|u_n(T) - u(T)\|^2_{L^2(B^c(0,R))}$$

and we have :

- a constant $C > 0$ such that for all $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} \int_{|x|\geq R} |u_n(x,T) - u(x,T)|^2\, dx &\leq \frac{1}{1+R^2}\int_{|x|\geq R} (1+|x|^2)|u_n(T) - u(T)|^2\, dx \\ &\leq \frac{1}{1+R^2}\|u_n(T) - u(T)\|_{H_1} \\ &\leq \frac{C}{1+R^2} \overset{R\to\infty}{\longrightarrow} 0 \end{aligned}$$

- since $u$ is the solution of (6.1) with potential $V_1 = \lim_{n\to+\infty} V_1^n$ in $H$ weak, then for all $R > 0$,

$$\int_{|x|<R} |u_n(x,T) - u(x,T)|^2\, dx \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Eventually, we get

$$u_n(T) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} u(T) \text{ in } L^2$$

and we deduce (6.7) which leads finally to

$$J(V_1) \leq \underline{\lim} J(V_1^n) = \inf_{V \in H} J(V).$$

Then $J(V_1) = \inf_{V \in H} J(V)$ since $V_1 \in H$ and the existence of an optimal control has been proved. $\square$

*Remark :* One can notice that we have actually prove the existence of an optimal control in the space $\left\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-1} V \in W^{1,1+\epsilon}(0,T;W^{1,\infty})\right\}$, $\epsilon > 0$. Indeed, the only important points are to ensure the existence of a solution $u$ to equation (6.1) and to take $V_1$ in a reflexive space.

### 6.2.2 Optimality condition

In the definition of the space $H$, we can consider for instance

$$W = H^3 \oplus \text{Span}\{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m\}$$

with $m \in \mathbb{N}$, and for all $i \in [\![1, m]\!]$, $\psi_i \in W^{1,\infty} \setminus H^3$. This example enables us to deal both with the particular case of [10] where $V_1(x,t) = I(t) \cdot x$, $I \in H^1(0,T)$ and with general electric potentials $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V_1(t) \in H^3$ which are non-homogeneous in space.

We have already proved the existence of a bilinear optimal control $V_1 \in H$ and the usual way to obtain an optimality condition in this kind of situation is to prove that $J$ is differentiable and to write the necessary condition

$$DJ(V_1)[\delta V_1] = 0,\ \forall \delta V_1 \in H \tag{6.8}$$

in terms of the adjoint state.
We postpone the proof of the following lemma and we set $V_0(x,t) = \dfrac{1}{|x-a(t)|}$.

**Lemma 5.** *If u is the solution of* (6.1)*, the functional*

$$\begin{array}{rcl} \phi : H & \to & L^2(\mathbb{R}^3) \\ V_1 & \mapsto & u(T) \end{array}$$

*is differentiable. Then, if z is the solution of*

$$\left\{ \begin{array}{ll} i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z = -\delta V_1 u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ z(0) = 0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{array} \right. \tag{6.9}$$

*we have $z \in ([0,T];L^2)$ and $D\phi(V_1)[\delta V_1] = z(T)$.*

Therefore, $J$ is differentiable in $V_1$ and since $H$ is an Hilbert space, condition (6.8) now reads

$$Re \int_{\mathbb{R}^3} (u(T) - u_1)\, .\overline{z}(T)\, dx + r\langle V_1, \delta V_1 \rangle_H = 0. \tag{6.10}$$

*Remark :* We can prove the differentiability of $V_1 \mapsto u(T)$ with values in $L^2$ but we don't know whether this remains true if we consider the same mapping with values in $H^1$ for example. We suspect that the differentiability is not true anymore. Therefore, in the functional $J$, the first term cannot be replaced by a stronger norm of $u(T) - u_1$.

We consider the adjoint state equation (6.4) :

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + V_0 p + V_1 p = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ p(T) = u(T) - u_1 & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases}$$

which has a unique solution $p \in C([0,T]; L^2)$ since $u(T) - u_1 \in L^2$.

We multiply equation (6.9) by $\overline{p}$ (the complex conjugate of $p$), integrate on $\mathbb{R}^3 \times [0,T]$ and take the imaginary part. We obtain :

$$Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z)\overline{p} = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} -\delta V_1 u \overline{p}.$$

After an integration by parts and since $z(0) = 0$, we get

$$Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} z\, \overline{i\partial_t p} - Im \int_{\mathbb{R}^3} z(T)\, \overline{ip(T)} + Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} z\, \overline{\Delta p} \\ + Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} z\, \overline{(V_0 + V_1)p} = -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u \overline{p}.$$

Since $p$ satisfies equation (6.4), we then have

$$Im\ i \int_{\mathbb{R}^3} z(T).\, \overline{(u(T) - u_1)} = -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u \overline{p}$$

what implies

$$Re \int_{\mathbb{R}^3} z(T)\, \overline{(u(T) - u_1)} = -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u \overline{p}.$$

We also have (6.10) and we finally obtain that for all $\delta V_1$ in $H$,

$$r\langle V_1, \delta V_1 \rangle_H = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1(x,t) u(x,t) \overline{p}(x,t)\, dxdt.$$

Hence the proof of the optimality condition of Theorem 1. □

We now give the proof of Lemma 5. Actually, we have to prove that $z(T)$ is well defined in $L^2$ when $z$ is solution of (6.9) and that if $w$ satisfies

$$\begin{cases} i\partial_t w + \Delta w + V_0 w + (V_1 + \delta V_1) w = -\delta V_1 z & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ w(0) = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{6.11}$$

then

$$\|w(T)\|_{L^2} = o(\|\delta V_1\|_H). \tag{6.12}$$

One can notice that $w$ is actually the difference between $z$ and $\delta u$ where $\delta u + u$ is the solution of equation (6.1) with electric potential $\delta V_1 + V_1$.

From Theorem 2, we know that $u \in L^\infty([0,T]; H^2 \cap H_2)$ and since we also have $(1 + |x|^2)^{-\frac{1}{2}} \delta V_1 \in H^1(0,T;W)$ and $H^1(0,T;W) \hookrightarrow C(0,T;W^{1,\infty})$, we obtain

$\delta V_1 u \in L^\infty(0,T;L^2)$. It is then easy to prove, using Corollary 3 to formulate the integral equation equivalent to equation (6.9), and using a Picard fixed point theorem, that there exists a unique solution $z \in C([0,T];L^2)$ to equation (6.9). We can also specify that

$$\|z(t)\|_{L^2} \leq C\|\delta V_1\|_H \|u\|_{L^\infty(H^2\cap H_2)},\ \forall t \in [0,T].$$

There and until the end of this proof, $C$ denotes various constants depending on $T$.

Now we work on the equation solved by $w$. Indeed, we multiply equation (6.11) by $\overline{w}$, integrate in space variable and take the imaginary part (what means we calculate $Im \int_{\mathbb{R}^3} (6.11).\overline{w}(x)\,dx$), and we obtain :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\|w(t)\|^2_{L^2}) &\leq \|\delta V_1\|_H \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^{\frac{1}{2}} |z(t)||w(t)|\,dx \\ &\leq \|\delta V_1\|_H \|z(t)\|_{H_1} \|w(t)\|_{L^2} \end{aligned}$$

and applying Gronwall lemma, since $w(0)=0$, we get, $\forall t \in [0,T]$,

$$\|w(t)\|_{L^2} \leq C\|\delta V_1\|_H \max_{t\in[0,T]} \|z(t)\|_{H_1}. \tag{6.13}$$

This implies that we have to work more on equation (6.9) in order to obtain an estimate of $\|z(t)\|^2_{H_1}$ for all $t$ in $[0,T]$. Actually, the formulation of equation (6.9) as an integral equation allows to prove that $z \in C([0,T];H^1\cap H_1)$ and the same kind of fixed point arguments then leads to prove that there exists a unique solution $w \in C([0,T];L^2)$ of equation (6.11). Usual calculations bring the following estimates :

$$\frac{d}{dt}(\|z(t)\|^2_{L^2}) \leq C\|\delta V_1\|_H \|u(t)\|_{H_1} \|z(t)\|_{L^2} \tag{6.14}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\||x|z(t)\|^2_{L^2}) &\leq C\|\nabla z(t)\|_{L^2} \||x|z(t)\|_{L^2} \\ &+ C\|\delta V_1\|_H \|u(t)\|_{H_2} \||x|z(t)\|_{L^2} \end{aligned} \tag{6.15}$$

Let us now have a look at $Re \int_{\mathbb{R}^3} (6.9).\partial_t \overline{z}(x)\,dx$. We obtain, after some calculation and integrations by parts,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} V_0|z|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V_1|z|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla z|\right) &= \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t V_0 |z|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t V_1 |z|^2 \\ &- 2\frac{d}{dt}\left(Re\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{z}\right) + 2Re\int_{\mathbb{R}^3} \partial_t(\delta V_1)u\overline{z} + 2Re\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 \partial_t u\,\overline{z} \end{aligned}$$

We recall here that $V_0(x,t) = \dfrac{1}{|x-a(t)|}$ with $a \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$. Thus we have $|\partial_t V_0(x,t)| = \dfrac{|\partial_t a(t)|}{|x-a(t)|^2}$. We also remind the reader of Hardy's inequality :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|^2} \leq 4\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2.$$

Therefore, we obtain

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla z| - \int_{\mathbb{R}^3}(V_0+V_1)|z|^2\right) &\leq C\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla z|^2 + 2\,\frac{d}{dt}\left(Re\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1 u\bar{z}\right)\\ &+ C\|V_1\|_H\|z(t)\|_{H_1}^2\\ &+ C\|\delta V_1\|_H\|u(t)\|_{H_1}\|z(t)\|_{L^2}\\ &+ C\|\delta V_1\|_H\|\partial_t u(t)\|_{L^2}\|z(t)\|_{H_1}\end{aligned}$$

We integrate this between $0$ and $t\in[0,T]$ and remember that $z(0)=0$ :

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla z(t)| &\leq \int_{\mathbb{R}^3}(V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 + \int_{\mathbb{R}^3}|\delta V_1(t)||u(t)||z(t)| \\ &+ C\int_0^t g(s)\|z(s)\|_{H_1}\,ds + C\int_0^t f(s)\left(\|z(s)\|_{H_1}^2 + \|\nabla z(s)\|_{L^2}^2\right)\,ds\end{aligned} \tag{6.16}$$

where $g(s) = \|\delta V_1\|_H(\|u(s)\|_{H_2} + \|\partial_t u(s)\|_{L^2})$ and $f(s) = 1 + \|V_1\|_H$ with obviously $f\in L^1(0,T)$, $g\in L^1(0,T)$ and $g\to 0$ uniformly in $s$ when $\delta V_1\to 0$ in $H$.

We set

$$E(t) = \int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)|z(t)|^2\,dx + \int_{\mathbb{R}^3}|\nabla z(t)|^2\,dx.$$

Moreover, we recall that from (6.14) we have

$$\|z(t)\|_{L^2}^2 \leq C\int_0^t g(s)\|z(s)\|_{L^2}\,ds \tag{6.17}$$

what implies, with the properties of $g$, that $\|z(t)\|_{L^2}\to 0$ uniformly with respect to $t\in[0,T]$, when $\|\delta V_1\|_H\to 0$, and from (6.15),

$$\||x|z(t)\|_{L^2}^2 \leq C\int_0^t(\|\nabla z(s)\|_{L^2}^2 + \||x|z(s)\|_{L^2}^2)\,ds + C\int_0^t g(s)\||x|z(s)\|_{L^2}\,ds. \tag{6.18}$$

Thereafter, using (6.16), (6.17) and (6.18) we can write that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\begin{aligned}E(t) &\leq C\int_0^t g(s)\sqrt{E(s)}\,ds + C\int_0^t f(s)E(s)\,ds\\ &+ \int_{\mathbb{R}^3}(V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 + C\|\delta V_1\|_H\|z(t)\|_{L^2}.\end{aligned}$$

Then, we can prove that for all $\eta>0$ there exits a constant $C_\eta>0$ such that

$$\int_{\mathbb{R}^3}(V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 \leq C_\eta\|z(t)\|_{L^2}^2 + \eta\|z(t)\|_{H^1\cap H_1}^2.$$

Indeed, from Cauchy-Schwarz and Hardy's inequalities, we have

$$\int_{\mathbb{R}^3}V_0(t)|z(t)|^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3}\frac{|z(t)|^2}{|x-a(t)|} \leq C\|z(t)\|_{H^1}\|z(t)\|_{L^2}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3}V_1(t)|z(t)|^2 \leq \|V_1\|_H\int_{\mathbb{R}^3}(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|z(t)|^2 \leq \|V_1\|_H\|z(t)\|_{L^2}\|z(t)\|_{H_1}$$

and we obtain the expected result from Young's inequality.

Consequently, if we set $h(t) = \|\delta V_1\|_H \|z(t)\|_{L^2} + \|z(t)\|_{L^2}^2$ and if we choose $\eta$ small enough, we obtain

$$E(t) \leq C \int_0^t g(s)\sqrt{E(s)}\, ds + C \int_0^t f(s)E(s)\, ds + Ch(t) \tag{6.19}$$

where $g \to 0$ in $L^1(0,T)$ and $h \to 0$ in $L^\infty(0,T)$ when $\delta V_1 \to 0$ in $H$.

We set $F(t) = \left( \int_0^t g(s)\sqrt{E(s)}\, ds + \int_0^t f(s)E(s)\, ds + \|h\|_{L^\infty} \right)^{\frac{1}{2}}$ and we have $E(t) \leq C\ F(t)^2$. We use a Gronwall inequality on $F$.

$$\begin{aligned} \partial_t F(t) &= \frac{f(t)E(t) + g(t)\sqrt{E(t)}}{2F(t)} \\ &\leq \frac{C}{2} f(t)F(t) + \frac{\sqrt{C}}{2} g(t) \\ &\leq C_1\ f(t)F(t) + C_2\ g(t). \end{aligned}$$

Then, setting $G(t) = \int_0^t C_1\ f(s)\, ds$, we have $G$ bounded in $L^\infty(0,T)$ and

$$\partial_t \left( e^{-G(t)} F(t) \right) \leq C_2\ g(t) e^{-G(t)}.$$

We obtain

$$F(t) \leq C\|h\|_{L^\infty(0,T)}^{\frac{1}{2}} + C \int_0^t g(s)\, ds$$

and we finally can write that

$$E(t) \leq C \left( \|h\|_{L^\infty} + \left| \int_0^t g(s)\, ds \right|^2 \right)$$

and when $\|\delta V_1\|_H \to 0$, we have (uniformly with respect to $t \in [0,T]$)

$$\|h\|_{L^\infty} + \left| \int_0^t g(s)\, ds \right|^2 \longrightarrow 0.$$

Actually, we proved the following uniform convergence :

$$\|z(t)\|_{H_1} + \|\nabla z(t)\|_{L^2} \overset{\|\delta V_1\|_H \to 0}{\longrightarrow} 0.$$

Moreover, we also have (6.13) :

$$\|w(t)\|_{L^2} \leq C\|\delta V_1\|_H \max_{t\in[0,T]} \|z(t)\|_{H_1}$$

and therefore, we obtain (6.12) and the proof of lemma 5 is complete. □

We can finally give an interpretation of the optimality condition in terms of partial differential equation's in the particular case when $W = H^3(\mathbb{R}^3)$ :

$$\widetilde{H} = \left\{ V,\ \left(1 + |x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;H^3) \right\}.$$

