

## ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

УДК 539.194: 544.273

DOI: 10.15587/2313-8416.2018.134334

## ОСОБЕННОСТИ ПРЕЦЕССИИ ДВУХЧАСТОТНОГО МАЯТНИКА

© Н. Т. Малафаев

*Проведен анализ прецессии вращательных колебаний молекул воды с помощью модели двухчастотного маятника во всей области его колебаний. Обнаружено, что прецессия двухчастотного маятника в поле неоднородных сил взаимодействий является анизотропной. Наибольшая анизотропия наблюдается в критической точке изменения типа колебаний с двухчастотного на одночастотный. Рассмотрено проявление особенностей прецессии (изменения фазы) в области двухчастотных колебаний, наблюдаемые для случаев малых начальных скоростей колебаний маятника*

**Ключевые слова:** молекула воды, прецессия, двухчастотный маятник, анизотропия, тип колебания, неоднородное поле сил

**1. Введение**

Свойства воды вызывают большой интерес и широко обсуждаются в литературе [1, 2]. Вопросы влияния колебательных спектров атомов и молекул на свойства веществ подробно рассматриваются в рамках теории эффекта Яна – Теллера [3]. В работе [4] данная теория применена автором к колебательным спектрам молекул в жидкой воде, сравнительно со льдом. Показано, что ее физико-химические особенности обусловлены появлением в ней новых коллективизированных вращательных колебаний (либрационных колебаний, ограниченных вращений [1]), приводящих в воде к изгибам водородных связей (*H*-связей) и значительному изменению всех ее свойств.

Особенностью вращательных колебаний молекул воды является их многочастотность. Моделирование вращательных колебаний молекул воды проводилось с помощью модели двухчастотного сферического маятника [5], однако еще многие вопросы физики колебаний молекул воды требуют своего анализа. В частности, не ясно, какие особенности имеет прецессия молекулы в пространстве, исходя из модели двухчастотного маятника.

**2. Литературный обзор**

В работе [6] были рассмотрены двумерные колебания маятника и его прецессия. Показано, что прецессия (дополнительный поворот по углу) большой оси эллиптической орбиты колебаний маятника направлена в направлении вращения маятника. Согласно формулы Пьюзо угол прецессии (поворота) большой оси эллиптической орбиты маятника пропорционален площади описываемого им эллипса, и он постоянен во времени и изотропен в

пространстве для свободных незатухающих колебаний маятника.

В работе [7] подробно рассмотрен двухчастотный маятник. Основное внимание уделено его отличию от обычного одночастотного, наличию биеения его частот, проведено сравнение особенностей его колебаний с оптическими эффектами. Рассмотрено для сферического маятника выражение для его прецессии. В работе обсуждается резонанс колебаний маятника от внешних источников, однако не рассматривается случай возможного перехода между собственными частотами маятника на общую частоту.

Работы по двухчастотным маятникам редки. В [8] рассмотрены вопросы устойчивости колебаний двухчастотного маятника с двумя разными типами колебаний – трансляционным и вращательным. Однако это совсем другой тип маятника, сравнительно с нашей моделью.

В работе [9] рассмотрена многочастотность колебаний как следствие наличия нескольких локальных минимумов для потенциала взаимодействия, а не одного, как у нас. При компьютерном моделировании колебаний молекул воды [10] применяются одночастичные потенциалы взаимодействия, которые при всех улучшениях [11] дают обычно один минимум потенциала. Для назревшего получения нескольких минимумов потенциала [3, 9] необходимо учитывать направленность межмолекулярных взаимодействий и взаимодействия молекул во второй координационной сфере.

При компьютерном моделировании колебаний ансамблей молекул воды методом молекулярной динамики [10, 12] рассчитываются термодинамические характеристики колебаний молекул. При

этом задается большой шаг во времени сравнительно с периодом колебаний, что не позволяет рассмотреть особенности вращательного движения молекул, а также требует постоянной коррекции температуры системы. В потенциалах взаимодействия молекул с соседями часто не учитывается наличие моментов инерции молекул, которые ведут к их вращательным колебаниям. Учет теплового движения всех молекул сопровождается его сильной хаотизацией и разрывами связей, что также затрудняет рассмотрение особенностей вращательного движения молекул.

В работе [5] для моделирования свободных вращательных колебаний одной молекулы воды была применена модель двухчастотного сферического маятника, поскольку было показано [4], что малые вращательные колебания молекул воды являются двухчастотными. Наличие двух вращательных частот маятника задавалось параметром  $k = I_x / I_y$ , характеризующим отношение моментов инерции маятника (и молекулы) по осям модели, где  $k > 1$  и ось  $x$  – низкочастотная. Вследствие различия моментов инерции для маятника по осям возвращающие силы для него становятся нецентрными.

Двухчастотный сферический маятник при малых отклонениях имеет два начальных периода  $T_{x_0}$  и  $T_{y_0}$  независимых колебаний (НК) [5]. При этом маятник совершает вращения за период биений в двух направлениях вокруг его оси [7]. С ростом амплитуды колебаний его период увеличивается, что создает возможность колебаний по двум осям на одной общей частоте. В результате маятник начинает совершать сложные эллипсоподобные колебания (ЭПК) – с однонаправленным вращением вокруг своей вертикальной оси. Для возможности появления ЭПК необходимо, чтобы амплитуда колебаний по оси  $Y$  была больше, чем по оси  $X$ , чтобы периоды смогли стать равными ( $T_x = T_y$ ). Это сопровождается появлением вращений маятника в одном направлении внутри эллиптической области колебаний, а не в круге, как для сферического одночастотного маятника. Оси огибающей эллиптической области колебаний двухчастотного маятника совпадают с осями связей – координатами  $X$  и  $Y$ .

Особенно быстро частота понижается в неоднородных полях сил (НПС), моделирующих направленные силы межмолекулярного взаимодействия [5]. Это создает условия к появлению ЭПК при малых амплитудах колебаний и согласуется с зависимостями либрационных частот воды от температуры [1]. ЭПК соответствуют вращениям молекул воды и, в частности, их ядер атомов водорода вокруг осей  $H$  – связей с соседними молекулами.

