梯度算子

首先我想谈谈场这个在物理学中非常基本的概念。我们所说的场是指取决于空间位置的一个量。最可能简单的一种物理场是标量场，所谓标量场，是指每点仅有一个单独数量——一个标量——所标志的那种场。当然这个数量还可随时间而变，不过眼下我们还无需为此操心。我们将只谈论在某一特定时刻，场看来是个什么样子。作为标量场的一个例子，你可以考虑一块固体材料，其中某些地方受热而另一些地方受冷，使得该物体的温度以一种复杂方式逐点改变。于是温度将是从某个迪卡尔坐标系上量得的代表空间每一位置的函数。可见温度是一标量场。另一个常见的例子则是势场。

还有一种场叫做矢量场，意义也十分简单。就是在空间每一点给出一个矢量，这个矢量逐点变化。作为一个例子，可考虑一个旋转物体。在每点上物体中原子的速度便是位置函数的矢量。作为第二个例子，考虑在一块材料中的热流。如果某处的温度高于另一处的，热量就会从较热处流至较冷处。在材料中的不同位置热量将朝不同的方向流动，这一热流就是一个矢量场。

当然，类似的，你也可以给张量场下个定义。

当场随时间变化时，可通过给出场对时间的微商来加以描述。我们希望也按同样办法来描述场对空间的变化，因为对于例如或者相邻两点之间的温度或者势能关系我们是感兴趣的。值得注意的是，对任一标量场，例如ϕ，其可能的微商有三个：$\partial\phi/\partial x_1$、$\partial\phi/\partial x_2$和$\partial\phi/\partial x_3$。由于有这三种微商，而我们又知道要形成一个矢量需要三个数量，也许这三个微商就是一个矢量的分量？！

当然，一般并非任何三个数量都能构成为一个矢量的。只有当我们旋转坐标系，各个分量按照正确的方式变换时，这才成立。所以需要分析坐标系旋转时，这些微商是如何变换的。为此，我们采用一个新坐标系$x_i' = \lambda_{ij} x_j$，在这个坐标系中，微商变为$\partial\phi'/\partial x_i' = \partial\phi/\partial x_i'$，这是因为$\partial\phi'/\partial x_i'$是一个标量。利用链式法则，有

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_i'} = \frac{\partial x_j}{\partial x_i'}\frac{\partial\phi}{\partial x_j} \tag{1}$$

为了得到$\partial x_j / \partial x'_i$这个系数，我们写出坐标变换的反变换

$$x_j = \lambda_{kj} x'_k \tag{2}$$

并将其两边对x'_i求导数，得

$$\frac{\partial x_j}{\partial x'_i} = \lambda_{kj} \frac{\partial x'_k}{\partial x'_i} = \lambda_{kj} \delta_{ik} = \lambda_{ij} \tag{3}$$

将它代入式(1)，我们就得到了

$$\frac{\partial \phi}{\partial x'_i} = \lambda_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \tag{4}$$

这个式子说明$\left(\partial\phi/\partial x_1, \partial\phi/\partial x_2, \partial\phi/\partial x_3 \right)$是一个矢量。

上面的论证与我们究竟是在对哪一个标量场进行微分是没有关系的。既然不管我们对之进行微分的是什么，那些变换公式都相同，那就可以略去ϕ而由一个算符方程式来代替式(4)：

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} = \lambda_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \tag{5}$$

在很多参考书上也将$\partial/\partial x_i$用∂_i来表示，即$\partial_i \equiv \partial/\partial x_i$。这样的记号写起来更加简单，而且在复杂的场合也不容易出错。而目前，我们则可以利用它将上面的变换关系可以写得好看一些

$$\partial'_i = \lambda_{ij} \partial_j \tag{6}$$

由于这些微分算符本身就已如同一个矢量的分量那样进行变换，我们便可以称之为一个矢量算符的分量，通常用符号∇来表示这个矢量算符，即可以写成

$$\nabla \equiv \left(\partial_1, \partial_2, \partial_3 \right) \tag{7}$$

或者

$$\nabla = \hat{x}_i \partial_i \tag{8}$$

那当然就意味着其分量

$$\nabla_i = \partial_i \tag{9}$$

顺便提一句，在有关张量的现代处理中，我们正是把∂_i这样的微分算符看作矢量基的。

当∇作用在标量函数或者矢量场上，就是我们所熟悉的梯度、散度以及旋度：

$$
\begin{aligned}
\operatorname{grad}\phi &= \nabla\phi = \left(\partial_i\phi\right)\hat{x}_i = \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \\
\operatorname{div}\vec{A} &= \nabla\cdot\vec{A} = \partial_i A_i \\
\operatorname{curl}\vec{A} &= \nabla\times\vec{A} = \left(\varepsilon_{ijk}\partial_j A_k\right)\hat{x}_i
\end{aligned} \tag{10}
$$

