Гамильтониан молекулярной пары, в котором ориентация мономеров описывается относительно транслированной лабораторной системы координат

Рассмотрим два произвольных мономера. Обозначим радиус-векторы их центров масс через $\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_1}$ и $\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}$. Поместим начало системы отсчета в центр масс системы как целого; параметризуем ось, соединяющую центры масс мономеров, сферическими углами Θ, Φ; обозначим вектор, направленный из центра масс первого мономера в центр масс второго за $\mathbf{R}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\mathrm{mon}_1} &= -\frac{m_{\mathrm{mon}_2}}{M}\mathbf{R} = -\frac{m_{\mathrm{mon}_2}}{M}\begin{bmatrix} R\sin\Theta\cos\Phi \\ R\sin\Theta\sin\Phi \\ R\cos\Theta \end{bmatrix}, \\ \mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2} &= \frac{m_{\mathrm{mon}_1}}{M}\mathbf{R} = \frac{m_{\mathrm{mon}_1}}{M}\begin{bmatrix} R\sin\Theta\cos\Phi \\ R\sin\Theta\sin\Phi \\ R\cos\Theta \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{1}$$

где M – сумма масс мономеров. Пусть второй мономер состоит из n точек, радиус-вектора которых во введенной системе отсчета обозначим $\left\{\mathbf{r}_2^k\right\}_{k=1\ldots n}$, а относительно центра масс второго мономера – $\left\{\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}^k\right\}_{k=1\ldots n}$. Тогда для k-й точки вектора связаны соотношением

$$\mathbf{r}_2^k = \mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2} + \mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}^k \tag{2}$$

Преобразуем выражение кинетической энергии второго мономера.

$$\begin{aligned} T_2 = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\dot{\mathbf{r}}_2^k\right)^2 = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2} + \dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^k\right)^2 = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left[\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^2 + 2\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^k + \left(\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^k\right)^2\right] = \\ = \frac{1}{2}m_{\mathrm{mon}_2}\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^2 + \dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}\frac{d}{dt}\left[\sum_{k=1}^{n} m_k \mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}^k\right] + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^k\right)^2 \end{aligned} \tag{3}$$

Второе слагаемое в (3) равно нулю, т.к. в квадратных скобках представлен вектор, направленный в центр масс второго мономера, в системе, связанной с центром масс второго мономера, то есть нуль-вектор. Квадрат производной вектора $\mathbf{R}$, соединяющего центры масс мономеров, в сферической системе координат имеет следующий вид

$$\dot{\mathbf{R}}^2 = \dot{R}^2 + R^2\dot{\Theta}^2 + R^2\dot{\Phi}^2\sin^2\Theta \tag{4}$$

Подставим выражение для производной (4) в кинетическую энергию второго мономера (3) (вектор $\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}$ связан с вектором $\mathbf{R}$ соотношением (1)):

$$T_2 = \frac{1}{2}m_{\mathrm{mon}_2}\frac{m_{\mathrm{mon}_1}^2}{M^2}\left[\dot{R}^2 + R^2\dot{\Theta}^2 + R^2\dot{\Phi}^2\sin^2\Theta\right] + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\dot{\mathbf{r}}_{\mathrm{mon}_2}^k\right)^2 \tag{5}$$

Будем описывать ориентацию второго мономера при помощи матрицы $\mathbb{S}_2$. Обозначим систему векторов $\left\{\mathbf{r}^k_{\mathrm{mon}_2}\right\}_{k=1\dots n}$ в начальный момент времени за $\left\{\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right\}_{k=1\dots n}$. Тогда в момент времени t системы векторов связаны при помощи матрицы $\mathbb{S}_2$:

$$\mathbf{r}^k_{\mathrm{mon}_2}(t) = \mathbb{S}_2(t)\,\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}, \qquad k = 1\dots n \tag{6}$$