Если для математического сферического маятника прецессия исследована [6, 7], включая анализ в НПС [13], то ее особенности для двухчастотного сферического маятника пока никто не рассматривал. Возможно, что с ее помощью можно объяснить особенности траекторий ЭПК данного сферического маятника.

### 3. Цель и задачи исследования

Цель работы - физико-математический анализ колебаний двухчастотного маятника, как модели вращательных колебаний молекулы воды и опреде-

ление для него параметров прецессии и их особенностей.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Создание методики анализа и модификация программ расчета.
2. Анализ траекторий колебаний, определение особенностей и анализ параметров прецессии двухчастотного маятника для области ЭПК и сравнение их со сферическим (одночастотным) маятником.
3. Рассмотрение особенностей периодичности колебаний двухчастотного маятника для всего диапазона его возможных скоростей.
4. Анализ особенностей и параметров прецессии (фазы) двухчастотного маятника для области НК и связи их с областью ЭПК.

### 4. Модель колебаний двухчастотного маятника в НПС

Модель свободных колебаний двухчастотного сферического маятника в НПС рассмотрена в [5]. Она представляет две массы, закрепленные на двух невесомых стержнях длиной  $l$  под углом  $\Theta_0$ , что дает разные моменты инерции маятника по его осям. Ось  $X$  маятника (перпендикуляр к плоскости маятника) соответствует оси  $x$  молекулы воды [4], а ось  $Y$  маятника – оси  $z$  молекулы (биссектриса угла  $\Theta_0$  молекулы) – для отношения моментов инерции  $k=1,5$ . В модели принято, что главные моменты инерции маятника от его смещений не зависят. Смещения маятника от равновесия (от вертикальной оси  $Z$ ) рассматриваются через угол отклонения маятника  $\theta$ , либо через относительные смещения от начала  $XU$  – координат по оси  $X_i$ :  $\delta_i = x_i / l$  ( $l=1$  м,  $i=X, Y$ ), где смещения по осям  $x_i$  и  $\delta_i$  численно равны. При моделировании колебаний задавались начальное относительное смещение маятника  $\delta_{x_0}$  по оси  $X$  и его начальная скорость  $v_{y_0}$  по оси  $Y$ . Угол максимального отклонения маятника  $\theta$  ограничивался при моделировании нижней полусферой – углом  $90^\circ$ , тогда как для молекулы воды при углах более  $30^\circ$  вероятен разрыв ее  $H$  – связи [12]. В НПС разрыв связи для свободных колебаний возникает при углах больших  $40^\circ$ .

Локальное моделирование вращательных колебаний молекулы воды было проведено в пакете *MatLab* с помощью модели двухчастотного сферического маятника в НПС вида  $G = g \cdot \cos^n \theta$  ( $g=10$  м/с<sup>2</sup>,  $n=8$ ).

Это осредненное поле сил остается неизменным для всего процесса моделирования колебаний, в котором маятник совершает свободные колебания, то есть, для молекулы воды мы пренебрегаем тепловым движением ее соседних молекул. Наличие НПС приводит к синхронизации частот колебаний в "критической" точке уже при малых отклонениях маятника  $\delta$ . Это приводит к изменению типа колебаний с ростом начальной скорости маятника [5, 13]. При ЭПК колебания происходят в области колебаний, ограниченной двумя огибающими эллипсами – внутренним и внешним, одним из радиусов которого по оси  $X$  является величина начального смещения маятника  $\delta_{x_0}$ . При "эллиптической" начальной скорости траектория представляет чистый эллипс (огибающие эллипсы

совпадают), при "максимальной" скорости – угол отклонения маятника  $\theta$  достигает края нижней полушеры ( $\theta \leq 90^\circ$ ). Определение параметров маятника проводилось для отношения моментов инерции, характерного для молекул воды  $k=1,5$  [1, 5].

Колебания (НК и ЭПК) двухчастотного маятника происходят в широкой области эллиптического пространства [5] и сложны для рассмотрения. Потому при анализе колебаний были нормирована область колебаний и рассмотрены ее особые точки и их значения. При большом числе периодов колебаний и времени моделирования ( $\approx 200$  с) можно получить большое число значений величин и достаточно надежно усреднить полученные результаты. Шаг моделирования составлял 0,0001 с, поскольку при этом нелинейностями в расчетах за данное время моделирования можно пренебречь.

### 5. Результаты исследования и их обсуждение

Для определения углов и периодов прецессии по траекториям ЭПК двухчастотного маятника была проведена нормировка эллиптических областей колебаний в координатах  $XU$  по обеим осям ( $x_n=x/x_{max}$ ,  $y_n=y/y_{max}$ ) для получения круговой внешней границы области колебаний. Для расчетов величин углов прецессии  $\phi_p$  и их периодов  $T_p$  взяты точки максимального отклонения траекторий по радиусу. Расчеты проводились от одного максимума к другому, то есть для полупериода прецессии. Это позволило упростить расчеты, а также получить вдвое больше точек на графиках, что существенно вследствие быстрых изменений этих параметров, особенно вблизи максимальных начальных скоростей маятника  $v_{yo}$ . При сравнении периода  $T_p$  с полным периодом маятника  $T$  его величина удваивалась.

Для расчета угла прецессии за полпериода из угла между максимумами вычитался угол  $180^\circ$ . Надо отметить, что при углах прецессии больших  $1...3^\circ$  говорить об "эллипсах" с точки зрения геометрии неверно. Однако рассчитать площадь  $S_p$   $n$ -го эллипса  $S_{pn0}=\pi a_n b_{ncp}$  [6] не вызывает проблем, где  $a_n=r_{min,n}$ ,  $b_n=r_{max,n}$ ,  $b_{ncp}=(b_n+b_{n+1})/2$ . Для больших углов прецессии  $\phi_p$  в данную площадь добавлялся угловой коэффициент, пропорциональный величине угла прецессии и увеличивающий площадь "полуэллипса":  $S_{pn}=S_{pn0}(1+\phi_p/180)$ .

