2. Филонов Г.Н. Деятельностная сущность воспитания / Г.Н. Филонов // Педагогика. 2008. №2. с.13.

3. Шиянов Е. Н. Аксиологические основания процесса воспитания / Е.Н. Шиянов // Педагогика. 2007. №10. с.33.

Фундаментальные и прикладные проблемы математики

ИНТЕГРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЙ ЛИНЕЙНОГО ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ С ДЕЙСТВУЮЩИМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА ФУНКЦИЮ СОСТОЯНИЯ (ПРОГИБ)

Крупенин В.Л.
ИМАШ РАН
Москва, Россия

Рассмотрим линейное волновое уравнение, описывающее состояние (прогиб от положения равновесия) линейной струны. Пусть прогиб есть $u(x,t)$; $t\geq 0$, $x\in[-1/2, 1/2]$. И пусть:

$$u(x,t) \geq \Delta>-1; \tag{1}$$

$$u(0,t) \geq \Delta_1>\Delta \tag{2}$$

При реализации строгих неравенств система описывается линейным волновым уравнением $\Box u\equiv u_{tt}-u_{xx}=0$, где без ограничения общности приняты единичными физические параметры струны. Граничные и начальные условия: $u(-1/2,t)=u(1/2,t)=0$; $u(x,0)=u_0(x)$; $u_t(x,0)=0$. Гладкость функции $u_0(x)$ обеспечивает существование и единственность решения линейной задачи Коши для уравнения $\Box u=0$, по крайней мере, в обобщенном смысле. Приведем определяющие соотношения.

При реализации в соотношении (1) равенства, ограничитель действуют на струну «от себя». Поэтому при $x\neq 0$, если $u\leq 0$, то $\Box u\geq 0$. Оперируя с обобщенными решениями, потребуем, чтобы носитель обобщенной функции $\mathrm{supp}\ \Box u\subset\{(x,t);x=0,\ |u(x,t)|\underset{\cdot}{=}\Delta\}$. Гипотеза удара предполагает, что потерь энергии не происходит, т.е. как и для линейной струны в смысле обобщенных функций

$$\partial/\partial t\ (|u_x|^2+|u_t|^2\}=\partial/\partial x\ (2u_tu_x). \tag{3}$$

Это соотношение в данном уже «нелинейном случае» постулируется и дает аналог классической гипотезы об абсолютно упругом ударе:

$$u_t(x,t-0)=-u_t(x,t+0),\ (x,t)\in \mathrm{supp}\ \Box u;\ u(x,t)= \Delta;\ x\neq 0.$$

При $x=0$ образуются временные выстои струны.. При этом во время выстоя на струну при $u(0,t)\underset{\cdot}{=}\Delta_1$ ($t\in[t_k, \theta_k]$) действует сила реакции $R_k(t)$, где t_k и θ_k - моменты начала и конца выстоя; *k* - целочисленный индекс - здесь и везде отвечает некоему *k*-му взаимодействию.

Тогда, если записать обобщенную функцию $\Phi_0[u]$, символически выражающую силу порождаемую ограничениями (1) и (2), она, будет представляться в виде двух обобщенных функций: $\Phi_0[u]=\Phi_1[u]+\Phi_2[u]$. Причем при *n-м* взаимодействии,

$$\Phi_1[u]=J(x)\delta[t-t_n(x)]\gamma(x;\Delta). \tag{4}$$

Здесь $J(x)$ –плотность ударного импульса, $t_n(x)$ – распределение *n*-й «фазы» удара, определяемой в данном случае как решение уравнения $u[x, t_n(x)]|\underset{\cdot}{=} \Delta$, где $x\neq 0$; $\delta(t)$ - δ-функция Дирака. Индикаторная функция - нестрогое. Для второй составляющей силы взаимодействия в некоем j-м случае имеем:

$$\Phi_2[u]= R_j(t)\ \delta(x)[\eta(t- t_j) - \eta(t-\theta_j)],\ R_j(t)= u_x(-0,t) – u_x(+0,t)\geq 0,;\ t\in[t_{j,}\ \theta_j], \tag{5}$$

где $\eta(t)$ – единичная функция Хевисайда. Анализируемая задача, следовательно, может быть записана в виде нелинейного уравнения типа Клейна – Гордона $\Box u-\Phi_0[u]=0$ с краевыми и начальными условиями (2).

