ПРОГРАММИРОВАНИЕ, 2020, № 2, с. 60–66

КОМПЬЮТЕРНАЯ АЛГЕБРА

УДК 514.8

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ И МЕХАНИКА – ИСТОЧНИК ЗАДАЧ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ АЛГЕБРЫ

В. Н. Сальников[a,*], А. Хамдуни[b,]**

[a] *ЦНРС и Университет города Ла Рошель*
17042 Ла Рошель, Проспект Мишеля Крепо, Франция
[b] *Университет города Ла Рошель*
Ла Рошель, Проспект Мишеля Крепо, Франция
**E-mail: vladimir.salnikov@univ-lr.fr,*
***E-mail: aziz.hamdouni@univ-lr.fr*

Поступила в редакцию 04.08.2019 г.
После доработки 23.09.2019 г.
Принята к публикации 11.11.2019 г.

В этой статье мы обсуждаем возможности компьютерной алгебры в процессе моделирования и изучения качественных свойств механических систем и задач теоретической физики.

Мы описываем структуры из так называемой обобщенной геометрии: алгеброиды Куранта и структуры Дирака. Они являются удобным языком для изучения структуры дифференциальных уравнений порт-Гамильтоновых и неявных Лагранжевых систем, описывающих, соответственно, взаимодействующие механические системы с диссипацией и системы со связями. Для обоих классов систем мы формулируем нерешенные задачи, в решении которых могут быть использованы методы компьютерной алгебры.

Мы также напоминаем определения из градуированной геометрии: градуированных многообразий и Q-структур. На конкретных примерах мы объясняем, как классическая дифференциальная геометрия описывается в рамках градуированной и какие вычислительные вопросы могут возникать. Это направление, по-видимому, является очень малоисследованным в контексте компьютерной алгебры.

DOI: 10.31857/S0132347420020107

1. ВВЕДЕНИЕ/МОТИВАЦИЯ

Эта статья – часть большого проекта по “геометризации механики”, включающего в себя серию работ, цель которых описать формализм (связанный с дифференциальной или алгебраической геометрией), удобный для качественного анализа и моделирования достаточно обширного класса механических систем. В этом проекте мы исследуем весь спектр вопросов от описания математической модели изучаемой системы и определения соответствующих геометрических структур до подбора (или создания) численных методов, сохраняющих построенные структуры, а также эффективной компьютерной реализации и применения методов. Такие численные методы называют *геометрическими интеграторами*. Недавние публикации показывают преимущества такого подхода: рассмотрение законов сохранения, симметрий системы, ограничений, наложенных на нее, улучшает точность численных методов и, как следствие, надежность результатов моделирования, а также описания качественных свойств системы.

В данной статье мы остановимся на некоторых задачах, возникающих в этом процессе, которые трудно или невозможно решить классическими аналитическими методами. Как нам кажется, методы компьютерной алгебры могут быть с успехом использованы в этом контексте. Некоторые из возникающих задач являются чисто техническими, и компьютерная алгебра просто ускоряет расчеты, но большинство достаточно концептуальные, где актуальны вопросы существования решений и оптимизации алгоритмов.

Подчеркнем, что речь идет именно об *открытых вопросах*. В них понятно, что нужно сделать, и примерно понятно, как, то есть можно выделить некоторые перспективные направления. Мы считаем, что к решению этих задач нет концептуальных препятствий, поскольку для конкретных примеров есть понятные конструктивные ответы. Отсутствие же решений в общем случае объясняется отсутствием регулярных контактов между специалистами по компьютерной алгебре и прикладниками из других областей: физиками, механиками и особенно геометрами. В данной статье мы постараемся ликвидировать этот пробел, наиболее доступно описав геометрические конструкции, минимально необходимые для понимания возникающих задач и их непосредственного решения.

