Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

УДК 519.6

Оригинальная статья

НОРМАЛИЗАЦИЯ КЛАССИЧЕСКИХ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ С ДВУМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

И.Н. Беляева¹, И.К. Кириченко², О.Д. Пташный³, Н.Н. Чеканова⁴, Т.А. Ярхо³

¹ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный
исследовательский университет»

308015, Россия, Белгород, ул. Победы, 85

²Национальный университет гражданской защиты Украины

61023, Украина, Харьков, ул. Чернышевская, 94

³Харьковский Национальный автомобильно-дорожный университет

61002, Украина, Харьков, ул. Ярослава Мудрого, 25

⁴Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

61202, Украина, Харьков, пр. Победы, 55

ibelyaeva@bsu.edu.ru, ikir238@rambler.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.348

Аннотация: В работе исследовано семейство гамильтоновых систем с двумя степенями свободы. Расчетами сечений Пуанкаре показано, что при произвольных значениях параметров функции Гамильтона система является неинтегрируемой и в ней реализуется динамический хаос. Найдено, что для трех наборов параметров рассматриваемая система является интегрируемой, однако в одном интегрируемом случае при этих же значениях параметров на поверхности потенциальной энергии имеется область с отрицательной гауссовой кривизной, в то же время в двух других случаях интегрируемости при соответствующих значениях параметров областей с отрицательной гауссовой кривизной не имеется. Таким образом, наличие областей с отрицательной гауссовой кривизной на поверхности потенциальной энергии не достаточно для развития в системе глобального хаоса. Получена классическая нормальная форма для произвольных значений параметров.

Ключевые слова: гамильтоновы системы, нормализация, компьютерное моделирование, поверхность потенциальной энергии.

1. Введение

Хаотическое поведение имеет место для большинства нелинейных динамических систем, в том числе и для консервативных гамильтоновых систем с двумя степенями свободы [1, 2]. Для решения вопроса о существовании хаотических режимов движения имеется ряд универсальных методов, применение которых связано с очень громоздкими численными расчетами для индивидуальных траекторий [1], но для двумерных гамильтоновых систем имеется более простой и надежный численный метод сечений Пуанкаре [3]. Однако имеется аналитический метод [4, 5] предсказания перехода к глобальному хаосу в гамильтоновых системах с помощью критерия по наличию отрицательной гауссовой кривизны на поверхности потенциальной энергии. Для большинства исследованных в литературе систем этот критерий очень хорошо предсказывает энергию перехода к глобальному хаосу [6].

Нормализация гамильтоновых систем с произвольным конечным

числом степеней свободы является одним из универсальных методов приближенного интегрирования уравнений классической механики. Существо метода нормальных форм состоит в выполнении канонических преобразований исходной классической функции Гамильтона и ее приведении к более простому нормальному виду. Тогда уравнения движения с новой функцией Гамильтона в нормальной форме, или непосредственно просто интегрируются в нерезонансном случае, или же существенно упрощаются по сравнению с исходной функцией Гамильтона в случае наличия в системе резонансов. Исследование нерезонансных гамильтоновых систем методом нормальных форм широко использовал Дж. Биркгоф [7], а позже в случае наличия в системе резонансов этот метод был развит Ф. Густавсоном [8] с конкретными расчетами на ЭВМ для хорошо известной системы Хенона-Хейлеса [3]. Из-за трудоемкости канонических преобразований, как правило, вычисления выполняются с применением ЭВМ.

Нормализация гамильтоновых систем позволяет эффективно решить вопросы о наличии периодических или условно-периодических решений, об устойчивости решений, а также выполнить квантование классических гамильтоновых систем без использования явного вида самих решений, что существенно для квантования в области энергий, где режим движения является хаотическим. В настоящей работе исследуется семейство гамильтоновых систем с двумя степенями свободы с применением метода.

