2.4 Gradient

Für eine differenzierbare Funktion $f : X \to \mathbb{R}$ kennen wir bereits das Differenzial $\mathrm{d}f$. Ist der Differenzvektorraum V des affinen Raums X mit der geometrischen Struktur eines Euklidischen Skalarprodukts ausgestattet, so können wir der Funktion f neben der 1-Form $\mathrm{d}f$ auch noch ein Vektorfeld, das sog. Gradientenfeld (kurz: Gradient) $\mathrm{grad} f$, zuordnen. Wir betonen, dass das Differenzial fundamentaler als der Gradient ist: das Differenzial existiert immer, während der Gradient nur definiert werden kann, wenn ein Skalarprodukt vorliegt.

2.4.1 Euklidischer Isomorphismus: Vektorfelder → 1-Formen

Sei E_n der n-dimensionale Euklidische Raum mit Differenzvektorraum $V = \mathbb{R}^n$. (Unser besonderes Augenmerk gilt natürlich dem wichtigen Spezialfall $n = 3$, doch die hier zu besprechende Konstruktion ist von der Dimension n unabhängig.) In einer solchen Situation ist jedem Vektorfeld $u : E_n \to V$ eine 1-Form $\mathcal{I}(u) : E_n \to V^*$ zugeordnet. Diese Zuordnung erfolgt durch punktweise Anwendung des in Abschnitt 1.13 eingeführten Isomorphismus zwischen Vektoren und Linearformen. In Formeln:

$$\mathcal{I}(u)_p = \langle u(p), \cdot \rangle. \tag{2.20}$$

Speziell gelten für jeden Satz von kartesischen Koordinaten $x_1, \ldots, x_n$ die Relationen

$$\mathcal{I}(\partial_i) = \mathrm{d}x_i\,, \qquad \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}x_i) = \partial_i \qquad (i = 1, \ldots, n). \tag{2.21}$$

Wie zuvor sind hierbei ∂_i die Vektorfelder zur kartesischen Basis $\{e_1, \ldots, e_n\}$; also $\partial_i(p) = e_i$ $(i = 1, \ldots, n)$. Für ein allgemeines Vektorfeld u bzw. eine allgemeine 1-Form α gilt natürlich

$$\mathcal{I}(u) = \mathcal{I}\left(\sum u_i\,\partial_i\right) = \sum u_i\,\mathrm{d}x_i\,, \qquad \mathcal{I}^{-1}(\alpha) = \mathcal{I}^{-1}\left(\sum \alpha_i\,\mathrm{d}x_i\right) = \sum \alpha_i\,\partial_i\,. \tag{2.22}$$

Erinnerung. Durch die Einführung eines Euklidischen Skalarprodukts wird über das Längenmaß der Einheitsvektoren e (mit $\langle e, e\rangle = 1$) ein Maßstab ℓ festgelegt. In der bildlichen Darstellung der 1-Form $\mathcal{I}(u)$ durch Ebenenscharen gilt

$$\text{Länge}\big(u(p)\big) \times \text{Ebenenabstand}\big(\mathcal{I}(u)_p\big) = \ell^2. \tag{2.23}$$

2.4.2 Differenzial und Gradient

Spezialisieren wir den Isomorphismus $\mathcal{I}$ zwischen Vektorfeldern und 1-Formen zum Sonderfall des Differenzials einer Funktion, so erhalten wir:

Definition. Unter dem Gradienten einer Funktion $f : E_n \to \mathbb{R}$ versteht man das Vektorfeld

$$\mathrm{grad}\, f := \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}f). \tag{2.24}$$