1.1. Организация статьи

В следующей части (раздел 3) мы определяем структуры из обобщенной геометрии, возникающие в приложениях к механике и теоретической физике. Затем в разделах 7 и 8 мы описываем механические системы, для которых такая геометрия является удобным "языком", и объясняем, какие задачи могут быть решены методами компьютерной алгебры. Раздел 9 посвящен градуированной геометрии: мы определим необходимые математические понятия и снова опишем важные задачи компьютерной алгебры, насколько нам известно, не решенные в стандартных пакетах.

2. ОБОБЩЕННАЯ ГЕОМЕТРИЯ

В этом разделе мы коротко определим упомянутые во введении геометрические конструкции, а именно, алгеброид Куранта и структуры Дирака. По сравнению с оригинальной статьей [1], мы упростим изложение, опустив некоторые технические детали, не принципиальные для интересующих нас результатов, однако данного раздела должно быть достаточно, чтобы понять и сформулировать задачи компьютерной алгебры. В частности, мы будем писать слова "многообразие" и "расслоение", не определяя их; для понимания можно читать "векторное пространство соответствующей размерности".

2.1. Векторные поля

Итак, пусть M — многообразие размерности n. Обозначим TM — *касательное расслоение* к нему (множество всех касательных векторов в каждой точке) и T^*M — *кокасательное расслоение*. Локально TM можно рассматривать как

$$TM \simeq \mathbb{R}^{2n} = \mathbb{R}^n \times V,$$

где V — векторное пространство той же размерности, что и M, тогда

$$T^*M \simeq \mathbb{R}^{2n} = \mathbb{R}^n \times V^*$$

Множество сечений TM обозначается $\Gamma(TM)$ — это векторные поля на M. На них определен коммутатор

$$[\cdot,\cdot] : \Gamma(TM) \times \Gamma(TM) \to \Gamma(TM).$$

В компонентах он имеет вид:

$$[v, w]^i = \sum_j (v^j \partial_j w^i - w^j \partial_j v^i),$$

где ∂_j — производная по j-й координате.

2.2. Дифференциальные формы

На V можно определить кососимметричные k-линейные формы. Если это сделать в каждой точке M, с некоторыми условиями на регулярность, получится объект, называемый *дифференциальная* k-форма, то есть, по сути, кососимметричная "функция", "аргументами" которой являются k векторных полей на M.

Функции на M можно рассматривать как 0-формы. Стандартные примеры 1-форм, то есть ковекторных полей — это объекты, двойственные векторным полям ∂_i, их обозначают dx^i. Двойственность понимается в смысле $dx^i(\partial_j) = \delta^i_j$, где δ^i_j — символ Кронекера. В размерности 2 примером 2-формы будет ориентированная площадь.

На дифференциальных формах определены две естественные операции:

- *Свертка* формы $\alpha(\cdot,\cdot,\ldots)$ с векторным полем v:

$$\iota_v(\alpha) := \alpha(v,\cdot,\ldots).$$

Она понижает степень формы.

- *Внешний дифференциал формы* α:

$$d\alpha(v_0, v_1, \ldots, v_k) := \sum_i (-1)^i v_i \alpha(v_0, \ldots, v_i \ldots, v_k) + \\ + \sum_{i<j} (-1)^{i+j} \alpha([v_i, v_j], v_0, \ldots, \hat{v}_i, \ldots \hat{v}_j, \ldots, v_k),$$

где $\hat{v}$ обозначает пропуск аргумента.

Внешний дифференциал повышает степень формы.

Обозначение dx^i выше не случайно: двойственные к ∂_i объекты, действительно являются дифференциалами координат. Если $d\alpha = 0$, то форма α называется *замкнутой*. Если форма α сама является дифференциалом другой формы: $\alpha = d\beta$, то форма α называется *точной*, а форма β иногда называется ее *интегралом*.

Если 2-форма невырождена (в каждой точке, в смысле линейной алгебры), она называется *почти симплектической*, если она к тому же замкнута, то *симплектической*. Векторное поле v, свертка которого с симплектической формой ω является точной формой с интегралом H ($\iota_v\omega = dH$), называется *гамильтоновым векторным полем с гамильтонианом H*.

Заметим, что подобная конструкция возможна также на кокасательном расслоении — результатом будут поливекторные поля. А аналогом симплектической формы будет Пуассонов бивектор, который мы упомянем в разделе 5.