Уточнение площади эллипса интегрированием:  $S_{pi}=\int r^2 d\phi$  дает близкие значения с величиной  $S_{pn}$  для смещений  $\delta < 0,5$ , характерных для колебаний молекул воды, и качественно не меняет результаты. Различия их связаны с НПС, длительным нахождением маятника при больших смещениях.

Данная методика была применена для расчета прецессии маятника в области ЭПК (одночастотных), а также в области двухчастотных НК для их сравнения и анализа. Нормировка по оси  $Y$  в области НК проводилась для радиуса по формуле:  $y_n = y/(y_{max} \cdot \sin\phi_m)$ , где угол  $\phi_m$  взят для точки  $y_{max}$ .

#### 5.1. Прецессия в области ЭПК

Обычно, в отсутствие кратности средних периодов колебаний и средних периодов прецессии  $k_p=T_p/T$ , траектории в области ЭПК равномерно за-

полняют эллиптическую область колебаний [5, 13]. Для случаев кратности средних периодов наблюдается многократное наложение траекторий двухчастотного маятника в  $XU$  – координатах самих на себя, и они упрощаются.

На рис. 1, а показаны траектории для отношения периодов  $k_p=16/15$ , которое позволяет увидеть много лепестков эллипсов. Видим анизотропию прецессии: малые углы прецессии  $\phi_p$  "эллипсов" траекторий вблизи оси  $Y$  и большие углы  $\phi_p$  вблизи оси  $X$ . Вследствие близости скорости к критической внутренней эллипс области колебаний узкий, а отношение периодов колебаний  $k_p$  близко к единице. Для больших  $k_p$ , скоростей  $v_{yo}$  и малого числа лепестков анизотропия прецессии может быть малозаметной (рис. 1, б).

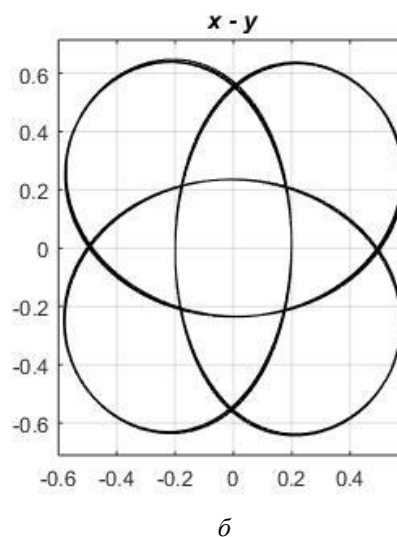
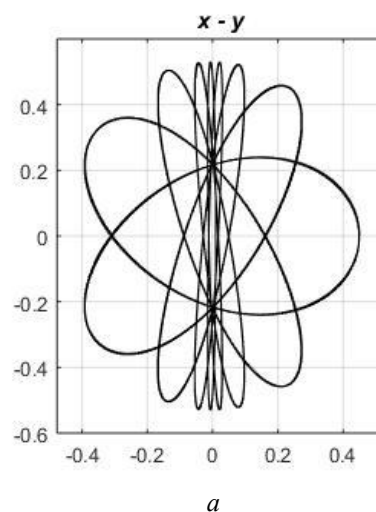


Рис. 1. Траектории маятника для отношения периодов колебаний в области ЭПК: а- $k_p=16/15$  ( $\delta_{x0}=0,45$ ;  $v_{yo}=0,6$  м/с); б- $k_p=3/2$  ( $\delta_{x0}=0,2$ ;  $v_{yo}=1,531$  м/с)

При больших отклонениях по оси  $Y$  ускорения маятника вдоль оси  $X$  ослаблены, что ведет к малой скорости  $v_x$  и узким эллипсам вдоль оси  $Y$  и малой прецессии, особенно вблизи критической точки ( $v_{x,кр} \approx 0$ ) [14]. Вследствие эллиптичности области колебаний скорости  $v_y$  на границе области колебаний вблизи оси  $X$  всегда больше чем скорость  $v_x$  вблизи оси  $Y$

и уменьшаются с ростом смещения  $\delta_{x0}$  или скорости  $v_{y0}$  [14], что сопровождается уменьшением относительных изменений (анизотропии) угла прецессии.

На рис. 2 представлены зависимости средних периодов колебаний  $T$ , периодов прецессии  $T_p$ , отношения этих периодов  $k_p$  и средние отклонения для периодов прецессии  $\Delta T_p$  от величины начальной скорости маятника  $v_{y0}$  (от критической до максимальной). Видим сравнительно линейный рост отношения периодов колебаний маятника  $k_p$  со скоростью и быстрый рост всех параметров вблизи максимальной скорости маятника, обусловленные НПС.

На рис. 3 представлены для тех же скоростей зависимости средних углов прецессии  $\phi_p$  за полпериода прецессии и средние отклонения для них  $\Delta\phi_p$  (в градусах). Видим, что средние отклонения для углов прецессии относительно большие, чем для периодов прецессии  $\Delta T_p$  (рис. 2), что говорит об большом влиянии скорости на величину угла прецессии. Видим наличие максимумов для этих отклонений для эллиптической траектории ( $v_{y0,el.}=1,082$  м/с). Вблизи максимальной скорости маятника средний угол прецессии  $\phi_p$  за полпериода колебаний быстро растет и превышает  $100^\circ$ . На рис. 1,а средний угол прецессии  $\phi_p$  за полпериода составляет  $24^\circ$ , на рис. 1,б –  $90^\circ$ .