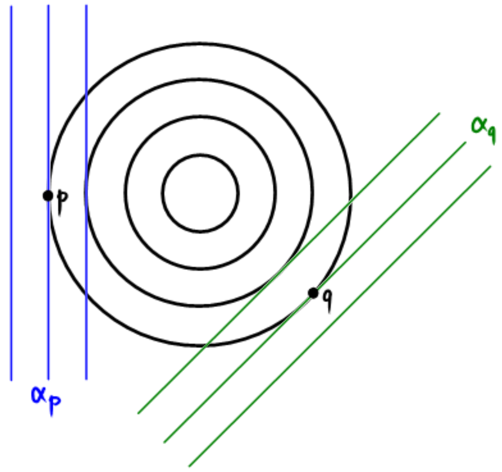
Andere Schreibweisen für den Gradienten sind

$$\mathrm{grad}\, f \equiv \nabla f \equiv \vec{\nabla} f. \tag{2.25}$$

Visualisierung. Wir wollen den Gradienten nun anschaulich deuten. Als Vorbereitung betrachten wir zuerst das Differenzial. Zwecks besserer Vorstellung spezialisieren wir zum Fall $n = 3$. Eine Funktion $f : E_3 \to \mathbb{R}$ veranschaulichen wir durch ihre Niveauflächen,

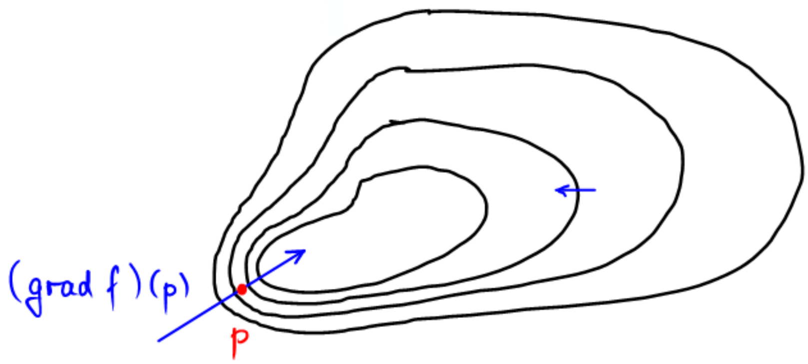
$$S_r := \{p \in E_3 \mid f(p) = r \in \mathbb{R}\}. \tag{2.26}$$

Zum Beispiel sind die Niveauflächen der Euklidischen Abstandsfunktion $f = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (in kartesischen Koordinaten $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $x_3 \equiv z$) Kugeloberflächen:



Die Ebenenschar der 1-Form $\alpha = \mathrm{d}f$ im Punkt p entsteht durch Linearisierung der Niveauflächen von f im Punkt p. Dabei ergibt eine dichte/dünne Aufeinanderfolge von Niveauflächen eine dicht/dünn gestaffelte Ebenenschar. Der Gradient einer Funktion f steht überall senkrecht auf den Niveauflächen von f. Dabei verhält sich die Länge des Gradienten reziprok zum Abstand zwischen den Niveauflächen.

Beispiel (in zwei Dimensionen): Niveaulinien einer Höhenfunktion. Der Gradient zeigt in Richtung des steilsten Anstiegs und ist umso größer, je dichter die Höhenlinien liegen.



2.4.3 Partielle Ableitung

Zum Zweck der Koordinatendarstellung des Differenzials und des Gradienten definieren wir jetzt den Begriff der partiellen Ableitung. Zunächst befassen wir uns nur mit dem Differenzial $\mathrm{d}f$. Sei dazu $\{o\,; e_1\,, \ldots, e_n\}$ ein affines Koordinatensystem des Euklidischen Raums E_n (oder eines anderen affinen Raums). Wie zuvor bezeichnen wir die affinen Koordinatenfunktionen mit $x_i : E_n \to \mathbb{R}$. Ihre Differenziale sind die Koordinatenformen $\mathrm{d}x_i : E_n \to V^*$.

Definition. Für eine differenzierbare Funktion $f: E_n \to \mathbb{R}$ definiert man die partielle Ableitung

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \quad : \quad E_n \to \mathbb{R} \tag{2.27}$$

als den Wert des Differenzials von f auf dem Basisvektor e_i :

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(p) := (\mathrm{d}f)_p(e_i) = \lim_{t\to 0} \frac{f(p+te_i) - f(p)}{t} \; . \quad \square \tag{2.28}$$

Hieraus folgt für das Differenzial die Koordinatendarstellung

$$\mathrm{d}f = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathrm{d}x_i \, . \tag{2.29}$$

Ergänzung. Der Begriff der partiellen Ableitung ist nicht an affine Koordinaten geknüpft, sondern für ganz allgemeine Koordinatensysteme erklärt. Hierauf wollen wir kurz eingehen.