Indeed, by now, we have the following optimality condition :

$$\forall \delta V \in \widetilde{H},\ \ r\langle V_1, \delta V\rangle_{\widetilde{H}} = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V u\overline{p}\, dxdt$$

with $u$ solution of the state equation (6.1), $p$ solution of the adjoint state equation (6.4) and $V_1 \in \widetilde{H}$ the optimal control such that

$$J(V_1) = \inf\{J(V),\ V \in \widetilde{H}\}.$$

In this particular case, if $V \in \widetilde{H}$, there exists $X \in H^1(0,T;H^3)$ such that $V = \left(1+|x|^2\right)^{\frac{1}{2}} X$. Moreover, $X = (I-\Delta)^{-1}Y$ with $Y \in H^1(0,T;H^1)$. Therefore,

$$\langle V_1, \delta V\rangle_H = \langle X_1, \delta X\rangle_{H^1(0,T;H^2)} = \langle Y_1, \delta Y\rangle_{H^1(0,T;H^1)}$$

and on the one hand,

$$\langle Y_1, \delta Y\rangle_{H^1(0,T;L^2)} = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (I-\partial_t^2)Y_1\delta Y + \int_{\mathbb{R}^3} \left(\partial_t Y_1(T)\delta Y(T) - \partial_t Y_1(0)\delta Y(0)\right).$$

while on the other hand,

$$\begin{aligned}\langle \nabla Y_1, \nabla \delta Y\rangle_{H^1(0,T;L^2)} \quad &= \quad \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} -(I-\partial_t^2)\Delta Y_1 \delta Y \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^3} \left(\partial_t \Delta Y_1(0)\delta Y(0) - \partial_t \Delta Y_1(T)\delta Y(T)\right).\end{aligned}$$

We obtain

$$\langle Y_1, \delta Y\rangle_{H^1(0,T;H^1)} = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1\delta Y$$
$$+ \int_{\mathbb{R}^3} \big(\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y(T) - \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y(0)\big).$$

The optimality condition becomes :

$$\begin{aligned}&\forall \delta Y \in H^1(0,T;L^2),\\ &\quad r\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1\delta Y\, dxdt + r\int_{\mathbb{R}^3} \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y(T)\, dx\\ &\qquad\qquad - r\int_{\mathbb{R}^3} \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y(0)\, dx\\ &\qquad\qquad\qquad = Im\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\,(I-\Delta)^{-1}\,\delta Y\, dxdt\end{aligned}$$

and since an integration by parts gives

$$\begin{aligned}&Im\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\,(I-\Delta)^{-1}\,\delta Y\, dxdt\\ =\ \ &Im\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta Y(I-\Delta)^{-1}\left(u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\right)\, dxdt,\end{aligned}$$

we obtain for all $\delta Y$ in $H^1(0,T;L^2)$,

$$\begin{aligned}
& r\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1\delta Y\,dxdt \\
& + r\int_{\mathbb{R}^3}\big(\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y(T)-\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y(0)\big)\,dxs \\
& = Im\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}\delta Y(I-\Delta)^{-1}\left(u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\right)\,dxdt.
\end{aligned}$$

It can be notice that if the target $u_1$ is in $L^2$ then $p\in L^\infty(0,T;L^2)$ and since $u\in L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)$, we have $u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\in L^\infty(0,T;L^1)$. Then, as we have $L^1(\mathbb{R}^3)\hookrightarrow H^{-2}(\mathbb{R}^3)$, we get $(I-\Delta)^{-1}\left(u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\right)\in L^\infty(0,T;L^2)$ and finally, the right hand side has a meaning.

Thus, the optimality condition corresponds to the system :

$$\begin{cases} r(I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1=(I-\Delta)^{-1}\left(Im(u\overline{p})\sqrt{1+|x|^2}\right) & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,T) \\ \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)=\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)=0 & \text{in } \mathbb{R}^3. \end{cases}$$

where

$$V_1=\left(1+|x|^2\right)^{\frac{1}{2}}(I-\Delta)^{-1}\,Y_1.$$

# Chapitre 7

# A bilinear optimal control problem applied to a time dependent Hartree-Fock equation coupled with classical nuclear dynamics

L'article qui suit est actuellement soumis.

ABSTRACT : We study a problem of bilinear optimal control for the electronic wave function of an Helium atom (one nucleus and two electrons) by an external time dependent electric field. The behavior of the atom is modeled by the Hartree-Fock equation (whose solution is the wave function of the electrons) coupled with the classical Newtonian dynamics (for the position of the nucleus). We prove the existence of a bilinear optimal control in the case when the position of the nucleus is known and also prove the corresponding optimality condition. Then, we detail the proof of the existence of an optimal control for the coupled system and complete the study giving a formal optimality condition to define the electric control.

**Keywords :** Hartree-Fock equation, optimal control, optimality condition.
*AMS Classification :* 49J20, 35Q55.

RÉSUMÉ : Nous étudions le problème du contrôle optimal bilinéaire de la fonction d'onde électronique d'un atome d'Helium (un noyau et deux électrons) par un champ électrique extérieur dépendant du temps. Le comportement de l'atome est modélisé par une équation de Hartree-Fock (de solution la fonction d'onde des électrons) couplée à une équation de la dynamique newtonienne (pour la position du noyau). Nous démontrons l'existence d'un contrôle optimal bilinéaire dans le cas ou la position du noyau est considérée comme connue. Nous donnons aussi la démonstration de la condition d'optimalité associée. Nous détaillons ensuite la preuve de l'existence d'un contrôle optimal pour le système d'équations couplées avant de compléter l'étude en donnant une condition d'optimalité formelle pour définir le contrôle électrique.

## 7.1 Introduction

We are interested in a bilinear optimal control problem applied to the mathematical model of the behavior of a simplified chemical system, in fact an Helium atom, controlled by an external electric field. We describe the chemical system in terms of ordinary and partial differential equations using very classical approximations of quantum chemistry.

On the one hand, since the nucleus is much heavier than the electrons, we consider it as a point particle which moves according to the Newton dynamics in the external electric field and in the electric potential created by the electronic density (nucleus-electron attraction of Hellman-Feynman type). We obtain a second order in time ordinary differential equation solved by the position $a(t)$ of the nucleus (of mass $m$). On the other hand, under the restricted Hartree-Fock formalism, we describe the behavior of the electrons by a wave function, solution of a time dependent Hartree-Fock equation. We can define it as a Schrödinger equation with a coulombian potential due to the nucleus, singular at finite distance, an electric potential corresponding to the external electric field, possibly unbounded, and a nonlinearity of Hartree type in the right hand side. We want precisely to study the optimal control of the wave function of the electrons only, the control being performed by the electric potential.

We are in fact considering the following coupled system :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2 a}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx - \nabla V_1(a), & \text{in } (0,T) \\ a(0) = a_0, \ \ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0 \end{cases} \tag{7.1}$$

where $V_1$ is the external electric potential which takes its values in $\mathbb{R}$ and satisfy the assumptions :

$$\begin{array}{rcl} (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \text{ and} \\ \nabla V_1 & \in & L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)\right). \end{array} \tag{7.2}$$

We will define later on the optimal control problem related to this system and recall the precise results of existence and regularity of the solution we need in the sequel.

The Cauchy problem for this kind of non-adiabatic approximation of the general chemical Schrödinger equation has also been studied in the particular case when the atom is subjected to a uniform external time-dependent electric field $I(t)$ such that in equation (7.1), one has $V_1 = -I(t)\cdot x$ as in reference [10]. The authors remove the electric potential from the equation using a change of unknown function and variables (gauge transformation given in [22]). From then on, they have to deal with the nonlinear Schrödinger equation with only a time dependent coulombian potential.

We work in $\mathbb{R}^3$ and throughout this paper, we use the following notations :

$$\nabla v = \left(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \frac{\partial v}{\partial x_2}, \frac{\partial v}{\partial x_3}\right), \quad \Delta v = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}, \quad \partial_t v = \frac{\partial v}{\partial t},$$

$Re$ and $Im$ are the real and the imaginary parts of a complex number,
$\langle\, .\, ,\, .\, \rangle$ stands for the scalar product in an Hilbert space
$W^{2,1}(0,T) = W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$, for $p \geq 1$, $L^p = L^p(\mathbb{R}^3)$ and
the usual Sobolev spaces are $H^1 = H^1(\mathbb{R}^3)$ and $H^2 = H^2(\mathbb{R}^3)$.

We also define

$$\begin{aligned} H_1 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|v(x)|^2\, dx < +\infty \right\} \\ H_2 &= \left\{ v \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^2|v(x)|^2\, dx < +\infty \right\}. \end{aligned}$$

One can notice that $H_1$ and $H_2$ are respectively the images of $H^1$ and $H^2$ under the Fourier transform.

On a mathematical point of view, the optimal control problem consists in minimizing a cost functional depending on the solution of a state equation (here, a coupled system of partial differential equations) and to characterize the minimum of the functional by an optimality condition. One will see in the sequel that even if we can prove existence of an optimal control for system (7.1), we cannot justify the optimality condition we formally obtain. However, the process will be described and fully proved in the following section in the simpler situation where the position of the nucleus is known at every moment.

Let $(u,a)$ be a solution of system (7.1) where the external electric field $V_1$ is the control, and $u_1 \in L^2$ be a given target. We define the cost functionnal $J$ by

$$J(V_1,u) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(T)-u_1|^2\, dx + \frac{r}{2}\|V_1\|^2_{\mathcal{H}}$$

where $r > 0$ is a weight affecting the control cost and

$$\mathcal{H} = \left\{ V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;\mathcal{W}) \text{ and } \nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}\right) \right\}$$

where $\mathcal{W}$ is an Hilbert space which satisfies $\mathcal{W} \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$.

Can one find a minimizer $V_1 \in \mathcal{H}$ for $\inf\{J(V,u),\ V \in \mathcal{H}\}$ ?

*Remarks :* **1)** For example, in the space $\mathcal{H}$, we can choose the Hilbert space

$$\mathcal{W} = H^3 \oplus \text{Span}\{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m\}$$

where $m \in \mathbb{N}$, and for all $i \in [\![1,m]\!]$, $\psi_i \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \setminus H^3(\mathbb{R}^3)$.
**2)** In $\mathcal{H}$, we can replace the hypothesis on $\nabla V$ by $\nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right)$ as in assumption (7.2). Indeed, since we do not use any hypothesis on $\nabla V_1$ to prove that the

solution $a$ is bounded in $C([0,T])$ (see chapter 5, section 5.4), then we don't need any information on $\nabla V_1$ at infinity in $\mathbb{R}^3$. We will give details later on.

We can actually prove the following theorem :

**Theorem 1.** *There exists an optimal control $V_1 \in \mathcal{H}$ such that*

$$J(V_1, u) = \inf\{J(V,u),\ V \in \mathcal{H}\}.$$

One can notice that in order to be able to formulate the bilinear optimal control problem we first need an existence result for a solution of the coupled system (7.1). We have already proved one, actually with a more general hypothesis on $V_1$. Indeed, we have

**Theorem 2.** *We assume that $T$ is a positive arbitrary time and*

$$\begin{array}{rcl}(1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3),\\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)),\\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)) \text{ and}\\ \nabla V_1 & \in & L^2(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)).\end{array} \tag{7.3}$$

*If $u_0 \in H^2 \cap H_2$, $a_0,\ v_0 \in \mathbb{R}$, then system* (7.1) *has at least a solution*

$$(u,a) \in \big(W^{1,\infty}(0,T;L^2) \cap L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)\big) \times W^{2,1}(0,T).$$

*Moreover, for any solution of (7.1) in this class, if $\rho_0 > 0$ is such that*

$$\big\|(1+|x|^2)^{-1}V_1\big\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} \leq \rho_0,$$

*then there exists $R > 0$ depending on $\rho_0$ such that $\|a\|_{C([0,T])} \leq R$ and if $\rho_1 > 0$ is such that*

$$\left\|\frac{V_1}{1+|x|^2}\right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\|\frac{\nabla V_1}{1+|x|^2}\right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B_R))} \leq \rho_1$$

*then there exists a non-negative constant $K^0_{T,\rho_1}$ depending on the time $T$, on $\rho_1$, on $\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$ and on $|a_0|,\ |v_0|$, such that :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + m\left\|\frac{da}{dt}\right\|_{L^\infty(0,T)} + m\left\|\frac{d^2a}{dt^2}\right\|_{L^1(0,T)}$$
$$+ \sup_{t\in[0,T]}\left(\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u(t,x)|^2 \star \frac{1}{|x|}\right)|u(t,x)|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq K^0_{T,\rho_1}. \tag{7.4}$$

One can notice that if $V_1 \in \mathcal{H}$ then it satisfies assumptions (7.2) and (7.3), and we have at least a solution to equation (7.1) with Theorem 2. The optimal control problem is then well defined.

The reader may also notice that we do not give any uniqueness result for the coupled system (7.1) in Theorem 2. Indeed, even if we are convinced that the solution in this class is unique, we do not have a proof of this result up to now. Actually, E. CANCÈS and C. LE BRIS give a proof of existence and uniqueness of solutions for the analogous system without electric potential in [10]. Of course, the method for proving uniqueness used in this article cannot be applied here because the Marcinkiewicz spaces which are used do not suit the general electric potential $V_1$ satisfying (7.3).

We underline that the lack of proof for uniqueness of the solution has no effects on the proof of existence of an optimal control (Theorem 1) but of course it is a main obstruction to the obtention of an optimality condition.

The next section presents the study of the situation where the position of the nucleus is known, instead of being the solution of an ordinary differential equation coupled to the Hartree-Fock equation. Without any coupling, the problem comes down to the difficulty of dealing with a nonlinear Schrödinger equation. In section 7.3, we give the proof of Theorem 1 and a formal optimality condition.

## 7.2 Non-Linear Schrödinger Equation

Before studying the optimal control problem linked with the coupled situation described in the introduction, we will consider the position $a(t)$ of the nucleus as known at any time $t \in [0,T]$ and forget the second equation in (7.1). Of course, this is too restrictive for the study of the control of chemical reactions by an external electric potential, but this section is only a first step in the study of the more realistic coupled situation. Moreover, in this present case, we will give a full result for the optimal control problem described further, from the existence of an optimal control to the proof of a necessary optimality condition.

### 7.2.1 Existence, uniqueness and regularity of solution

We consider the following non-linear Schrödinger equation :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \mathbb{R}^3 \end{cases} \tag{7.5}$$

where $V_1$ takes its values in $\mathbb{R}$ and we make the following assumptions :

$$\begin{array}{rcl} a & \in & W^{2,1}(0,T) \text{ is known} \\ (1+|x|^2)^{-1}V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-1}\partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty) \text{ and} \\ (1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^3)). \end{array} \tag{7.6}$$

We have to underline that one can find in reference [14] the proof of existence, uniqueness and regularity for the analogous equation without the electric potential $V_1$. This paper also deals with the more general case of an atom with more than two electrons. We draw the reader's attention on the fact that one of the main difficulty we encounter in the situation we are interested in is the coexistence of two potentials whose singularities are non-comparable.

Before describing the optimal control problem we will consider here, we first give two regularity results, very useful in the sequel. The first one is a theorem about the linear Schrödinger equation, proved in chapter 4. The next one gives existence and regularity of the unique solution to equation (7.5) and its proof is given in chapter 5.

We first consider the linear Schrödinger equation

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{1}{|x-a|}u + V_1 u = 0, & \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

we set $\rho > 0$ and $\alpha > 0$ such that

$$\left\| \frac{V_1}{1+|x|^2} \right\|_{W^{1,1}(0,T,L^\infty)} + \left\| \frac{\nabla V_1}{1+|x|^2} \right\|_{L^1(0,T,L^\infty)} \leq \rho \text{ and } \left\| \frac{d^2 a}{dt^2} \right\|_{L^1(0,T)} \leq \alpha \quad (7.7)$$

and we have the following result :

**Theorem 3.** *Let the initial data $u_0$ belongs to $H^2 \cap H_2$ and the electric potential $V_1$ and the position $a$ of the nucleus satisfy assumption* (7.6)*. We define the family of Hamiltonians $\{H(t), t \in [0,T]\}$ by $H(t) = -\Delta - \dfrac{1}{|x-a(t)|} - V_1$. Then, there exists a unique family of evolution operators $\{U(t,s), s,t \in [0,T]\}$ (the so called propagator associated with $H(t)$) on $H^2 \cap H_2$ such that for $u_0 \in H^2 \cap H_2$ we have*

$(i)$ $U(t,s)U(s,r)u_0 = U(t,r)u_0$ *and* $U(t,t)u_0 = u_0$ *for all* $s,t,r \in [0,T]$;

$(ii)$ $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is strongly continuous in* $L^2$ *on* $[0,T]^2$ *and* $U(t,s)$ *is an isometry on* $L^2$*, that is* $\|U(t,s)u_0\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$;

$(iii)$ $U(t,s) \in \mathcal{L}(H^2 \cap H_2)$ *for all* $(s,t) \in [0,T]^2$ *and* $(t,s) \mapsto U(t,s)u_0$ *is weakly continuous from* $[0,T]^2$ *to* $H^2 \cap H_2$; *moreover, there exists* $M_{T,\alpha,\rho} > 0$ *such that :* $\forall t,s \in [0,T]$, $\forall f \in H^2 \cap H_2$,
$$\|U(t,s)f\|_{H^2 \cap H_2} \leq M_{T,\alpha,\rho}\|f\|_{H^2 \cap H_2}.$$

$(iv)$ *The equalities* $i\partial_t U(t,s)u_0 = H(t)U(t,s)u_0$ *and* $i\partial_s U(t,s)u_0 = -U(t,s)H(s)u_0$ *hold in* $L^2$.