Получим выражение для производной k-го вектора $\mathbf{r}^k_{\mathrm{mon}_2}$:

$$\dot{\mathbf{r}}^k_{\mathrm{mon}_2} = \dot{\mathbb{S}}_2\,\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2} = \dot{\mathbb{S}}_2\,\mathbb{S}_2^{-1}\mathbf{r}^k_{\mathrm{mon}_2} = \left[\boldsymbol{\omega}_2 \times \mathbf{r}^k_{\mathrm{mon}_2}\right] = \mathbb{S}_2\left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right] \tag{7}$$

Просуммируем масс-взвешенные производные векторов:

$$\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\dot{\mathbf{r}}^k_{\mathrm{mon}_2}\right)^2 = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right]^\top \mathbb{S}_2^\top\mathbb{S}_2\left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right] = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right]^2 =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\,\boldsymbol{\Omega}_2^\top\left[\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2} \times \left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right]\right] = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\boldsymbol{\Omega}_2^\top\left(\left(\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}, \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\right)\boldsymbol{\Omega}_2 - \mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}\left(\mathbf{R}^k_{\mathrm{mon}_2}, \boldsymbol{\Omega}_2\right)\right) =$$
$$= \frac{1}{2}\boldsymbol{\Omega}_2^\top\mathbb{I}_2\,\boldsymbol{\Omega}_2,$$

где $\mathbb{I}_2$ – тензор инерции второго мономера. Положим, что в начальный момент система координат, находящаяся в центре масс пары, совпадала с системой главных осей второго мономера. Тогда тензор инерции $\mathbb{I}_2$ принимает диагональный вид (верхний индекс – номер мономера)

$$\mathbb{I}_2 = \begin{bmatrix} I_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & I_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3^2 \end{bmatrix}$$

Вектор угловой скорости $\boldsymbol{\Omega}_2$ связан с вектором эйлеровых скоростей $\dot{\mathbf{e}}_2$ матрицей $\mathbb{V}_2$:

$$\boldsymbol{\Omega}_2 = \begin{bmatrix} \sin\theta_2\sin\psi_2 & \cos\psi_2 & 0 \\ \sin\theta_2\cos\psi_2 & -\sin\psi_2 & 0 \\ \cos\theta_2 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \dot{\varphi}_2 \\ \dot{\theta}_2 \\ \dot{\psi}_2 \end{bmatrix} = \mathbb{V}_2\,\dot{\mathbf{e}}_2$$

Итак, выражение кинетической энергии второго мономера T_2 приходит к виду

$$T_2 = \frac{1}{2}m_{\mathrm{mon}_2}\frac{m^2_{\mathrm{mon}_1}}{M^2}\left[\dot{R}^2 + R^2\dot{\Theta}^2 + R^2\dot{\Phi}^2\sin^2\Theta\right] + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{e}}_2^\top\mathbb{V}_2^\top\mathbb{I}_2\,\mathbb{V}_2\dot{\mathbf{e}}_2 \tag{8}$$

Проводя аналогичные рассуждения приходим к выражению для кинетической энергии первого мономера T_1. Получаем выражение для полной кинетической энергии пары:

$$T = T_1 + T_2 = \frac{1}{2}\left[m_{\mathrm{mon}_1}\frac{m_{\mathrm{mon}_2}^2}{M^2} + m_{\mathrm{mon}_2}\frac{m_{\mathrm{mon}_1}^2}{M^2}\right] \times \left[\dot{R}^2 + R^2\dot{\Theta}^2 + R^2\dot{\Phi}^2\sin^2\Theta\right] + \\ + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{e}}_1^\top \mathbb{V}_1^\top \mathbb{I}_1\, \mathbb{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_1 + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{e}}_2^\top \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2\, \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2, \tag{9}$$

$$T = \frac{1}{2}\mu\left[\dot{R}^2 + R^2\dot{\Theta}^2 + R^2\dot{\Phi}^2\sin^2\Theta\right] + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{e}}_1^\top \mathbb{V}_1^\top \mathbb{I}_1\, \mathbb{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_1 + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{e}}_2^\top \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2\, \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2, \tag{10}$$

где $\mu = \dfrac{m_{\mathrm{mon}_1} m_{\mathrm{mon}_2}}{m_{\mathrm{mon}_1} + m_{\mathrm{mon}_2}}$.

