

хаоса не только в форме периодических структур, но и в форме хаоса со скрытым порядком, характеризующимся структурами фрактального типа, на основе которых возможен вероятностный прогноз состояний системы.

Это новейшая парадигма синергетики начинает оказывать все большее влияние на развитие современного естествознания, обществоведения.

Современный этап в науке и образовании — это исследование нелинейных моделей окружающего мира. Теоретическая механика традиционно является фундаментом построения моделей и их исследования, что уже находит воплощение в учебных планах ведущих университетов мира. Именно на базе синергетической парадигмы необходимо создавать новые информационные технологии в образовании в виде новых учебников, задачников, пособий, электронных учебников и пакетов программ. Первым шагом в этом направлении является включение в программы курса теоретической механики разделов нелинейной динамики систем.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Советский энциклопедический словарь. М.: Советская энциклопедия, 1986.
2. Бир С. Кибернетика и управление производством. М.: Издательство иностранной литературы, 1963.
3. Мойсеев Н.Н. Расставание с простотой. М.: Аграф, 1998, с. 201
4. Колесников А.А. Когнитивные возможности синергетики. Вест. РАН, 2003, т. 73, № 8, с. 727-734.
5. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980.
6. Moon F.C. Chaotic and Fractal Dynamics. New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, A Wiley-Interscience Publication, John Wiley and Sons, Inc. 1992. 408 p.
7. Маркеев А.П. Регулярная и стохастическая динамика. М.: РСД, 2002.
8. Козлов В. В., Фурта С.Д. Асимптотики решений сильно нелинейных систем дифференциальных уравнений. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1996, с. 244.
9. Арнольд В. М. Эргодичность в классической механике. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999, с. 296.
10. Хейфец М. П., Кожуро П.М., Мрочек Ж.А. Процессы самоорганизации при формировании поверхностей. Гомель, 1999, с. 275.
11. Степин В.С. Саморазвивающиеся системы и перспективы техногенной цивилизации // Синергетическая парадигма. М.: Прогресс-Традиция, 2000.
12. Чигарев А.В. Стохастическая и регулярная динамика неоднородных сред. Минск, Технопринт, 2000, с. 425.

### КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА КАК ОСНОВА СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ: ПРИМЕР ВИБРАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Вихренко В.С.

*It is emphasized that classical mechanics is a firm basis for computer modeling a variety of phenomena on macro-, meso- and microscopic levels. Vibrational relaxation is considered as an example.*

В инженерном вузе теоретическая механика всегда занимала ведущее положение, поскольку обеспечивала фундамент традиционного инженерного образования. Однако расширение мировых информационных ресурсов, развитие новых технологий и технических направлений неизбежно ведет к сужению удельного веса традиционных дисциплин в вузовском образовании. Предстоящая реформа высшего образования может существенно усилить упомянутый процесс сужения, и нам, понимая важность классической механики и на современном этапе, необходимо видеть, насколько широко ее представления, методология и методы проникают во многие, если не во все, новые направления, пропагандировать достижения и роль механики,

отстаивать занимаемое ею место в высшей школе перед инстанциями, влияющими на формирование содержания высшего образования.

В этом плане следует отметить сообщение, сделанное на семинаре преподавателей механики два года назад [1], где были рассмотрены многочисленные приложения механики к решению инженерных и исследовательских задач. Этот перечень можно расширить.

Кафедра теоретической механики Белорусского государственного технологического университета на протяжении всего времени ее существования уделяла много внимания межпредметным связям и проблемному подходу в преподавании механики (см. [2-10]). Оба подхода тесно взаимосвязаны, а идеи последнего сейчас

трансформировались и составляют основу учебно-исследовательского метода. В частности, были установлены многочисленные связи между теоретической механикой и предметами химико-технологических специальностей. За истекшее время уверенность в том, что базовые знания классической механики необходимы студентам химико-технологических и материаловедческих специальностей, только усилилась.