Если для одночастотного маятника угол прецессии  $\phi_p$  постоянен при заданных величинах начальных скорости маятника  $v_{y0}$  и смещении  $\delta_{x0}$ , то для двухчастотного маятника прецессия для заданных величин  $v_{y0}$  и  $\delta_{x0}$  меняется со временем (рис. 1). Назовем эти характеристики локальными, в отличие от их средних, при данных величинах  $v_{y0}$  и  $\delta_{x0}$ . Средние величины для прецессии (рис. 2, 3) не дают информации о локальных характеристиках. Поэтому интересно их рассмотреть во времени и в пространстве для соответствующих  $v_{y0}$  и  $\delta_{x0}$ .

Согласно фазовых диаграмм маятника  $v_x - X$ , являющихся эллипсами или спиралями [14], скорость  $v_x$  на оси  $Y$  пропорциональна максимальной координате  $X$  для этого эллипса. Это ведет к росту величины его угловой скорости по  $\phi$ , а также угла прецессии  $\phi_p$  с ростом величины максимального смещения по  $X$  для последующих эллипсов (рис. 1, а). При росте скорости  $v_{y0}$  выше критической диапазоны изменения максимальных координат  $X$  эллипсов и скоростей  $v_x$  уменьшаются, а соответственно, и анизотропия прецессии.

На рис. 4 представлены зависимости для углов прецессии  $\phi_p$  за полпериода для начального смещения маятника  $\delta_{x0}=0,3$  и ряда начальных скоростей  $v_{y0}$  от времени. Видим, что вблизи критической точки (рис. 4, кривая 1,  $v_{y0}=0,741$  м/с) угол прецессии большую часть времени мал и периодически возрастает, а затем снова убывает. С ростом скорости  $v_{y0}$  углы прецессии  $\phi_p$  возрастают, а периодичность и анизотропия углов прецессии уменьшаются.

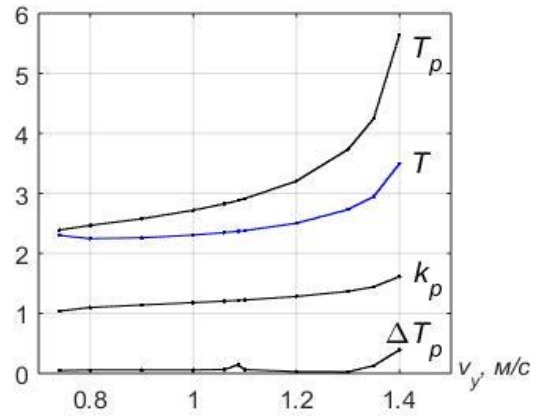


Рис. 2. Зависимости для периодов прецессии  $T_p$  и колебаний  $T$ , их отношения  $k_p$  и отклонения периода  $\Delta T_p$  от начальной скорости маятника  $v_{y0}$  при  $\delta_{x0}=0,3$

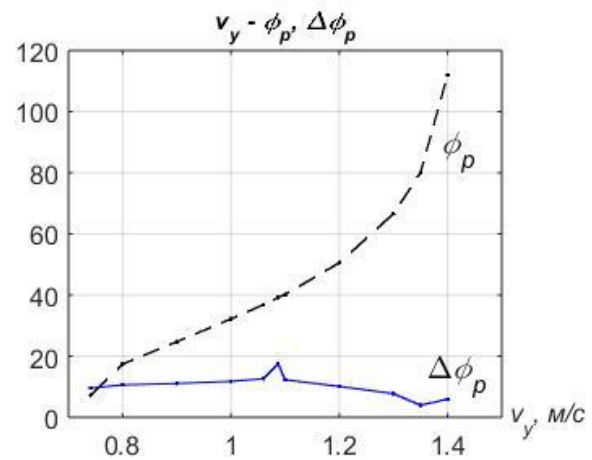


Рис. 3. Зависимости для средних углов прецессии  $\phi_{pm}$  и их отклонений  $\Delta\phi_p$  от начальной скорости маятника  $v_{y0}$  при начальном смещении  $\delta_{x0}=0,3$

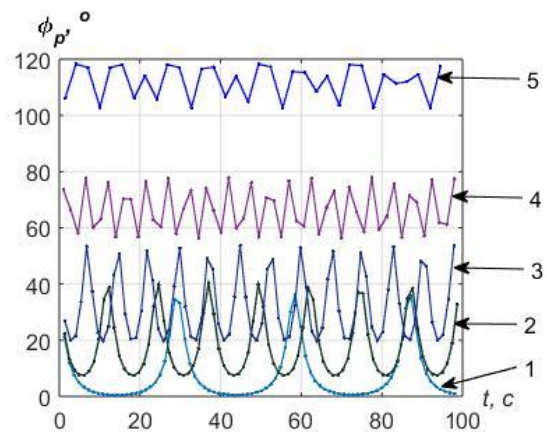


Рис. 4. Зависимости углов прецессии  $\phi_p$  от времени для начальных скоростей  $v_{y0}=0,741; 0,8; 1; 1,3$  и  $1,4$  м/с (кривые 1–5, соответственно) при  $\delta_{x0}=0,3$

Расчеты показывают, что максимумы на зависимостях для углов прецессии периодически повторяются после каждой суммы для углов прецессии  $\Sigma\phi_p$  в среднем равной  $180^\circ$ . Поскольку углы прецессии вблизи критической точки изменения типа колебаний минимальны, периоды повторения для углов прецессии и их анизотропия будут максимальны (рис. 4, кривая 1). При больших начальных скоростях и смещениях анизотропия скоростей по осям уменьшается [14], а потому анизотропия углов прецессии  $\phi_p$  по осям минимальна (рис. 4, кривые 4–5).

Интересно рассмотреть, как изменилась связь между углами прецессии и площадями эллипсов для двухчастотного сферического маятника. На рис. 5 для ЭПК представлены локальные зависимости для углов прецессии  $\phi_{pn}$  от площади данного полуэллипса  $S_{pn}$  для начального смещения маятника  $\delta_{x0}=0,3$  и ряда начальных скоростей  $v_{y0}$ . Треугольниками на рисунках показаны величины средних значений для углов прецессии и площадей эллипсов, через которые проведена штриховая линия. Средние значения определены с учетом плотности точек, за время моделирования 200 с. Для средних значений углов прецессии и площадей эллипсов получаем их пропорциональность для малых площадей  $S_p < 0,2 \text{ м}^2$ , что согласуется с поведением прецессии обычного маятника [5, 10], однако локальные зависимости существенно отличны. Учет углового коэффициента для  $S_{pn}$ , значительного для больших углов прецессии, существенно линеаризирует данную зависимость.