Для перехода к гамильтоновой форме кинетической энергии выпишем выражения для эйлеровых импульсов второго волчка (нижний индекс обозначает номер волчка):

$$\mathbf{p}_2^e = \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{e}}_2} = \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2\, \mathbb{V}_2\, \dot{\mathbf{e}}_2 \tag{11}$$

Перемножая матрицы $\mathbb{V}_2^\top$, $\mathbb{I}_2$ и $\mathbb{V}_2$, приходим к следующей связи эйлеровых импульсов $\mathbf{p}_2^e$ с эйлеровыми скоростоями $\dot{\mathbf{e}}_2$. Обращаем матрицу, чтобы найти обратную связь.

$$\begin{bmatrix} \left(I_1^2\sin^2\psi_2 + I_2^2\cos^2\psi_2\right)\sin^2\theta_2 + I_3^2\cos^2\theta_2 & \left(I_1^2 - I_2^2\right)\sin\theta_2\sin\psi_2\cos\psi_2 & I_3^2\cos\theta_2 \\ \left(I_1^2 - I_2^2\right)\sin\theta_2\sin\psi_2\cos\psi_2 & I_1^2\cos^2\psi_2 + I_2^2\sin^2\psi_2 & 0 \\ I_3^2\cos\theta_2 & 0 & I_3^2 \end{bmatrix}\dot{\mathbf{e}}_2 = \mathbf{p}_2^e$$

$$\dot{\mathbf{e}}_2 = \frac{1}{I_1^2 I_2^2\sin^2\theta_2} \times \begin{bmatrix} \alpha & \beta & -\alpha\cos\theta_2 \\ \beta & \left(I_1^2\sin^2\psi_2 + I_2^2\cos^2\psi_2\right)\sin^2\theta_2 & -\beta\cos\theta_2 \\ -\alpha\cos\theta_2 & -\beta\cos\theta_2 & \dfrac{I_1^2 I_2^2}{I_3^2}\sin^2\theta_2 + \alpha\cos^2\theta_2 \end{bmatrix}\mathbf{p}_2^e,$$

$$\alpha = I_1^2\cos^2\psi_2 + I_2^2\sin^2\psi_2, \quad \beta = \left(I_2^2 - I_1^2\right)\sin\theta_2\sin\psi_2\cos\psi_2$$

Полученная матрица $\left(\mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2\, \mathbb{V}_2\right)^{-1}$ является матрицей гамильтоновой формы кинетической энергии волчка. Умножив ее слева на вектор-строку и справа на вектор-столбец эйлеровых импульсов $\mathbf{p}_2^e$ приходим к выражению для гамильтоновой формы кинетической энергии волчка $T_2^{\mathcal{H}}$. (Заметим, что в статье AA (2015) в этом выражении опечатка – I_1^2 и I_2^2 перепутаны местами.)

$$T_2^{\mathcal{H}} = \frac{1}{2I_1^2\sin^2\theta_2}\left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi\cos\theta_2\right)\sin\psi_2 + p_2^\theta\sin\theta_2\cos\psi_2\right]^2 + \\ + \frac{1}{2I_2^2\sin^2\theta_2}\left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi\cos\theta_2\right)\cos\psi_2 - p_2^\theta\sin\theta_2\sin\psi_2\right]^2 + \frac{1}{2I_3^2}\left(p_2^\psi\right)^2. \tag{12}$$

Итак, приходим к следующему выражению для гамильтониана:

$$
\begin{gathered}
T_{\mathcal{H}} = \frac{p_R^2}{2\mu} + \frac{p_\Theta^2}{2\mu R^2} + \frac{p_\Phi^2}{2\mu R^2 \sin^2 \Theta} + \\
+ \frac{1}{2I_1^2 \sin^2 \theta_2} \left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \sin \psi_2 + p_2^\theta \sin \theta_2 \cos \psi_2 \right]^2 + \\
+ \frac{1}{2I_2^2 \sin^2 \theta_2} \left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \cos \psi_2 - p_2^\theta \sin \theta_2 \sin \psi_2 \right]^2 + \frac{1}{2I_3^2} \left(p_2^\psi \right)^2 + \\
\frac{1}{2I_1^1 \sin^2 \theta_1} \left[\left(p_1^\varphi - p_1^\psi \cos \theta_1 \right) \sin \psi_1 + p_1^\theta \sin \theta_1 \cos \psi_1 \right]^2 + \\
+ \frac{1}{2I_2^1 \sin^2 \theta_1} \left[\left(p_1^\varphi - p_1^\psi \cos \theta_1 \right) \cos \psi_1 - p_1^\theta \sin \theta_1 \sin \psi_1 \right]^2 + \frac{1}{2I_3^1} \left(p_1^\psi \right)^2 .
\end{gathered} \tag{13}
$$

Рассмотрим якобиан замены переменных, приводящей гамильтониан к сумме квадратов.

$$
T_{\mathcal{H}}(p_R, p_\Theta, p_\Phi, p_1^\varphi, p_1^\theta, p_1^\psi, p_2^\varphi, p_2^\theta, p_2^\psi) \longrightarrow T_{\mathcal{H}}(x_1, \ldots, x_9) = x_1^2 + \cdots + x_9^2 \tag{14}
$$

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu}} p_R \\
x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2}} p_\Theta \\
x_3 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2 \sin^2 \Theta}} p_\Phi \\
x_4 &= \frac{(p_1^\varphi - p_1^\psi \cos \theta_1) \sin \psi_1 + p_1^\theta \sin \theta_1 \cos \psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2 \theta_1}} \\
x_5 &= \frac{(p_1^\varphi - p_1^\psi \cos \theta_1) \cos \psi_1 - p_1^\theta \sin \theta_1 \sin \psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin \theta_1}} \\
x_6 &= \frac{1}{\sqrt{2I_3^1}} p_1^\psi \\
x_7 &= \frac{(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2) \sin \psi_2 + p_2^\theta \sin \theta_2 \cos \psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2 \theta_2}} \\
x_8 &= \frac{(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2) \cos \psi_2 - p_2^\theta \sin \theta_2 \sin \psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin \theta_2}} \\
x_9 &= \frac{1}{\sqrt{2I_3^2}} p_2^\psi
\end{aligned} \tag{15}
$$

$$[\,\mathrm{Jac}\,]_{\mathrm{ham}} = \left| \frac{\partial(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9)}{\partial(p_R, p_\Theta, p_\Phi, p_1^\varphi, p_1^\theta, p_1^\psi, p_2^\varphi, p_2^\theta, p_2^\psi)} \right|^{-1} =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\mu}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2 \sin\Theta}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sin\psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2\theta_1}} & \frac{\sin\theta_1 \cos\psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2\theta_1}} & -\frac{\cos\theta_1 \sin\psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2\theta_1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\cos\psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2\theta_1}} & -\frac{\sin\theta_1 \sin\psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2\theta_1}} & -\frac{\cos\theta_1 \cos\psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2\theta_1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2I_3^1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sin\psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2\theta_2}} & \frac{\sin\theta_2 \cos\psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2\theta_2}} & -\frac{\cos\theta_2 \sin\psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2\theta_2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\cos\psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2\theta_2}} & -\frac{\sin\theta_2 \sin\psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2\theta_2}} & -\frac{\cos\theta_2 \cos\psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2\theta_2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2I_3^2}} \end{bmatrix} =$$

$$= \left[2^{9/2} \mu R^2 \sqrt{I_1^1 I_2^1 I_3^1 I_1^2 I_2^2 I_3^2} \sin\Theta \sin\theta_1 \sin\theta_2 \right]^{-1}$$

$$[\,\mathrm{Jac}\,]_{\mathrm{ham}} = 2^{9/2} \mu R^2 \sqrt{I_1^1 I_2^1 I_3^1 I_1^2 I_2^2 I_3^2} \sin\Theta \sin\theta_1 \sin\theta_2$$