В середине прошлого столетия с помощью вычислительных машин было обнаружено, что применимость классической гидромеханики распространяется на объекты очень малых линейных размеров, вплоть до молекулярных. Например, используя формулу Стокса для коэффициента сопротивления движению сферы в вязкой жидкости можно получить разумные оценки характеристик случайного движения молекул в жидкости, в частности, коэффициента самодиффузии, а для несферической частицы — коэффициента вращательной диффузии. Хотя в дальнейшем было показано, что не все так просто и нужны более детальные модели микросистем, идеи гидродинамики были положены [11–13] в основу описания динамики многих реальных систем. При этом вязкоупругие характеристики зависят от характеризующих процесс частоты и волнового вектора. Сформулированные уравнения обобщенной гидродинамики позволяют рассматривать быстро протекающие процессы вплоть до характерных времен порядка  $10^{-13}$  с с характерными неоднородностями порядка межмолекулярных расстояний ( $10^{-10}$  м).

Отмеченные достижения были бы не мыслимы без использования современных вычислительных средств, и одним из основных методов исследования является молекулярная динамика [14–16], позволяющая рассматривать процессы фемтосекундного ( $10^{-15}$  с) диапазона, что соответствует современным экспериментальным возможностям, например, лазерно-оптических методов [17].

Суть метода молекулярной динамики состоит в численном интегрировании уравнений движения системы многих взаимодействующих частиц. Если внутренние колебательные степени свободы молекул не рассматриваются, шаг интегрирования составляет несколько фемтосекунд. При учете внутримолекулярных движений шаг интегрирования уменьшается до десятых долей фемтосекунды. Межмолекулярные потенциалы взаимодействия, как правило, рассматриваются двухчастичными (потенциальная энергия системы состоит из суммы энергий взаимодействия пар частиц). Для описания внутримолекулярных движений необходимо вводить более сложные потенциальные функции, зависящие от координат трех или четырех атомов, определяемых углами между связями или вза-

имодействиями торсионного типа. Существенно, что молекулярная динамика позволяет получить максимально полную информацию о поведении системы, значительно более полную, чем получаемую при экспериментальных исследованиях.

Остановимся на важном вопросе учета квантово-механических особенностей движения систем, состоящих из частиц молекулярных и субмолекулярных размеров. Многие задачи, например, о движении волновых пакетов при изучении химических реакций или диссоциации — рекомбинации молекул, являются сутобо квантово-механическими [18] и не могут рассматриваться в рамках классической механики. Вместе с тем, задачи, связанные с определением структурных, термомеханических, транспортных, кинетических характеристик различных систем (жидкостей, полимеров, белковых молекул, мембран, съпучих материалов и т.д.) решаются на основе методов классической механики и опыт показывает, что получаемые результаты адекватно отражают их реальное поведение.

Проблема использования квантово-механических методов состоит в том, что уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением в частных производных, и его численное интегрирование требует введения сеточных функций, определенных на  $z^{3N}$  узлах, где  $z$  — количество узлов вдоль одного измерения,  $N$  — число частиц. Даже при  $z = 10$  (чего обычно явно недостаточно) система порядка  $N = 10$  частиц оказывается далеко за пределами возможностей наиболее мощных современных компьютеров.

Уравнения классической механики содержат  $6N$  канонических переменных и системы с  $N$  порядка  $10^6$  частиц доступны для исследований [19]. В качестве примера укажем работу [20], в которой рассматривались мембрана, состоявшая из 64 липидных молекул, и окружающие ее 1472 молекулы воды, в целом около 13 000 атомов. Продолжительность интегрирования составила 0,1 микросекунды или порядка  $10^8$  шагов. При моделировании могут быть изучены структурные особенности системы и процесс проникновения различных веществ через мембрану. Например, были установлены механизмы высокой селективности этого процесса, т. е. мембрана проницаема только для молекул воды [21]. Для решения подобного рода задач необходимы мощные вычислительные комплексы. Однако во многих случаях достаточно рассмотреть систему, состоящую из нескольких сотен частиц, и проинтегрировать уравнения движения на отрезке времени порядка десятков пикосекунд. Современные персональные ЭВМ позволяют успешно решать такие задачи.

