

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

Рассмотрим два произвольных мономера. Обозначим радиус-векторы их центров масс через $\mathbf{r}_{\text{mon}_1}$ и $\mathbf{r}_{\text{mon}_2}$. 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} .

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

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

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

Преобразуем выражение кинетической энергии второго мономера.

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

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 $\mathbf{r}_{\text{mon}_2}$ связан с вектором \mathbf{R} соотношением (1)):

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

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

$$\mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k(t) = \mathbb{S}_2(t) \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \quad k = 1 \dots n \quad (6)$$

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

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \mathbb{S}_2^{-1} \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k = [\boldsymbol{\omega}_2 \times \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k] = \mathbb{S}_2 [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k] \quad (7)$$

Просуммируем масс-взвешенные производные векторов:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n m_k (\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k)^2 &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n m_k [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k]^\top \mathbb{S}_2^\top \mathbb{S}_2 [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n m_k [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k]^2 = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n m_k \boldsymbol{\Omega}_2^\top [\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \times [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k]] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n m_k \boldsymbol{\Omega}_2^\top ((\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k) \boldsymbol{\Omega}_2 - \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k (\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \boldsymbol{\Omega}_2)) = \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}_2^\top \mathbb{I}_2 \boldsymbol{\Omega}_2, \end{aligned}$$

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

$$T_2 = \frac{1}{2} m_{\text{mon}_2} \frac{m_{\text{mon}_1}^2}{M^2} \left[\dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \right] + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_2^\top \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2 \quad (8)$$

Проводя аналогичные рассуждения приходим к выражению для кинетической энергии

первого мономера T_1 . Получаем выражение для полной кинетической энергии пары:

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

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

$$\text{где } \mu = \frac{m_{\text{mon}_1} m_{\text{mon}_2}}{m_{\text{mon}_1} + m_{\text{mon}_2}}.$$

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

$$\mathbf{p}_2^e = \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{e}}_2} = \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2 \quad (11)$$

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 скоростями $\dot{\mathbf{e}}_2$. Обращаем матрицу, чтобы найти обратную связь.

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

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

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

Подставив полученные выражения эйлеровых скоростей через эйлеровы импульсы в матричное произведение $\dot{\mathbf{e}}_2^\top \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2$, получаем (?) угловую часть кинетической энергии второго мономера в гамильтоновой форме

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2^{\mathcal{H}}(\varphi_2, \theta_2, \psi_2, p_2^\varphi, p_2^\theta, p_2^\psi) &= \frac{1}{2 I_1^2 \sin^2 \theta_2} \left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \cos \psi_2 - p_2^\theta \sin \theta_2 \sin \psi_2 \right]^2 + \\ &+ \frac{1}{2 I_2^2 \sin^2 \theta_2} \left[\left(p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \sin \psi_2 + p_2^\theta \sin \theta_2 \cos \psi_2 \right]^2 + \frac{1}{2 I_3^2} \left(p_2^\psi \right)^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Выражения для импульсов, сопряженных координатам R, Θ, Φ , существенно проще:

$$\begin{aligned} p_R &= \frac{\partial T}{\partial \dot{R}} = \mu \dot{R} \\ p_\Theta &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\Theta}} = \mu R^2 \dot{\Theta} \\ p_\Phi &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\Phi}} = \mu R^2 \dot{\Phi} \sin^2 \Theta \end{aligned}$$

Итого, приходим к следующему выражению для гамильтониана:

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

Рассмотрим якобиан замены переменных, приводящей гамильтониан к сумме квадратов.

$$T_{\mathcal{H}}(p_R, p_{\Theta}, p_{\Phi}, p_1^{\varphi}, p_1^{\theta}, p_1^{\psi}, p_2^{\varphi}, p_2^{\theta}, p_2^{\psi}) \longrightarrow T_{\mathcal{H}}(x_1, \dots, x_9) = x_1^2 + \dots + x_9^2 \quad (13)$$