2.3. Алгеброид куранта и структуры Дирака

Рассмотрим теперь расслоение $E = TM \oplus T^*M$, иногда его называют обобщенным касательным расслоением или расслоением Понтрягина. Его сечения – это пары (v,α), где v – векторное поле, α – 1-форма, то есть ковекторное поле. На парах сечений определяются две операции:

Аналог скалярного произведения (в каждой точке, со значениями в $\mathbb{R}$):

$$\langle (v,\alpha),(w,\beta)\rangle := \iota_v\beta + \iota_w\alpha.$$

Аналог векторного произведения:

$$[(v,\alpha),(w,\beta)]_{CD} := ([v,w],(d\iota_v + \iota_v d)\beta - \iota_w d\alpha.$$

Вторая операция называется *скобкой Куранта–Дорфман*, а вся конструкция – пример (достаточно общий) *алгеброида Куранта*.

Структура Дирака это подрасслоение $D \subset E$, которое, во-первых, максимально изотропно (то есть $\langle\cdot,\cdot\rangle|_D \equiv 0$, и его ранг максимален и равен размерности M), во-вторых, устойчиво под действием $[\cdot,\cdot]_{CD}$:

$$[\Gamma(D),\Gamma(D)]_{CD} \subset \Gamma(D),$$

где $\Gamma(D)$ обозначает множество сечений D. Если ослабить второе условие, получится *почти структура Дирака*.

Тривиальным примером структуры Дирака будет $D = TM \subset E$. Более интересный задается графиком 2-формы ω, т.е. множеством пар

$$(v,\alpha), \quad \text{где} \quad \alpha = \iota_v\omega.$$

Условие на скалярное произведение гарантируется кососимметричностью формы. Условие на $[\cdot,\cdot]_{CD}$ выполнено, когда форма замкнута. Таким образом, симплектическая структура – частный случай структуры Дирака.

Другие примеры включают Пуассоновы структуры – мы обсудим их в разделе (9), а общее описание можно найти в оригинальной статье ([1]).

Структуры Дирака были введены Т. Курантом с некоторой мотивацией из механики: систему можно рассматривать в терминах координат и скоростей или координат и импульсов, геометрическое описание тогда происходит на TM или T^*M соответственно. В некотором смысле, структуры Дирака могли бы обеспечить связь этих двух способов описания. Однако в дальнейших работах Т. Куранта изучались лишь их геометрические свойства. Приложения к механике возникли позже в работах о неявных Лагранжевых ([2–5]) и порт-Гамильтоновых системах ([6, 7]) – о них мы расскажем в двух следующих разделах.

3. НЕЯВНЫЙ ЛАГРАНЖЕВ ФОРМАЛИЗМ И СИСТЕМЫ СО СВЯЗЯМИ

Одна из причин, почему структуры Дирака не сразу нашли свое применение в механике, заключается в том, что просто рассматривать TM и T^*M как фазовое пространство системы не совсем верно. Оказывается, правильная конструкция подразумевает построение структур Дирака на многообразии, которое уже является расслоением: $M = T^*Q$, где Q – конфигурационное пространство системы. Тогда необходимый формализм использует двойные расслоения и некоторые их фундаментальные свойства, описанные в [8].

Такая конструкция позволяет пересмотреть классический формализм систем со связями. Рассмотрим с теми же оговорками, что и в предыдущем разделе, $TQ \simeq \mathbb{R}^{2d} = \mathbb{R}^d \times V$ и $T^*Q \simeq \mathbb{R}^{2d} = \mathbb{R}^d \times V^*$, где d – число степеней свободы системы. V представляет собой пространство скоростей $\mathbf{v}$ в каждой точке $\mathbf{q}$ конфигурационного пространства, а V^*, соответственно, пространство импульсов $\mathbf{p}$. Наложить связи на данную систему значит ограничить разрешенные точки в конфигурационном пространстве и в каждой разрешенной точке выбрать подпространство допустимых скоростей – обозначим это множество Δ. Такая геометрическая конструкция называется *распределением*, при некоторых условиях невырожденности, можно считать, что оно задается как ядро некоторого количества 1-форм.