Выведем представления периодических стоячих волн некоторого периода $T(E)=2\pi/\omega$ где ω - частота; E – полная энергия. Воспользуемся методами частотно-временного анализа к интегральному уравнению T- периодических колебаний

$$u(x,t)=\int_{0}^{T}\int_{-1/2}^{1/2}\chi(x,y;\ t-s)\Phi_0[u(x,t-s)]dsdy; \qquad (6)$$

При этом периодическая функция Грина (ПФГ):

$$\chi(x,y;\ t)=\sum \mathbf{sin}\pi n(x+1/2)\mathbf{sin}\pi n(z+1/2)\chi_n(t).\ n=0,\pm 1,\ \pm 2,\ldots \qquad (7)$$

Внося (4) и (5) в (6), находим, предполагая, что за каждый период искомого периодического движения происходит лишь одно взаимодействие:

$$u(x,t)=\int_{-1/2}^{1/2}J(y)\ \gamma(y;\Delta)\ \chi\ (x,y;t-\varphi\ (y)]dy+\int_{t_1}^{\theta_1}R(s)\ \chi\ (x,0;t-s)ds, \qquad (8)$$

где φ (x) – распределение фазы удара. Представление решения в виде называется трехфункциональным, ибо три функции J(x), φ(x) и R(t), определяемые сформулированными выше условиями и дают описание искомой стоячей периодической волны.

Методы вычислений ПФГ χ, параметров $\boldsymbol{\theta}_1$ и $\mathbf{t}_1$ и др. даны в [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Крупенин В.Л. К описанию динамических эффектов, сопровождающих колебания струн вблизи однотавровых ограничителей // ДАН-. № 388 (3). -2003.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ 2-МЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА С СЕРОВОДОРОДОМ, МЕТИЛМЕРКАПТАНОМ И ДИМЕТИЛСУЛЬФИДОМ

Валиахметова О.Ю.[1], Бочкор С.А.[1], Кузнецов В.В.[1,2]

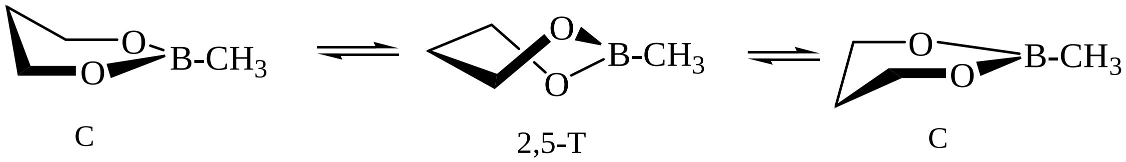
[1] *Уфимский государственный нефтяной технический университет*

[2] *Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН*

Известно, что шестичленные циклические эфиры борных кислот – 1,3,2-диоксаборинаны – являются ценными реагентами тонкого органического синтеза, могут использоваться в качестве добавок к моторному топливу, присадок к смазочным маслам, ингибиторов коррозии, пластификаторов, и потенциальных биологически активных веществ [1,2]. Помимо этого интерес к строению обсуждаемых соединений обусловлен электронными и стерическими внутримолекулярными взаимодействиями, вызванными присутствием электронодефицитного атома бора и электронодонорных гетероатомов кислорода в одной молекуле [1-5]. Это делает их удобными объектами в компьютерном моделировании механизмов взаимодействия субстрата с растворителями различной природы. Наличие электроноакцепторного и электронодонорного центров должно привести к возникновению устойчивых кластеров борный эфир – растворитель. Начальная фаза исследования таких гетероассоциатов связана с анализом структуры и конформационного поведения молекулярных комплексов состава 1:1. Однако до настоящего времени данные системы остаются практически неизученными.

Известно также, что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) шестичленных циклических борных эфиров содержит минимумы – инвертомеры *софы* – и максимум – *2,5-твист-форму* (2,5-Т) [5-14].

Учитывая все вышесказанное, можно полагать, что соединения этого класса способны к формированию комплексов как с донорами, так и с акцепторами электронной пары. Принципиальная возможность существования таких ассоциатов была ранее подтверждена квантово-химическими расчетами [15]. В этой связи целью настоящей работы является компьютерное моделирование конформационных превращений S→B комплексов: 2-метил-1,3,2-диоксаборинана (**I**) с молекулами сероводорода (**А**), метилмеркаптана (**Б**) и диметилсульфида (**В**), осуществленное с помощью квантово-химического приближения RHF//STO-3G в рамках программного обеспечения HyperChem [16].



C 2,5-T C