Now, Theorem 3 is the main ingredient to prove the following result of existence along with a Picard fixed point theorem.

**Theorem 4.** *Let $T$ be a positive arbitrary time and $\alpha$ and $\rho$ satisfy $(7.7)$. Under assumption* (7.6)*, and if we also assume $u_0 \in H^2 \cap H_2$, then equation* (7.5) *has a unique solution*

$$u \in L^\infty(0,T; H^2 \cap H_2) \text{ with } \partial_t u \in L^\infty(0,T; L^2)$$

*and there exists a real constant $C > 0$ depending on $T$, $u_0$, $\alpha$ and $\rho$ such that :*

$$\|u\|_{L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2)} + \|\partial_t u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C\|u_0\|_{H^2 \cap H_2}.$$

We draw the reader's attention to the uniqueness of the solution of (7.5) in this result. Thus, we can correctly define an optimal control problem on equation (7.5), the control being the external electric potential $V_1$ and the solution $u$.

From now on, we may denote $\dfrac{1}{|x-a|}$ by $V_0$ and we mean $a \in W^{2,1}(0,T)$. Theorem 3 is also useful to give a meaning to the equations we will encounter in the sequel. More precisely, we consider the general equation

$$\begin{cases} i\partial_t v + \Delta v + V_0 v + V_1 v = f(v), & \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ v(0) = v_0, & \mathbb{R}^3 \end{cases} \quad (7.8)$$

and we give the following result :

**Proposition 5.** *Let $T$ be a positive arbitrary time. Under assumption* (7.6)*, if we assume $v_0 \in L^2$ and if we also assume that there exists $C, C_M > 0$ such that for all $u, v \in C([0,T]; L^2)$,*

$$\|f(u)\|_{L^1(0,T,L^2)} \leq CT(\|u\|_{C([0,T];L^2)} + 1)$$

*and when $\|u\|_{C([0,T];L^2)} \leq M$ and $\|v\|_{C([0,T];L^2)} \leq M$,*

$$\|f(u) - f(v)\|_{L^1(0,T,L^2)} \leq C_M T \|u - v\|_{C([0,T];L^2)},$$

*then equation* (7.8) *has a unique solution $v \in C([0,T]; L^2)$.*

The proof uses a Picard fixed point theorem on the functional $\Phi$ defined on the space $C([0,T]; L^2)$ by $\Phi : v \mapsto v_0 - i \int_0^{\cdot} U(\cdot, s) f(v(s))\, ds$ where $U$ is the propagator of Theorem 3.

### 7.2.2 Optimal control problem

On the evolution system (7.5), we define an optimal control problem which reads as follows : if $u_1 \in L^2$ is a given target, find a minimizer $V_1 \in H$ for

$$\inf\{J(V),\ V \in H\} \tag{7.9}$$

where the cost functionnal $J$ is defined by

$$J(V_1) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |u(T) - u_1|^2\, dx + \frac{r}{2} \|V_1\|_H^2,\ r > 0. \tag{7.10}$$

There,

$$H = \left\{ V,\ \left(1 + |x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T; W) \right\}$$

where $W$ is an Hilbert space such that $W \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ and in (7.10), $u$ is the solution of equation (7.5).

*Remarks :* 1) One can notice that if $V_1$ belongs to $H$, then it satisfies (7.6) and we can apply Theorem 4 that gives a unique solution $u$.
2) This space $H$ has been chosen here as an Hilbert space in order to have a differentiable norm.
3) This optimal control problem is a so-called "bilinear optimal control problem" and the mapping *control* $\rightarrow$ *state* ($V_1 \mapsto u$) is strongly nonlinear.

Let us now formulate the result on the bilinear optimal control problem.

**Theorem 6.** *There exists an optimal control $V_1 \in H$ such that*

$$J(V_1) = \inf\{J(V),\ V \in H\}$$

*and for all $\delta V$ in $H$, $V_1$ satisfies*

$$r\langle V_1, \delta V\rangle_H = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V(x,t) u(x,t) \bar{p}(x,t)\, dxdt \tag{7.11}$$

*where $u$ is solution of* (7.5) *and $p$ is solution of the following adjoint problem*

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + V_0 p + V_1 p = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})p + 2i(Im(u\overline{p}) \star \dfrac{1}{|x|})u & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ p(T) = u(T) - u_1 & \text{in } \mathbb{R}^3. \end{cases} \tag{7.12}$$

*Remark :* If we substitute the Hilbert space $H$ by the space corresponding to assumption (7.6) in the definition of $J$ and in (7.9), the existence of an optimal control can also be proved. Nevertheless, the proof of an optimality condition needs an Hilbert space.

A result of existence for a bilinear optimal control problem, governed by a Schrödinger equation with the same Hartree non-linearity $(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$, has also been given by E. CANCÈS, C. LE BRIS and M. PILOT in [11]. The authors deal with an electric potential homogeneous in space $V_1 = -E(t) \cdot x$ with $E \in L^2(0,T)$, while we take into account here a more general electric potential optimal control. For instance, in the definition of $H$, we can consider the Hilbert space $W = H^3 \oplus \text{Span}\{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m\}$ with $m \in \mathbb{N}$, and for all $i \in [\![1, m]\!]$, $\psi_i \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \setminus H^3(\mathbb{R}^3)$. Then $W \hookrightarrow W^{1,\infty}$ and this example enables us to deal both with the particular case of [11] where $V_1(x,t) = E(t) \cdot x$ but for $E \in H^1(0,T)$ and with general electric potentials $(1 + |x|^2)^{-\frac{1}{2}} V_1(t) \in H^2(\mathbb{R}^3)$ which are non-homogeneous in space.

We can also specify the optimality condition in the particular case where $W = H^3(\mathbb{R}^3) \oplus \text{Span}\{\psi_1\}$ by an optimality system. We choose for instance $\psi_1 = \mathbb{1}$ where $\psi_1(x) = 1$, for all $x \in \mathbb{R}^3$. Therefore, from the optimality condition (7.11), we can get an optimality system that reads :

$$
\begin{cases}
r(I - \partial_t^2)(I - \Delta)Y_1 = (I - \Delta)^{-1} \left( Im(u\overline{p})\sqrt{1 + |x|^2} \right) & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\
\partial_t(Y_1 - \Delta Y_1)(T) = \partial_t(Y_1 - \Delta Y_1)(0) = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3 \\
r\left(E - \dfrac{d^2E}{dt^2}\right) = Im \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{p}\sqrt{1 + |x|^2}\, dx & \text{in } (0,T) \\
\dfrac{dE}{dt}(T) = \dfrac{dE}{dt}(0) = 0. &
\end{cases}
$$

where $V_1(x,t) = \left(1 + |x|^2\right)^{\frac{1}{2}} \left[(I - \Delta)^{-1} Y_1(x,t) + E(t)\right]$ and $p$ is the solution of the adjoint equation (7.12). The proof when $W = H^3$ can be read for the problem of optimal control for the linear Schrödinger equation in the previous chapter, the only changes being the adjoint equation solved by $p$ and the absence of $E$.

The proof of Theorem 6 is divided in two steps. Existence of an optimal control can be treated first while the optimality condition requires the proof of the continuity and the differentiability of $J$. The regularity result of Theorem 4 is strongly needed for proving this differentiability result.

**Existence of an optimal control**

We will prove here the existence of an electric optimal control minimizing the cost functional. Indeed, we are going to prove :

$$\exists V_1 \in H \text{ such that } J(V_1) = \inf\{J(V),\ V \in H\}.$$

*Remark :* The structure of the proof given in the preceding chapter, for a bilinear optimal control problem defined on the linear Schrödinger equation, is analogous to the one we will follow here.

We consider a minimizing sequence $(V_1^n)_{n \geq 0}$ in $H$ for the functional $J$ :

$$\inf_H J(V) = \lim_{n \to \infty} J(V_1^n).$$

Since

$$J(V_1^n) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(T) - u_1|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V_1^n\|_H^2$$

where $u_n$ is solution of (7.5) with potential $V_1 = V_1^n$, we then obtain that $(V_1^n)_{n\geq 0}$ is bounded in $H$, independently of $n$. Up to a subsequence, we have $V_1^n \rightharpoonup V_1$ weakly in $H$ and

$$\|V_1\|_H \leq \underline{\lim}\|V_1^n\|_H. \tag{7.13}$$

The difficulty comes from the term $\|u_n(T) - u_1\|_{L^2}^2$. If we can prove that for all $t$ in $[0,T]$, $u_n(t) \longrightarrow u(t)$ in $L^2$, where $u$ is the solution associated with $V_1$, then

$$\lim_{n\to+\infty} \|u_n(T) - u_1\|_{L^2}^2 = \|u(T) - u_1\|_{L^2}^2, \tag{7.14}$$

and from (7.13) and (7.14) we obtain

$$J(V_1) \leq \underline{\lim} J(V_1^n) = \inf_{V\in H} J(V).$$

As $V_1 \in H$, we get $J(V_1) = \inf\limits_H J$ and the existence of an optimal control is proved.

We set $F(u) = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u$ and we consider $w_n = u_n - u$ solution of the following equation :

$$\begin{cases} i\partial_t w_n + \Delta w_n + V_0 w_n + V_1^n w_n = F(u_n) - F(u) + u(V_1 - V_1^n), & \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ w_n(0) = 0, & \mathbb{R}^3. \end{cases} \tag{7.15}$$

We are going to prove that for all $t$ in $[0,T]$, $\|w_n(t)\|_{L^2} \longrightarrow 0$.

In order to deal with the nonlinearity, we observe that we have, from Cauchy-Schwarz and Hardy's inequality,

$$\begin{aligned} \|F(u) - F(u_n)\|_{L^2} &\leq \left\|(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u - (|u_n|^2 \star \frac{1}{|x|})u_n\right\|_{L^2} \\ &\leq \left\|(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u - u_n)\right\|_{L^2} + \left\|\left((|u|^2 - |u_n|^2) \star \frac{1}{|x|}\right) u_n\right\|_{L^2} \\ &\leq 2\|u\|_{L^2}\|\nabla u\|_{L^2}\|u - u_n\|_{L^2} \\ &\quad + 2\|u_n\|_{L^2}\left(\|\nabla u\|_{L^2} + \|\nabla u_n\|_{L^2}\right)\|u - u_n\|_{L^2} \\ &\leq C(\|u\|_{H^1}^2 + \|u_n\|_{H^1}^2)\|u - u_n\|_{L^2}. \end{aligned} \tag{7.16}$$

Therefore, if we multiply equation (7.15) by $\overline{w_n}$ integrate on $\mathbb{R}^3$ and take the imaginary part, which means we calculate $Im\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}(7.15).\overline{w_n}(x)\,dx$, we obtain :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|w_n|^2\,dx\right) &\leq C\,\|F(u) - F(u_n)\|_{L^2}\|w_n\|_{L^2} + C\int_{\mathbb{R}^3}|V_1^n - V_1||u||w_n|\,dx \\ &\leq C\left(\|u_n\|_{H^1}^2 + \|u\|_{H^1}^2\right)\|w_n\|_{L^2}^2 \\ &+\ C\,\|V_1^n - V_1\|_H \int_{\mathbb{R}^3}|u|(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|w_n|\,dx \end{aligned}$$

From Theorem 4, we have :

$$\|u_n\|_{L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)} + \|\partial_t u_n\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C\|u_0\|_{H^2\cap H_2}$$

where $C$ is independent of $n$ since $(V_1^n)_{n\geq 0}$ is bounded in $H$. Then,

$$\forall t \in [0,T],\ \|u_n(t)\|_{H^1}^2 + \|u(t)\|_{H^1}^2 \leq C$$

and we actually obtain ($C$ denoting a generic constant depending on $T$),

$$\frac{d}{dt}\left(\|w_n(t)\|_{L^2}^2\right) \leq C\,\|w_n(t)\|_{L^2}^2 + C\int_{\mathbb{R}^3} |u(t)|(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|w_n(t)|\,dx \qquad (7.17)$$

Moreover, we will need the following compactness lemma (see reference [44] for the proof).

**Lemma 7.** *Let $X,\ B$ and $Y$ be Banach spaces and $p \in [1,\infty]$.*
*We assume that $X \hookrightarrow B \hookrightarrow Y$ with compact embedding $X \hookrightarrow B$.*
*If $\{f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^p(0,T;X)$ and if $\{\partial_t f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is bounded in $L^p(0,T;Y)$ then $\{f_n, n \in \mathbb{N}\}$ is relatively compact in $L^p(0,T;B)$ (and in $C([0,T];B)$ if $p=\infty$).*

Then, it has to be noticed that up to a subsequence we also have $u_n \longrightarrow u$ in $C([0,T];H^1_{\text{loc}})$. Indeed, we can use Lemma 7 since $(u_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $L^\infty(H^2 \cap H_2)$ and $(\partial_t u_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $L^\infty(L^2)$. Then for all $R>0$,

$$\|w_n\|_{C([0,T];L^2(B(0,R))} \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0 \qquad (7.18)$$

and on the other hand, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\left(\int_{B(0,R)^c} \frac{|w_n(t)|^2}{1+|x|^2}\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\frac{1}{1+R^2}\right)^{\frac{1}{2}} \|w_n(t)\|_{L^2}.$$

Thus, using Cauchy-Schwarz inequality, we can write

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3} |u(t)|(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|w_n(t)|\,dx \\
\leq\ & \int_{B(0,R)} |u(t)|(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|w_n(t)|\,dx + \int_{B(0,R)^c} |u(t)|(1+|x|^2)\frac{|w_n(t)|}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}\,dx \\
\leq\ & \|u(t)\|_{H_1}\|w_n(t)\|_{L^2(B(0,R))} + \frac{1}{\sqrt{1+R^2}}\,\|u(t)\|_{H_2}\|w_n(t)\|_{L^2} \\
\leq\ & C\left(\|w_n\|_{C([0,T];L^2(B(0,R))} + \frac{1}{\sqrt{1+R^2}}\,\|w_n(t)\|_{L^2}\right). \qquad (7.19)
\end{aligned}$$

We set $E_n(t) = \|w_n(t)\|_{L^2}^2 + \|w_n\|_{C([0,T];L^2(B(0,R))}$, where one can notice that $\|w_n\|_{C([0,T];L^2(B(0,R))}$ does not depend on $t$. From (7.17) and (7.19), it satisfies

$$\frac{dE_n}{dt}(t) \leq CE_n(t) + \frac{C}{\sqrt{1+R^2}}\,\sqrt{E_n(t)}.$$

Since $E_n(0) = \|w_n\|_{C([0,T];L^2(B(0,R))}$ and since we have actually

$$\frac{d\sqrt{E_n}}{dt}(t) \leq C\sqrt{E_n(t)} + \frac{C}{\sqrt{1+R^2}},$$

then, from Gronwall lemma, we obtain that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\sqrt{E_n(t)} \leq CT\frac{e^{CT}}{\sqrt{1+R^2}} + e^{CT}\|w_n\|^{\frac{1}{2}}_{C([0,T];L^2(B(0,R))}.$$

It means that since $T$ is fixed and since we have (7.18), then for any $\varepsilon > 0$, there exists $R > 0$ and $n_0$ large enough in $\mathbb{N}$ such that

$$CT\frac{e^{CT}}{\sqrt{1+R^2}} \leq \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{and} \quad \forall n \geq n_0,\ e^{CT}\|w_n\|^{\frac{1}{2}}_{C([0,T];L^2(B(0,R))} \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

We finally obtain that for all $t$ in $[0,T]$, $\|w_n(t)\|_{L^2} \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0$ and therefore, $u$ is the solution of (7.5) in the sense of distributions and we have proved the existence of an optimal control $V_1$ associated with the functionnal $J$. We then have to write an optimality condition for $V_1$.