Интегрирование уравнений движения отдельных атомов или центров масс молекул часто орга-

низутся по схеме с перешагиванием, когда скорости вычисляются на полушаге, а координаты и силы — на целом шаге:

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + 0,5\delta t)\delta t, \quad (1)$$

$$\mathbf{v}(t + 0,5\delta t) = \mathbf{v}(t - 0,5\delta t) + \mathbf{F}(t)\delta t, \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{F}(t)$  — суммарная сила, действующая на рассматриваемую молекулу со стороны остальных молекул системы.

Для директора  $\mathbf{e}$ , направленного вдоль оси молекулы, имеющей форму двухосного эллипсоида, динамическое уравнение вращательного движения имеет вид

$$\frac{d\mathbf{e}}{dt} = \mathbf{u} = \frac{1}{I} \mathbf{T} \times \mathbf{e}, \quad (3)$$

где  $I$  — момент инерции относительно центральной оси, перпендикулярной оси молекулы,  $\mathbf{T}$  — суммарный вектор-момент сил, действующих на молекулу.

Схема интегрирования уравнения (3) аналогична интегрированию уравнения движения центра масс

$$\mathbf{e}(t + \delta t) = \mathbf{e}(t) + \mathbf{u}(t + 0,5\delta t)\delta t, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t + 0,5\delta t) = & \mathbf{u}(t - 0,5\delta t) + I^{-1} \mathbf{T}(t) \times \mathbf{e}(t)\delta t - \\ & - 2[\mathbf{u}(t - 0,5\delta t) \cdot \mathbf{e}(t)] \mathbf{e}(t). \end{aligned} \quad (5)$$

Последнее слагаемое в (5) компенсирует кинематическую составляющую скорости изменения модуля директора, обусловленную неодновременностью входящих в правую часть уравнения первых двух слагаемых.

Для молекулы более сложной формы, характеризующейся тремя главными моментами инерции, уравнения сферического движения относительно центра масс могут быть получены на основе теоремы об изменении кинетического момента, записанной в лабораторной или собственной системах отсчета:

$$\frac{d\mathbf{L}_l}{dt} = \mathbf{T}_l, \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{L}_b}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_b = \mathbf{T}_b. \quad (7)$$

Индексы « $l$ » и « $b$ » обозначают величины, заданные в лабораторной и собственной системах отсчета, соответственно.  $\mathbf{L}$  — вектор кинетического момента,  $\mathbf{T}$  — вектор момента сил, действующих на молекулу, относительно ее центра масс. Ввиду сложного характера изменения тензора моментов инерции  $\mathbf{I}$  молекулы в лабораторной системе отсчета записываются уравнения для производных проекций угловой скорости на оси собственной системы координат, оси ко-

торой являются главными осями инерции молекулы

$$\dot{\omega}_{bx} = \frac{1}{I_{xx}} T_{bx} + \frac{I_{yy} - I_{zz}}{I_{xx}} \omega_{by} \omega_{bz},$$

$$\dot{\omega}_{by} = \frac{1}{I_{yy}} T_{by} + \frac{I_{zz} - I_{xx}}{I_{yy}} \omega_{bz} \omega_{bx},$$

$$\dot{\omega}_{bz} = \frac{1}{I_{zz}} T_{bz} + \frac{I_{xx} - I_{yy}}{I_{zz}} \omega_{bx} \omega_{by}. \quad (8)$$

В дополнение к этим уравнениям следует записать кинематические соотношения для производных углов Эйлера по времени

$$\dot{\varphi} = -\frac{\sin \varphi \cos \theta}{\sin \theta} \omega_{lx} + \frac{\cos \varphi \cos \theta}{\sin \theta} \omega_{ly} + \omega_{lz},$$

$$\dot{\psi} = \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \omega_{lx} - \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \omega_{ly},$$

$$\dot{\theta} = \cos \varphi \omega_{lx} + \sin \varphi \omega_{ly}, \quad (9)$$