2. Классическая динамика

Нами рассмотрена классическая система с двумя степенями свободы, которая описывается следующей функцией Гамильтона

$$H = \frac{1}{2} p_1^2 + p_2^2 + V, \quad V = \frac{1}{2} q_1^2 + q_2^2 + b \left(q_1^2 q_2 + \frac{1}{3} q_2^3 \right) + c q_1^2 q_2^2 + d (q_1^2 + q_2^2)^2, \quad (1)$$

где p_1, p_2, q_1, q_2 – канонически сопряженные импульс и координата, а b, c, d – безразмерные параметры, причем $d > 0$ и $c + 4d > 0$.

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) в зависимости от параметров имеет достаточно сложный рельеф, особые точки которой находятся из системы двух уравнений $V'_{q_1} = 0$, $V'_{q_2} = 0$, а линии нулевой гауссовой кривизны описываются уравнением

$$V''_{q_1 q_1} \cdot V''_{q_2 q_2} - V''_{q_1 q_2}^2 = 0. \quad (2)$$

На ППЭ имеются обширные области с отрицательной гауссовой кривизной. Расчетами сечений Пуанкаре показано, что при произвольных значениях параметров эта система является неинтегрируемой и в ней реализуется динамический хаос. Отметим, что исследуемая нами гамильтонова система (1) отличается от изученных в литературе систем:

1) несмотря на наличие отрицательной гауссовой кривизны на ППЭ, она, например, при условии $c=4d$ является интегрируемой; 2) в широком диапазоне параметров стационарные точки квадратичной части ППЭ являются вырожденными, то есть её одно или оба собственные значения равны нулю.

Для большинства наборов параметров b, c, d в исследуемой системе (1) существует хаотический режим движения. Область отрицательной гауссовой кривизны при $b=0,1$, $c=0,0023$ и $d=0,000625$ является ограниченной, что приводит к существованию в системе перехода регулярность – хаос – регулярность, то есть с увеличением полной энергии регулярный режим движения восстанавливается, что было впервые обнаружено в других двумерных гамильтоновых системах [9]. Для других значений параметров области отрицательной гауссовой кривизны не ограничена и регулярный характер движения не восстанавливается с увеличением полной энергии.

Таким образом, для рассматриваемой, в общем, неинтегрируемой гамильтоновой системы (1) критерий ОГК недостаточно точно предсказывает величину критической энергии E_{cr} в отличие, например, от предсказаний для других исследованных ранее систем [6]. Кроме того, в интегрируемых случаях, которые рассмотрим ниже, на ППЭ имеются области с отрицательной гауссовой кривизной, но, тем не менее, при всех энергиях классическое движение является регулярным, то есть критерий ОГК вовсе не применим.

Гамильтонова система (1) для трёх наборов параметров b, c, d является интегрируемой.

1) Если $b \neq 0, c = 4d$, то исследуемая система имеет, кроме энергии, второй интеграл движения

$$I_2 = p_1 p_2 + q_1 q_2 + b \left(q_1 q_2^2 + \frac{1}{3} q_2^3 \right) + 4d q_1 q_2 (q_1^2 + q_2^2). \quad (3)$$

При этих значениях параметров выполнены численные расчеты сечений Пуанкаре. Так как выполняются неравенства $d > 0$ и $c + 4d > 0$, то классическое движение финитно. Для приведенных этих же значений параметров величины $W = 16d / b^2$ и $W_c = (2c + 8d) / b^2$, определяющие топологию ППЭ, одинаковы и равны $W = W_c = 32 / 25 = 1.28$. А так как выполняется неравенство $W = W_c > 1$, то на ППЭ имеется единственный минимум в начале координат. Отметим, что равенство $W = W_c$ означает выполнение условия интегрируемости $c = 4d$. Как уже отмечалось выше одной из особенностей исследуемой двумерной гамильтоновой системы (1) является то, что, несмотря на наличие на ППЭ областей с

отрицательной гауссовой кривизной, она является интегрируемой.

2) Если $b = 0, d \neq 0$, то функция Гамильтона (1) упрощается и из её вида можно заключить, что в этом случае имеется закон сохранения момента импульса, то есть имеется второй, кроме энергии, интеграл движения $I_2 = q_1 p_2 - q_2 p_1$. Это непосредственно можно легко проверить, вычисляя скобку Пуассона, $\{H, I_2\} = 0$, что подтверждается проведенными численными расчетами сечений Пуанкаре при различных начальных данных. В этом интегрируемом случае областей с отрицательной гауссовой кривизной не имеется.