**Optimality condition**

The usual way to obtain an optimality condition is to prove that the cost functional $J$ is differentiable and to translate the necessary condition

$$DJ(V_1)[\delta V_1] = 0,\ \forall \delta V_1 \in H$$

in terms of the adjoint state. Since $J(V_1) = \frac{1}{2}\|u(T) - u_1\|^2_{L^2} + \frac{r}{2}\|V_1\|^2_H$, as announced in the introduction, the main difficulty comes from the necessity to differentiate the state variable $u$ with respect to the control $V_1$, in order to calculate the gradient $DJ(V_1)$. We postpone the proof of the following lemma.

**Lemma 8.** *Let u be the solution of* (7.5). *The functional* $\phi$ *defined by*

$$\begin{array}{rcl} \phi : H & \to & L^2(\mathbb{R}^3) \\ V_1 & \mapsto & u(T) \end{array}$$

*is differentiable and if z is the solution of the following equation, set in* $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$ *:*

$$\begin{cases} i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z = -\delta V_1 u + (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})z + 2Re(u\overline{z} \star \frac{1}{|x|})u, \\ z(t=0) = 0 \end{cases} \tag{7.20}$$

*we have* $z \in C([0,T];L^2)$ *and* $D\phi(V_1)[\delta V_1] = z(T)$.

We deduce from Lemma 8 that $J$ is differentiable with respect to $V_1$. Thereafter, since $D\phi(V_1)[\delta V_1] = z(T)$, the condition

$$DJ(V_1)[\delta V_1] = 0,\ \forall \delta V_1 \in H$$

reads

$$Re\int_{\mathbb{R}^3} (u(T,x) - u_1(x))\,\overline{z(T,x)}\,dx + r\langle V_1, \delta V_1\rangle_H = 0. \tag{7.21}$$

*Remarks :* 1) As for the study of the same bilinear optimal control problem for the linear Schrödinger equation one has read in the preceding chapter, we can prove the

differentiability of $V_1 \mapsto u(T)$ with values in $L^2$ but we don't know whether this remains true if we consider the same mapping with values in $H^1$ for example. We think that the differentiability is not true anymore. Therefore, in the functional $J$, the first term cannot be replaced by a stronger norm of $u(T) - u_1$.
2) We can also underline the choice of $H$ we made on purpose. As it is an Hilbert space, we can easily take the derivative of the norm $\|\cdot\|_H$ in the functional $J$.

Now, we consider the adjoint system (7.12) :

$$\begin{cases} i\partial_t p + \Delta p + V_0 p + V_1 p = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})p + 2i(Im(u\overline{p}) \star \dfrac{1}{|x|})\overline{u} & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ p(T) = u(T) - u_1 & \text{in } \mathbb{R}^3. \end{cases}$$

Using Proposition 5, one can prove that the equivalent integral equation has a unique solution $p \in C([0,T]; L^2)$ since we have

$$\left\| (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})p + 2i(Im(u\overline{p}) \star \frac{1}{|x|})\overline{u} \right\|_{L^1(0,T;L^2)} \leq CT\|p\|_{C([0,T];L^2)}.$$

We then multiply equation (7.20) by $\overline{p}$, integrate on $[0,T] \times \mathbb{R}^3$ and take the imaginary part. We obtain :

$$Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z)\overline{p} = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} -\delta V_1 u\overline{p}$$
$$+Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})z\overline{p} + 2\; Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} Re(u\overline{z} \star \frac{1}{|x|})u\overline{p}.$$

Then $z(0) = 0$ implies

$$Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} z\; \left(\overline{i\partial_t p} + \overline{\Delta p} + \overline{(V_0 + V_1)p}\right) + Im\; i \int_{\mathbb{R}^3} z(T)\; \overline{p(T)}$$
$$= -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{p} + Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \overline{z(|u|^2 \star \frac{1}{|x|})p}$$
$$+2 \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (Im(u\overline{p}) \star \frac{1}{|x|})Re(u\overline{z})$$

and since $p$ satisfies equation (7.12), we get

$$Im\; i \int_{\mathbb{R}^3} z(T).\; \overline{(u(T) - u_1)} = -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{p}$$

which gives

$$Re \int_{\mathbb{R}^3} \overline{z(T)}\; (u(T) - u_1) = -Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{p}. \tag{7.22}$$

Using (7.22), the optimality condition (7.21) can be written :

$$r\langle V_1, \delta V_1\rangle_H = Im \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{p}\, dxdt,\; \forall \delta V_1 \in H.$$

The proof of Theorem 6 will be complete with the proof of Lemma 8. □

**Proof of Lemma 8.** Actually, we will first study the continuity of $\phi$ and then the differentiability. We recall the definition of the functional $\phi$ : if $u$ is the solution of (7.5) with electric potential $V_1$ in $H$, then

$$\begin{array}{rcl} \phi : H & \to & L^2(\mathbb{R}^3) \\ V_1 & \mapsto & u(T). \end{array}$$

According to Proposition 5 and to the properties of $F$, we consider the solution $\delta u \in C([0,T];L^2)$ of the following equation set in $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} i\partial_t \delta u + \Delta \delta u + V_0 \delta u + (V_1 + \delta V_1)\delta u = -\delta V_1 u + F(u+\delta u) - F(u) \\ \delta u(0) = 0. \end{array} \right. \tag{7.23}$$

In order to prove the continuity of $\phi$, we will prove that

$$\|\delta u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} = O(\|\delta V_1\|_H).$$

Let us calculate $Im \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} (7.23).\overline{\delta u}(x)\, dx$. Using the property (7.16) of $F$, we obtain

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{d}{dt}\left( \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |\delta u|^2\, dx \right) & \leq & C\|\delta V_1\|_H \|u\|_{H_1} \|\delta u\|_{L^2} + C\|F(u+\delta u) - F(u)\|_{L^2} \|\delta u\|_{L^2} \\ & \leq & C\|\delta V_1\|_H \|u\|_{H_1} \|\delta u\|_{L^2} + C(\|\delta u + u\|_{L^2}^2 + \|\delta u\|_{L^2}^2)\|\delta u\|_{L^2}^2 \\ & \leq & C\|\delta V_1\|_H \|\delta u\|_{L^2} + C\|\delta u\|_{L^2}^2. \end{array}$$

Indeed, the solution $u$ of equation (7.5) and the solution $u + \delta u$ of the same equation but with potential $V_1 + \delta V_1$, are bounded in $L^2$. As $\delta u(0) = 0$ and using Gronwall's lemma, it follows

$$\|\delta u(t)\|_{L^2} \leq CTe^{Ct} \|\delta V_1\|_H \ , \ \forall t \in [0,T].$$

Eventually, we get $\|\delta u\|_{C([0,T];L^2)} = O(\|\delta V_1\|_H)$, the continuity of $\phi$ is proved and we will now prove the differentiability.

We first have to prove that $z(T)$ is well defined in $L^2$ where $z$ is solution of (7.20) and then, if we set $w = \delta u - z$, we will prove that

$$\|w(T)\|_{L^2} = o(\|\delta V_1\|_H)$$

which means that $D\phi(V_1)[\delta V_1] = z(T)$ and completes the proof of Lemma 8.

Since we can prove the right hand side of equation (7.20) satisfies

$$\left\| (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})z + 2Re(u\overline{z} \star \frac{1}{|x|})u - \delta V_1 u \right\|_{L^1(0,T;L^2)} \leq CT(\|z\|_{C([0,T],L^2)} + 1),$$

then Proposition 5 gives a unique solution $z \in C([0,T];L^2)$ to equation (7.20). Moreover, if we calculate $Im \int_{\mathbb{R}^3} (7.20).\overline{z}(x)\,dx$, we obtain from Hardy's inequality :

$$
\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} |z|^2\,dx\right) = -2Im\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 u\overline{z}\,dx + 2\int_{\mathbb{R}^3} (Re(u\overline{z}) \star \frac{1}{|x|}) Im(u\overline{z})\,dx \\
\leq \;& C\,\|\delta V_1\|_H \|u\|_{H_1}\|z\|_{L^2} + C\int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)||z(x)|}{|x-y|}|u(y)||z(y)|\,dxdy \\
\leq \;& C\,\|\delta V_1\|_H \|z\|_{L^2} + C\,\|\nabla u\|_{L^2}\|z\|_{L^2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)||z(x)|\,dx \\
\leq \;& C\,\|\delta V_1\|_H \|z\|_{L^2} + C\,\|z\|^2_{L^2}.
\end{aligned}
$$

It implies

$$
\|z(t)\|^2_{L^2} \leq C\|\delta V_1\|_H \int_0^t \|z(s)\|_{L^2}\,ds + C\int_0^t \|z(s)\|^2_{L^2}\,ds \tag{7.24}
$$

and a Gronwall argument leads us easily to deduce that there exists a constants $C_T > 0$ such that

$$
\|z(t)\|_{L^2} \leq C_T\|\delta V_1\|_H,\ \forall t \in [0,T]. \tag{7.25}
$$

In order to simplify the right hand side of the equation solved by $w = \delta u - z$, we consider the source terms of equation (7.23) solved by $\delta u$ :

$$
\begin{aligned}
& F(u+\delta u) - F(u) - \delta V_1 u \\
= \;& (|u+\delta u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u+\delta u) - (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u - \delta V_1 u \\
= \;& (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})\delta u + 2Re(u\overline{\delta u} \star \frac{1}{|x|})(u+\delta u) + (|\delta u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u+\delta u) - \delta V_1 u
\end{aligned}
$$

and since $z$ satisfies (7.20), we have finally the following right hand side

$$
\begin{aligned}
& F(u+\delta u) - F(u) - \delta V_1 u - \left(-\delta V_1 u + (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})z + 2Re(u\overline{z} \star \frac{1}{|x|})u\right) \\
= \;& (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})\delta u + 2Re(u\overline{\delta u} \star \frac{1}{|x|})(u+\delta u) \\
& + (|\delta u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u+\delta u) - (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})z - 2Re(u\overline{z} \star \frac{1}{|x|})u \\
= \;& (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})w + 2Re(u\overline{w} \star \frac{1}{|x|})u + 2Re(u\overline{\delta u} \star \frac{1}{|x|})\delta u \\
& + (|\delta u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u+w+z).
\end{aligned}
$$

Therefore, the equation satisfied by $w$ in $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$ is :

$$
\left\{
\begin{aligned}
& i\partial_t w + \Delta w + V_0 w + (V_1 + \delta V_1)w = -\delta V_1 z + (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})w \\
& \qquad\qquad\qquad + 2Re(u\overline{w} \star \frac{1}{|x|})u + 2Re(u\overline{\delta u} \star \frac{1}{|x|})\delta u \\
& \qquad\qquad\qquad + (|\delta u|^2 \star \frac{1}{|x|})(u+w+z) \\
& w(t=0) = 0
\end{aligned}
\right. \tag{7.26}
$$

Using Proposition 5, since the right hand side of equation (7.26) belongs to $L^1(0,T;L^2)$ and has the good properties, we can prove that there exists a unique solution $w \in C([0,T];L^2)$. We can also formally calculate $Im\int_{\mathbb{R}^3}(7.26).\overline{w}(x)\,dx$ in the same way we did to prove (7.25). Since we have $\|\delta u\|_{L^\infty(L^2)} = O(\|\delta V_1\|_H)$, we obtain :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\|w\|_{L^2}^2) &\leq C\int_{\mathbb{R}^3}|\delta V_1||z||w|\,dx + C\int_{\mathbb{R}^3}\left|(Re(u\overline{w})\star\frac{1}{|x|})Im(u\overline{w})\right|\,dx \\
&\quad + C\int_{\mathbb{R}^3}\left|Re(u\overline{\delta u}\star\frac{1}{|x|})Im(\delta u\,\overline{w})\right|\,dx \\
&\quad + C\int_{\mathbb{R}^3}\left|(|\delta u|^2\star\frac{1}{|x|})Im((u+z)\overline{w})\right|\,dx \\
&\leq C\|\delta V_1\|_H\|z\|_{H_1}\|w\|_{L^2} + C\|\nabla u\|_{L^2}\|u\|_{L^2}\|w\|_{L^2}^2 \\
&\quad + C\left(\|\nabla u\|_{L^2} + \|\nabla z\|_{L^2}\right)\|\delta u\|_{L^2}^2\|w\|_{L^2} \\
&\leq C\|\delta V_1\|_H\|z\|_{H_1}\|w\|_{L^2} + C\|w\|_{L^2}^2 + C\|\delta V_1\|_H^2\|w\|_{L^2} \\
&\quad + C\|z\|_{H^1}\|\delta V_1\|_H^2\|w\|_{L^2}
\end{aligned}$$

which means that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\frac{d}{dt}(\|w(t)\|_{L^2}) \leq C\|\delta V_1\|_H\left(\|z(t)\|_{H^1\cap H_1} + \|\delta V_1\|_H\right) + C\|w(t)\|_{L^2}. \tag{7.27}$$

Since we want to prove that $\|w\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C\|\delta V_1\|_H^2$, we have to work more on equation (7.20) in order to obtain an $H^1\cap H_1$ estimate on $z$. Actually, we could have directly proved with Theorem 3 and a Picard fixed point theorem that $z \in C([0,T];H^1\cap H_1)$. If we calculate $Im\int_{\mathbb{R}^3}(7.20).|x|^2\overline{z}(x)\,dx$, we obtain the following estimate in the usual way :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\||x|z(t)\|_{L^2}^2) &\leq C\|\nabla z(t)\|_{L^2}\||x|z(t)\|_{L^2} + C\|\delta V_1\|_H\|u(t)\|_{H_1}\||x|z(t)\|_{L^2} \\
&\quad + C\|\nabla u(t)\|_{L^2}\|u(t)\|_{H_2}\|z(t)\|_{H_1}^2 \\
&\leq C\|\nabla z(t)\|_{L^2}^2 + C\|z(t)\|_{H_1}^2 + C\|\delta V_1\|_H\||x|z(t)\|_{L^2}
\end{aligned}$$

Therefore, an integration on $[0,t]$ and $z(0)=0$ give

$$\begin{aligned}
\||x|z(t)\|_{L^2}^2 &\leq C\int_0^t\|\nabla z(s)\|_{L^2}^2\,ds + C\int_0^t\|z(t)\|_{H_1}^2\,ds \\
&\quad + C\int_0^t\|\delta V_1\|_H\||x|z(t)\|_{L^2}\,ds
\end{aligned} \tag{7.28}$$

Now, as we need to estimate $\nabla z$, we will calculate $Re\int_{\mathbb{R}^3}(7.20).\partial_t\overline{z}(x)\,dx$. Before, we can notice that :

$$Re\int_{\mathbb{R}^3}(|u|^2\star\frac{1}{|x|})z\partial_t\overline{z} = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}(|u|^2\star\frac{1}{|x|})|z|^2\right) - \int_{\mathbb{R}^3}(Re(u\partial_t\overline{u})\star\frac{1}{|x|})|z|^2$$

and

$$\begin{aligned}
2\,Re\int_{\mathbb{R}^3}(Re(u\overline{z})\star\frac{1}{|x|})u\partial_t\overline{z} &= \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3}(Re(u\overline{z})\star\frac{1}{|x|})Re(u\overline{z})\right) \\
&\quad - 2\int_{\mathbb{R}^3}(Re(u\overline{z})\star\frac{1}{|x|})Re(\overline{z}\partial_t u).
\end{aligned}$$