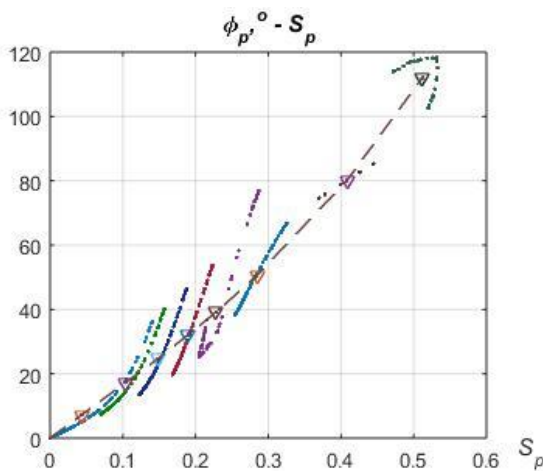


Рис. 5. Зависимости углов прецессии  $\phi_p$  при ЭПК от площади полуэллипсов  $S_p$  при  $\delta_{x0}=0,3$  для  $v_{y0}=0,741; 0,8; \dots 1,3; 1,4 \text{ м/с}$  и их средних значений ( $\blacktriangledown$ )

Для каждой отдельной точки моделирования ( $v_{y0}, \delta_{x0}$ ) двухчастотного маятника за время моделирования (рис. 5) имеем целый набор локальных значений углов прецессии  $\phi_{pn}$  и площадей их эллипсов  $S_{pn}$ , изменяющихся нелинейно в широких интервалах значений. Видим, что вблизи критической скорости, когда наблюдается узкий внутренний эллипс вдоль оси  $Y$ , значения  $S_p$  изменяются от нуля и до максимума, когда эллипсы разворачиваются от оси  $Y$  к оси  $X$  и становятся широкими. С ростом скоростей  $v_{y0}$  значения величин координат

внутреннего или внешнего эллипсов для расчета  $S_p$  возрастают.

Видим, что вначале с ростом скорости угол наклона локальных кривых и диапазон углов  $\phi_p$  растет и имеет максимум для эллиптической орбиты, далее угол наклона уменьшается, а вблизи максимальной скорости  $v_{y0}$  локальная зависимость между  $\phi_p$  и  $S_p$  сопровождается перегибом. Уменьшение наклона  $\phi_p$  от  $S_p$  видимо связано с переносом ограничения области колебаний для эллиптической орбиты по  $\delta_{x0}$  – со внешнего эллипса на внутренний [14].

Набор локальных значений величин  $\phi_p$  и  $S_p$  за время моделирования для каждой точки ЭПК двухчастотного маятника изменяется сложно и в большом интервале значений, в отличие от пары значений, как для одночастотного маятника. Большой диапазон изменений угла прецессии вблизи эллиптической орбиты маятника согласуется с отклонениями угла  $\Delta\phi_p$  (рис. 3) и показывает особенности локальных изменений этих параметров в пространстве  $\phi_p - S_p$ . Изменения площадей  $S_p$  при этом связано с тем, что точки для расчета больших осей полуэллипса определены в нормализованных координатах, а координаты для расчетов его площади  $S_p$  – в реальных.

## 5. 2. Сдвиг фазы в области НК

Интересно рассмотреть, применив данную методику расчета параметров, имеются ли в области НК особенности, аналогичные прецессии, особенности перехода между типами колебаний, тем более, что их механизмы качественно близки. В [13] показано, что прецессия возникает вследствие различия периодов колебаний маятника по большой и малой осям эллипсоида. В результате за время разности периодов колебаний точка максимума отклонения маятника поворачивается на дополнительный угол – угол прецессии. Если для маятника различие периодов колебаний обусловлено разной амплитудой колебаний по осям эллипса, то для маятника в двухчастотной области НК это задано начальными условиями, а потому эффект от сдвига фазы для этих колебаний может быть большим. Обозначения для рассчитанных в области НК угла  $\phi_p$  и площади  $S_p$  не изменяются.

Колебания в области НК отличаются от колебаний в области ЭПК не только двухчастотностью, но и формой области колебаний. При малых скоростях и отклонениях маятника ( $\delta < 0,1$ ) колебания по осям проходят в прямоугольной области колебаний. С ростом скорости "прямоугольник" искажается, превращается в "бабочку", с округлением боковых сторон и со сжатием по оси  $Y$ , которое увеличивается с ростом скорости  $v_{y0}$  (рис. 6, кривые 1, 2), смещений  $\delta_{x0}$ , показателя НПС  $n$ . Далее с ростом скорости диагонали приближаются к оси  $Y$ , и в критической точке "диагонали" сольются с осью  $Y$  (рис. 6, кривая 3), а "прямоугольник" превратится в эллипс. В результате получим изменение типа колебаний – переход их в область ЭПК. Видим эффект сгущения траекторий по "диагоналям" и разрежение их вблизи оси  $X$ .

На рис. 7 показано зависимости углов фазы  $\phi_p$  от времени для начальных скоростей  $v_{y0}$  при смещении  $\delta_{x0}=0,3$ . Видим, что при малых колебаниях (кри-

вая 1) зависимость фазы  $\phi_p(t)$  в области НК близка к синусоидальной. То есть, рост фазы  $\phi_p$  связан с различием фаз независимых частот и их биением, которое ведет к смещению максимумов амплитуды колебаний со временем. С ростом амплитуды колебаний зависимости для сил в НПС становятся нелинейными, частоты сближаются. Вблизи критической точки имеем острые по модулю, максимумы фазы  $\phi_p$  (кривые 3 и 4) с периодом биения частот, аналогичные прецессии (рис. 4, кривая 1), но двухполярные по фазе. Острые максимумы фазы так же, как в области ЭПК, связаны с нелинейностями сил для больших амплитуд, большими скоростями  $v_y$  на оси X и соответствующими угловыми скоростями маятника для максимальных отклонений по оси X [14].