Тогда, следуя построению из предыдущего раздела, рассмотрим $\mathcal{V} = TT^*Q \simeq \mathbb{R}^{4d}$ и $\mathcal{V}^* = T^*T^*Q \simeq \mathbb{R}^{4d}$. Распределение Δ и линейная оболочка 1-форм поднимаются на это двойное расслоение – обозначим результат поднятия $\tilde{\Delta}$ и Δ_0 соответственно. Заметим, что на T^*Q существует каноническая симплектическая форма Ω, которая определяет отображение $\Omega^\flat \mathcal{V} \to \mathcal{V}^*$, как в примере в предыдущем разделе. Тогда (почти) структура Дирака для системы со связями задается следующим условием:

$$\mathbb{D}_\Delta = \{(w,\beta) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}^* \mid w \in \tilde{\Delta}, \beta - \Omega^\flat w \in \Delta_0\}.$$

Динамика системы, в свою очередь, задается Лагранжианом $L : TQ \to \mathbb{R}$, дифференциал которого можно поднять до $\mathcal{V}^*$, и векторным полем – сечением $\mathcal{V}$. Такая динамика сохраняет связи, если эта пара принадлежит $\mathbb{D}_\Delta$.

Эта конструкция, конечно, не обязательна для вывода уравнений движения системы: связи можно изучать, например, с помощью множителей Лагранжа. Однако у геометрического подхода есть важное преимущество: все встречающиеся объекты и операции имеют естественные дискретные аналоги. Это позволяет построить численный метод для решения полученных уравнений движения, который будет сохранять связи лучше, чем классические методы.

Более подробно эта конструкция описана в [4, 5]. Опустив технические детали, приведем здесь только конечные уравнения, задающие $\mathbb{D}_\Delta$:

$$\begin{gathered} \iota_v \alpha^a = 0, \quad a = 1, \ldots, m, \\ \dot{\mathbf{q}} \in \Delta, \quad \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}}, \\ \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{p}} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \in \Delta_0 \end{gathered} \tag{3.1}$$

Первая строчка здесь определяет связи: α^a — 1-формы, задающие распределение Δ. Дискретная версия этих уравнений имеет вид:

$$\begin{gathered} \langle \alpha_d^a, v_k \rangle = 0, \quad a = 1, \ldots, m, \\ p_{k+1} = \frac{1}{h} \frac{\partial L_d}{\partial v_k} \\ p_k - \frac{1}{h} \frac{\partial L_d}{\partial v_k} + \frac{\partial L_d}{\partial q_k} = \sum_{a=1}^{m} \lambda^a \frac{\partial \langle \alpha_d^a, v_k \rangle}{\partial v_k} \end{gathered} \tag{3.2}$$

$L_d := hL(q_k, v_k)$ — дискретный Лагранжиан системы, индексы k или $k + 1$ обозначают момент времени, в который вычисляется соответствующая переменная. В уравнения явно входят переменные p на k-м и $(k+1)$-м шаге, а v_k задается некоторым приближением скорости v с участием q_k. Таким образом, легко проверить, что система определена и полна, кроме того она линейна по всем переменным, кроме, возможно v.

С точки зрения компьютерной алгебры, здесь естественно возникают два вопроса. Первый чисто технический: вывод уравнений (3.1) и их дискретизация. Второй гораздо более концептуальный: дискретные уравнения (3.2) нужно решать, причем делать это на каждом шаге интегрирования, то есть возникает вопрос эффективности. Отсюда первая задача, которую мы хотим сформулировать в данной статье.

Задача 1. *Для уравнений вида* (3.1) *и* (3.2) *определить*, *когда полученный численный метод является явным*, *а когда нет. Какие геометрические* (*например*, *вид связей*) *и численные* (*например*, *приближение* v) *факторы на это влияют*? *Для каждого класса предложить алгоритм точного* (*символьного*) *или приближенного* (*итеративного*) *решения системы* (3.2).

