Запишем гамильтониан в следующей форме

$$H = \frac{1}{2}\mathbf{p}^\top \mathbb{G}_{22}\left(\mathbf{q}\right)\mathbf{p} + \mathbf{p}_\mathbf{e}^\top \mathbb{W}(\mathbf{\Omega_e})^\top\, \mathbb{G}_{12}\left(\mathbf{q}\right)\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{p}_\mathbf{e}^\top \mathbb{W}(\mathbf{\Omega_e})^\top \mathbb{G}_{11}\left(\mathbf{q}\right)\, \mathbb{W}(\mathbf{\Omega_e})\mathbf{p}_\mathbf{e} + U(\mathbf{q}), \tag{1}$$

где $\mathbf{q}, \mathbf{p}$ – векторы внутренних координат и сопряженных им импульсов, $\mathbf{\Omega_e}, \mathbf{p_e}$ – векторы эйлеровых углов и сопряженных к ним импульсов. Матрица $\mathbb{W}(\mathbf{\Omega_e})$ связывает векторы углового момента $\mathbf{J}$ и эйлеровых импульсов $\mathbf{p_e}$ соотношением

$$\mathbf{J} = \mathbb{W}\mathbf{p_e}, \quad \mathbb{W} = \begin{bmatrix} \dfrac{\sin\psi}{\sin\theta} & \cos\psi & -\dfrac{\cos\theta\sin\psi}{\sin\theta} \\ \dfrac{\cos\psi}{\sin\theta} & -\sin\psi & -\dfrac{\cos\theta\cos\psi}{\sin\theta} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Матрицы $\mathbb{G}_{11}$, $\mathbb{G}_{12}$, $\mathbb{G}_{22}$ связаны с матрицами, опредялющими кинетическую энергию в Лагранжевой форме, следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \mathbb{G}_{11} &= \left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathbb{a}^{-1}\mathbb{A}^\top\right)^{-1} \\ \mathbb{G}_{12} &= -\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{G}_{22} = -\mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathbb{a}^{-1}, \\ \mathbb{G}_{22} &= \left(\mathbb{a} - \mathbb{A}^\top\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{3}$$

где

- $\mathbb{a} = \{\mathbb{a}_{jk}\}$ – матрица относительной кинетической энергии, $\mathbb{a}_{jk} = \sum_{i=1}^{n} m_i \dfrac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial q_j}\dfrac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial q_k}$;
- $\mathbb{A} = \{\mathbb{A}_{jk}\}$ – кориолисова матрица, $\mathbb{A}_{jk} = \sum_{i=1}^{n} m_i \left[\mathbf{R}_i \times \dfrac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial q_k}\right]_j$;
- $\mathbb{I} = \{\mathbb{I}_{jk}\}$ – матрица тензора инерции.

Система динамических уравнений Гамильтона состоит из 4х векторных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{\Omega}}_\mathbf{e} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}} \\ \dot{\mathbf{p}}_\mathbf{e} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} \end{aligned} \tag{4}$$

Рассмотрим сначала производные по эйлеровым углам $\mathbf{\Omega_e}$ и сопряженным к ним импульсам $\mathbf{p_e}$:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} = \frac{1}{2}\mathbf{p}_\mathbf{e}^\top \frac{\partial \mathbb{W}^\top}{\partial \mathbf{\Omega_e}}\mathbb{G}_{11}\mathbb{W}\mathbf{p_e} + \mathbf{p}_\mathbf{e}^\top \frac{\partial \mathbb{W}^\top}{\partial \mathbf{\Omega_e}}\mathbb{G}_{12}\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{p}_\mathbf{e}^\top \mathbb{W}^\top\mathbb{G}_{11}\frac{\partial \mathbb{W}}{\partial \mathbf{\Omega_e}}\mathbf{p_e} \tag{5}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}} = \mathbb{W}^\top\mathbb{G}_{11}\mathbb{W}\mathbf{p_e} + \mathbb{W}^\top\mathbb{G}_{12}\mathbf{p} \tag{6}$$