值得注意的是，上面的式子中顺序是很重要的，例如$\nabla\cdot\vec{A}$是矢量场$\vec{A}$的散度，它是一个标量；而$\vec{A}\cdot\nabla$并非一个数值，它仍然是某种算符。另外，这里我还写出了标量场梯度的另一种表示方法，即$\nabla\phi = \partial f/\partial\vec{r}$，在分析力学部分我们会比较多的采用这个记法，其好处在下面这样一个简单的例子中可见一斑。设f是粒子位矢$\vec{r}$的函数，而$\vec{r}$本身又是某个变量q的函数，现在我们要求f对q的微商，根据链式法则，有

$$
\frac{df}{dq} = \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{dx^i}{dq} \tag{11}
$$

而采用这里的写法，我们就可以将上式写为

$$
\frac{df}{dq} = \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}\cdot\frac{d\vec{r}}{dq} \tag{12}
$$

这在涉及质点组问题时会带来较大的方便。

利用式(10)给出的这些结合，就可以按照一种方便的方式——一种并不依赖于任一特定坐标系的普遍方式——来写出关于场的空间变化。作为对矢量微分算符∇应用的一个例子，我在这里把 Maxwell 方程写出来：

$$
\begin{aligned}
&\nabla\cdot\vec{E} = \rho, \qquad && \nabla\times\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \\
&\nabla\cdot\vec{B} = 0, \qquad && \nabla\times\vec{B} = \frac{\partial\vec{E}}{\partial t} + \vec{J}
\end{aligned} \tag{13}
$$

迄今为止，我们只有场的一阶变化。当然我们本来也可以考虑二阶微商，这有以下几种可能的结合式：

$$
\nabla\cdot\left(\nabla\phi\right),\quad \nabla\times\left(\nabla\phi\right),\quad \nabla\left(\nabla\cdot\vec{A}\right),\quad \nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{A}\right),\quad \nabla\times\left(\nabla\times\vec{A}\right) \tag{14}
$$

你可以核实一下，这些是所有的各种可能结合。

在这些项中，你会发现第二和第四项实际上总是等于零的：

$$\begin{aligned}\left[\nabla\times\left(\nabla\phi\right)\right]_i &= \varepsilon_{ijk}\partial_j\left(\partial_k\phi\right)=\varepsilon_{ijk}\partial_j\partial_k\phi \\ &= \frac{1}{2}\left(\varepsilon_{ijk}\partial_j\partial_k\phi+\varepsilon_{ikj}\partial_k\partial_j\phi\right) \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\left(\partial_j\partial_k\phi-\partial_k\partial_j\phi\right)\equiv 0 \\ \nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{A}\right) &= \partial_i\left(\nabla\times\vec{A}\right)_i=\partial_i\left(\varepsilon_{ijk}\partial_j A_k\right)=\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_j A_k \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\left(\partial_i\partial_j A_k-\partial_i\partial_j A_k\right)\equiv 0\end{aligned} \tag{15}$$

第一个式子说明任一标量场的梯度是无旋场，而第二个则是说任一矢量场的旋度是无散场（或无源场）。

现在我将不加证明地陈述两个物理学中非常有用的数学定理。在一个物理问题中，我们经常会发现某一个矢量场的旋度为零，而我们注意到，一个梯度的旋度为零，于是，肯定有可能本来就是某一个标量的梯度，这样它的旋度才必然等于零。第一个定理是讲：

$$\begin{array}{ll}\text{如果} & \nabla\times\vec{A}=0 \\ \text{就有一个} & \psi \\ \text{使得} & \vec{A}=\nabla\psi\end{array} \tag{16}$$

当散度为零时，还有一个类似定理：

$$\begin{array}{ll}\text{如果} & \nabla\cdot\vec{B}=0 \\ \text{就有一个} & \vec{A} \\ \text{使得} & \vec{B}=\nabla\times\vec{A}\end{array} \tag{17}$$

在检查由两个算符的可能结合中，我们已经找出了其中有两种结合总是等于零的。现在看看那些不等于零的。考虑(14)所列的第一结合，

$$\nabla\cdot\left(\nabla\phi\right)=\partial_i\left(\partial_i\phi\right)=\partial_i\partial_i\phi=\frac{\partial^2\phi}{\partial {x_1}^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial {x_2}^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial {x_3}^2} \tag{18}$$

因此在这个式子中我们没必要保留那个括号，所以，在不引起混乱的情况下写成

$$\nabla\cdot\left(\nabla\phi\right)=\nabla\cdot\nabla\phi=\left(\nabla\cdot\nabla\right)\phi=\nabla^2\phi \tag{19}$$

这里我们把∇^2看成一个新的算符，这是一个标量算符。由于经常出现在物理学中，因而它被赋予一个名称，即 Laplace 算符：

$$\nabla^2 = \partial_i \partial_i = \frac{\partial^2}{\partial x_1{}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2{}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3{}^2} \tag{20}$$