After some calculations and integrations by parts, we obtain

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} V_0|z|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V_1|z|^2 - \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla z|^2\right) = \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t V_0|z|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t V_1|z|^2$$
$$-2\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 Re(u\overline{z})\right) + 2\int_{\mathbb{R}^3} \partial_t(\delta V_1)Re(u\overline{z}) + 2\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1 Re(\partial_t u\,\overline{z})$$
$$+\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})|z|^2\right) - 2\int_{\mathbb{R}^3} (Re(u\partial_t\overline{u}) \star \frac{1}{|x|})|z|^2$$
$$+2\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} (Re(u\overline{z}) \star \frac{1}{|x|})Re(u\overline{z})\right) - 4\int_{\mathbb{R}^3} (Re(u\overline{z}) \star \frac{1}{|x|})Re(\overline{z}\partial_t u).$$

We recall here that $V_0(x,t) = \dfrac{1}{|x-a(t)|}$ with $a \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^3)$ thus we have $|\partial_t V_0(x,t)| = \dfrac{|\partial_t a(t)|}{|x-a(t)|^2}$. We also remind Hardy's inequality for $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$ :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u(x)|^2}{|x|^2}\,dx \leq 4\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(x)|^2\,dx.$$

Therefore we obtain

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla z(t)|\right) \quad \leq \quad & \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} (V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 + 2Re\int_{\mathbb{R}^3} \delta V_1(t)u(t)\overline{z}(t)\right) \\
& + \frac{d}{dt}\left(2\int_{\mathbb{R}^3} (Re(u(t)\overline{z}(t)) \star \frac{1}{|x|})Re(u(t)\overline{z}(t))\right) \\
& + \frac{d}{dt}\left(\int_{\mathbb{R}^3} (|u(t)|^2 \star \frac{1}{|x|})|z(t)|^2\right) \\
& + C\,\|\nabla z(t)\|_{L^1}^2 + C\,\|V_1\|_H \||x|z(t)\|_{L^2}^2 \\
& + C\,\|\partial_t u(t)\|_{L^2}\|\nabla u(t)\|_{L^2}\|z(t)\|_{L^2} \\
& + C\,\|\delta V_1\|_H\left(\|u(t)\|_{L^2} + \|\partial_t u(t)\|_{L^2}\right)\||x|z(t)\|_{L^2}.
\end{aligned}$$

We integrate this, between $0$ and $t \in [0,T]$, using $z(0)=0$,
$u \in L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2)$ and $\partial_t u \in L^\infty(0,T;L^2)$. We obtain :

$$\begin{aligned}
&\|\nabla z(t)\|_{L^2}^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3} (V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 + 2\int_{\mathbb{R}^3} |\delta V_1(t)||u(t)||z(t)| \\
&+ 2\int_{\mathbb{R}^3} (|u(t)||z(t)| \star \frac{1}{|x|})|u(t)||z(t)| + \int_{\mathbb{R}^3} (|u(t)|^2 \star \frac{1}{|x|})|z(t)|^2 \\
&+ C\int_0^t \left(\|\nabla z(s)\|_{L^2}^2 + \|z(s)\|_{H_1}^2\right)\,ds + C\,\|\delta V_1\|_H \int_0^t \|z(s)\|_{H_1}\,ds.
\end{aligned} \tag{7.29}$$

We set

$$E(t) = \|z(t)\|_{H^1}^2 + \|z(t)\|_{H_1}^2 = \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)|z(t,x)|^2\,dx + \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla z(t,x)|^2\,dx.$$

Moreover, we remind that we have (7.24) and (7.28) and adding this to (7.29), we get, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\begin{aligned} E(t) &\leq C\,\|\delta V_1\|_H \int_0^t \sqrt{E(s)}\,ds + C\int_0^t E(s)\,ds \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} (V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 + C\,\|\delta V_1\|_H \|u(t)\|_{H_1}\|z(t)\|_{L^2} \\ &+ C\,\|u(t)\|_{L^2}\|u(t)\|_{H^1}\|z(t)\|^2_{L^2}. \end{aligned}$$

Then, we can prove that for all $\eta > 0$ there exists a constant $C_\eta > 0$ such that

$$\int_{\mathbb{R}^3} (V_0(t)+V_1(t))|z(t)|^2 \leq C_\eta \|z(t)\|^2_{L^2} + \eta \|z(t)\|^2_{H^1\cap H_1}. \tag{7.30}$$

Indeed, from Cauchy-Schwarz and Hardy's inequalities, we have

$$\int_{\mathbb{R}^3} V_0(t)|z(t)|^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|z(t)|^2}{|x-a(t)|} \leq C\,\|z(t)\|_{H^1}\|z(t)\|_{L^2},$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} V_1(t)|z(t)|^2 \leq \|V_1\|_H \int_{\mathbb{R}^3} (1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}|z(t)|^2 \leq \|V_1\|_H \|z(t)\|_{L^2}\|z(t)\|_{H_1}$$

an we obtain (7.30) from Young's inequality. Consequently, if we choose $\eta$ small enough, we obtain

$$\begin{aligned} E(t) &\leq C\,\|\delta V_1\|_H \int_0^t \sqrt{E(s)}\,ds + C\int_0^t E(s)\,ds \\ &+ C_\eta \|z(t)\|^2_{L^2} + C\,\|\delta V_1\|_H \|z(t)\|_{L^2} \end{aligned}$$

and using (7.25), we get

$$E(t) \leq C\,\|\delta V_1\|_H \int_0^t \sqrt{E(s)}\,ds + C\int_0^t E(s)\,ds + C\,\|\delta V_1\|^2_H.$$

We recall that here again, $C$ denotes various positive constants, depending only on the time $T$. We set

$$F(t) = \|\delta V_1\|_H \int_0^t \sqrt{E(s)}\,ds + \int_0^t E(s)\,ds + \|\delta V_1\|^2_H.$$

We have both

$$\begin{aligned} E(t) &\leq C\,F(t) \ \text{ and} \\ \frac{dF}{dt}(t) &= E(t) + \|\delta V_1\|_H \sqrt{E(t)} \\ &\leq C\,F(t) + C\,\|\delta V_1\|_H \sqrt{F(t)}. \end{aligned}$$

Then, $\dfrac{d}{dt}\left(e^{-Ct}\sqrt{F(t)}\right) \leq e^{-Ct}C\,\|\delta V_1\|_H$ and we obtain after an integration in time :

$$\forall t \in (0,T), \ \ F(t) \leq C\|\delta V_1\|^2_H.$$

This implies that there exists a constant $C_T > 0$ such that

$$\forall t \in (0,T), \ \ E(t) = \|z(t)\|^2_{H^1\cap H_1} \leq C_T\|\delta V_1\|^2_H.$$

Eventually, we have proved that,

$$\sup_{t\in[0,T]} \left(\|(1+|x|)z(t)\|_{L^2} + \|\nabla z(t)\|_{L^2}\right) \overset{\|\delta V_1\|_H \to 0}{\longrightarrow} 0.$$

Now, using this in (7.27), we obtain

$$\frac{d}{dt}(\|w(t)\|_{L^2}) \leq C\,\|\delta V_1\|_H^2 + C\,\|w(t)\|_{L^2}$$

and applying Gronwall lemma we get : $\forall t \in [0,T]$, $\|w(t)\|_{L^2} \leq C_T \|\delta V_1\|_H^2$. Therefore, we have

$$\|w(T)\|_{L^2} = o(\|\delta V_1\|_H)$$

and the proof of Lemma 8 is complete. □

## 7.3 Optimal control of the coupled system

We recall the coupled system (7.1) we are considering :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \dfrac{u}{|x-a|} + V_1 u = (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2 a}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx - \nabla V_1(a), & \text{on } (0,T) \\ a(0) = a_0,\ \dfrac{da}{dt}(0) = v_0. \end{cases}$$

The electric potential $V_1$ takes its values in $\mathbb{R}$ and satisfy assumption (7.2) :

$$\begin{array}{rcl} (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} V_1 & \in & L^\infty((0,T)\times\mathbb{R}^3), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \partial_t V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty), \\ (1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}} \nabla V_1 & \in & L^1(0,T;L^\infty) \text{ and} \\ \nabla V_1 & \in & L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right). \end{array} \tag{7.31}$$

On this evolution system we define the following optimal control problem :

if $(u,a)$ is a solution of system (7.1) and if $u_1 \in L^2$ is a given target, find a minimizer $V_1 \in \mathcal{H}$ for

$$\inf\{J(V,u),\ V\in\mathcal{H}\}$$

where the cost functionnal $J$ is defined by

$$J(V_1,u) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u(T,x) - u_1(x)|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V_1\|_{\mathcal{H}}^2$$

and

$$\mathcal{H} = \left\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;\mathcal{W}) \text{ and } \nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}\right)\right\}$$

where $\mathcal{W}$ is an Hilbert space which satisfies $\mathcal{W} \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$.

We are going to prove Theorem 1 in the next subsection and the following one will be devoted to the formal obtention of an optimality condition.

### 7.3.1 Existence of an optimal control

We consider a minimizing sequence $(V_1^n)_{n\geq 0}$ in $\mathcal{H}$ for the functional $J$. It means that

$$\inf\{J(V,u), V \in \mathcal{H}\} = \lim_{n\to\infty} J(V_1^n, u_n)$$

where $(u_n, a_n) \in W^{1,\infty}(0,T;L^2) \cap L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2) \times W^{2,1}(0,T)$ is solution of

$$\begin{cases} i\partial_t u_n + \Delta u_n + \dfrac{u_n}{|x-a_n|} + V_1^n u_n = (|u_n|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u_n, & \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \\ u_n(0) = u_0, & \text{in } \mathbb{R}^3 \\ m\,\dfrac{d^2 a_n}{dt^2} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} -|u_n(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a_n|}\,dx - \nabla V_1^n(a_n), & \text{on } (0,T) \\ a_n(0) = a_0, \ \ \dfrac{da_n}{dt}(0) = v_0. \end{cases} \tag{7.32}$$

Since

$$J(V_1^n, u_n) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(T,x) - u_1(x)|^2\,dx + \frac{r}{2}\|V_1^n\|^2_{\mathcal{H}},$$

we then obtain that $(V_1^n)_{n\geq 0}$ is bounded in $\mathcal{H}$, independently of $n$. Up to a subsequence, we have $V_1^n \rightharpoonup V_1$ weakly in $\mathcal{H}$ and

$$\|V_1\|_{\mathcal{H}} \leq \underline{\lim}\|V_1^n\|_{\mathcal{H}}.$$

The difficulty comes again from the term $\|u_n(T) - u_1\|^2_{L^2}$. We will prove that the limit $(u,a)$ of $(u_n,a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is a solution of system (7.1) associated with $V_1$.
If we consider a solution $(u_n,a_n)$ of system (7.32), since the sequence of the electric potentials $(V_1^n)$ is bounded in $\mathcal{H}$, we can apply Theorem 2 and obtain that the sequence $(u_n,a_n)$ is bounded in

$$W^{1,\infty}(0,T;L^2) \cap L^\infty(0,T;H^2 \cap H_2) \times W^{2,1}(0,T)$$

independently of $n$. We get $a_n \to a$ in $L^\infty(0,T)$ strongly and $u_n \rightharpoonup u$ weak in $C([0,T],L^2)$.

Therefore, since the application $u \mapsto \|u(T) - u_1\|^2_{L^2}$ is lower semi-continuous, then $u_n(T) \rightharpoonup u(T)$ weak in $L^2(\mathbb{R}^3)$ implies

$$\|u(T) - u_1\|^2_{L^2} \leq \underline{\lim}\|u_n(T) - u_1\|^2_{L^2}$$

and we finally obtain

$$J(V_1,u) \leq \underline{\lim} J(V_1^n, u_n) = \inf_{V\in\mathcal{H}} J(V,u).$$

Since $V_1 \in \mathcal{H}$, that leads to $J(V_1,u) = \inf\limits_{V\in\mathcal{H}} J(V,u)$ and the existence of an optimal control is proved.

*Remark :* As mentioned in the introduction, we can replace $\nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}\right)$ by $\nabla V \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right)$ in the definition of $\mathcal{H}$. Then, in the cost functional $J$, $\|V_1\|_{\mathcal{H}}$ has to be replaced by $\|(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1\|_{H^1(0,T;\mathcal{W})} + \|\nabla V_1\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty}(B(0,\rho)))}$ where $B(0,\rho) \subset \mathbb{R}^3$ and the point is to choose $\rho > 0$ conveniently. From chapter 5, and as one can read in Theorem 2, we know that without any hypothesis on $\nabla V_1$, we can bound $a$

in $C([0,T])$. In fact, we only need $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1 \in H^1(0,T;\mathcal{W})$. Moreover, when we consider a minimizing sequence $(V_1^n)_{n\geq 0}$ in $\mathcal{H}$, as soon as $J(V_1^n,u_n)$ is then bounded, for instance by $J(0,u_n)$, we obtain an a priori bound for $\|(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}V_1\|_{H^1(0,T;\mathcal{W})}$ and then for $\|a_n\|_{C([0,T])}$. Thus, if $\rho$ is chosen large enough to satisfy $\|a_n\|_{C([0,T])} \leq \rho$ for all $n \in \mathbb{N}$, we will be able to proceed to the same proof as follows.

For clarity, we denote by (7.33) and (7.34) the two equations solved by $u$ and $a$ :

$$i\partial_t u + \Delta u + \frac{u}{|x-a|} + V_1 u = (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u, \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \times (0,T) \tag{7.33}$$

$$m\,\frac{d^2a}{dt^2} = -\int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx + \nabla V_1(a), \quad \text{in } (0,T) \tag{7.34}$$

and we want to prove that the limit $(u,a)$ of $(u_n,a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is a solution of (7.1).

Up to a subsequence, we have $\partial_t u_n \to \partial_t u$ and $\Delta u_n \to \Delta u$ in $\mathcal{D}'((0,T)\times\mathbb{R}^3)$. Moreover, on the one hand, since $V_1$ is bounded in $\mathcal{H}$, we have $\left(\frac{V_1^n}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}\right)_{n\geq 0}$ bounded in $H^1(0,T;\mathcal{W})$. Since the embedding $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \hookrightarrow L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$ is compact and since $\mathcal{W} \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$, then from Lemma 7, we get the local strong convergence

$$\frac{V_1^n}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \frac{V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}} \;\text{ in }\; L^2(0,T;L^2_{\text{loc}}).$$

On the other hand, $(u_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $L^\infty(0,T;H_2)$ and since $(u_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $L^\infty(0,T;H^2)\cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)$, we have the local strong convergence

$$u_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} u \;\text{ in }\; L^\infty(0,T;L^2_{\text{loc}}).$$

We have, for all $R>0$,

$$\begin{aligned}
\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3} |V_1^n u_n - V_1 u| &\leq \int_0^T\int_{B_R} |V_1^n u_n - V_1 u| + \int_0^T\int_{B_R^c} |V_1^n u_n - V_1 u| \\
&\leq \int_0^T\int_{B_R} \left|\frac{V_1^n - V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}} u_n (1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}\right| \\
&\quad + (1+R^2)^{\frac{1}{2}} \int_0^T\int_{B_R} \left|\frac{V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}(u_n - u)\right| \\
&\quad + \frac{1}{(1+R^2)^{\frac{1}{2}}} \int_0^T\int_{B_R^c} \frac{|V_1^n u_n| + |V_1 u|}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}(1+|x|^2).
\end{aligned}$$

Then, using Cauchy-Schwarz inequality, we can prove :

$$\begin{aligned}
&\int_0^T\int_{B_R} \left|\frac{V_1^n - V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}} u_n (1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}\right| \\
\leq\;& \int_0^T \left(\int_{B_R} \frac{|V_1^n - V_1|^2}{(1+|x|^2)}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{B_R} |u_n|^2(1+|x|^2)\right)^{\frac{1}{2}} \\
\leq\;& \sqrt{T}\left\|(V_1^n - V_1)(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}\right\|_{L^2(0,T;L^2(B_R))} \|u_n\|_{L^\infty(0,T;H_2)} \\
\leq\;& C_T \left\|(V_1^n - V_1)(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}\right\|_{L^2(0,T;L^2(B_R))} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0,
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
&(1+R^2)^{\frac{1}{2}}\int_0^T\int_{B_R}\left|\frac{V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}(u_n-u)\right| \\
\leq\ & C_T\left\|V_1(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}\right\|_{L^2(0,T;L^2)}\|u_n-u\|_{L^\infty(0,T;L^2(B_R))} \\
\leq\ & C_T\|u_n-u\|_{L^\infty(0,T;L^2(B_R))}\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}0
\end{aligned}$$

and for all $\varepsilon>0$, there exists $R>0$ such that

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(1+R^2)^{\frac{1}{2}}}\int_0^T\int_{B_R^c}\frac{|V_1^n u_n|+|V_1 u|}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}(1+|x|^2) \\
\leq\ & \frac{2\sqrt{T}}{(1+R^2)^{\frac{1}{2}}}\left\|V_1^n(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}\right\|_{L^2(0,T;L^2)}\|u_n\|_{L^\infty(0,T;H_2)} \\
\leq\ & \frac{C_T}{(1+R^2)^{\frac{1}{2}}}\leq\varepsilon.
\end{aligned}$$

Eventually, we obtain $V_1^n u_n\to V_1 u$ in $L^1((0,T)\times\mathbb{R}^3)$.