Unter einem Koordinatensystem für E_n (oder irgendeinen n-dimensionalen affinen Raum) versteht man einen Satz von differenzierbaren Funktionen $\xi_i : E_n \to \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, n)$ mit der Eigenschaft, dass die Differenziale $(\mathrm{d}\xi_1)_p , \ldots , (\mathrm{d}\xi_n)_p$ für jeden Punkt $p \in E_n$ eine Basis von V^* bilden. ($V \simeq \mathbb{R}^n$ ist wie immer dem Differenzvektorraum von E_n .) Passend zu diesen Differenzialen bestimmt man (Basis-)Vektorfelder $\partial_{\xi_1}, \ldots, \partial_{\xi_n}$ durch Lösen des Gleichungssystems

$$(\mathrm{d}\xi_i)_p(\partial_{\xi_j}(p)) = \delta_{ij} \tag{2.30}$$

für alle $p \in E_n$. Die partielle Ableitung nach ξ_i ist dann definiert durch

$$\frac{\partial f}{\partial \xi_i}(p) := (\mathrm{d}f)_p(\partial_{\xi_i}(p)) = \lim_{t\to 0} \frac{f(p+t\partial_{\xi_i}(p)) - f(p)}{t} \, . \tag{2.31}$$

Das Differenzial hat den universell einfachen Ausdruck

$$\mathrm{d}f = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \mathrm{d}\xi_i \, . \tag{2.32}$$

Achtung! Zur Bestimmung der partiellen Ableitung nach einer Koordinate ξ_1 reicht es nicht aus, die Koordinatenfunktion ξ_1 allein zu kennen. Für die partielle Ableitung $\partial f/\partial \xi_1$ benötigt man das durch die Gleichungen

$$(\mathrm{d}\xi_1)(\partial_{\xi_1}) = 1, \quad (\mathrm{d}\xi_2)(\partial_{\xi_1}) = 0, \quad \ldots, \quad (\mathrm{d}\xi_n)(\partial_{\xi_1}) = 0 \tag{2.33}$$

bestimmte Vektorfeld ∂_{ξ_1}, was wiederum die Kenntnis aller n Koordinaten $\xi_1, \ldots, \xi_n$ erfordert.

Gradient in kartesischen Koordinaten. Wir wenden uns jetzt dem Gradienten zu. Um einen möglichst einfachen Ausdruck für ihn zu erhalten, schränken wir die Wahl des Koordinatensystems unter Verwendung der Euklidischen Struktur von E_n ein. Sei also das durch $\{o\,; e_1 , \ldots , e_n\}$ bestimme Koordinatensystem jetzt kartesisch, d.h. die Basisvektoren $e_1 , \ldots , e_n$ bilden ein Orthonormalsystem, $\langle e_i , e_j \rangle = \delta_{ij}$. Dann haben wir $\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}x_i) = \partial_i$, und für den Gradienten folgt der simple Ausdruck

$$\operatorname{grad} f = \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}f) = \mathcal{I}^{-1}\left(\sum \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathrm{d}x_i\right) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \partial_i \, . \tag{2.34}$$

Gradient in Zylinderkoordinaten. Ausgehend von kartesischen Koordinaten x_1, x_2, x_3 im E_3 erklärt man Zylinderkoordinaten ρ, φ, z durch

$$x_1 = \rho \cos\varphi, \quad x_2 = \rho \sin\varphi, \quad x_3 = z. \tag{2.35}$$

Das Differenzial hat in Zylinderkoordinaten die universell simple Form von (2.29):

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial \rho}\,\mathrm{d}\rho + \frac{\partial f}{\partial \varphi}\,\mathrm{d}\varphi + \frac{\partial f}{\partial z}\,\mathrm{d}z. \tag{2.36}$$

Einfach gesagt wirken die partiellen Ableitungen $\partial/\partial\rho$, usw., wie man es erwarten würde: drückt man f durch die Koordinaten ρ, φ, z aus, dann ist $\partial f/\partial\rho$ die gewöhnliche Ableitung nach der Variablen ρ (wobei φ und z festgehalten werden).