3) Если $b = 0, c = -2d, d \neq 0$, то функция Гамильтона будет равна сумме двух одномерных ангармонических осцилляторов и, следовательно, такая классическая система является интегрируемой. Энергии каждого из этих одномерных осцилляторов являются интегралами движения. Как и в интегрируемом случае 2) здесь также на соответствующей потенциальной поверхности областей с отрицательной гауссовой кривизной нет.

3. Нормализация классической функции Гамильтона

Так как система (1) является резонансной с соотношением частот равным 1:1, то процедуру приведения к нормальной форме Биркгофа-Густавсона можно выполнить следующим образом. Для исходной функции Гамильтона применяем каноническое преобразование [6]:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{2}(q_2 - ip_2) + \frac{i}{2}(q_1 - ip_1), & Q_2 &= \frac{1}{2}(q_2 - ip_2) - \frac{i}{2}(q_1 - ip_1), \\ P_1 &= \frac{1}{2}(q_2 + ip_2) - \frac{i}{2}(q_1 + ip_1), & P_2 &= \frac{1}{2}(q_2 + ip_2) + \frac{i}{2}(q_1 + ip_1). \end{aligned} \quad (4)$$

Из выражений (4) непосредственно следует, что переменные Q_1, Q_2 комплексно сопряжены, соответственно, переменным P_1, P_2 . Для исходной функции Гамильтона (1), выраженной в новых переменных Q_1, Q_2 и P_1, P_2 , выполняем последовательные канонические преобразования $q_1, q_2, p_1, p_2 \rightarrow Q_1, Q_2, P_1, P_2$ при помощи производящей функции

$$F(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = Q_1 P_1 + Q_2 P_2 + \sum_{S=3}^{S_{\max}} W^{(S)}(Q_1, Q_2, P_1, P_2), \quad (5 \text{ а})$$

$$W^{(S)}(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = Q_1^{l_1} Q_2^{l_2} P_1^{m_1} P_2^{m_2}, \quad (5 \text{ б})$$

производящий однородный полином степени $S = l_1 + l_2 + m_1 + m_2$. В результате начальная функция Гамильтона $H(q_1, q_2, p_1, p_2)$ приводится к нормальной форме $G(Q_1, Q_2, P_1, P_2)$, для которой выполняется условие

$$\hat{D}G(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = 0, \quad (6)$$

где так называемый дифференциальный оператор нормальной формы имеет вид

$$\hat{D} = \sum_{\nu=1}^2 \left(Q_{\nu} \frac{\partial}{\partial Q_{\nu}} - P_{\nu} \frac{\partial}{\partial P_{\nu}} \right). \quad (7)$$

Из-за предварительного канонического преобразования (5) оператор (7) принимает диагональный вид, поэтому однородные мономы

$$W^{(S)}(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = Q_1^{l_1} Q_2^{l_2} P_1^{m_1} P_2^{m_2} \quad (8)$$

являются собственными функциями:

$$\hat{D} W^{(S)}(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = (l_1 + l_2 - m_1 - m_2) W^{(S)}(Q_1, Q_2, P_1, P_2), \quad (9)$$

что упрощает трудоемкую процедуру нормализации.

Затем при помощи программы [10] находим модифицированную нормальную форму Биркгофа-Густавсона до степени $S_{\max} = 6$ по каноническим переменным, которую представим в следующем виде

$$\begin{aligned} G_6(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = & i [Q_1 P_1 + Q_2 P_2 + C_{41} (Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - C_{42} (Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + \\ & + C_{43} (Q_1 P_1 - Q_2 P_2)^2 + C_{61} (Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - C_{62} (Q_1 P_2 + Q_2 P_1)^3 - \\ & - C_{63} (Q_1 P_2 + Q_2 P_1)(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - C_{64} (Q_1 P_1 + Q_2 P_2)(Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + \\ & + C_{65} (Q_1 P_2 + Q_2 P_1)(Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + C_{66} (Q_1 P_1 + Q_2 P_2)(Q_1 P_1 - Q_2 P_2)^2], \end{aligned} \quad (10 \text{ а})$$