Then, we have to work on the terms $\dfrac{u_n}{|x-a_n|}$ and $\left(|u_n|^2\star\dfrac{1}{|x|}\right)u_n$ of system (7.32). One can notice that $(a_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $W^{2,1}(0,T)$. We then have, up to a subsequence, the strong convergence $a_n\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}a$ in $L^\infty(0,T)$. We will check later that $a$, together with $u$, is a solution of coupled system (7.1). We set $\varphi\in\mathcal{D}((0,T)\times\mathbb{R}^3)$ which means in particular that $Supp\,\varphi$ is a compact set of $(0,T)\times\mathbb{R}^3$.

We have

$$\frac{u_n}{|x-a_n|}=\left(\frac{1}{|x-a_n|}-\frac{1}{|x-a|}\right)u_n+\frac{u_n}{|x-a|}$$

and we will prove that in $\mathcal{D}'((0,T)\times\mathbb{R}^3)$, we have the following convergences

$$\frac{u_n}{|x-a|}\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}\frac{u}{|x-a|}\ \text{ and }\left(\frac{1}{|x-a_n|}-\frac{1}{|x-a|}\right)u_n\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}0.$$

On the one hand, since $Supp\,\varphi$ is compact, from Hardy's inequality we have

$$\left|\int_{[0,T]\times\mathbb{R}^3}\frac{(u_n(t,x)-u(t,x))\varphi(t,x)}{|x-a(t)|}\,dtdx\right|\leq C\|u_n-u\|_{L^\infty(0,T;H^1(B_R))}$$

where $Supp\,\varphi\subset[0,T]\times B_R$ and $(u_n)_{n\geq 0}$ being bounded in the space $L^\infty(0,T;H^2)$ $\cap W^{1,\infty}(0,T;L^2)$ gives the local strong convergence

$$u_n\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}u\ \text{ in }\ C([0,T];H^1_{\text{loc}}).$$

Then $\|u_n-u\|_{L^\infty(0,T;H^1(B_R))}\to 0$ and we get $\dfrac{u_n}{|x-a|}\overset{n\to+\infty}{\longrightarrow}\dfrac{u}{|x-a|}$ in $\mathcal{D}'$.

On the other hand, for the same reasons, we have

$$\begin{aligned}
&\left|\int_{[0,T]\times\mathbb{R}^3}\left(\frac{1}{|x-a_n(t)|}-\frac{1}{|x-a(t)|}\right)u_n(t,x)\varphi(t,x)\,dtdx\right| \\
\leq\;& \int_{[0,T]\times\mathbb{R}^3}\frac{|u_n(t,x)||\varphi(t,x)||a_n(t)-a(t)|}{|x-a_n(t)||x-a(t)|}\,dtdx \\
\leq\;& \|u_n\|_{L^\infty(0,T;H^1(B_R))}|a_n-a|_{L^\infty(0,T)}\left(\int_{Supp\ \varphi}\frac{|\varphi(t,x)|^2}{|x-a(t)|^2}\,dtdx\right)^{\frac{1}{2}} \\
\leq\;& C\,|a_n-a|_{L^\infty(0,T)} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0
\end{aligned}$$

which means $\left(\frac{1}{|x-a_n|}-\frac{1}{|x-a|}\right)u_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ in $\mathcal{D}'$.

Finally, we are going to prove that $(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})u_n-(|u|^2\star\frac{1}{|x|})u \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ in $\mathcal{D}'((0,T)\times\mathbb{R}^3)$. We have

$$(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})u_n-(|u|^2\star\frac{1}{|x|})u=(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})(u_n-u)+((|u_n|^2-|u|^2)\star\frac{1}{|x|})u.$$

First of all, using Cauchy-Schwarz inequality and omitting the time $t$ fixed in $[0,T]$, we can write

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|\left|(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})u_n-(|u|^2\star\frac{1}{|x|})u\right|\,dx \\
\leq\;& \int_{\mathbb{R}^3}|\varphi||u_n-u|(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})\,dx+\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi||u|((|u_n|+|u|)|u_n-u|\star\frac{1}{|x|})\,dx \\
\leq\;& \left(\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi||u_n-u|^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&+\left(\int_{\mathbb{R}^3}|u|^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|^2((|u_n|+|u|)|u_n-u|\star\frac{1}{|x|})^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

which gives

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|\left|(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})u_n-(|u|^2\star\frac{1}{|x|})u\right|\,dx \\
\leq\;& \|u_n-u\|_{L^2(B_R)}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}} \\
&+\|u\|_{L^2}\left(\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi|^2((|u_n|+|u|)|u_n-u|\star\frac{1}{|x|})^2\,dx\right)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}\tag{7.35}$$

Next, from Hardy's inequality, we have

$$(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})(x)\leq\|u_n\|_{L^2}\|\nabla u_n\|_{L^2},\ \forall x\in\mathbb{R}^3$$

and since $\varphi\in\mathcal{D}((0,T)\times\mathbb{R}^3)$,

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(x)(|u_n|^2\star\frac{1}{|x|})^2(x)\,dx\right)^{\frac{1}{2}}\leq C\|u_n\|^2_{H^1}.\tag{7.36}$$

We will also need the following :

**Lemma 9.** *Let $r > 0$, $v \in H^1$ and $v_n \in L^2$. If we assume that $v_n \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ in $L^2_{\text{loc}}$, then*

$$\forall |x| < r, \ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{v(y)v_n(y)}{|x-y|}\, dy \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

**Proof of Lemma 9.** We set $R > r$ and $B_R = \{y \in \mathbb{R}^3, |y| < R\}$. From Cauchy-Schwarz and Hardy's inequalities, we obtain for all $x$ such that $|x| < r$,

$$\begin{aligned}
\left| \int_{\mathbb{R}^3} \frac{v(y)v_n(y)}{|x-y|}\, dy \right| &\leq \int_{B_R} \frac{|v(y)||v_n(y)|}{|x-y|}\, dy + \int_{B_R^c} \frac{|v(y)||v_n(y)|}{|y-x|}\, dy \\
&\leq \|v\|_{H^1}\|v_n\|_{L^2(B_R)} + \frac{1}{R-|x|}\|v\|_{L^2}\|v_n\|_{L^2} \\
&\leq C\left( \|v_n\|_{L^2(B_R)} + \frac{1}{R-r} \right).
\end{aligned}$$

Moreover, if we set $\varepsilon > 0$, then there exists $n_0 \in \mathbb{N}$ and $R_0 > 0$ such that

$$\frac{C}{R_0 - r} \leq \frac{\varepsilon}{2} \ \text{ and } \ \forall n > n_0, \ C\|v_n\|_{L^2(B_{R_0})} \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Thus, for all $\varepsilon > 0$ there exists $n_0 \in \mathbb{N}$ such that for all $n > n_0$,

$$\left| \int_{\mathbb{R}^3} \frac{v(y)v_n(y)}{|x-y|}\, dy \right| \leq \varepsilon$$

and the lemma has been proved. □

We use this result to deal with the term $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2((|u_n| + |u|)|u_n - u| \star \frac{1}{|x|})^2$.
Let $t \in (0,T)$ be fixed. Since $Supp\ \varphi$ is compact, we apply Lebesgue's theorem on a bounded domain to the sequence $(f_n(t))_{n\in\mathbb{N}}$ defined by

$$f_n(x,t) = \left( (|u_n(t)| + |u(t)|)|u_n(t) - u(t)| \star \frac{1}{|x|} \right)^2 (x).$$

Indeed, since $u_n - u \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ in $C([0,T]; L^2_{\text{loc}})$, $u \in L^\infty(0,T;H^1)$ and $u_n$ is bounded in $L^\infty(0,T;H^1)$ independently of $n$, using Lemma 9 we obtain that for all $t$ in $[0,T]$ and for all $x$ in $Supp\ \varphi$, $f_n(x,t) \to 0$. Then, from usual estimates we prove that $|f_n(t)| \leq C \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$ and we finally get : $\forall t \in [0,T]$,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^2(t,x) f_n(x,t)\, dx = I_n(t) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{7.37}$$

Now, plugging (7.36) and (7.37) in (7.35) we obtain, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(t) \left| (|u_n(t)|^2 \star \frac{1}{|x|})u_n(t) - (|u(t)|^2 \star \frac{1}{|x|})u(t) \right| \\
\leq\ & C\|u_n\|^2_{L^\infty(0,T;H^1)}\|u_n - u\|_{L^\infty(0,T;L^2(B_R))} + \|u\|_{L^\infty(0,T;L^2)}\sqrt{I_n(t)} \\
\leq\ & C\left( \|u_n - u\|_{L^\infty(0,T;L^2(B_R))} + \sqrt{I_n(t)} \right) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0.
\end{aligned}$$

Thus we have proved

$$(|u_n|^2 \star \frac{1}{|x|})u_n - (|u|^2 \star \frac{1}{|x|})u \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0 \ \text{ in } \ \mathcal{D}'((0,T) \times \mathbb{R}^3).$$

Therefore, we have all the elements to insure that $(u_n)$ is converging in a weak sense towards $u$ which is a solution of (7.33) in the sense of distributions. We finally have to prove that the limit $a$ of the sequence $(a_n)$ is a solution of (7.34). We already know that $(a_n)_{n\geq 0}$ is bounded in $W^{2,1}(0,T)$ and that $a_n \to a$ in $L^\infty(0,T)$ and we have in [0,T],

$$m\,\frac{d^2 a_n}{dt^2} = \int_{\mathbb{R}^3} -|u_n(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a_n|}\,dx + \nabla V_1^n(a_n).$$

On the one hand, omitting again the fixed time $t$ in $[0,T]$, we have

$$\nabla V_1^n(a_n) - \nabla V_1(a) = (\nabla V_1^n(a_n) - \nabla V_1^n(a)) + (\nabla V_1^n(a) - \nabla V_1(a))$$

and of course, since $V_1^n$ is bounded in $\mathcal{H}$ and $V_1^n \rightharpoonup V_1$ weakly in $\mathcal{H}$, we get

$$\nabla V_1^n(a) - \nabla V_1(a) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0 \text{ in } \mathcal{D}'(0,T) \text{ and}$$

$$\|\nabla V_1^n(a_n) - \nabla V_1^n(a)\|_{L^2(0,T)} \leq \|\nabla V_1^n\|_{L^2(0,T;W^{1,\infty})} |a_n - a|_{L^\infty(0,T)} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Therefore we obtain

$$\nabla V_1^n(a_n) \to \nabla V_1(a) \text{ in } \mathcal{D}'(0,T).$$

On the other hand, using the idea of the proof of Lemma 9 we will prove

$$\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a_n|}\,dx \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \int_{\mathbb{R}^3} |u(x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx \text{ in } \mathcal{D}'(0,T).$$

Actually for all $t$ in $[0,T]$, we can prove that an integration by parts gives

$$\begin{aligned}
&\left|\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(t,x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a_n(t)|}\,dx - \int_{\mathbb{R}^3} |u(t,x)|^2 \nabla \frac{1}{|x-a(t)|}\,dx\right| \\
\leq\ & \left|\int_{\mathbb{R}^3} |u_n|^2 \nabla \left(\frac{1}{|x-a_n|} - \frac{1}{|x-a|}\right) dx\right| + \left|\int_{\mathbb{R}^3} (|u_n|^2 - |u|^2) \nabla \frac{1}{|x-a|}\,dx\right| \\
\leq\ & C \int_{\mathbb{R}^3} \left(|u_n||\nabla u_n| \left|\frac{1}{|x-a_n|} - \frac{1}{|x-a|}\right| + \frac{(|u_n|+|u|)|u_n-u|}{|x-a|^2}\right) dx. \qquad (7.38)
\end{aligned}$$

Since $u_n$ is bounded in $L^\infty(0,T;H^2)$, using Cauchy-Schwarz and Hardy's inequality we are able to deal with the first right hand side term. Indeed,

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(t)||\nabla u_n(t)| \left|\frac{1}{|x-a_n(t)|} - \frac{1}{|x-a(t)|}\right| \\
\leq\ & \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|u_n||\nabla u_n|}{|x-a_n||x-a|} |a_n - a| \\
\leq\ & \|u_n\|_{L^2(0,T;H^1)} \|\nabla u_n\|_{L^2(0,T;H^1)} |a_n - a|_{L^\infty(0,T)} \\
\leq\ & \|u_n\|^2_{L^\infty(0,T;H^2)} |a_n - a|_{L^\infty(0,T)} \\
\leq\ & C\,|a_n - a|_{L^\infty(0,T)} \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \qquad (7.39)
\end{aligned}$$

Now, since $a$ is bounded on $(0,T)$, $u_n - u \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ in $C([0,T];H^1_{\text{loc}})$, $u$ belongs to $L^\infty(0,T;H^1)$ and $u_n$ is bounded in $L^\infty(0,T;H^1)$ independently of $n$, then we obtain in an analogous way as in the proof of Lemma 9 that for all $t$ in $[0,T]$,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{(|u_n(t)|+|u(t)|)|u_n(t)-u(t)|}{|x-a(t)|^2}\,dx = J_n(t) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \qquad (7.40)$$

In fact, omitting the time $t$, we have from Hardy's inequality

$$\begin{aligned} J_n &\leq \int_{B_R} \frac{(|u_n|+|u|)|u_n-u|}{|x-a|^2}\,dx + \int_{B_R^c} \frac{(|u_n|+|u|)^2}{|x-a|^2}\,dx \\ &\leq (\|u\|_{H^1}+\|u_n\|_{H^1})\|u_n-u\|_{H^1(B_R)} + \frac{2}{R-|a(t)|}(\|u\|_{L^2}^2+\|u_n\|_{L^2}^2) \\ &\leq C\left(\|u_n-u\|_{H^1(B_R)} + \frac{1}{R-\|a\|_{L^\infty(0,T)}}\right) \end{aligned}$$

and we can prove (see Lemma 9) that for all $t$ in $[0,T]$ and for all $\varepsilon>0$, there exists $n_0\in\mathbb{N}$ such that for all $n>n_0$, $J_n(t)\leq\varepsilon$.

Thus, using (7.39) and (7.40) together with (7.38), we get, for all $t$ in $[0,T]$,

$$\left|\int_{\mathbb{R}^3} |u_n(t,x)|^2\nabla\frac{1}{|x-a_n(t)|}\,dx - \int_{\mathbb{R}^3} |u(t,x)|^2\nabla\frac{1}{|x-a(t)|}\,dx\right| \\ \leq C\,|a_n-a|_{L^\infty(0,T)} + J_n(t) \overset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$$

and we finally obtain the awaited result. One can notice that we had already proved this result in the preceding chapter, in a slightly different way (see the first step of subsection 5.3.4).