Ausführlich gesprochen werden Basisvektorfelder $\partial_\rho, \partial_\varphi, \partial_z$ bestimmt durch

$$\begin{aligned}
&\mathrm{d}\rho(\partial_\rho) = 1, \quad \mathrm{d}\rho(\partial_\varphi) = 0, \quad \mathrm{d}\rho(\partial_z) = 0,\\
&\mathrm{d}\varphi(\partial_\rho) = 0, \quad \mathrm{d}\varphi(\partial_\varphi) = 1, \quad \mathrm{d}\varphi(\partial_z) = 0,\\
&\mathrm{d}z(\partial_\rho) = 0, \quad \mathrm{d}z(\partial_\varphi) = 0, \quad \mathrm{d}z(\partial_z) = 1.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

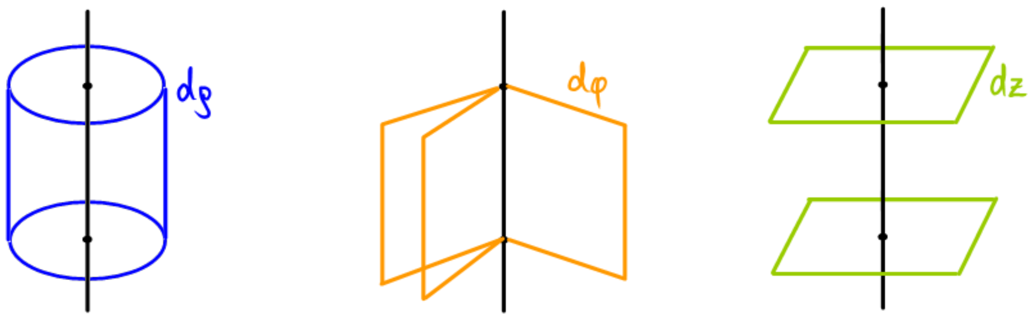
Die partiellen Ableitungen sind dann durch die allgemeine Definition (2.31) gegeben; zum Beispiel

$$\frac{\partial f}{\partial \rho}(p) = \lim_{t\to 0} \frac{f(p + t\partial_\rho(p)) - f(p)}{t}\,. \tag{2.38}$$

Zur Aufstellung des Gradienten in Zylinderkoordinaten,

$$\operatorname{grad} f = \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}f) = \frac{\partial f}{\partial \rho}\,\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}\rho) + \frac{\partial f}{\partial \varphi}\,\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}\varphi) + \frac{\partial f}{\partial z}\,\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}z), \tag{2.39}$$

benötigen wir $\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}\rho)$, $\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}\varphi)$ und $\mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}z)$. Dazu erinnern wir daran, dass der Isomorphismus $\mathcal{I}$ Orthonormalsysteme auf Orthonormalsysteme abbildet. Man sieht sofort (am schnellsten per graphischer Skizze), dass die Niveauflächen von ρ, φ, z aufeinander senkrecht stehen.



Es verbleibt also lediglich die Aufgabe, die orthogonalen 1-Formen $\mathrm{d}\rho, \mathrm{d}\varphi, \mathrm{d}z$ auf Eins zu normieren. Im Fall von $\mathrm{d}\rho$ erhält man

$$\mathrm{d}\rho = \mathrm{d}\sqrt{x_1^2 + x_2^2} = \frac{x_1\,\mathrm{d}x_1 + x_2\,\mathrm{d}x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}.$$

Da $\mathrm{d}x_1$ und $\mathrm{d}x_2$ Länge Eins haben, folgt

$$\langle \mathrm{d}\rho, \mathrm{d}\rho \rangle = \frac{x_1^2 + x_2^2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}^{\,2}} = 1.$$