Определение углов Эйлера вращения, являющегося композицией двух вращений

Рассмотрим композицию двух вращений $\mathbb{S}_1$ и $\mathbb{S}_2$, параметризованновых наборами углов Эйлера $(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1)$ и $(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$, соответственно, определенными в Голдстейне (zxz; 313 extrinsic).

$$\mathbb{S}_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) \cdot \mathbb{S}_2(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) = \mathbb{S}_3(\alpha_3, \beta_3, \gamma_3) \tag{16}$$

Перейдем от представления вращений при помощи эйлеровых углов к кватернионному, которое позволяет более удобным образом описывать параметры вращения, являющегося композицией вращений. Рассчитав компоненты кватерниона, соотвествующего композиции вращений, через наборы углов Эйлера 1 и 2, выразим через них углы Эйлера результирующего вращения.

Компоненты кватерниона следующим образом связаны с углом вращения ω вокруг оси, заданной направляющими углами α, β, γ (с положительными направлениями осей x, y, z, соответственно):

$$q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\dfrac{\omega}{2} \\ \cos\alpha\sin\dfrac{\omega}{2} \\ \cos\beta\sin\dfrac{\omega}{2} \\ \cos\gamma\sin\dfrac{\omega}{2} \end{bmatrix} \tag{17}$$

Заметим, что записанный кватернион имеет единичную норму.

$$|q|^2 = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 = \sin^2\frac{\omega}{2}(\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma) + \cos^2\frac{\omega}{2} = 1 \tag{18}$$

Компоненты матрицы вращения, соотвествующей кватерниону $q = [q_1, q_2, q_3, q_4]$, связаны следующим образом с компонентами кватерниона.

$$M = \begin{bmatrix} q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 - q_4^2 & 2(q_2q_3 - q_1q_4) & 2(q_2q_4 + q_1q_3) \\ 2(q_2q_3 + q_1q_4) & q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 - q_4^2 & 2(q_3q_4 - q_1q_2) \\ 2(q_2q_4 - q_1q_3) & 2(q_3q_4 + q_1q_2) & q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 \end{bmatrix} \tag{19}$$

Приравнивая матрицы вращения, компоненты которых выражены через углы Эйлера и через компоненты кватерниона, получают выражения для компонент кватерниона через углы

Эйлера, [1]. (При этом матрица с углами Эйлера для получения этих выражений берется обратной по Голдстейну, судя по всему это не важно.)

$$M = \begin{bmatrix} \cos\psi\cos\varphi - \cos\theta\sin\varphi\sin\psi & -\sin\psi\cos\varphi - \cos\theta\sin\varphi\cos\psi & \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\psi\sin\varphi + \cos\theta\cos\varphi\sin\psi & -\sin\psi\sin\varphi + \cos\theta\cos\varphi\cos\psi & -\sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\psi & \sin\theta\cos\psi & \cos\theta \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$q_1 = \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}\cos\frac{\beta_1}{2} \\ \cos\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}\sin\frac{\beta_1}{2} \\ \sin\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}\sin\frac{\beta_1}{2} \\ \sin\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}\cos\frac{\beta_1}{2} \end{bmatrix}, \qquad q_2 = \begin{bmatrix} \cos\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\cos\frac{\beta_2}{2} \\ \cos\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}\sin\frac{\beta_2}{2} \\ \sin\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}\sin\frac{\beta_2}{2} \\ \sin\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\cos\frac{\beta_2}{2} \end{bmatrix} \tag{21}$$

Кватернионы представляют в виде пары [действительное число q_1, вектор $\mathbf{q} = [q_2, q_3, q_4]$]: $q_1 = \left[q_1^1, \mathbf{q}_1\right]$ (нижний индекс – номер кватерниона, верхний индекс – номер компоненты). Произведение кватернионов в векторной форме представлено соотношением

$$q_1 \cdot q_2 = \left(q_1^1 q_2^1 - \mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\right) + q_1^1\mathbf{q}_2 + q_2^1\mathbf{q}_1 + [\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2] \tag{22}$$