We then have proved that $a$ is a solution of (7.34). As a consequence, the limit $(u,a)$ of $(u_n,a_n)$ is a solution in the sense of distribution of system (7.1). Moreover, since $(u,a)$ belongs to the class $\left(W^{1,\infty}(0,T;L^2)\cap L^\infty(0,T;H^2\cap H_2)\right)\times W^{2,1}(0,T)$, then it satisfies the estimate (7.4) of Theorem 2 and is in fact a strong solution of system (7.1). Hence the proof of Theorem 1. $\square$

### 7.3.2 Formal Optimality condition

As we did in the case when the position $a$ of the nucleus is known, except the fact that everything here will be done formally, we are going to give an optimality condition for the electric potential optimal control $V_1$.

A first step is to consider the functional

$$\begin{aligned} \Phi:\widetilde{\mathcal{H}} &\longrightarrow L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}^3))\times L^\infty(0,T) \\ V_1 &\longmapsto (u(V_1),a(V_1))) \end{aligned}$$

and to study its differentiability. In this section, we will choose $\widetilde{\mathcal{H}}$ as an Hilbert space included in

$$\left\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac12} V\in H^1(0,T;\mathcal{W}) \text{ and } \nabla V\in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right)\right\}$$

where $\mathcal{W}$ is an Hilbert space which satisfies $\mathcal{W}\hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$. Thus, we can take the derivative of $V_1\mapsto\|V_1\|_{\widetilde{\mathcal{H}}}$. More precisely, we set here

$$\widetilde{\mathcal{H}}=\left\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac12} V\in H^1(0,T;H^3\oplus\text{Sp}\{\psi_1\})\cap L^2(0,T;H^4\oplus\text{Sp}\{\psi_1\})\right\}$$

with $\psi_1 \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3) \setminus H^3$ and $\nabla\psi_1 \in W^{1,\infty}_{\text{loc}}$.

Indeed, since $H^3(\mathbb{R}^3) \hookrightarrow W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)$ and since the weight $(1+|x|^2)^{-\frac{1}{2}}$ has only an influence at infinity, we can prove that $\left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V_1 \in L^2(0,T;H^4)$ implies $\nabla V_1 \in L^2\left(0,T;W^{1,\infty}_{\text{loc}}\right)$. Moreover, we could actually consider the direct sum of $H^3$ with Span$\{\psi_1,\cdots,\psi_m\}$ for $m \in \mathbb{N}$ but we will give here the particular case where $m=1$ and $\psi_1 = \mathbb{1}$.

Of course, $\Phi$ is well-defined if the solution $(u,a)$ of the coupled equation (7.1) is unique. Henceforth, our work is formal and one can notice that the lack of proof for the uniqueness of the solution of system (7.1) is a first and main obstacle to prove next the differentiability with respect to $V_1$ of the cost functional J :

$$J(V_1,u) = \frac{1}{2}\|u(T)-u_1\|^2_{L^2} + \frac{r}{2}\|V_1\|^2_{\widetilde{\mathcal{H}}}.$$

Assuming that we have uniqueness of the solution of system (7.1) and assuming that $\Phi$ is differentiable, if we set $D\Phi(\delta V_1) = (z,b)$, then $(z(t,x),b(t))$ has to satisfy the following coupled system set in $\mathbb{R}^3 \times (0,T)$

$$\begin{cases} i\partial_t z + \Delta z + V_0 z + V_1 z = -\dfrac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b\, u - \delta V_1 u + (|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})z + 2(Re(u\overline{z}) \star \dfrac{1}{|x|})u, \\ m\,\dfrac{d^2 b}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 \nabla \dfrac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b - 2\int_{\mathbb{R}^3} Re(u\overline{z})\nabla V_0 - \nabla\delta V_1(a) - \nabla(\nabla V_1)\cdot b(a) \end{cases}$$

with initial conditions $z(0)=0,\ b(0)=0,\ \dfrac{db}{dt}(0)=0$ and with $V_0 = \dfrac{1}{|x-a|}$ (here and subsequently).

Indeed, if we consider the electric potential $V_1+\delta V_1$ (where $\delta V_1 \in \widetilde{\mathcal{H}}$) which gives the solution $(u+\delta u, a+\delta a)$ to equation (7.1), we have :

$$\begin{cases} i\partial_t(u+\delta u) + \Delta(u+\delta u) + \dfrac{1}{|x-a-\delta a|}(u+\delta u) + (V_1+\delta V_1)(u+\delta u) = \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (|u+\delta u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})(u+\delta u), \\ m\,\dfrac{d^2}{dt^2}(a+\delta a) = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |(u+\delta u)|^2 \nabla \dfrac{1}{|x-a-\delta a|}dx - \nabla(V_1+\delta V_1)(a+\delta a), \end{cases}$$

and using (7.1) and denoting $(|u|^2 \star \dfrac{1}{|x|})u$ by $F(u)$ as we previously did, we obtain

$$\begin{cases} i\partial_t \delta u + \Delta\delta u + \dfrac{1}{|x-a|}\delta u + (V_1+\delta V_1)\delta u = \\ \qquad\qquad \left(\dfrac{1}{|x-a|} - \dfrac{1}{|x-a-\delta a|}\right)(u+\delta u) - \delta V_1 u + F(u+\delta u) - F(u), \\ m\,\dfrac{d^2\delta a}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} |u|^2 \nabla\left(\dfrac{1}{|x-a-\delta a|} - \dfrac{1}{|x-a|}\right)dx - \int_{\mathbb{R}^3} |\delta u|^2 \nabla \dfrac{1}{|x-a-\delta a|}dx \\ \qquad - 2Re\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{\delta u}\nabla \dfrac{1}{|x-a-\delta a|}dx - \nabla V_1(a+\delta a) + \nabla V_1(a) - \nabla\delta V_1(a+\delta a). \end{cases}$$

We also have :

- $\dfrac{1}{|x-a|} - \dfrac{1}{|x-a-\delta a|} = \dfrac{\partial}{\partial a}\left(\dfrac{1}{|x-a|}\right)\cdot\delta a + o(\delta a),$

• $F(u+\delta u)-F(u) = (|\delta u|^2\star\frac{1}{|x|})(u+\delta u)+2Re(u\overline{\delta u}\star\frac{1}{|x|})(u+\delta u)+(|u|^2\star\frac{1}{|x|})\delta u$,
• $\nabla\frac{1}{|x-a-\delta a|} = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\nabla\frac{1}{|x-a|}\right)\cdot\delta a+\nabla\frac{1}{|x-a|}+o(\delta a)$,
• $\nabla V_1(a+\delta a)-\nabla V_1(a) = \nabla(\nabla V_1(a))\cdot\delta a+o(\delta a)$,
• $\nabla\delta V_1(a+\delta a) = \nabla(\nabla\delta V_1(a))\cdot\delta a+\nabla\delta V_1(a)+o(\delta a)$.

From these calculations and from the last system, we can deduce by linearization the one satisfied by $(z,b)$ as a candidate for a derivative of $\Phi$. Thereafter, if $J$ is differentiable in $V_1$, since $\widetilde{\mathcal{H}}$ is an Hilbert space we get that for all $\delta V_1$ in $\widetilde{\mathcal{H}}$,

$$DJ(V_1,u)[\delta V_1] = Re\int_{\mathbb{R}^3}(u(T,x)-u_1(x))\,\overline{z}(T,x)\,dx+r\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}}.$$

Thus, the condition

$$DJ(V_1,u)[\delta V_1]=0,\ \forall\delta V_1\in\widetilde{\mathcal{H}}$$

reads

$$Re\int_{\mathbb{R}^3}(u(T,x)-u_1(x))\,\overline{z}(T,x)\,dx+r\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}}=0. \tag{7.41}$$

*Remark :* The main difficulty we encounter when we try to give a meaning to the system of equations satisfied by the couple $(z,b)$ is of same nature than the one we had when we studied the equations solved by the difference of two solutions of system (7.1). Indeed, as for the proof of uniqueness which misses in Theorem 2, even in a formal study of the solutions, we have to deal with singularities of type $\frac{u}{|x|^2}$ that we cannot bound with Hardy's inequality. Moreover, the use of Marcinkiewicz (or Lorentz) spaces as in reference [10] is not directly appropriate here because of the properties of $V_1$.

We are now looking for the adjoint system in order to translate (7.41) in terms of the adjoint state. We will give here the approach to get the awaited system, whose solution is denoted by $(p,\varrho)$. We recall the equations solved by $z$ and $b$ :

$$i\partial_t z+\Delta z+V_0z+V_1z = -\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b\,u-\delta V_1u+(|u|^2\star\frac{1}{|x|})z+2(Re(u\overline{z})\star\frac{1}{|x|})u, \tag{7.42}$$

$$m\frac{d^2b}{dt^2} = -\int_{\mathbb{R}^3}\left(|u|^2\nabla\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b+2Re(u\overline{z})\nabla V_0\right)-\nabla\delta V_1(a)-\nabla(\nabla V_1)\cdot b(a). \tag{7.43}$$

We assume that $p(T)=u(T)-u_1$, $\varrho(T)=0$ and $\frac{d\varrho}{dt}(T)=0$.
On the one hand, we multiply equation (7.42) by $\overline{p}$, integrate on $\mathbb{R}^3\times(0,T)$ and we take the imaginary part. After some calculations, we obtain :

$$Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}(i\partial_t z+\Delta z+V_0z+V_1z)\overline{p} = -Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot bu\overline{p}-Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1u\overline{p}$$
$$+Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\overline{(|u|^2\star\frac{1}{|x|})}z\overline{p}+2\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}(Im(u\overline{p})\star\frac{1}{|x|})Re(u\overline{z}).$$

Since $z(0)=0$, we get after some integrations by parts

$$\begin{aligned} Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} \overline{(i\partial_t p+\Delta p+V_0p+V_1p)}z + Im\int_{\mathbb{R}^3} i\, z(T)\,\overline{(u(T)-u_1)} \\ = -\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} Im(u\overline{p})\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b - Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1 u\overline{p} \\ +Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\overline{(|u|^2\star\frac{1}{|x|})\overline{p}z} + 2\,Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} i(Im(u\overline{p})\star\frac{1}{|x|})\overline{u}z \end{aligned} \tag{7.44}$$

On the other hand, we multiply equation (7.43) by $\varrho$ and we integrate on $(0,T)$. After two integrations by parts and since we have $b(0)=\dfrac{db}{dt}(0)=0$, we get

$$\begin{aligned} \int_0^T m\frac{d^2\varrho}{dt^2}b = -2\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} Re(\overline{u}\nabla u)\varrho\,\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b - 2\,Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} i\overline{u}\nabla V_0\cdot\varrho z \\ -\int_0^T \varrho\nabla\delta V_1(a) - \int_0^T \nabla(\nabla V_1)(a)\varrho b \end{aligned} \tag{7.45}$$

and the sum of (7.44) and (7.45) then gives

$$\begin{aligned} Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\overline{(i\partial_t p+\Delta p+V_0p+V_1p)}z + \int_0^T m\frac{d^2\varrho}{dt^2}b + Re\int_{\mathbb{R}^3}\overline{z(T)}(u(T)-u_1) \\ = Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\overline{(|u|^2\star\frac{1}{|x|})\overline{p}z} + 2\,Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} i(Im(u\overline{p})\star\frac{1}{|x|})\overline{u}z \\ -2\,Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} i\overline{u}\nabla V_0\cdot\varrho z - Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1 u\overline{p} - \int_0^T \varrho\nabla\delta V_1(a) \\ -2\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} Re(\overline{u}\nabla u)\varrho\,\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b - \int_0^T\nabla(\nabla V_1)(a)\varrho b - \int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} Im(u\overline{p})\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot b. \end{aligned}$$

From this equality, we can easily deduce the candidate adjoint system :

$$\begin{cases} i\partial_t p+\Delta p+V_0p+V_1p = (|u|^2\star\dfrac{1}{|x|})p + 2i\,(Im(u\overline{p})\star\dfrac{1}{|x|})\overline{u} - 2i\overline{u}\,\nabla V_0\cdot\varrho, \\ p(T)=u(T)-u_1, \\ m\,\dfrac{d^2\varrho}{dt^2} = -\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\partial V_0}{\partial a}\,Im(u\overline{p}) - 2\int_{\mathbb{R}^3} Re(\overline{u}\nabla u)\frac{\partial V_0}{\partial a}\cdot\varrho - \nabla(\nabla V_1)(a)\cdot\varrho, \\ \varrho(T)=0,\ \dfrac{d\varrho}{dt}(T)=0. \end{cases}$$

Therefore, we obtain :

$$Re\int_{\mathbb{R}^3}\overline{z(T)}\,(u(T)-u_1) = -Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1 u\overline{p} - \int_0^T \varrho\cdot\nabla\delta V_1(a) \tag{7.46}$$

and from (7.41) and (7.46), we finally obtain that the optimal control $V_1$ has to satisfy the optimality condition, for all $\delta V_1\in H$,

$$r\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}} = Im\int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3}\delta V_1(t,x)u(t,x)\overline{p}(t,x)\,dxdt + \int_0^T \varrho(t)\cdot\nabla\delta V_1(t,a(t))\,dt.$$

Eventually, if $\delta_a$ denotes the Dirac mass at point $a\in\mathbb{R}^3$, we observe that

$$\varrho(t)\cdot\nabla\delta V_1(t,x) = \mathrm{div}(\varrho(t)\delta V_1(t,x))$$

and we get

$$\begin{aligned}\int_0^T \varrho(t)\cdot\nabla\delta V_1(t,a(t))\,dt &= \int_0^T \left\langle \delta_{a(t)}, \varrho(t)\cdot\nabla\delta V_1(t)\right\rangle\,dt\\ = \int_0^T \left\langle \delta_{a(t)}, \mathrm{div}(\varrho(t)\delta V_1(t))\right\rangle\,dt &= -\int_0^T \left\langle \nabla\delta_{a(t)}, \varrho(t)\delta V_1(t)\right\rangle\,dt\\ &= -\int_0^T \left\langle \varrho(t)\cdot\nabla\delta_{a(t)}, \delta V_1(t)\right\rangle\,dt\end{aligned}$$

Therefore, the bilinear optimal control $V_1$ is the solution of a partial differential equation defined by variational formulation in the following way :

$$r\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}} = \int_0^T\!\!\int_{\mathbb{R}^3} Im\,(u(t,x)\overline{p}(t,x))\,\delta V_1(t,x)\,dxdt - \int_0^T\left\langle \varrho(t)\cdot\nabla\delta_{a(t)}, \delta V_1(t)\right\rangle\,dt.$$

We can finally give an interpretation of the optimality condition in terms of partial differential equation's. We recall that for the sake of simplicity, we consider

$$\widetilde{\mathcal{H}} = \left\{V,\ \left(1+|x|^2\right)^{-\frac{1}{2}} V \in H^1(0,T;H^3\oplus \mathrm{Sp}\{\mathbb{1}\})\cap L^2(0,T;H^4\oplus \mathrm{Sp}\{\mathbb{1}\})\right\}.$$

For all $V\in\widetilde{\mathcal{H}}$, there exists $X\in H^1(0,T;H^3)\cap L^2(0,T;H^4)$ and $E\in H^1(0,T)$ such that

$$V(t,x) = \left(1+|x|^2\right)^{\frac{1}{2}}(X(t,x)+E(t)).$$

Moreover, $X=(I-\Delta)^{-1}Y$ with $Y\in H^1(0,T;H^1)\cap L^2(0,T;H^2)$. By now, we have an optimality condition expressing $\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}}$ in terms of the state $(u,a)$ and the adjoint state $(p,\varrho)$. Nevertheless, we can write :

$$\begin{aligned}&\langle V_1,\delta V_1\rangle_{\widetilde{\mathcal{H}}} = \left\langle \frac{V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}, \frac{\delta V_1}{(1+|x|^2)^{\frac{1}{2}}}\right\rangle_{H^1(0,T;H^3)\cap L^2(0,T;H^4)}\\
=\ &\langle X_1,\delta X_1\rangle_{H^1(0,T;H^3)} + \langle X_1,\delta X_1\rangle_{L^2(0,T;H^4)} + \langle E_1,\delta E_1\rangle_{H^1(0,T)}\\
=\ &\langle Y_1,\delta Y_1\rangle_{H^1(0,T;H^1)} + \langle Y_1,\delta Y_1\rangle_{L^2(0,T;H^2)} + \langle E_1,\delta E_1\rangle_{H^1(0,T)}\\
=\ &\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I+\partial_t)Y_1(I+\partial_t)\delta Y_1 + \int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I+\partial_t)\nabla Y_1\cdot(I+\partial_t)\nabla\delta Y_1\\
&+\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I-\Delta)Y_1(I-\Delta)\delta Y_1 + \int_0^T\left(I+\frac{d}{dt}\right)E_1\left(I+\frac{d}{dt}\right)\delta E_1\\
=\ &\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I-\partial_t^2)(I-\Delta)Y_1\delta Y_1 + \int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y_1(T)\\
&-\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y_1(0) + \int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}(I-\Delta)^2Y_1\delta Y_1\\
&+\int_0^T\left(I-\frac{d^2}{dt^2}\right)E_1\delta E_1 + \frac{dE_1}{dt}(T)\delta E_1(T) - \frac{dE_1}{dt}(0)\delta E_1(0).\end{aligned}$$