$$C_{41} = \frac{3}{2}d - \frac{5}{12}b^2, C_{42} = -\frac{5}{12}b^2 + \frac{3}{8}c, C_{43} = -\frac{d}{2} + \frac{c}{8},$$

$$C_{61} = -\frac{235}{432}b^4 + \frac{173}{36}b^2d + \frac{13}{36}b^2c - \frac{17}{4}d^2,$$

$$C_{62} = -\frac{2}{9}b^2d + \frac{1}{18}b^2c, C_{63} = -\frac{11}{9}b^2d + \frac{11}{36}b^2c, \quad (10 \text{ б})$$

$$C_{64} = -\frac{17}{64}c^2 + \frac{277}{36}b^2d + \frac{199}{72}b^2c - \frac{235}{144}b^4 - \frac{17}{8}cd,$$

$$C_{65} = \frac{11}{9}b^2d - \frac{11}{36}b^2c, C_{66} = \frac{9}{4}d^2 - \frac{1}{2}cd - \frac{1}{64}c^2 - \frac{1}{36}b^2d + \frac{1}{144}b^2c.$$

Если для нормальной формы (10) выполнить канонический переход к переменным действие-угол, то непосредственно из явного вида полученной функции Гамильтона можно увидеть, что исходная, в общем, неинтегрируемая двумерная система (1) приближенно будет представлена уже одномерной интегрируемой системой.

Введем следующие функции:

$$\Psi_2 = \frac{1}{2} Q_1 P_1 - Q_2 P_2, \Psi_0 = Q_1 P_1 + Q_2 P_2, \Psi_1 = \frac{i}{2} Q_1 P_1 + Q_2 P_2, \Psi_3 = \frac{1}{2} Q_1 P_2 + Q_2 P_1, \quad (11)$$

для которых скобки Пуассона равны

$$\Psi_0, \Psi_{\lambda} = 0, \quad \lambda = 1, 2, 3, \quad (12)$$

то модифицированная нормальная форма (10) перепишется в виде

$$G_6 = i[\Psi_0 + C_{41}\Psi_0^2 + 4C_{42}\Psi_1^2 + 4C_{43}\Psi_2^2 + C_{61}\Psi_0^3 - 8C_{62}\Psi_3^3 - 8C_{63}\Psi_0^2\Psi_3 + 4C_{64}\Psi_1^2\Psi_0 - 8C_{65}\Psi_1^2\Psi_3 + 4C_{66}\Psi_2^2\Psi_3]. \quad (13)$$

Из результатов для скобок Пуассона (12) непосредственно следует, что нормальная форма (13) является интегрируемым приближением для неинтегрируемой, в общем, исходной системы (1), причем выполняется тождество

$$\Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \Psi_3^2 = \frac{1}{4}\Psi_0^2, \quad (14)$$

а также имеют место соотношения

$$\Psi_\lambda, \Psi_\mu = i\varepsilon_{\lambda\mu\nu}, \quad \lambda, \mu, \nu = 1, 2, 3, \quad (15)$$

где $\varepsilon_{\lambda\mu\nu}$ – полностью антисимметричный тензор третьего ранга (символ Леви-Чивита). Таким образом, функции (11) образуют замкнутую группу преобразований относительно скобок Пуассона.

4. Заключение

Исследована двумерная динамическая система, функция Гамильтона которой зависит от трех параметров. На основе численных расчетов сечений Пуанкаре показано, что при произвольных значениях параметров функции Гамильтона в системе система является неинтегрируемой и имеет место хаотический режим движения. Получено, что при трех наборах параметров исследованная система является интегрируемой и в этих случаях приведены интегралы движения. Обнаружено, что в одном интегрируемом случае на поверхности потенциальной энергии имеются области с отрицательной гауссовой кривизной. Для этой системы получена классическая нормальная форма в подходе Биркгофа-Густавсона, которая при малых энергиях адекватно описывает поведение фазовых траекторий исходной системы и согласуется с результатами, полученными в сечениях Пуанкаре. Применение метода нормальных форм позволило систему уравнений движения Гамильтона с двумя степенями свободы привести к решению обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Исследуемая нами система отличается от изученных в литературе систем: 1) несмотря на наличие отрицательной гауссовой кривизны на ППЭ, она при условии $c=4d$ является интегрируемой, 2) в широком диапазоне параметров стационарные точки квадратичной части ППЭ являются вырожденными, то есть ее одно или оба собственных значения равны нулю.