由于 Laplace 算符是一个标量算符，就可以用它来对一个矢量进行运算——这意味着对在直角坐标系的每一个分量进行同一种运算：

$$\nabla^2 \vec{A} = \left(\nabla^2 A_i\right) \hat{x}_i \tag{21}$$

另一结合由于

$$\begin{aligned}
\left[\nabla \times \left(\nabla \times \vec{A}\right)\right]_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j \left(\nabla \times \vec{A}\right)_k = \varepsilon_{ijk} \partial_j \left(\varepsilon_{mnk} \partial_m A_n\right) \\
&= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mnk} \partial_j \partial_m A_n \\
&= \left(\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}\right) \partial_j \partial_m A_n \\
&= \partial_j \partial_i A_j - \partial_j \partial_j A_i \\
&= \partial_i \left(\nabla \cdot \vec{A}\right) - \nabla^2 A_i
\end{aligned} \tag{22}$$

因而

$$\nabla \times \left(\nabla \times \vec{A}\right) = \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A}\right) - \nabla^2 \vec{A} \tag{23}$$

而这里出现的$\nabla\left(\nabla \cdot \vec{A}\right)$也就是我们仅剩的还未考虑的一个组合，不过是偶尔会出现的一种矢量场罢了，对它没什么特别需要注意的。

把上面的结论放在一起：

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \left(\nabla \phi\right) &= \nabla^2 \phi = \text{scalar field} \\
\nabla \times \left(\nabla \phi\right) &= 0 \\
\nabla \left(\nabla \cdot \vec{A}\right) &= \text{vector field} \\
\nabla \cdot \left(\nabla \times \vec{A}\right) &= 0 \\
\nabla \times \left(\nabla \times \vec{A}\right) &= \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A}\right) - \nabla^2 \vec{A} = \text{vector field} \\
\left(\nabla \cdot \nabla\right) \vec{A} &= \nabla^2 \vec{A} = \text{vector field}
\end{aligned} \tag{24}$$

附录：不同坐标系中的梯度算子

设某一给定正交坐标系的三个单位矢量为$\hat{u}_i$，而线元的平方可以表示为$ds^2=g_i du_i^2$，那么体积元（其中$g=g_1g_2g_3$）

$$dV=\sqrt{g}du_1du_2du_3 \tag{A1}$$

梯度算子的作用则分别为

$$\nabla f=\frac{1}{\sqrt{g_i}}\frac{\partial f}{\partial u_i}\hat{u}_i,\qquad \nabla\cdot\vec{A}=\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\sqrt{\frac{g}{g_i}}A_i\right)$$
$$\nabla\times\vec{A}=\varepsilon_{ijk}\sqrt{\frac{g_i}{g}}\frac{\partial\sqrt{g_k}A_k}{\partial u_j}\hat{u}_i,\qquad \nabla^2 f=\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial u_i}\left(\frac{\sqrt{g}}{g_i}\frac{\partial f}{\partial u_i}\right) \tag{A2}$$

例如，对于柱坐标系有

$$ds^2=dr^2+r^2d\theta^2+dz^2 \tag{A3}$$

即

$$g_{rr}=g_{zz}=1,\qquad g_{\theta\theta}=r^2,\qquad \sqrt{g}=r \tag{A4}$$

因此，体积元为

$$dV=\sqrt{g}drd\theta dz=rdrd\theta dz \tag{A5}$$

而

$$\nabla f=\frac{\partial f}{\partial r}\hat{r}+\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial\theta}\hat{\theta}+\frac{\partial f}{\partial z}\hat{z}$$
$$\nabla^2 f=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$
$$\nabla\cdot\vec{A}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_r)+\frac{1}{r}\frac{\partial A_\theta}{\partial\theta}+\frac{\partial A_z}{\partial z}$$
$$\nabla\times\vec{A}=\left(\frac{1}{r}\frac{\partial A_z}{\partial\theta}-\frac{\partial A_\theta}{\partial z}\right)\hat{r}+\left(\frac{\partial A_r}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial r}\right)\hat{\theta}+\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta)-\frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right)\hat{z} \tag{A6}$$

而对于球坐标系，则有

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2\theta d\varphi^2 \tag{A7}$$

即

$$g_{rr} = 1, \quad g_{\theta\theta} = r^2, \quad g_{\varphi\varphi} = r^2\sin^2\theta, \quad \sqrt{g} = r^2\sin\theta \tag{A8}$$

因此，体积元为

$$dV = \sqrt{g}\, dr d\theta d\varphi = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \tag{A9}$$

而

$$\begin{aligned}
\nabla f &= \frac{\partial f}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial\varphi}\hat{\varphi} \\
\nabla^2 f &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \\
\nabla\cdot\vec{A} &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 A_r\right) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta A_\theta\right) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi} \\
\nabla\times\vec{A} &= \frac{1}{r\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta A_\varphi\right) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\varphi}\right]\hat{r} \\
&\quad + \frac{1}{r\sin\theta}\left[\frac{\partial A_r}{\partial\varphi} - \sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(rA_\varphi\right)\right]\hat{\theta} + \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(rA_\theta\right) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right]\hat{\varphi}
\end{aligned} \tag{A10}$$