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu}} p_R \\ x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2}} p_{\Theta} \\ x_3 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2 \sin^2 \Theta}} p_{\Phi} \\ x_4 &= \frac{(p_1^{\varphi} - p_1^{\psi} \cos \theta_1) \cos \psi_1 - p_1^{\theta} \sin \theta_1 \sin \psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin \theta_1}} \\ x_5 &= \frac{(p_1^{\varphi} - p_1^{\psi} \cos \theta_1) \sin \psi_1 + p_1^{\theta} \sin \theta_1 \cos \psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2 \theta_1}} \\ x_6 &= \frac{1}{\sqrt{2I_3^1}} p_1^{\psi} \\ x_7 &= \frac{(p_2^{\varphi} - p_2^{\psi} \cos \theta_2) \cos \psi_2 - p_2^{\theta} \sin \theta_2 \sin \psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin \theta_2}} \\ x_8 &= \frac{(p_2^{\varphi} - p_2^{\psi} \cos \theta_2) \sin \psi_2 + p_2^{\theta} \sin \theta_2 \cos \psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2 \theta_2}} \\ x_9 &= \frac{1}{\sqrt{2I_3^2}} p_2^{\psi} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned}
& \left[Jac \right]_{\text{ham}} = \left| \frac{\partial(p_R, p_\Theta, p_\Phi, p_\Psi, p_1^\varphi, p_1^\theta, p_1^\psi, p_2^\varphi, p_2^\theta, p_2^\psi)}{\partial(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9)} \right| = \\
& \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\mu}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2\mu R^2 \sin \Theta}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\cos \psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2 \theta_1}} & -\frac{\sin \theta_1 \sin \psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2 \theta_1}} & -\frac{\cos \theta_1 \cos \psi_1}{\sqrt{2I_1^1 \sin^2 \theta_1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sin \psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2 \theta_1}} & \frac{\sin \theta_1 \cos \psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2 \theta_1}} & -\frac{\cos \theta_1 \sin \psi_1}{\sqrt{2I_2^1 \sin^2 \theta_1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2I_3^1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\cos \psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2 \theta_2}} & -\frac{\sin \theta_2 \sin \psi_2}{\sqrt{2I_1^2 \sin^2 \theta_2}} & \cos \theta_2 \cos \psi_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sin \psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2 \theta_2}} & \frac{\sin \theta_2 \cos \psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2 \theta_2}} & -\frac{\cos \theta_2 \sin \psi_2}{\sqrt{2I_2^2 \sin^2 \theta_2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2I_3^2}} \end{bmatrix} \\
& = \\
& = 2^{9/2} \mu R^2 \sqrt{I_1^1 I_2^1 I_3^1 I_1^2 I_2^2 I_3^2} \sin \Theta \sin \theta_1 \sin \theta_2
\end{aligned}$$

Определение углов Эйлера вращения, являющегося композицией двух вращений

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

$$\mathbb{S}_1(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) \cdot \mathbb{S}_2(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) = \mathbb{S}_3(\alpha_3, \beta_3, \gamma_3) \quad (15)$$

Перейдем от представления вращений при помощи эйлеровых углов к кватернионному, которое позволяет более удобным образом описывать параметры вращения, являющегося композицией вращений. Рассчитав компоненты кватерниона, соответствующего 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):

$$q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \frac{\omega}{2} \\ \cos \alpha \sin \frac{\omega}{2} \\ \cos \beta \sin \frac{\omega}{2} \\ \cos \gamma \sin \frac{\omega}{2} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Заметим, что записанный кватернион имеет единичную норму.

$$|q|^2 = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 = \sin^2 \frac{\omega}{2} (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) + \cos^2 \frac{\omega}{2} = 1 \quad (17)$$

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

$$M = \begin{bmatrix} q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 - q_4^2 & 2(q_2q_3 - q_1q_4) & 2(q_2q_4 + q_1q_3) \\ 2(q_2q_3 + q_1q_4) & q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 - q_4^2 & 2(q_3q_4 - q_1q_2) \\ 2(q_2q_4 - q_1q_3) & 2(q_3q_4 + q_1q_2) & q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

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.)

$$M = \begin{bmatrix} \cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi & -\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi & \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi & -\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi & -\sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \psi & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$q_1 = \begin{bmatrix} \cos \frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} \cos \frac{\beta_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} \sin \frac{\beta_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} \sin \frac{\beta_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} \cos \frac{\beta_1}{2} \end{bmatrix}, \quad q_2 = \begin{bmatrix} \cos \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \\ \cos \frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \\ \sin \frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \\ \sin \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \end{bmatrix} \quad (20)$$

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

$$q_1 \cdot q_2 = (q_1^1 q_2^1 - \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2) + q_1^1 \mathbf{q}_2 + q_2^1 \mathbf{q}_1 + [\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2] \quad (21)$$