Производные матрицы $\mathbb{W}$ по эйлеровым углам $\mathbf{\Omega_e}$, появляющиеся в предыдущем выражении, имеют вид

$$\frac{\partial \mathbb{W}}{\partial \varphi} = 0, \quad \frac{\partial \mathbb{W}}{\partial \theta} = \begin{bmatrix} -\dfrac{\cos\theta\sin\psi}{\sin^2\theta} & 0 & \dfrac{\sin\psi}{\sin^2\theta} \\ -\dfrac{\cos\theta\cos\psi}{\sin^2\theta} & 0 & \dfrac{\cos\psi}{\sin^2\theta} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbb{W}}{\partial \psi} = \begin{bmatrix} \dfrac{\cos\psi}{\sin\theta} & -\sin\psi & -\dfrac{\cos\theta\cos\psi}{\sin\theta} \\ -\dfrac{\sin\psi}{\sin\theta} & -\cos\psi & \dfrac{\cos\theta\sin\psi}{\sin\theta} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{7}$$

Теперь перейдем к рассмотрению производных гамильтониана по векторам внутренних координат $\mathbf{q}$ и сопряженных к ним импульсов $\mathbf{p}$.

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbb{G}_{22}(\mathbf{q})\mathbf{p} + \mathbb{G}_{12}^{\top}(\mathbf{q})\mathbb{W}(\mathbf{\Omega_e})\mathbf{p_e} \tag{8}$$

При дифференцировании гамильтониана по $\mathbf{q}$ основную сложность представляют матрицы $\mathbb{G}_{ij}(\mathbf{q})$. При выводе этих производных были привлечены формулы из теории функциональных матриц. Рассмотрим дифференцируемую, обратимую матрицу $\mathbb{A}(\mathbf{q})$ векторного аргумента $\mathbf{q}$. Производная обратной матрицы $\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q})$ по переменной $\mathbf{q}$ связана с производной матрицы $\mathbb{A}(\mathbf{q})$ следующим выражением

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q}) = -\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q})\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{A}(\mathbf{q})\right]\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q}). \tag{9}$$

Рассмотрим производную матрицы $\mathbb{G}_{11}(\mathbf{q})$ по вектору внутренних координат $\mathbf{q}$.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left[\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}\right] = -\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)\right]\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}, \tag{10}$$

или, более кратко,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = -\mathbb{G}_{11}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)\right]\mathbb{G}_{11}. \tag{11}$$

При дифференцировании произведения матриц также действует правило Лейбница, используя которое раскрываем производную в (11).

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = -\mathbb{G}_{11}\left[\frac{\partial\, \mathbb{I}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top} + \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathbb{A}^{\top}}{\partial \mathbf{q}}\right]\mathbb{G}_{11}. \tag{12}$$

Аналогично, получаем выражения для производных матриц $\mathbb{G}_{12}(\mathbf{q})$ и $\mathbb{G}_{22}(\mathbf{q})$ по $\mathbf{q}$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{22} = -\mathbb{G}_{22}\left[\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbb{A}^{\top}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} + \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial\, \mathbb{I}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} - \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\right]\mathbb{G}_{22}, \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{12} = -\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11}\right]\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1} - \mathbb{G}_{11}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1} + \mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1} = \tag{14}$$

$$= \mathbb{G}_{22}\left[\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbb{A}^{\top}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} + \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial\, \mathbb{I}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} - \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\right]\mathbb{G}_{22}\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1} - \mathbb{G}_{11}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1} + \mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1}. \tag{15}$$

Итак, получив производные матриц $\mathbb{G}_{ij}$ по $\mathbf{q}$, мы можем получить производные гамильтониана по $\mathbf{q}$ по выражению

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^\top \frac{\partial \mathbb{G}_{22}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{p} + \mathbf{p_e}^\top \mathbb{W}^\top \frac{\partial \mathbb{G}_{12}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{p_e}^\top \mathbb{W}^\top \frac{\partial \mathbb{G}_{11}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{W}\mathbf{p_e} + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{q}}. \tag{16}$$