где  $\varphi$ ,  $\psi$  и  $\theta$  являются углами прецессии, собственного вращения и нутации, соответственно, а проекции угловой скорости на оси лабораторной системы отсчета находятся с помощью матрицы  $\mathbf{R}(\varphi, \psi, \theta)$  перехода от лабораторной системы отсчета к собственной:

$$\boldsymbol{\omega}_l = \mathbf{R}^{-1} \cdot \boldsymbol{\omega}_b. \quad (10)$$

В целом система уравнений (8) — (10) позволяет записать разностные уравнения для интегрирования уравнений (8) и (9). Однако система уравнений (8) — (10) достаточно сложная и, что более существенно, содержит  $\sin \varphi$  в знаменателях ряда слагаемых, что делает ее плохо обусловленной. Хотя существуют методы решения, основанные на использовании двух лабораторных систем отсчета для того, чтобы избежать появления малых величин  $\sin \varphi$  в знаменателях, алгоритмы переключения от одной системы к другой усложняют решение и без того сложной системы уравнений (8) — (10).

Неоспоримыми преимуществами обладает метод интегрирования дифференциальных уравнений сферического движения, основанный на использовании кватернионов. Не останавливаясь на алгебраических свойствах кватернионов, рассмотрим их использование для описания сферического движения [22,23] и построения разностной схемы интегрирования [14]. Кватернионы можно ввести как компоненты связанного с углами Эйлера четырехмерного вектора  $\mathbf{q}$ :

$$q_0 = \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi + \psi}{2}, \quad q_1 = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi - \psi}{2},$$

$$q_2 = \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi - \psi}{2}, \quad q_3 = \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi + \psi}{2}, \quad (11)$$

удовлетворяющие условию  $q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1$ .  
Матрица поворота  $\mathbf{R}$ , представленная через кватернионы, имеет простой вид

$$\mathbf{R} = 2 \begin{pmatrix} q_0^2 + q_1^2 - 1/2 & q_1 q_2 + q_0 q_3 & q_1 q_3 - q_0 q_2 \\ q_1 q_2 - q_0 q_3 & q_0^2 + q_2^2 - 1/2 & q_2 q_3 + q_0 q_1 \\ q_1 q_3 + q_0 q_2 & q_2 q_3 - q_0 q_1 & q_0^2 + q_3^2 - 1/2 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

и не содержит тригонометрических функций, вычисление которых требует значительных затрат машинного времени.

Производные по времени от кватернионов удовлетворяют кинематическим соотношениям

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{B}[\mathbf{q}(t)] \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\omega}_b(t) \end{pmatrix} \quad (13)$$

где матрица  $\mathbf{B}$  определена как

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} q_0 & -q_1 & -q_2 & -q_3 \\ q_1 & q_0 & -q_3 & q_2 \\ q_2 & q_3 & q_0 & -q_1 \\ q_3 & -q_2 & q_1 & q_0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Алгоритм интегрирования уравнений сферического движения включает обновление значений кинетического момента в лабораторной системе отсчета

$$\mathbf{L}_l(t) = \mathbf{L}_l \left( t - \frac{1}{2} \delta t \right) + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}(t) \delta t, \quad (15)$$

затем переход в собственную систему отсчета

$$\mathbf{L}_b(t) = \mathbf{R}[\mathbf{q}(t)] \cdot \mathbf{L}_l(t), \quad (16)$$

и последующее обновление значений компонент кватерниона на основе уравнения (13)

$$\mathbf{q} \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \mathbf{q}(t) + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}(t) \delta t. \quad (17)$$

Еще раз отметим, что соотношения (15) — (17) не требуют вычисления тригонометрических функций. Для последующего полшага система разностных уравнений может быть записана в виде

$$\mathbf{L}_l \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \mathbf{L}_l \left( t - \frac{1}{2} \delta t \right) + \mathbf{T}(t) \delta t,$$

$$\mathbf{L}_b \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \mathbf{R} \left[ \mathbf{q} \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) \right] \cdot \mathbf{L}_l \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right),$$

$$\boldsymbol{\omega}_b \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \mathbf{I}_b^{-1} \cdot \mathbf{L}_b \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right)$$

$$\dot{\mathbf{q}} \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \mathbf{B} \left[ \mathbf{q} \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) \right] \cdot \left[ 0, \boldsymbol{\omega}_b \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) \right]$$

$$\mathbf{q}(t + \delta t) = \mathbf{q}(t) + \dot{\mathbf{q}} \left( t + \frac{1}{2} \delta t \right) \delta t. \quad (18)$$