Подставив выражения для q_1 и q_2 в определение (22), получаем выражение для компонент кватерниона $q_3 = q_1 \cdot q_2$:

$$q_3 = \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\beta_2}{2}\cos\left(\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}+\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\right) - \sin\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\beta_2}{2}\cos\left(\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}-\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}\right) \\ \sin\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\beta_2}{2}\cos\left(\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}-\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\right) + \cos\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\beta_2}{2}\cos\left(\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}+\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}\right) \\ \cos\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\beta_2}{2}\sin\left(\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}+\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}\right) + \sin\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\beta_2}{2}\sin\left(\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}-\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\right) \\ \cos\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\beta_2}{2}\sin\left(\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}+\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}\right) + \sin\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\beta_2}{2}\sin\left(\frac{\alpha_2-\gamma_2}{2}-\frac{\alpha_1-\gamma_1}{2}\right) \end{bmatrix} \tag{23}$$

Исходя из равенства матриц вращения, компоненты которых выражены через углы Эйлера и через компоненты кватерниона, получим связь углов Эйлера с компонентами кватерниона.

$$\operatorname{tg}\psi = \operatorname{tg}\gamma_3 = \frac{M_{31}}{M_{32}} = \frac{q_2 q_4 - q_1 q_3}{q_3 q_4 + q_1 q_2} \tag{24}$$

$$\operatorname{tg}\varphi = \operatorname{tg}\alpha_3 = \frac{M_{13}}{M_{23}} = \frac{q_2 q_4 + q_1 q_3}{q_1 q_2 - q_3 q_4} \tag{25}$$

$$\cos\theta = \cos\beta_3 = q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 \tag{26}$$

Подстановка компонентов кватерниона (23) в выражения для углов Эйлера (24), (25), (26) была выполнена в Maple, затем выражения были автоматически упрощены. В итоге были получены следующие выражения:

$$\operatorname{tg}\alpha_3 = \frac{\Big[\sin(\alpha_2+\gamma_1)\cos\alpha_1 + \cos\beta_1 \sin\alpha_1 \cos(\alpha_2+\gamma_1)\Big]\sin\beta_2 + \sin\alpha_1 \sin\beta_1 \cos\beta_2}{\Big[\cos\beta_1 \cos(\alpha_2+\gamma_1)\cos\alpha_1 - \sin\alpha_1 \sin(\alpha_2+\gamma_1)\Big]\sin\beta_2 + \cos\alpha_1 \sin\beta_1 \cos\beta_2} \tag{27}$$

$$\cos\beta_3 = -\sin\beta_2 \cos(\alpha_2+\gamma_1)\sin\beta_1 + \cos\beta_1 \cos\beta_2 \tag{28}$$

$$\operatorname{tg}\gamma_3 = \frac{\Big[\sin(\alpha_2+\gamma_1)\cos\gamma_2 + \cos\beta_2 \sin\gamma_2 \cos(\alpha_2+\gamma_1)\Big]\sin\beta_1 + \cos\beta_1 \sin\gamma_2 \sin\beta_2}{\Big[\cos\beta_2 \cos(\alpha_2+\gamma_1)\cos\gamma_2 - \sin\gamma_2 \sin(\alpha_2+\gamma_1)\Big]\sin\beta_1 + \cos\beta_1 \cos\gamma_2 \sin\beta_2} \tag{29}$$

Связь угловых координат "транслированной"и подвижной систем

Транслированной системой кратко называем описанную выше систему, в которой ориентации мономеров описывается относительно транслированной лабораторной системы (перемещенной из центра масс пары в центры масс каждого из мономеров). Внутренние координаты такой системы будем помечать верхним индексом t. Вектор $\mathbf{R}$, соединяющий центры масс мономеров, имеет компоненты

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} R\sin\Theta^t\cos\Phi^t \\ R\sin\Theta^t\sin\Phi^t \\ R\cos\Theta^t \end{bmatrix} \tag{30}$$

Ориентация мономеров относительно транслированной лабораторной системы описывается при помощи матриц $\mathbb{S}_1^t(\varphi_1^t, \theta_1^t, \psi_1^t)$ и $\mathbb{S}_2^t(\varphi_2^t, \theta_2^t, \psi_2^t)$. Матрицы $\mathbb{S}_1^t$, $\mathbb{S}_2^t$ осуществляют преобразование координат из системы жестко связанной с первым, вторым волчком, соответственно, в лабораторную систему.