Im Fall von $\mathrm{d}\varphi$ ergibt sich

$$\mathrm{d}\varphi = \mathrm{d}\arctan(x_2/x_1) = \frac{x_1\,\mathrm{d}x_2 - x_2\,\mathrm{d}x_1}{x_1^2 + x_2^2}$$

und somit

$$\langle \mathrm{d}\varphi, \mathrm{d}\varphi \rangle = \frac{x_1^2 + x_2^2}{(x_1^2 + x_2^2)^2} = \frac{1}{\rho^2}.$$

Ausserdem gilt $\langle \mathrm{d}z, \mathrm{d}z \rangle$. Folglich bilden die 1-Formen $\mathrm{d}\rho$, $\rho\,\mathrm{d}\varphi$ und $\mathrm{d}z$ ein Orthonormalsystem. Das entsprechende Orthonormalsystem von Vektorfeldern bezeichnen wir mit

$$\widehat{e}_\rho := \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}\rho), \quad \widehat{e}_\varphi := \mathcal{I}^{-1}(\rho\,\mathrm{d}\varphi), \quad \widehat{e}_z := \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}z). \tag{2.40}$$

Man hat

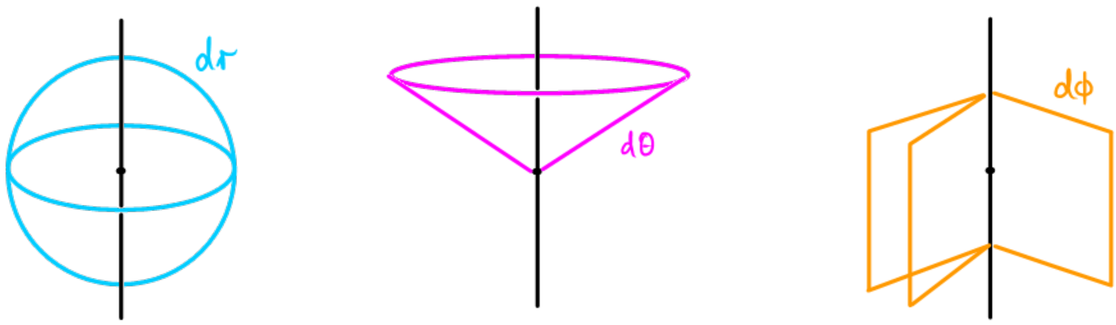
$$\widehat{e}_\rho = \partial_\rho\,, \quad \widehat{e}_\varphi = \rho^{-1}\partial_\varphi\,, \quad \widehat{e}_z = \partial_z\,. \tag{2.41}$$

Der Gradient in Zylinderkoordinaten wird dann ausgedrückt durch

$$\operatorname{grad} f = \frac{\partial f}{\partial \rho}\,\widehat{e}_\rho + \frac{1}{\rho}\frac{\partial f}{\partial \varphi}\,\widehat{e}_\varphi + \frac{\partial f}{\partial z}\,\widehat{e}_z\,. \tag{2.42}$$

Aufgabe. Sphärische Polarkoordinaten (oder Kugelkoordinaten) r, θ, ϕ sind erklärt durch

$$x_1 = r\sin\theta\cos\phi, \quad x_2 = r\sin\theta\sin\phi, \quad x_3 = r\cos\theta. \tag{2.43}$$



Die 1-Formen $\mathrm{d}r$, $r\mathrm{d}\theta$ und $r\sin\theta\,\mathrm{d}\phi$ bilden ein Orthonormalsystem, und der Gradient in Kugelkoordinaten ist

$$\operatorname{grad} f = \frac{\partial f}{\partial r}\,\widehat{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\,\widehat{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \phi}\,\widehat{e}_\phi \tag{2.44}$$

mit

$$\widehat{e}_r = \mathcal{I}^{-1}(\mathrm{d}r) = \partial_r, \quad \widehat{e}_\theta = \mathcal{I}^{-1}(r\mathrm{d}\theta) = r^{-1}\partial_\theta, \quad \widehat{e}_\phi = \mathcal{I}^{-1}(r\sin\theta\,\mathrm{d}\phi) = (r\sin\theta)^{-1}\partial_\phi\,. \quad \square$$