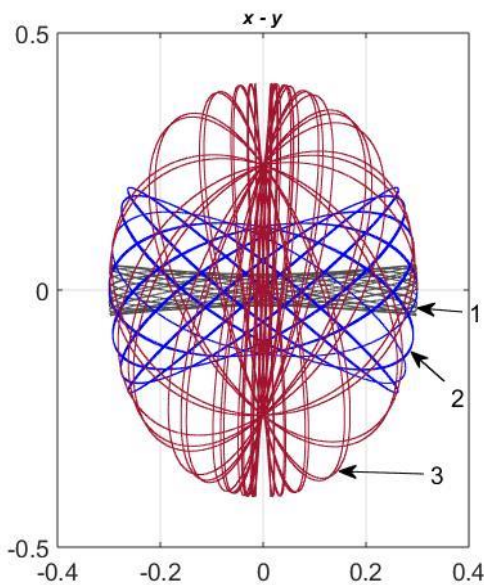


Рис. 6. Траектории маятника в области НК:  $\delta_{x0}=0,3$ ;  $v_{y0}=0,1$ ; 0,4 и 0,74 м/с (кривые 1, 2 и 3, соответственно). Время моделирования – по 50 с.

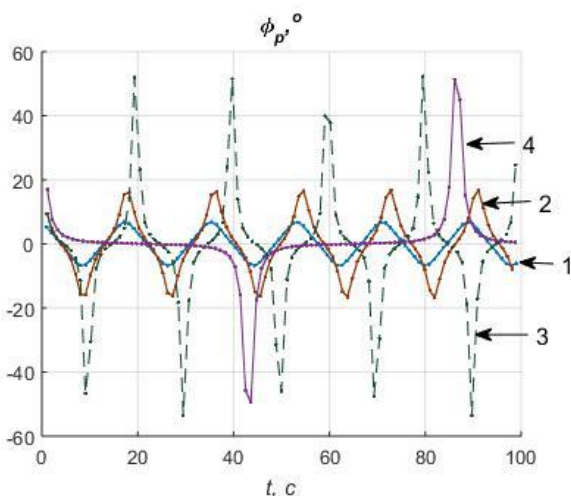


Рис. 7. Зависимости углов  $\phi_p$  от времени для начальных скоростей  $v_{y0}=0,1$ ; 0,2; 0,04 и 0,74 м/с (кривые 1-4, соответственно) при  $\delta_{x0}=0,3$

На рис. 8 точками показано зависимости фазы  $\phi_p$  от площади эллипса  $S_p$  в области НК при  $\delta_{x0}=0,3$  для ряда скоростей  $v_{y0}$ . В точках поворота направления вращения задано, что площадь эллипса меняет знак и кривые центрально симметричные. Вследствие этого средние значения их величин находятся в начале координат. Для малых начальных скоростей (кривые 1–2) зависимость параметров линейная, а с ростом скорости и смещений становится нелинейной. Угол наклона в начале координат связан с различием фаз для частот НК по осям, а нелинейность – с НПС. Видим, что положительная часть кривой 5 (рис. 8,  $v_{y0}=0,74$  м/с) практически совпадает с кривой для критической скорости при ЭПК (рис. 5,  $v_{y0}=0,741$  м/с).

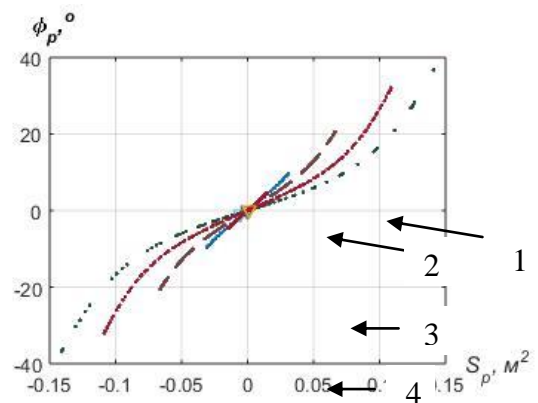


Рис. 8. Зависимости углов прецессии  $\phi_p$  от площади эллипса  $S_p$  в области НК при  $\delta_{x0}=0,3$  и  $v_{y0}=0,1$ ; 0,2; 0,4; 0,6 и 0,74 м/с (кривые 1–5, соответственно)

На рис. 9 показано зависимости общей фазы  $\phi$  ( $\phi_i = \arctg(y_i/x_i)$ ) и фазы  $\phi_p$  от времени в области НК. В двухчастотной области НК маятник с частотой биения меняет направление вращения [7], что ведет к росту или уменьшению фазы  $\phi$  со временем. Видим, что для фазы  $\phi \approx 0$  модуль фазы  $\phi_p$  экстремальный, а в точках изменения направления вращения (экстремумы фазы  $\phi$ ) фаза  $\phi_p$  меняет знак. Таким образом, знак фазы  $\phi_p$  в области НК как и для прецессии обычного маятника [6], связан с направлением вращения маятника – ростом или уменьшением общей фазы  $\phi$ .

В точках поворота вращения маятник находится значительное время и потому угол  $\phi$  почти не меняется. После этого маятник проходит наиболее близко к началу координат, а потому угол  $\phi$  меняется наиболее быстро – видим почти вертикальные отрезки кривых  $\phi(t)$ , то есть, вблизи диагоналей прямоугольника фаза  $\phi$  меняется ступенеподобно (рис. 9). Для максимальных отклонений вдоль оси X перпендикулярные к ней скорости велики и наблюдаются более близкие к линейным зависимости фазы от времени ( $\phi \approx 0$ ).