Библиографический список:

1. **Лихтенберг, А.** Регулярная и стохастическая динамика / А. Лихтенберг, М. Либерман. – М.: Мир, 1984. – 528 с.
2. **Штокман, Х-Ю.** Квантовый хаос: введение / Х.-Ю. Штокман; пер. с англ.

- А.И. Малышева. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 376 с.
3. **Henon, M.** The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments / M. Henon, C. Heiles // *Astronomical Journal*. – 1964. – V. 69. – № 1. – P. 73-79. DOI: 10.1086/109234.
4. **Toda, M.** Instability of trajectories of lattice with cubic nonlinearity / M. Toda // *Physics Letters A*. – 1974. – V. 48. – I. 5. – P. 335-336. DOI: 10.1016/0375-9601(74)90454-X.
5. **Gonchenko, S. V.** Mathematical theory of dynamical chaos and its applications: Review. Part 2. Spiral chaos of three-dimensional flows / S.V. Gonchenko, A. S. Gonchenko, A.O. Kazakov, A.D. Kozlov, Yu.V. Bakhanova // *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. – 2019. – V. 27. – I. 5. – P. 7-52. DOI: 10.18500/0869-6632-2019-27-5-7-52.
6. **Чеканов, Н.А.** Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Кириченко, Н.Н. Чеканова. – Харків: «ІСМА», 2019. – 420 с.
7. **Биркгоф, Дж.** Динамические системы. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. – 406 с.
8. **Gustavson, F.G.** On construction formal integral of a Hamiltonian system near an equilibrium point / F.G. Gustavson // *Astronomical Journal*. – 1966. – V. 71. – № 8. – P. 670-686. DOI: 10.1086/110172.
9. **Bolotin, Yu.L.** The transition «regularity – chaos – regularity» and statistical properties of energy spectra / Yu.L. Bolotin, N.A. Chekanov, V.Yu. Gonchar, V.N. Tarasov // *Physics Letters A*. – 1989. – V. 135. – I. 1. – P. 29-31. DOI: 10.1016/0375-9601(89)90720-2.
10. **Basios, V.** GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. / V. Basios, N.A. Chekanov, B.L. Markovski, et al. // *Computer Physics Communications*. – 1995. – V. 90. – I. 2-3. – P. 355-368. DOI: 10.1016/0010-4655(95)00080-Y.

References:

1. **Lichtenberg, A.J.** Regular and Stochastic Motion / A.J. Lichtenberg, M.A. Lieberman. – New York: Springer-Verlag, 1983. – XXI, 499 p. DOI: 10.1007/978-1-4757-4257-2.
2. **Stöckmann, H.-J.** Quantum Chaos. An Introduction / H.-J. Stöckmann. – Cambridge: Cambridge University Press, 1999. – XI, 368 p. DOI: 10.1017/CBO9780511524622.
3. **Henon, M.** The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments / M. Henon, C. Heiles // *Astronomical Journal*. – 1964. – V. 69. – № 1. – P. 73-79. DOI: 10.1086/109234.
4. **Toda, M.** Instability of trajectories of lattice with cubic nonlinearity / M. Toda // *Physics Letters A*. – 1974. – V. 48. – I. 5. – P. 335-336. DOI: 10.1016/0375-9601(74)90454-X.
5. **Gonchenko, S. V.** Mathematical theory of dynamical chaos and its applications: Review. Part 2. Spiral chaos of three-dimensional flows / S.V. Gonchenko, A. S. Gonchenko, A.O. Kazakov, A.D. Kozlov, Yu.V. Bakhanova // *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. – 2019. – V. 27. – I. 5. – P. 7-52. DOI: 10.18500/0869-6632-2019-27-5-7-52.
6. **Chekanov, N.A.** Simvol'no-chislennyye metody resheniya differentsial'nykh uravnenii klassicheskoi i kvantovoi mekhaniki [Symbol-numerical methods for solving differential equations of classical and quantum mechanics] / N.A. Chekanov, I.N. Belyaeva, I.K. Kirichenko, N.N. Chekanova. – Kharkiv: «ISMA», 2019. – 420 p. (In Russian).
7. **Birkhoff, G.D.** Dynamical systems / J.D. Birkhoff // *Colloquium Publications*. – 1927. – V. 9. – 305 p.
8. **Gustavson, F.G.** On construction formal integral of a Hamiltonian system near an equilibrium point / F.G. Gustavson // *Astronomical Journal*. – 1966. – V. 71. – № 8. – P. 670-686. DOI: 10.1086/110172.