Ответ на первый вопрос, по-видимому, довольно естественный: он зависит от того, насколько нелинейными соотношениями связаны известные и искомые переменные, а это классические вопросы компьютерной алгебры. В зависимости от этого ответа и производится выбор нужного алгоритма решения. При этом геометрическая и механическая интерпретация ответа может быть достаточно интересной.

4. ПОРТ-ГАМИЛЬТОНОВ ФОРМАЛИЗМ И ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЕ СИСТЕМЫ

В разделе 2 мы определили симплектическую структуру и Гамильтоновы векторные поля. Это удобный формализм для описания консервативных механических систем, не взаимодействующих с окружением. В обозначениях предыдущих разделов, на кокасательном расслоении T^*Q с канонической симплектической формой такие системы имеют вид:

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}. \tag{4.1}$$

Можно проверить, что поток Гамильтонова векторного поля v сохраняет функцию H, что, с точки зрения механики, соответствует сохранению энергии. Пожалуй, первые геометрические интеграторы появились в этом контексте ([9, 10]) — они сохраняют симплектическую структуру и объем в фазовом пространстве и, как следствие, позволяют контролировать сохранение энергии.

Однако большинство механических систем, рассматриваемых в приложениях, взаимодействуют друг с другом и не являются консервативными. Для таких ситуаций была предложена модификация формализма, связанная с так называемыми *порт-Гамильтоновыми системами* ([6, 7]) — изучаются уравнения вида (4.1), в которые добавляют слагаемые, отвечающие за взаимодействие и диссипацию:

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \mathbf{F}.$$

Динамика тогда полностью определяется функцией $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ и силой $\mathbf{F}$. Или в более общем случае (для неканонических симплектических форм) рассмотрим систему уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = (J(\mathbf{x}) - R(\mathbf{x}))\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} + g(\mathbf{x})\mathbf{f}, \tag{4.2}$$

где $J(\mathbf{x})$ — кососимметрическая матрица, а $R(\mathbf{x})$ и $\mathbf{f}$ новые слагаемые, отвечающие за взаимодействие и диссипацию, — они отсутствуют в классических Гамильтоновых системах. В работах [6, 7] приведена классификация этих слагаемых и описан их физический смысл.

Важно понимать, что порт-Гамильтонов формализм сам по себе не дает новой информации о системе. Однако он позволяет “упорядочить” систему, то есть разбить ее на простые блоки, взаимодействующие по понятным законам — это может быть полезно для моделирования (см. например, [11]). Кроме того, оказывается ([7]) порт-Гамильтоновы системы можно описывать с помощью структур Дирака, а это очень важно в контексте геометрических интеграторов. Таким образом, мы подходим ко второй задаче этой статьи.

Задача 2. *По заданной системе дифференциальных уравнений построить ее оптимальное порт-Гамильтоново представление. Описать соответствующую структуру Дирака.*

Обратим внимание на слово "оптимальное" в задаче. Нетрудно убедиться, что любую систему дифференциальных уравнений можно переписать в порт-Гамильтоновой форме: достаточно "забыть" Гамильтонову структуру и объявить все правые части "портами". Но тогда потеряется информация об энергетическом балансе системы, и она потенциально увеличится втрое. С точки зрения приложений, такое решение задачи не имеет большого смысла. Оптимальность можно понимать, например, как ограничение количества добавленных переменных. Тогда возникают стандартные вопросы существования решения и быстрых тестов, исключающих нерешаемые случаи.

Построение структуры Дирака, в свою очередь, нужно для последующего использования в контексте геометрических интеграторов. Здесь необходимо понять, в какой форме ответ будет наиболее конструктивен, а именно, как описать структуры Дирака в виде, удобном для дискретизации. В этом контексте возможна также некоторая связь с вопросами из следующего раздела (9).

5. ГРАДУИРОВАННАЯ ГЕОМЕТРИЯ

В этом разделе мы опишем геометрическую конструкцию, еще более общую, чем в разделе 3: речь идет о *градуированных многообразиях*. По-прежнему, вместо многообразий можно думать о векторных пространствах, хотя в градуированном случае могут возникать более интересные последствия такого упрощения.