После нахождения кватернионов на последующем шаге ( $t + dt$ ), вычисляются углы Эйлера в соответствии с соотношениями

$$\psi = \arctg \frac{q_3}{q_0} - \arctg \frac{q_2}{q_1}, \quad \varphi = \arctg \frac{q_3}{q_0} + \arctg \frac{q_2}{q_1},$$

$$\theta = 2 \arccos(q_0^2 + q_3^2). \quad (19)$$

По известным углам  $\varphi$ ,  $\psi$  и  $\theta$  в момент времени  $t + \delta t$  определяется ориентация молекулы и вычисляется вектор-момент действующих на нее сил. Последующее использование процедуры (18) позволяет перейти к моменту времени  $t + 2\delta t$  и т. д.

Отметим, что поскольку матрица  $\mathbf{R}$ , определяющая ориентацию молекулы, выражена через кватернионы, можно углы Эйлера не определять. Положения всех точек молекулы в лабораторной системе координат легко находятся с помощью  $\mathbf{R}$ .

Вибрационная релаксация является одной из важнейших составляющих химических реакций и состоит в передаче энергии от колебательно возбужденных молекул к растворителю. Ее исследованию посвящена обширная литература (см. [24] и имеющиеся там ссылки). Силовые параметры, характеризующие внутри- и межмолекулярные взаимодействия, отличаются на несколько порядков величины. Это обуславливает медленность процесса вибрационной релаксации, характерное время которой для различных веществ и условий изменяется в огромном диапазоне от пикосекунд до секунд, тогда как период внутримолекулярных колебаний находится в диапазоне нескольких десятков фемтосекунд.

Лазерно-оптические эксперименты позволяют получить лишь время вибрационной релаксации и не обеспечивают возможность исследовать ее механизмы. Одним из наиболее надежных и полных источников информации о вибрационной релаксации является ее молекулярно-динамическое моделирование. При этом, как в процессе самого моделирования, так и при анализе полученных результатов привлекается широкий ассортимент методов механики. Например, при изучении вибрационной релаксации азулена ( $C_8H_{10}$ ) в жидкостях было проанализировано распределение потока энергии в растворителе по 48 колебательным модам и установлено, что основная доля энергии передается

через наиболее низкочастотные моды [25,26]. Была также установлена важная роль внутримолекулярного перераспределения энергии по модам, что обеспечило возможность введения понятия внутренней температуры молекулы. На более простой модели молекулы как «дышащей сферы» было показано, что основная роль в передаче энергии от возбужденной молекулы к растворителю принадлежит высокоэнергетичным ее столкновениям, каждый раз с одной из молекул растворителя [27]. Такие столкновения длятся  $10^{-13}$  с и меньше. Аналогичные выводы были получены и для более реальной двухатомной модели возбужденной молекулы, а также изучено влияние нелинейности межмолекулярного взаимодействия на процесс вибрационной релаксации и роль колебательно-вращательного взаимодействия, которое можно объяснить в терминах центробежной и кориолисовой сил инерции [28].

Естественно, расширившиеся возможности компьютерного моделирования различных процессов не только не умаляют роли аналитических методов, но и дают дополнительную информацию для развития последних. Например, используя информацию о подавляющем вкладе в вибрационную релаксацию двухчастичных столкновений, было проведено решение задачи двух тел с учетом нетривиальных потенциалов межчастичного взаимодействия [29], когда в процессе вычислений удобно было ввести мнимое время.