9. **Bolotin, Yu.L.** The transition «regularity – chaos – regularity» and statistical properties of energy spectra / Yu.L. Bolotin, N.A. Chekanov, V.Yu. Gonchar, V.N. Tarasov // *Physics Letters A*. – 1989. – V. 135. – I. 1. – P. 29-31. DOI: 10.1016/0375-9601(89)90720-2.
10. **Basios, V.** GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. / V. Basios, N.A. Chekanov, B.L. Markovski, et al. // *Computer Physics Communications*. – 1995. – V. 90. – I. 2-3. – P. 355-368. DOI: 10.1016/0010-4655(95)00080-Y.

Original paper

NORMALIZATION OF CLASSICAL HAMILTONIAN SYSTEMS WITH TWO DEGREES OF FREEDOM

I.N. Belyaeva¹, I.K. Kirichenko², O.D. Ptashnyi³, N.N. Chekanova⁴, T.A. Yarkho³

¹*Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*

²*National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*

³*Kharkiv National Automobile and Highway University, Kharkiv, Ukraine*

⁴*V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine*

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.348

Abstract: The family of the Hamiltonian systems with two degrees of freedom was investigated. The calculations of the Poincaré sections show that with arbitrary values of the parameters of the Hamilton function, the system is non-integrable and dynamic chaos is realized in it. For the three parameter sets, the system in question was found to be integrable, but shows that in one integrable case on the potential energy surface (PES) there are regions with the negative Gaussian curvature. It was found that in one integrable case for the same values of the parameters, the potential energy surface has a region with the negative Gaussian curvature. At the same time, in the other two cases, the domains with negative Gaussian curvature are not integrable for the corresponding values of the parameters. Thus, the presence of regions with negative Gaussian curvature on the potential energy surface is not enough for the development of the global chaos in the system. The classical normal form for arbitrary parameter values is obtained.

Keywords: *Hamiltonian systems, normalization, computer modeling, potential energy surface.*

Беляева Ирина Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методики преподавания, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

Кириченко Игорь Константинович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры физико-математических дисциплин Национального университета гражданской защиты Украины

Пташный Олег Дмитриевич – к.п.н., доцент, доцент кафедры высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета

Чеканова Наталья Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедра информационных технологий и математического моделирования, Учебно-научный институт «Каразинский банковский институт», Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

Ярхо Татьяна Александровна – д.п.н., доцент, заведующий кафедрой высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета

Irina N. Belyaeva – Ph. D, Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University

Igor K. Kirichenko – Dr. Sc., Professor, Department of physical and mathematical sciences, National University of Civil Defence of Ukraine

Oleg D. Ptashnyi – Ph. D, Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University

Natalia N. Chekanova – Ph. D, Docent, Department of Information Technologies and Mathematical Modeling, Educational and Scientific Institute «Karazin Banking Institute», V. N. Karazin Kharkiv National University

Tatyana A. Yarkho – Dr. Sc., Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University

Поступила в редакцию/received: 5.07.2020; после рецензирования/revised: 31.07.2020; принята/accepted 04.08.2020.