§ Spectral Theory lesson 02 What is weak derivative and weak solution
譜理論誕生於從二十世紀初，源自 David Hilbert 的 Hilbert space theory，該理論是在積分方程的背景下發展起來的。
在譜理論出生後幾年，人們發現它能解釋原子的發射光譜(spectra of the atoms)。
Hilbert 空間與光譜有了美麗的邂逅。

現在，關於量子力學有兩個主要的假設：

1. 量子系統的態由複 Hilbert 空間 H 的非零向量描述。
2. 這些可觀察量由自伴隨線性算子表示 $T:H\to H$

一個狀態 $u\in H$ 提供了每個可能測量結果的機率分佈，一個可觀察的 $T:H\to H$ 提供一個可被測量的物理量(例如位置或動量)。

Stone 定理：
假設 $T:H\to H$ 是一自伴隨算子，則這個演化方程 $\partial_t u = iTu, u(0,\cdot)=u_0\in H$ 的解由 $t\to u(t)=U_t u_0$ 給出，其中 $(U_t)_{t\in R}$ 是由 $U_t\equiv e^{itT}$ 所定義的么正群(unitary group)。

當 $T=\partial_x^2$，上述的方程即為薛丁格方程。

這個定理出現了 T 與 H，還需要仔細思量。
路途還很遙遠，我們先看懂以下兩個基本觀念：弱導數與弱解。
在抽象的定義之前，先看簡單的例子。
以下的計算注意到 φ,φ' 在邊界值皆為 0，即所謂的 compact support。

§ 弱導數(weak derivative)
若一個函數 f 雖然不可微（傳統意義），但它在積分中與某個函數 g 表現得就像是有導數，那我們就稱 g 為 f 的弱導數。
定義：

Let $f\in L^1_{loc}(R)$(locally integrable)，if $\int_R f(x)\varphi'(x)dx = -\int_R g(x)\varphi(x)dx$ for all $\varphi(x)\in C_c^\infty(R)$，then $g(x)\in L^1_{loc}(R)$ is called the weak derivative of f(x)。

例 $f(x)=|x|$ 在 x=0 不可微。

$f'(x)=\begin{cases}1, x>0\\ -1, x<0\end{cases}$ 作為 f(x)的 weak derivative。即 $g(x)=\begin{cases}1, x>0\\ -1, x<0\end{cases}$ 是 f 的弱導數。

驗證一下 $\int_R |x|\varphi'(x)dx = -\int_R g(x)\varphi(x)dx$ （因為 $\varphi(x)\in C_c^\infty(R)$，它與其導數在邊界都為 0)

$$\int_R |x|\varphi'(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}|x|\varphi'(x)dx = \int_{-\infty}^{0}(-x)\varphi'(x)dx + \int_0^{\infty}x\varphi'(x)dx$$

$$\int_{-\infty}^{0}(-x)\varphi'(x)dx = -x\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{0} + \int_{-\infty}^{0}\varphi(x)dx = \int_{-\infty}^{0}\varphi(x)dx$$

$$\int_0^{\infty}x\varphi'(x)dx = x\varphi(x)\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty}\varphi(x)dx = -\int_0^{\infty}\varphi(x)dx$$

兩者合併，得$\int_{-\infty}^{\infty}|x|\varphi'(x)dx = -\int_{-\infty}^{\infty}g(x)\varphi(x)dx$

由定義，g(x)是 $f(x)=|x|$ 的弱導數。

§ 弱解(weak solution)

例 Poisson equation $-\Delta u = f$ in $\Omega \subset R^n$

Strong/calssical solution 要滿足

1. $u \in C^2$
2. 滿足上式每一點都成立。

$$\int_\Omega -\Delta u\varphi(x)dx = \int_\Omega f\varphi dx \Rightarrow \int_\Omega \nabla u \bullet \nabla\varphi dx = \int_\Omega f\varphi dx \quad \text{for all} \quad \varphi \in C_c^\infty(\Omega)$$

定義：

若$u \in H^1(\Omega)$且$\int_\Omega \nabla u \bullet \nabla\varphi dx = \int_\Omega f\varphi dx$ 對所有的$\varphi \in C_c^\infty(\Omega)$都成立。則 u 即為此 Poisson 方程的弱解。

例 $\Omega = (0,1)$ $\begin{cases} -u''(x) = 1, x \in (0,1) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$

則 $u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x$ 是 strong(classical)solution。

以下驗證一下$v(x) = \begin{cases} x(1-x), x \in (0,1) \\ 0, other \end{cases}$ 是一個 weak solution。

$\int_\Omega \nabla v \bullet \nabla\varphi dx = \int_\Omega f\varphi dx$ 即為$\int_0^1 (1-2x)\varphi'(x)dx = \int_0^1 \varphi(x)dx$ (f(x)=1)

其中左式$\int_0^1 (1-2x)\varphi' dx = (1-2x)\varphi\Big|_0^1 + \int_0^1 2\varphi dx = \int_0^1 2\varphi dx$ (integration by parts)

又$\int_0^1 v'(x)\varphi'(x)dx = v'(x)\varphi'(x)\Big|_0^1 - \int_0^1 v''(x)\varphi(x)dx = -\int_0^1 v''(x)\varphi(x)dx$

對所有的測試函數φ，$\int_0^1 2\varphi(x)dx = -\int_0^1 v''(x)\varphi(x)dx$ 都成立，

所以$v''(x) = -2$ 。

所以，儘管v''在經典意義下不存在(在 x=0 與 x=1 微分不存在)，但它有一個$-v''=2, v(0)=v(1)=0$ 弱導數為常數-2。
因此它是 PDE $-v''(x)=2, v(0)=v(1)=0$ 的弱解。

項目	傳統定義（強解）	弱解定義
要求	$u \in C^2$	$u \in H^1$（具有弱導數）
方式	滿足 PDE 點對點	滿足積分形式的 PDE
優點	明確精確	更廣泛存在，適用於不光滑解
工具	經典微積分	Sobolev 空間、變分法、泛函分析

後記：
測試函數(test function) $\varphi(x)$ 還在其他地方出現：

1. 分佈理論 例如 Dirac delta $\delta(\varphi) := \varphi(0)$ for all $\varphi \in C_c^\infty(R)$
2. Sobolev 空間的定義 定義弱導數
3. PDE 弱解的定義 定義積分恆等式
4. 變分法 定義變化方向
5. 有限元素法 定義試驗空間與基底
6. Fourier 分析中的核與收斂性 定義弱收斂與卷積核
7. 建構某些 PDE 的基本解 與δ函數作用建立解
8. Microlocal 分析 探測奇異點與頻率