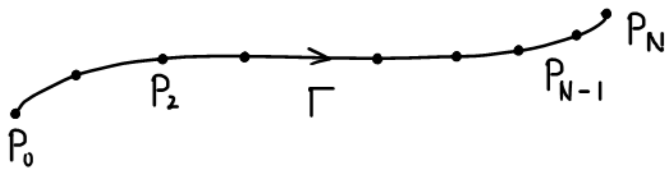
Abschließend soll noch einmal betont werden, dass das Differenzial immer existiert, während zur Bildung des Gradienten die Euklidische Struktur des Raums notwendig ist. Dieser wichtige Unterschied wird spätestens in der Thermodynamik deutlich. Im Zustandsraum der Thermodynamik gibt es keinen natürlichen Begriff von Skalarprodukt, weshalb man dort viele Differenziale aber keine Gradienten zu sehen bekommt.

Merke: Ohne Skalarprodukt kein Gradient!

2.5 Wegintegrale

Eine besonders wichtige Eigenschaft von 1-Formen ist, dass sie sich in kanonischer Weise längs Kurven im Raum integrieren lassen.

Definition (anschaulich). Wir erklären das Wegintegral einer 1-Form $\alpha : X \to V^*$ längs einer Kurve (oder eines Weges) Γ in einem affinen Raum $(X, V, +)$. Dazu unterteilen wir den Weg gleichmäßig in Stücke, indem wir eine große Zahl von Stützpunkten $p_0, p_1, \ldots, p_N$ einführen:



Dann berechnen wir die Summe

$$\alpha_{p_0}(p_1 - p_0) + \alpha_{p_1}(p_2 - p_1) + \ldots + \alpha_{p_{N-1}}(p_N - p_{N-1}) \, .$$

Schließlich verfeinern wir die Kette der Stützpunkte, bis sich im Limes $N \to \infty$ ein Grenzwert (nämlich das Wegintegral $\int_\Gamma \alpha$ von α längs Γ) einstellt:

$$\int_\Gamma \alpha := \lim_{N\to\infty} \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_{p_i}(p_{i+1} - p_i) \, . \tag{2.45}$$

Bemerkung. Für diese Definition wird nur die affine Struktur des Raumes benötigt: zur Bestimmung der auftretenden Summanden $\alpha_{p_i}(p_{i+1} - p_i)$ tun wir nichts weiter, als die Linearformen α_{p_i} auf den Differenzvektoren $p_{i+1} - p_i$ auszuwerten. Hierfür genügt der Begriff von Parallelität – im anschaulichen Bild von Abschnitt 1.4 zählen wir ganz einfach die von $p_{i+1} - p_i$ gekreuzten Ebenen von α_{p_i}. Winkelmessung und/oder Längenmessung von Vektoren kommt hier nicht vor! (Tatsächlich ist Winkel- und Längenmessung für unser spezielles Ziel, nämlich die Berechnung von Wegintegralen von Kraftfeldern, nicht angezeigt.) □

Um zu einer konzisen Definition zu gelangen, ersetzt man grob gesprochen die Differenzvektoren der Stützpunkte durch die Tangentialvektoren der Kurve. Das genaue Vorgehen ist wie folgt. Sei Γ eine Kurve in X mit Anfangspunkt p und Endpunkt q. Unter einer Parametrisierung von Γ versteht man eine differenzierbare Abbildung

$$\gamma : \ [0,1] \to X \tag{2.46}$$

mit $\gamma([0,1]) = \Gamma$ (als Punktmengen), $\gamma(0) = p$, $\gamma(1) = q$ und $\gamma'(t) \neq \mathbf{0}$ für alle $t \in [0,1]$.

Definition (Wegintegral). Ist $\gamma : \ [0,1] \to X$ eine Parametrisierung der Kurve Γ, so erklärt man das Wegintegral der 1-Form $\alpha : \ X \to V^*$ längs Γ durch

$$\int_\Gamma \alpha := \int_0^1 \alpha_{\gamma(t)}(\gamma'(t)) \, dt. \tag{2.47}$$

Bemerkung. Das Wegintegral hängt nicht von der Wahl der Parametrisierung ab. Ist nämlich