Будем считать, что на многообразии M определена *градуировка*, то есть для каждой координаты x^i на M определена величина $deg(x^i) \in \mathbb{Z}$, называемая *степень*. Для простоты будем считать, что $deg(x^i)$ неотрицательна для всех координат.

Эта градуировка используется для определения коммутационных соотношений между координатами. В отличие от классического случая,

$$x^i \cdot x^j = (-1)^{deg(x^i)deg(x^j)} x^j \cdot x^i.$$

Кроме того, для всех координат выполнено соотношение

$$deg(x^i \cdot x^j) = deg(x^i) + deg(x^j).$$

Наиболее общие функции на таком многообразии представляют собой формальные ряды по всем переменным, однако в интересных случаях достаточно ограничиться многочленами от координат с ненулевыми степенями, коэффициенты которых суть гладкие функции от координат с нулевой степенью. Для них корректно определено понятие однородной функции и ее степени, а значит и коммутационные соотношения:

$$f \cdot g = (-1)^{deg(f)deg(g)} g \cdot f.$$

На градуированных многообразиях определены многие объекты и операции классической дифференциальной геометрии. Важное отличие заключается в том, что каждый раз, когда градуированные объекты переставляются, возникает знак, зависящий от их степени. Например, градуированное векторное поле V четной степени коммутирует само с собой автоматически:

$$[V, V] \equiv VV - (-1)^{deg(V)deg(V)} VV = 0.$$

Условие коммутирования векторного поля Q нечетной степени нетривиально:

$$[Q, Q] \equiv QQ - (-1)^{deg(Q)deg(Q)} QQ = 2Q^2.$$

Коммутирующее с собой векторное поле степени 1 называется *Q-структурой*.

Градуированное многообразие с таким векторным полем называется *дифференциальным градуированным многообразием* (или в физической литературе *Q-многообразием*). Мы рассмотрим несколько таких многообразий, на примере которых проиллюстрируем вычисления в градуированном случае.

5.1. Дифференциальные формы

Рассмотрим, как раньше, касательное расслоение к обычному многообразию Σ, линейные координаты θ на слое которого имеют степень 1 — такой объект обозначается $T[1]\Sigma$. Так как $deg(\sigma^\mu) = 0$, $\sigma^{\mu_1}\sigma^{\mu_2} = \sigma^{\mu_2}\sigma^{\mu_1}$ и $deg(h(\sigma^1, \ldots, \sigma^d)) = 0$. Равенство $deg(\theta^\mu) = 1$ означает, что $\theta^{\mu_1}\theta^{\mu_2} = -\theta^{\mu_2}\theta^{\mu_1}$. Произвольная однородная функция на $T[1]\Sigma$ степени p имеет вид

$$f = \sum f_{\mu_1 \ldots \mu_p}(\sigma^1, \ldots, \sigma^d)\theta^{\mu_1} \ldots \theta^{\mu_p}.$$

И как и раньше,

$$f \cdot g = (-1)^{deg(f)deg(g)} g \cdot f.$$

Легко заметить, что эта конструкция повторяет операции с дифференциальными формами, определенные в разделе 2:

$$f \leftrightarrow \alpha = \sum f_{\mu_1 \ldots \mu_p} d\sigma^{\mu_1} \wedge \ldots \wedge d\sigma^{\mu_p} \in \Omega(\Sigma).$$

Рассмотрим векторное поле $Q = \sum \theta^\mu \frac{\partial}{\partial \sigma^\mu}$. Заметим, что $\deg Q = 1$ и $[Q, Q] \equiv 2Q^2 = 0$, значит, оно является Q-структурой, повторяющей в точности внешний дифференциал.