The optimality condition becomes : $\forall \delta Y_1 \in H^1(0,T;H^1)$, $\forall \delta E_1 \in H^1(0,T)$

$$\begin{aligned}
r\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}[(I-\partial_t^2)+(I-\Delta)](I-\Delta)Y_1\delta Y_1\,dxdt + r\int_0^T\left(I-\frac{d^2}{dt^2}\right)E_1\delta E_1\,dt \\
+ r\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y_1(T)\,dx - r\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y_1(0)\,dx \\
- r\frac{dE_1}{dt}(0)\delta E_1(0) + r\frac{dE_1}{dt}(T)\delta E_1(T) \\
= Im\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3} u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\ \left((I-\Delta)^{-1}\,\delta Y_1+\delta E_1\right)\,dxdt \\
-\int_0^T\left\langle \varrho\cdot\nabla\delta_a,\sqrt{1+|x|^2}\ \left((I-\Delta)^{-1}\,\delta Y_1+\delta E_1\right)\right\rangle\,dt.
\end{aligned}$$

Moreover, since for all $x\in\mathbb{R}^3$, $f(x)\nabla\delta_a = f(a)\delta_a - \nabla f(a)\delta_a$, we also obtain :

$$\begin{aligned}
&\int_0^T\left\langle \varrho\cdot\nabla\delta_a,\sqrt{1+|x|^2}\ \left((I-\Delta)^{-1}\,\delta Y_1+\delta E_1\right)\right\rangle\,dt \\
=\ &\int_0^T\left\langle \sqrt{1+|x|^2}\ \varrho\cdot\nabla\delta_a,\left((I-\Delta)^{-1}\,\delta Y_1+\delta E_1\right)\right\rangle\,dt \\
=\ &\int_0^T\left\langle \sqrt{1+|a|^2}\ \varrho\cdot\nabla\delta_a - \frac{a\cdot\varrho}{\sqrt{1+|a|^2}}\ \delta_a,\left((I-\Delta)^{-1}\,\delta Y_1+\delta E_1\right)\right\rangle\,dt
\end{aligned}$$

and we deduce that for all $\delta Y_1$ in $H^1(0,T;H^1)\cap L^2(0,T;H^2)$ and for all $\delta E_1$ in $H^1(0,T)$,

$$\begin{aligned}
&r\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}[(I-\partial_t^2)+(I-\Delta)](I-\Delta)Y_1\delta Y_1\,dxdt \\
&+ r\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T)\delta Y_1(T)\,dx - r\int_{\mathbb{R}^3}\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0)\delta Y_1(0)\,dx \\
&+ r\int_0^T\left(I-\frac{d^2}{dt^2}\right)E_1\delta E_1\,dt + r\frac{dE_1}{dt}(T)\delta E_1(T) - r\frac{dE_1}{dt}(0)\delta E_1(0) \\
=\ &\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}\delta Y_1(I-\Delta)^{-1}Im\left(u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\right)\,dxdt \\
&-\int_0^T\left\langle (I-\Delta)^{-1}\left(\sqrt{1+|a|^2}\ \varrho\cdot\nabla\delta_a - \frac{a\cdot\varrho}{\sqrt{1+|a|^2}}\ \delta_a\right),\delta Y_1\right\rangle\,dt \\
&+\int_0^T\delta E_1\left(\int_{\mathbb{R}^3}Im\left(u\overline{p}\sqrt{1+|x|^2}\right)\,dx\right)dt \\
&-\int_0^T\delta E_1\left\langle \sqrt{1+|a|^2}\ \varrho\cdot\nabla\delta_a - \frac{a\cdot\varrho}{\sqrt{1+|a|^2}}\ \delta_a,\mathbb{1}\right\rangle\,dt.
\end{aligned}$$

Thus, the optimality condition corresponds to the system :

$$\left\{\begin{array}{ll}
r\Big[(I-\partial_t^2)+(I-\Delta)\Big](I-\Delta)Y_1 = (I-\Delta)^{-1}G & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,T) \\
\partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(T) = \partial_t(Y_1-\Delta Y_1)(0) = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3 \\
r\left(E_1-\dfrac{d^2E_1}{dt^2}\right) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3}G(x)\,dx & \text{in } (0,T) \\
\dfrac{dE_1}{dt}(T) = \dfrac{dE_1}{dt}(0) = 0 &
\end{array}\right. \tag{7.47}$$

where

$$\begin{aligned} G(x,t) &= Im\left(u(x,t)\overline{p(x,t)}\right)\sqrt{1+|x|^2} \\ &\quad - \varrho(t)\cdot\nabla\delta_{a(t)}(x)\sqrt{1+|a(t)|^2} + \frac{a(t)\cdot\varrho(t)}{\sqrt{1+|a(t)|^2}}\,\delta_{a(t)}(x) \end{aligned}$$

and

$$V_1(x,t) = \left(1+|x|^2\right)^{\frac{1}{2}}\left((I-\Delta)^{-1}\,Y_1(x,t)+E_1(t)\right).$$

*Remark :* The Fourier transform (in space variables) of the optimality system (7.47) gives a one dimensional (time variable) elliptic system which can be solved.

# Bibliographie


[1] C. BARDOS, G. LEBEAU et J. RAUCH, *Sharp sufficient conditions for the observation, control and stabilization of waves from the boundary*, SIAM J. Control and Optimisation, 30, 1992, 1024-1065.

[2] C. BARDOS, G. LEBEAU et J. RAUCH, *Contrôlabilité exacte, perturbation et stabilisation de Systèmes Distribués*, Appendice 2, Masson, Paris, 1988.

[3] L. BAUDOUIN, O. KAVIAN et J.-P. PUEL, *Regularity in a Schrödinger equation with a potential singular at finite distance and at infinity.* C. R. Acad. Sci. Paris, 337, 11 (2003), 705-710.

[4] L. BAUDOUIN et J.-P. PUEL, *Détermination du potentiel dans l'équation de Schrödinger à partir de mesures sur une partie du bord* C. R. Acad. Sci. Paris, Série I 334 (2002), 967-972.

[5] L. BAUDOUIN and J.-P. PUEL, *Uniqueness and stability in an inverse problem for the Schrödinger equation*, Inverse Problems **18** (2002) 1537-1554.

[6] H. BRÉZIS, *Analyse fonctionnelle, théorie et applications*, Mathématiques appliquées pour la maîtrise. Dunod, Paris, 1999.

[7] A. L. BUKHGEIM, *Introduction to the theory of Inverse Problems*, Inverse and Ill-posed problem Series. VSP, Utrecht, 2000.

[8] A. L. BUKHGEIM et M.V. KLIBANOV, *Global uniqueness of a class of multidimensional inverse problems* Soviet. Math. Dokl. 24 (1981), no. 2, 244-247.

[9] A. L. BUKHGEIM et G. UHLMANN, *Recovering a potential from partial Cauchy data*, Comm. Partial Differential Equations **27** (2002), 653-668.

[10] E. CANCÈS et C. LE BRIS, *On the time-dependent Hartree-Fock equations coupled with a classical nuclear dynamics*, Math. Mod. and Meth. in Appl. Sci. 9 (7) (1999), 963-990.

[11] E. CANCÈS, C. LE BRIS et M. PILOT, *Contrôle optimal bilinéaire d'une equation de Schrödinger* C. R. Acad. Sci. Paris, t. 330, Série 1 (2000), 567-571.

[12] T. CAZENAVE, *An introduction to nonlinear Schrödinger equation*, Textos de Métodos Matemáticos 26, third edition (1996).

[13] T. CAZENAVE et A. HARAUX, *An introduction to semilinear evolution equations.* Oxford Lect. Series in Math. and its Appli. **13** The Clarendon Press, Oxford University Press, New York (1998).

[14] J. M. CHADAM et R. T. GLASSEY, *Global existence of solutions to the Cauchy problem for time dependent Hartree equations*, J. Math. Phys. 16 (1975), 1122-1130.

[15] R. DAUTRAY et J.-L. LIONS, *Analyse mathématique et Calcul numérique pour les sciences et les techniques*, Masson, Paris, 1988, Vol. **1**, **7** et **8**.

[16] C. FABRE, *Résultat de contrôlabilité exacte interne pour l'équation de Schrödinger et leurs limites asymptotiques, application à certaines équations de plaques vibrantes*, Asymptotic Analysis **5** (1992), 343-379.

[17] L. HÖRMANDER, *Linear Partial Differential Operators*, Springer Verlag, Berlin, 1963.

[18] M.A. HORN et W. LITTMAN *Boundary control of a Schrödinger equation with nonconstant principal part*. Control of partial differential equations and applications (Laredo, 1994), Lecture Notes in Pure and Appl. Math., 174, Dekker, New York, (1996), 101-106

[19] O. Yu. IMANUVILOV, *On Carleman estimates for hyperbolic equations.*, Asym. Anal. 32 (2002), no. 3-4, 185-220.

[20] O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO, *Global uniqueness and stability in determining coefficients of wave equations.*, Comm. Partial Differential Equations **26**,(2001), No 7-8, 1409-1425.

[21] O. Yu. IMANUVILOV et M. YAMAMOTO, *Global lipschitz stability in an inverse hyperbolic problem by interior observations*, Inverse Problems **17**,(2001), No 4, 717-728.

[22] R. J. IORIO et D. MARCHESIN *On the Schrödinger equation with time dependent electric fields*, Proc. Royal Soc. Edinburgh 96 (1984), 117-134.

[23] V. ISAKOV, *Inverse Problems for Partial Differencial Equations.*, Springer Verlag, Berlin, 1998.

[24] V. ISAKOV, *Inverse Source Problems.*, Am. Math. Soc., Providence, RI 1990.

[25] V. ISAKOV et M. YAMAMOTO, *Carleman estimate with the Neumann boundary condition and its applications to the observability inequality and inverse hyperbolic problems*, Contemp. Math. **268**,(2000), Amer. Math. Soc., Providence, RI, 191–225.

[26] T. KATO, *Linear evolution equations of "hyperbolic" type*, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. I, 17 (1970), 241-258.

[27] A. KHAIDAROV *Estimates for stability in multidimensional inverse problems for differential equations*, Soviet Math. Dokl. 38 (1989), No. 3, 614-617

[28] Y. M. KIM *Carleman inequalities and strong unique continuation theorem for the Schrödinger operator.* Kyungpook Math. J. **37** (1997), No. 2, 197-204.

[29] M.V. KLIBANOV, *Inverse Problems and Carleman estimates*, Inverse Problems **8** (1992), 575-596.

[30] V. KOMORNIK, *Exact controllability and stabilization (the multiplier method)*, Wiley, Masson, Paris, 1995.

[31] I. LASIECKA et R. TRIGGIANI, *Optimal regularity, exact controllability and uniform stabilization of the Schrödinger equations with Dirichlet control*, Differential and Integral Equations **5** (1992), No 3, 521-535.

[32] G. LEBEAU, *Contrôle de l'équation de Schrödinger*, J. Math. Pures Appl. **71** (1992), 267-291.

[33] J.-L. LIONS, *Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*, 1, Masson, Paris, 1968.

[34] J.-L. LIONS, *Contrôlabilité exacte, perturbation et stabilisation de Systèmes Distribués*, 1, Masson, Paris, 1988.

[35] J.-L. LIONS et E. MAGENES, *Problèmes aux Limites non-Homogène et Application*, Dunod, Paris, 1968.

[36] E. MACHTYNGIER, *Exact controllability for the Schrödinger equation*, SIAM J. Control and Optimization **32**,(1994), No 1, 24-34.

[37] A. OSSES, *A rotated multiplier method applied to the controllability of waves, elasticity and tangential Stokes control*, SIAM J. on Control Optim. **40** (2001), 777-800.

[38] A. OSSES et J. P. PUEL, *Une nouvelle famille de multiplicateurs et applications à la contrôlabilité exacte de l'équation de ondes*, C.R. Acad. Sci. Paris Série 1 Math. **326** (1998), No 9, 1099-1104.

[39] K.-D. PHUNG *Observability of Schrödinger equation*, Carleman estimates and applications to uniqueness and control theory (Cortona, 1999), Progr. Nonlinear Differential Equations Appl., **46** (2001), 165-177, Birkhäuser Boston.

[40] J.-P. PUEL et M. YAMAMOTO, *Applications of exact controllability to some inverse problems for the wave equations.* Control of partial differential equations and applications (Laredo, 1994), Lecture Notes in Pure and Appl. Math., 174, Dekker, New York, (1996), 241-249.

[41] J.-P. PUEL et M. YAMAMOTO, *Smoothing property in multidimentional inverse hyperbolic problems : application to uniqueness and stability.*, J of Inverse and Ill-posed Problems **4** (1996), 283-296.

[42] A. RUIZ, *Uniquecontinuation for weak solutions of the wave equation plus a potential*, J. Math. Pures Appl. 71 (1992), 455-467.

[43] J. SEGAL, *Nonlinear semigroups*, Ann. Math. 78 (1963), 339-364.

[44] J. SIMON, *Compact Sets in the Space $L^p(0,T;B)$*, Ann. Mat. Pura Appl. (4) 146 (1987), 65-96.

[45] J. SYLVESTER et G. UHLMANN, *A global uniqueness theorem for an inverse boundary value problem.* Ann. of Math. (2) 125 (1987), no. 1, 153-169.

[46] L. TARTAR, *An Introduction to Sobolev Spaces and Interpolation Spaces*, Course given at Wean Hall, (2000).

[47] D. TATARU, *Carleman estimates and unique continuation for solutions to boundary value problems* J. Math. Pures Appl. **9** 75 (1996), No. 4, 367-408.

[48] R. TRIGGIANI, *Carleman estimates and exact boundary controllability for a system of coupled non-conservative Schrödinger equations*, Special issue *Rend. Istit. Mat. Univ. Trieste*, **XXVIII** (1997), 453-504. Supplement, Dedicated to the memory of Pierre Grisvard.

[49] R. TRIGGIANI et P.- F. YAO, *Inverse estimates for Schrödinger equations with variable coefficients*,Control and Cybernetics, **28** No 3 (1999), 627-664.

[50] U. WÜLLER, *Existence of time evolutions for Schrödinger operators with time dependent singular potentials*, Ann. Inst. H. Poincaré, Sec A 44 (1986), 155-171.

[51] K. YAJIMA, *Existence of solutions for Schrödinger evolution equations*, Com. Math. Phys. 110 (1987), 415-426.

[52] K. YAJIMA and G. ZHANG *Smoothing property for Schrödinger equations with potential superquadratic at infinity*, Com. Math. Phys. 221 (2001), $n^o$3, 573-590.

[53] M. YAMAMOTO, *Uniqueness and stability in multidimensional hyperbolic inverse problems*, J. Math. Pures Appl. **78** (1999), 65-98.

[54] X. ZHANG, *Exact controllability of semilinear plate equations*, Asymptot. Anal. **27** (2001), No. 2, 95-125.

[55] E. ZUAZUA, *Remarks on the controllability of the Schrödinger equation*, A. Bandrauk, M.C. Delfour, and C. Le Bris, Quantum Control : mathematical and numerical challenges, CRM Proc. Lect. Notes Ser., AMS Publications, Providence, R.I., (2003), pp. 181-199.