Подвижная система связана с лабораторной системой при помощи матрицы $\mathbb{S}_0(\varphi_0, \theta_0, \psi_0)$. Ориентации мономеров относительно подвижной системы описывается матрицами $\mathbb{S}_1^0(\varphi_1, \theta_1, \psi_1)$ и $\mathbb{S}_2^0(\varphi_2, \theta_2, \psi_2)$. Матрицы $\mathbb{S}_1^0$, $\mathbb{S}_2^0$ осуществляют пребразование координат из системы связанной жестко с волчком в подвижную систему. Матрица $\mathbb{S}_0$ осуществляет преобразование координат из подвижной системы в лабораторную систему, связанную с центром масс пары.

Рассмотрим следующую систему уравнений, связывающую угловые переменные "транслированной"и подвижной систем:

$$\begin{cases} \mathbb{S}_0 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R\sin\Theta^t\cos\Phi^t \\ R\sin\Theta^t\sin\Phi^t \\ R\cos\Theta^t \end{bmatrix} \\ \qquad \mathbb{S}_0 \times \mathbb{S}_1^0 = \mathbb{S}_1^t \\ \qquad \mathbb{S}_0 \times \mathbb{S}_2^0 = \mathbb{S}_2^t \end{cases} \tag{31}$$

Эта система связывает 8 угловых переменных $(\varphi_0, \theta_0, \psi_0, \varphi_1, \theta_1, \psi_1, \varphi_2, \theta_2)$, связанных с подвижной системой, с 8 угловыми переменными "транслированной"системы (Φ^t, Θ^t, φ_1^t, θ_1^t, ψ_1^t, φ_2^t, θ_2^t, ψ_2^t). В результате решения этой системы мы сможем пересчитать якобиан замены переменных, приводящей гамильтониан в "транслированной"системе к голым квадратам, через углы подвижной системы, а также найти якобиан замены углов "транслированной"системы на углы подвижной системы. Основываясь на (27), (28) и (29), выпишем выражения, связывающие угловые перменные "транслированной"системы с угловыми переменными подвижной системы:

$$\begin{cases} \quad \Theta_t = \theta_0 \\ \quad \Phi_t = \varphi_0 \\ \operatorname{tg}\varphi_1^t = \dfrac{\Big[\sin(\varphi_1+\psi_0)\cos\varphi_0 + \cos\theta_0\sin\varphi_0\cos(\varphi_1+\psi_0)\Big]\sin\theta_1 + \sin\varphi_0\sin\theta_0\cos\theta_1}{\Big[\cos\theta_0\cos(\varphi_1+\psi_0)\cos\varphi_0 - \sin\varphi_0\sin(\varphi_1+\psi_0)\Big]\sin\theta_1 + \cos\varphi_0\sin\theta_0\sin\theta_1} \\ \cos\theta_1^t = -\sin\theta_1\cos(\varphi_1+\psi_0)\sin\theta_0 + \cos\theta_0\cos\theta_1 \\ \operatorname{tg}\psi_1^t = \dfrac{\Big[\sin(\varphi_1+\psi_0)\cos\psi_1 + \cos\theta_1\sin\psi_1\cos(\varphi_1+\psi_0)\Big]\sin\theta_0 + \cos\theta_0\sin\psi_1\sin\theta_1}{\Big[\cos\theta_1\cos(\varphi_1+\psi_0)\cos\psi_1 - \sin\psi_1\sin(\varphi_1+\psi_0)\Big]\sin\theta_0 + \cos\theta_0\cos\psi_1\sin\theta_1} \\ \operatorname{tg}\varphi_2^t = \dfrac{\Big[\sin(\varphi_2+\psi_0)\cos\varphi_0 + \cos\theta_0\sin\varphi_0\cos(\varphi_2+\psi_0)\Big]\sin\theta_2 + \sin\varphi_0\sin\theta_0\cos\theta_2}{\Big[\cos\theta_0\cos(\varphi_2+\psi_0)\cos\varphi_0 - \sin\varphi_0\sin(\varphi_2+\psi_0)\Big]\sin\theta_2 + \cos\varphi_0\sin\theta_0\sin\theta_2} \\ \cos\theta_2^t = -\sin\theta_2\cos(\varphi_2+\psi_0)\sin\theta_0 + \cos\theta_0\cos\theta_2 \\ \operatorname{tg}\psi_2^t = \dfrac{\Big[\sin(\varphi_2+\psi_0)\cos\psi_2 + \cos\theta_2\sin\psi_2\cos(\varphi_2+\psi_0)\Big]\sin\theta_0 + \cos\theta_0\sin\psi_2\sin\theta_2}{\Big[\cos\theta_2\cos(\varphi_2+\psi_0)\cos\psi_2 - \sin\psi_2\sin(\varphi_2+\psi_0)\Big]\sin\theta_0 + \cos\theta_0\cos\psi_2\sin\theta_2} \end{cases} \tag{32}$$