В целом можно отметить, что компьютерное моделирование осуществляется на трех уровнях: микро-, мезо- и макроскопическом. Им свойственны соответственно следующие характерные времена ( $10^{-14}$ - $10^{-8}$ ,  $10^{-9}$ - $10^{-4}$ ,  $10^{-6}$  с и выше) и размеры ( $10^{-10}$ - $10^{-7}$ ,  $10^{-8}$ - $10^{-5}$ ,  $10^{-6}$  м и выше). Это деление весьма условно и существуют многие объекты, вариации характеристик которых перекрывают все диапазоны (полимеры, белки, стекло, критические состояния и т.д.). В настоящее время разработано множество специализированных коммерческих программных комплексов для всех отмеченных выше уровней, а также такие программы общего назначения как Mathematica, Mathcad, Matlab и др. Они позволяют исследователю и инженеру решать численными методами задачи, которые еще каких-то 10 лет назад трудно было планировать даже на перспективу.

В связи со сказанным необходимо думать об изменении акцентов при преподавании механических дисциплин. Акцент должен быть смещен на постановку задач и анализ получаемых решений. Численные алгоритмы основаны, как правило, на теоремах о движении центра масс, об изменении кинетического момента и энергии. Во многих случаях привлекаются решения задач теории упругости или гидродинамики при

относительно простых граничных условиях. Здесь можно провести аналогию с вождением автомобиля. В первой половине прошлого века водитель должен был знать материальную часть, так как она была достаточно простой, но недостаточно надежной. В настоящее время двигатель на некоторых автомобилях расположен так, что он даже недоступен водителю.

Естественно, дилемма, до какого уровня необходимо владеть математическим и предметным аппаратом, а когда нужно взять в руки счеты, логарифмическую линейку, калькулятор или сесть за дисплей компьютера, всегда стояла и «момент переключения» не является некоторой универсальной константой, а определяется имеющимися техническими возможностями и резервами человеческого организма. В любом случае пути назад нет, и необходимо учебный процесс приводить в соответствие с требованиями времени.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Журавков М. А., Мартыненко М. Д., Склир О. Н. Механика в наше время // Материалы Республиканского научно-методического семинара преподавателей кафедр теоретической механики, теории машин и механизмов, сопротивления материалов вузов Беларуси. — Мн.: Технопринт, 2001.
2. Вихренко В.С., Немцов В.Б., Ротт Л.А. К построению курса теоретической механики для инженеров-механиков. // Теоретическая механика / Сборник научно-методических статей. М.: Высш. шк. — 1974. — Вып. 4. — С. 34 — 41.
3. Ротт Л.А., Немцов В.Б., Вихренко В.С. Построение курса теоретической механики для инженеров-химиков. — Теоретическая механика во вузах/ Под ред. А.А. Яблонского. Изд. 2-е. — М.: Высш. шк., 1975. — С. 242 — 260.
4. Ротт Л.А., Вихренко В.С. На пути решения нестандартных задач // Вестник высшей школы. — 1984. — № 12. — С.25 — 27.
5. Ротт Л.А., Вихренко В.С. Проблемное обучение и межпредметные связи. // Теоретическая механика / Сборник научно-методических статей. — М.: Высш. шк., 1984. — Вып. 5. — С. 18 — 24.
6. Ротт Л.А., Вихренко В.С., Наркевич И.И. К построению курса теоретической механики для химико-технологических специальностей // Теоретическая механика / Сборник научно-методических статей. М.: Высш. шк. — 1986. — Вып. 16. — С. 3 — 9.
7. Ротт Л.А. О проблемном обучении // Метод. матер. по вопросам преподавания теоретич. механики в высшей школе. — Мн.: Минвуз БССР, 1980. — Вып. 1. — С. 4 — 14.
8. Бокун Г.С., Вихренко В.С. Разработка проблемных ситуаций в курсе теоретической механики