На рисунке штриховой линией показана синусоида для осредненной частоты биений  $\omega_b = \omega_y - \omega_x$  между частотами колебаний по осям ( $20 \sin \phi_b$ , где  $\phi_b = \omega_b t$ ,  $\omega = 1/T$ ). Узлы колебаний для углов  $\phi$  и  $\phi_b$  часто не совпадают, что обусловлено несовпадением

текущих периодов колебаний и биений. Вблизи критической точки частоты сближаются, а периоды биений возрастают.

Можно отметить, что в области НК максимумам угла  $\phi$  соответствуют максимумы колебаний по осям  $X$  и  $Y$  в фазе, а минимумам – в противофазе, что соответствует сдвигу по фазе между фазами  $\phi_i$  их частот НК на  $\pm 180^\circ$ , однако за полный цикл биения частот для  $\phi$  (а также  $\phi_p$ ) получим суммарный угол  $0^\circ$ .

Представляет интерес рассмотреть, так ли меняется суммарная фаза  $\Sigma\phi_p$ , как и угол  $\phi$ , за полпериода биения частот при одном направлении вращения маятника в зависимости от величины скорости  $v_{yo}$ . На рис. 10 показано зависимости для модуля суммы углов фазы  $\Sigma\phi_p$  от скорости  $v_{yo}$  для разных начальных смещений маятника  $\delta_{xo}$ . Видим рост суммы фаз с ростом скорости и выход их значений в области ЭПК на  $180^\circ$  для полуэллипсов при критической скорости ( $v_{yo,кр}$  уменьшается с ростом начального смещения  $\delta_{xo}$  [5]).

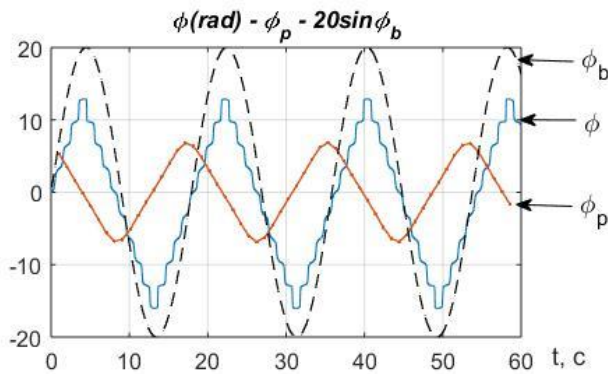


Рис. 9. Зависимости фазы  $\phi$  (в радианах), углов прецессии  $\phi_p$  и кривой биений  $20 \sin \phi_b$  (кривая  $\phi_b$ ) от времени в области НК для  $\delta_{xo}=0,3$  и  $v_{yo}=0,1$  м/с

Данная сумма углов фазы соответствует углу, под которым видны боковые ("вертикальные", рис. 6) стороны прямоугольной области колебаний маятника в  $XU$  – координатах, вдоль которых перемещаются максимумы эллипсов. Быстрое увеличение угла вблизи критической точки (до  $180^\circ$ ) связано со сближением диагоналей "прямоугольной" области колебаний к оси  $Y$  при превращении ее в эллипс (рис. 6). Выгибы кривых влево для малых смещений  $\delta_{xo}$  связаны с ростом угла, под которым видны боковые стороны области колебаний для этих малых смещений. Суммарная фаза  $\Sigma\phi_p$  будет занижаться вследствие наличия граничных полуэллипсов с двумя направлениями вращения и результирующей фазой для них  $\phi_{пр} \approx 0$ .

Качественным отличием изменения угла  $\phi_p$  в областях НК и ЭПК является не только знакопеременность углов  $\phi$  и  $\phi_p$  для НК, но и различие величин для суммарного угла прецессии /фазы  $\Sigma\phi_p$  за период биений. Также различны ориентация больших осей эллипсов с минимальной прецессией/ фазой  $\phi_p$ : для ЭПК – по оси  $Y$  и для НК – по диагоналям "прямоугольника". При этом для НК большие оси полуэллипсов находятся на боковых сторонах "прямоуголь-

ника" и внутри угла  $\Sigma\phi_p$ . На его диагоналях происходит остановка вращения маятника по углу  $\phi$  и изменение направления его вращения. По достижении критической скорости не происходит остановки вращения маятника на оси  $Y$  по углу  $\phi$ , и он продолжает вращение в том же направлении с периодичностью для максимумов  $\phi_p$ , равной в среднем  $180^\circ$  (рис. 4).

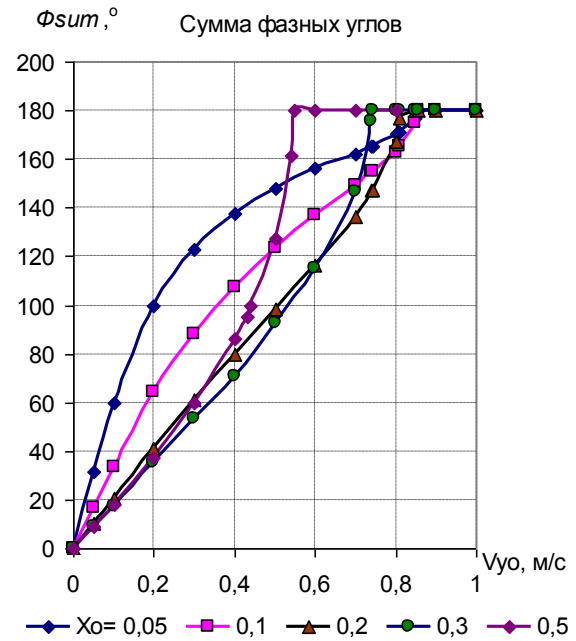


Рис. 10. Зависимости модуля суммы углов фазы  $\Sigma\phi_p$  от начальной скорости  $v_{yo}$  для разных смещений  $\delta_{xo}$  в областях НК и ЭПК

В области ЭПК наблюдаются эффекты, сходные с биениями, вызванные ростом суммарного угла прецессии  $\Sigma\phi_p$  до  $180^\circ$ . Эллиптичность области колебаний вследствие различия моментов инерции по осям координат и их частот в НПС ведет в обоих случаях к анизотропии углов прецессии или фазы в области НК. Наибольшая анизотропия прецессии наблюдается вблизи критической точки вследствие близкой к нулю скорости вращения маятника около оси  $Y$  ( $v_x \approx 0$  [14]) и соответствующей малой прецессией по углу. Далее с ростом начальной скорости растет скорость  $v_x$  пересечения оси  $Y$  и анизотропия прецессии уменьшается.