Переходя к якобиану замены переменных, заметим, что φ_1^t и θ_1^t не зависят от ψ_1. Следовательно производные $\dfrac{\partial\varphi_1^t}{\partial\psi_1}$ и $\dfrac{\partial\theta_1^t}{\partial\psi_1}$ равны 0.

$$
\frac{\partial\left(\Phi^t,\Theta^t,\varphi_1^t,\theta_1^t,\psi_1^t,\varphi_2^t,\theta_2^t,\psi_2^t\right)}{\partial\left(\varphi_0,\theta_0,\psi_0,\varphi_1,\theta_1,\psi_1,\varphi_2,\theta_2\right)}=
$$

$$
=\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
\frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\psi_0} & \frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\varphi_1} & \frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\theta_1} & 0 & 0 & 0\\
\frac{\partial\theta_1^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\theta_1^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\theta_1^t}{\partial\psi_0} & \frac{\partial\theta_1^t}{\partial\varphi_1} & \frac{\partial\theta_1^t}{\partial\theta_1} & 0 & 0 & 0\\
\frac{\partial\psi_1^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\psi_1^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\psi_1^t}{\partial\psi_0} & \frac{\partial\psi_1^t}{\partial\varphi_1} & \frac{\partial\psi_1^t}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_1^t}{\partial\psi_1} & 0 & 0\\
\frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\psi_0} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\varphi_2} & \frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\theta_2}\\
\frac{\partial\theta_2^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\theta_2^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\theta_2^t}{\partial\psi_0} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial\theta_2^t}{\partial\varphi_2} & \frac{\partial\theta_2^t}{\partial\theta_2}\\
\frac{\partial\psi_2^t}{\partial\varphi_0} & \frac{\partial\psi_2^t}{\partial\theta_0} & \frac{\partial\psi_2^t}{\partial\psi_0} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial\psi_2^t}{\partial\varphi_2} & \frac{\partial\psi_2^t}{\partial\theta_2}
\end{bmatrix}=
$$

$$
=\frac{\partial\varphi_2^t}{\partial\psi_0}\frac{\partial\psi_1^t}{\partial\psi_1}\left[\frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\varphi_1}\frac{\partial\theta_1^t}{\partial\theta_1}-\frac{\partial\varphi_1^t}{\partial\theta_1}\frac{\partial\theta_1^t}{\partial\varphi_1}\right]\cdot\left[\frac{\partial\theta_2^t}{\partial\varphi_2}\frac{\partial\psi_2^t}{\partial\theta_2}-\frac{\partial\theta_2^t}{\partial\theta_2}\frac{\partial\psi_2^t}{\partial\varphi_2}\right] \tag{33}
$$

Список литературы

[1] D. M. Henderson. *Shuttle program: Euler angles, quaternions, and transformation matrices.* NASA Johnson Space Center; Houston, TX, United States, 1977.

[2] Dr. H. Richter, Department of Mechanical Engineering Cleveland State University. Lecture handouts. Rigid motions and homogeneous transformations.