- ки // Метод. матер. по вопросам преподавания теоретич. механики в высшей школе. — Мн.: Минвуз БССР, 1982. — Вып. 2. — С. 22 — 30.
9. Вихренко В.С., Ротт Л.А. Использование аналогий в преподавании теоретической механики // Метод. матер. по вопросам преподавания теоретич. механики в высшей школе. — Мн.: Минвуз БССР, 1983. — Вып. 3. — С. 7 — 15.
  10. Немцов В.Б. Исследовательский метод — определяющий метод при изучении теоретической механики // Труды БГТУ. — 2001. — Вып. VI, сер. VIII — Учебно-методическая работа. — С.3 — 5.
  11. Boon J. P., Yip S. Molecular hydrodynamics. — New York: McGraw-Hill Co., 1980.
  12. Hansen J. P., McDonald I. Theory of simple liquids. — London: Academic Press, 1986.
  13. Bulacani U., Zoppi M. Dynamics of the liquid state. — Oxford: Clarendon Press, 1994.
  14. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer simulation of liquids. — Oxford: Clarendon Press, 1999.
  15. Frenkel D. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. — London: Academic Press, 1996.
  16. Rapaport D. C. The art of molecular dynamics simulation. — Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
  17. Zewail A. H. Femtochemistry. — Singapore: World Scientific, 1994.
  18. Schinke R. Photodissociation dynamics. — Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
  19. Wengenmayr R. Super computer plays with strings of pearls and liquid crystals // Max-Planck Research. — 2002. — No. 2. — P. 30 — 35.
  20. Aman K., Lindahl E., Edholm O., Hakansson P., Westlund P.-O. Structure and dynamics of interfacial water in an  $L_a$  phase lipid bilayer from molecular dynamics simulations // Biophys. Journ. — 2003. — V. 84, no. 1. — P. 102 — 115.
  21. de Groot B. L., Grubmüller H. Water permeation across biological membranes: Mechanism and dynamics of Aquaporin-1 and GlpF // Science. — 2001. — V. 294, no. 5550. — P. 2353 — 2357.
  22. Бранец В. Н., Шмыглевский Н. П. Применение кватернионов в задачах ориентации твердого тела. — М.: Наука, 1973.
  23. Борисенко Л. А. Манипуляторы: Механика поворотов. — Мн.: Тэхналогія, 2001.
  24. Egorov S. A., Skinner J. L. A theory of vibrational energy relaxation in liquids // Journ. Chem. Phys. — 1996. — V. 105, no. 16. — P. 7047 — 7058.
  25. Heidelberg C., Vikhrenko V. S., Schwarzer D., Schroeder J. Mode specificity of vibrational energy relaxation of azulene in CO<sub>2</sub> at low and high density // Chemical Physics Letters — 1998. — V 291, no. 3-4. — P. 333 — 340.
  26. Heidelberg C., Vikhrenko V.S., Schwarzer D., Schroeder J. Molecular Dynamics Simulation of Vibrational Energy Relaxation of Highly Excited Molecules in Fluids. // The Journal of Chemical Physics. — 1999. — V. 110, no.11. — P. 5286 — 5299.
  27. Vikhrenko V. S., Schwarzer D., Schroeder J. Microscopic description of vibrational energy relaxation in supercritical fluids: on the dominance of binary solute-solvent contributions // Physical Chemistry Chemical Physics — 2001. — V. 3, no 6. — P. 1000–1010.
  28. Кдб G., Vikhrenko V. S. Vibrational cooling of a highly excited anharmonic oscillator: Evidence for strong vibration-rotation coupling during relaxation // Physical Chemistry Chemical Physics — 2001. — V. 3, no 6. — P. 2223–2229.
  29. Teubner M. Correlation functions in classical gases at high frequency // Phys. Rev. E — 2002. — V. 65, no. 3. — Art. no. 031204.

## ВОЗНИКНОВЕНИЕ ХАОСА ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ ВОЛНОВЫХ ФРОНТОВ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

Чигарев Ю.В., Беляцкая Л.Н.

*Appearing of chaos at an propagation of waves in the determined heterogeneous media to investigation in the general case yet it is not possible. The ray method allows to reduce partial differential equation to the ordinary nonlinear differential equations, to which investigation it is possible to apply methods of nonlinear dynamic of systems. The closed systems of the equations describing geometry of rays, wave front and intensities of waves of jump of stress for volume and surface waves in a heterogeneous elastic medium are obtained. Stochastization of rays causes a chaotization of parameters of interior geometry of wave surfaces*