Таким образом, данная методика успешно работает во всей области колебаний двухчастотного маятника и эффекты, сходные с прецессией, для нее наблюдаются. Изменение направления вращения маятника и знака фазы  $\phi_p$  в области НК связано с изменением фазы частоты биения его частот. При достижении критической точки фаза/ прецессия остается далее постоянной по знаку (рис. 4), поскольку направление вращения маятника не меняется.

Наличие прецессии существенно уширяет спектры частот колебаний маятника, а также результирующих спектров либрационных частот колебаний молекул воды для всего диапазона их начальных скоростей и смещений.

## 6. Выводы

1. Создана методика анализа прецессии колебаний двухчастотного маятника и проведена соответствующая модификация программ расчета.

2. Сложные эллипсоподобные колебания двухчастотного сферического маятника внутри эллиптической области колебаний обусловлены его анизотропной прецессией и характеризуются набором локальных значений величин параметров. Анизотропия угла прецессии максимальна вблизи критической точки изменения типа колебаний двухчастотного маятника, когда скорость пересечения оси  $Y$  близка к нулю и далее она уменьшается с ростом начальной скорости маятника и скорости пересечения им оси  $Y$ . Средние углы прецессии растут вместе с величиной начальной скорости маятника.

3. Зависимости для траекторий и углов прецессии периодически повторяются после полного оборота для угла прецессии – для суммы углов прецессии, равной  $180^\circ$ . Периоды повторения для углов

прецессии связаны с суммированием углов прецессии и максимальны вблизи критической точки изменения типа колебаний маятника.

4. В двухчастотной области колебаний наблюдается явление дополнительного роста фазы колебаний с периодом биения частот. При приближении к критической точке максимумы фазы нелинейно растут и сходны с прецессией, но они двухполярные, знак фазы зависит от направления вращения маятника. Суммарная фаза для одного направления вращения растет с ростом начальной скорости и в области ЭПК становится равной  $180^\circ$  и постоянного знака. Однако за период биения частот для обоих направлений вращения маятника сумма фаз равна нулю.

## Благодарности

В заключение автор выражает благодарность профессору Погожих Н. И. за интерес и замечания по данной работе.

## Литература

1. Эйзенберг Д., Кауцман В. Структура и свойства воды. Ленинград: Гидрометеониздат, 1975. 280 с.
2. Антонченко В. Я., Давыдов А. С., Ильин В. В. Основы физики воды. Київ: Наукова думка, 1991. 672 с.
3. Берсукер И. Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. Москва: Наука, 1987. 344 с.
4. Малафаев Н. Т. О взаимодействиях и динамике молекул в чистой воде // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2011. Т. 4, № 8 (52). С. 48–58. URL: <http://journals.urau.ru/eejet/article/view/1465/1363>
5. Малафаев Н. Т., Погожих Н. И. Моделирование вращательных колебаний молекул воды // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2015. Т. 2, № 5 (74). С. 27–35. doi: <http://doi.org/10.15587/1729-4061.2015.40569>
6. Крылов А. Н. Лекции по приближенным вычислениям. Москва: Гостехиздат, 1954. 400 с.
7. Зельдович Б. Я., Суало М. Дж. Двухчастотный маятник на вращающейся платформе: моделирование оптических явлений // Успехи физических наук. 2004. Т. 174, № 12. С. 1337–1354. doi: <http://doi.org/10.3367/ufnr.0174.200412e.1337>
8. Viet L. D., Nghi N. B. On a nonlinear single-mass two-frequency pendulum tuned mass damper to reduce horizontal vibration // Engineering Structures. 2014. Vol. 81. P. 175–180. doi: <http://doi.org/10.1016/j.engstruct.2014.09.038>
9. Нейштадт А. И. Захват в резонанс и рассеяние на резонансах в двухчастотных системах // Труды математического института. 2005. Т. 250. С. 198–218.
10. Маленков Г. Г. Структура и динамика жидкой воды // Журнал структурной химии. 2006. Т. 47. С. 5–35.
11. Miceli G., de Gironcoli S., Pasquarello A. Isobaric first-principles molecular dynamics of liquid water with nonlocal van der Waals interactions // The Journal of Chemical Physics. 2015. Vol. 142, Issue 3. P. 034501. doi: <http://doi.org/10.1063/1.4905333>
12. Malenkov G. G., Naberukhin Y. I., Voloshin V. P. Collective effects in molecular motions in liquids // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2012. Vol. 86, Issue 9. P. 1378–1384. doi: <http://doi.org/10.1134/s003602441209004x>
13. Малафаев Н. Т. Вращательные колебания молекул как колебания сферического маятника в неоднородном поле сил // ScienceRise. 2016. Т. 2, № 2 (19). С. 62–69. doi: <http://doi.org/10.15587/2313-8416.2016.60587>
14. Малафаев Н. Т. Анализ фазовых диаграмм двухчастотного маятника как модели вращательных колебаний молекулы воды // ScienceRise. 2018. № 1 (42). С. 50–56. doi: <http://doi.org/10.15587/2313-8416.2018.121426>

*Рекомендовано до публікації д-р техн. наук Погожих М. І.  
Дата надходження рукопису 15.05.2018*

**Малафаев Микола Тимофійович**, кандидат фізико-математичних наук, доцент, кафедра фізико-математичних та інженерно-технічних дисциплін, Харківський державний університет харчування та торгівлі, вул. Клочківська, 333, м. Харків, Україна, 61051  
E-mail: [mnt949@gmail.com](mailto:mnt949@gmail.com)