5.2. Пуассоновы структуры

Пусть на многообразии M определена скобка Пуассона, то есть кососимметричная операция $\{\cdot,\cdot\} : C^\infty(M)\times C^\infty(M) \to C^\infty(M)$, удовлетворяющая тождеству Лейбница

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}$$

и тождеству Якоби

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$$

С геометрической точки зрения, скобка Пуассона может быть переписана как $\{f, g\} = \pi(\mathrm{d}f, \mathrm{d}g)$, где $\pi \in \Gamma(\Lambda^2 TM)$ – бивекторное поле с компонентами $\pi^{ij}(x) = \{x^i, x^j\}$ (см. замечание в разделе 3). Бивекторное поле является бидифференцированием, поэтому удовлетворяет тождеству Лейбница. Тождество Якоби в компонентах π имеет вид

$$\sum_l \left(\frac{\partial \pi^{ij}(x)}{\partial x^l} \pi^{lk}(x) + \frac{\partial \pi^{ki}(x)}{\partial x^l} \pi^{lj}(x) + \right.$$
$$\left. + \frac{\partial \pi^{jk}(x)}{\partial x^l} \pi^{li}(x) \right) = 0 \tag{5.1}$$

Рассмотрим теперь $T^*[1]M$ – кокасательное расслоение к M с координатами на слое степени 1, то есть $deg(x^i) = 0$, $deg(p_i) = 1$. На нем определена каноническая симплектическая форма $\omega = \sum_i dp_i \wedge dx^i$. Бивекторное поле тогда определяет функцию на $T^*[1]M$: $H = \frac{1}{2}\pi^{ij} p_i p_j$, а соответствующее Гамильтоново векторное поле имеет вид

$$Q_\pi = \pi^{ij}(x) p_j \frac{\partial}{\partial x^i} - \frac{1}{2}\frac{\partial \pi^{jk}}{\partial x^i} p_j p_k \frac{\partial}{\partial p_i}$$

Полезно проверить, что $\deg(Q_\pi) = 1$, а также что условие $Q_\pi^2 = 0$ эквивалентно (5.1).

Таким образом, градуированная геометрия описывает аналогичным способом достаточно разные объекты, такие как дифференциальные формы и Пуассоновы структуры. Кроме того, в этот формализм вписываются структуры Дирака, описанные выше (см. общее утверждение в [12] и конкретные механические примеры в [13, 14]), а также алгеброиды Ли и Куранта и многие другие объекты. А они, как упоминалось выше, находят применение в механике и теоретической физике.

Стоит отметить, что при всей изящности определений градуированных объектов реальные вычисления для конкретных примеров достаточно объемны и не всегда прямолинейны. Таким образом, мы подходим к третьей задаче компьютерной алгебры, которую мы довольно расплывчато сформулируем следующим образом:

Задача 3. *Расширить стандартные пакеты дифференциальной геометрии для работы с градуированными объектами.*

Насколько нам известно, существующие пакеты для работы с некоммутирующими объектами (а, по сути, это и есть основное отличие градуированных многообразий) написаны для конкретных довольно узкоспециализированных задач. Пакеты для классической дифференциальной геометрии, напротив, развиты очень хорошо – их расширение сделало бы неоценимый вклад в соответствующие прикладные области. Более конкретно, во все стандартные операции (дифференцирование, подсчет сверток и коммутаторов векторных полей, алгебраическое упрощение, ...) полезно было бы включить знаки, обусловленные градуировками – это исключительно вопрос программирования. Более того, нужно рассмотреть соответствие довольно простых условий вида $Q^2 = 0$ с классическими условиями вида (5.1), которые являются уравнениями с частными производными, и использовать их при упрощении выражений. Это нетривиальная задача даже без учета градуировок, одним из возможных подходов может быть описание уравнений с частными производными в пространстве джетов ([15, 16]).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ/ОБСУЖДЕНИЕ

Итак, мы сформулировали три задачи компьютерной алгебры, возникающие при изучении геометрических аспектов механических систем. Первая из них довольно техническая – компьютерная алгебра может помочь избежать длинных ошибкоопасных вычислений. Вторая является более концептуальной, она призвана помочь в качественном анализе систем дифференциальных уравнений и избежать "угадывания" их корректной формы. Третья задача выглядит, как достаточно неизученное, потенциально очень интересное направление развития компьютерной алгебры.

Подчеркнем еще раз, что решения приведенных задач важно для нас не "из спортивного интереса". Для решения механических задач они позволят создавать программные комплексы "полного цикла" (от описания физики системы до результатов численного счета). Мы упомянули этот подход во введении: в настоящее время каждый пример, разобранный по такой схеме, достоин публикации. Именно поэтому автоматизация процесса в рамках задачи 2, кажется естественным и важным направлением вычислительной механики. Это верно и для задачи 3, возникающей, например, в расчетах по теоретической физике или физике высоких энергий. В любом случае, мотивированный читатель может воспринимать эти задачи как приглашение к совместной работе.

Заметим в заключение, что кроме собственно описанных “непрерывных” конструкций, для многих из них важно построить дискретные аналоги. Это направление тоже интересует нас ([17, 18]) в рамках уже упомянутого проекта по “геометризации механики”, оно очевидным образом связано со сформулированными задачами.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор благодарен С.А. Абрамову, С.Я. Степанову, А. Прокопене за интересные вопросы и плодотворные обсуждения, посвященные данной тематике, во многом повлиявшие на эту статью, а также за полезные замечания при подготовке рукописи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Courant T.J.* Dirac manifolds. Trans. Am. Math. Soc. 1990. V. 319. P. 631–661.
2. *Yoshimura H., Marsden J.E.* Dirac Structures in Lagrangian Mechanics Part I: Implicit Lagrangian Systems, Journal of Geometry and Physics. 2006. V. 57.
3. *Yoshimura H., Marsden J.E.* Dirac structures in Lagrangian mechanics. Part II: Variational structures, Journal of Geometry and Physics. 2006. V. 57.
4. *Salnikov V., Hamdouni A.* From modelling of systems with constraints to generalized geometry and back to numerics, Z Angew Math Mech. 2019.
5. *Razafindralandy D., Salnikov V., Hamdouni A., Deeb A.* Some robust integrators for large time dynamics, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, 2019.
6. *Maschke B.M., van der Schaft A.J., Breedveld P.C.* An intrinsic Hamiltonian formulation of network dynamics: non-standard Poisson structures and gyrators. J. Franklin Inst. 1992. V. 329.
7. *van der Schaft A.* Port-Hamiltonian systems: an introductory survey, Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Madrid, 2006.
8. *Tulczyjew W.M.* The Legendre transformation, Ann. Inst. H. Poincaré, Sect. A. 1977. V. 27 (1). P. 101–114.
9. *Verlet L.* Computer “Experiments” on Classical Fluids, Physical Review. 1967. V. 159. P. 98–103.
10. *Yoshida H.* Construction of higher order symplectic integrators. Phys. Lett. A. 1990. V. 150. P. 262.
11. *Falaize A., Hélie T.* Passive simulation of the nonlinear port-hamiltonian modeling of a rhodes piano, Journal of Sound and Vibration, 2016.
12. *Kotov A., Schaller P., Strobl T.* Dirac Sigma Models, Commun. Math. Phys. 2005. V. 260.
13. *Salnikov V., Hamdouni A.* Geometric integrators in mechanics – the need for computer algebra tools, Proceedings of The third International Conference “Computer algebra”. Moscow, Russia, 2019.
14. *Salnikov V., Hamdouni A.* Géométrie généraliso et graduo pour la mмanique, proceedings of the Congrès Français de Mécanique. Brest, France, 2019.
15. *Kushner A., Lychagin V., Rubtsov V.*, Contact geometry and non-linear differential equations. Encyclopedia of Mathematics and its Applications, 101, Cambridge University Press, 2007.
16. *Krasil’shchik I.S., Vinogradov A.M. et al.* Symmetries and conservation laws for differential equations of mathematical physics, AMS, Providence, RI, 1999.
17. *Hamdouni A., Salnikov V.* Dirac integrators for port-Hamiltonian systems, in preparation.
18. *Salnikov V., Hamdouni A.* Discretization in the graded world, in preparation.