Подставив выражения для q_1 и q_2 в определение (21), получаем выражение для компонент кватерниона $q_3 = q_1 \cdot q_2$:

$$q_3 = \begin{bmatrix} \cos \frac{\beta_1}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \cos \left(\frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} + \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \right) - \sin \frac{\beta_1}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \cos \left(\frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} - \frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} \right) \\ \sin \frac{\beta_1}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \cos \left(\frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} - \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \right) + \cos \frac{\beta_1}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \cos \left(\frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} + \frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} \right) \\ \cos \frac{\beta_1}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \sin \left(\frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} + \frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} \right) + \sin \frac{\beta_1}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \sin \left(\frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} - \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \right) \\ \cos \frac{\beta_1}{2} \cos \frac{\beta_2}{2} \sin \left(\frac{\alpha_1 + \gamma_1}{2} + \frac{\alpha_2 + \gamma_2}{2} \right) + \sin \frac{\beta_1}{2} \sin \frac{\beta_2}{2} \sin \left(\frac{\alpha_2 - \gamma_2}{2} - \frac{\alpha_1 - \gamma_1}{2} \right) \end{bmatrix} \quad (22)$$

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

ниона.

$$\operatorname{tg} \psi = \operatorname{tg} \gamma_3 = \frac{M_{31}}{M_{32}} = \frac{q_2 q_4 - q_1 q_3}{q_3 q_4 + q_1 q_2} \quad (23)$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \operatorname{tg} \alpha_3 = \frac{M_{13}}{M_{23}} = \frac{q_2 q_4 + q_1 q_3}{q_1 q_2 - q_3 q_4} \quad (24)$$

$$\cos \theta = \cos \beta_3 = q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 \quad (25)$$

Подстановка компонентов кватерниона (22) в выражения для углов Эйлера (23), (24), (25) была выполнена в Maple, затем выражения были автоматически упрощены. В итоге были получены следующие выражения:

$$\operatorname{tg} \alpha_3 = \frac{\left[\sin(\alpha_2 + \gamma_1) \cos \alpha_1 + \cos \beta_1 \sin \alpha_1 \cos(\alpha_2 + \gamma_1) \right] \sin \beta_2 + \sin \alpha_1 \sin \beta_1 \cos \beta_2}{\left[\cos \beta_1 \cos(\alpha_2 + \gamma_1) \cos \alpha_1 - \sin \alpha_1 \sin(\alpha_2 + \gamma_1) \right] \sin \beta_2 + \cos \alpha_1 \sin \beta_1 \cos \beta_2} \quad (26)$$

$$\cos \beta_3 = -\sin \beta_2 \cos(\alpha_2 + \gamma_1) \sin \beta_1 + \cos \beta_1 \cos \beta_2 \quad (27)$$

$$\operatorname{tg} \gamma_3 = \frac{\left[\sin(\alpha_2 + \gamma_1) \cos \gamma_2 + \cos \beta_2 \sin \gamma_2 \cos(\alpha_2 + \gamma_1) \right] \sin \beta_1 + \cos \beta_1 \sin \gamma_2 \sin \beta_2}{\left[\cos \beta_2 \cos(\alpha_2 + \gamma_1) \cos \gamma_2 - \sin \gamma_2 \sin(\alpha_2 + \gamma_1) \right] \sin \beta_1 + \cos \beta_1 \cos \gamma_2 \sin \beta_2} \quad (28)$$

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

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} R \sin \Theta^t \cos \Phi^t \\ R \sin \Theta^t \sin \Phi^t \\ R \cos \Theta^t \end{bmatrix} \quad (29)$$

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 преобразование 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:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbb{S}_0 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \sin \Theta^t \cos \Phi^t \\ R \sin \Theta^t \sin \Phi^t \\ R \cos \Theta^t \end{bmatrix} \\ \mathbb{S}_0 \times \mathbb{S}_1^0 = \mathbb{S}_1^t \\ \mathbb{S}_0 \times \mathbb{S}_2^0 = \mathbb{S}_2^t \end{array} \right. \quad (30)$$

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 $(\Phi^t, \Theta^t, \varphi_1^t, \theta_1^t, \psi_1^t, \varphi_2^t, \theta_2^t, \psi_2^t)$. 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 (26), (27) и (28), выпишем выражения, связывающие угловые переменные "транслированной" системы с угловыми переменными подвижной системы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta_t = \theta_0 \\ \Phi_t = \varphi_0 \\ \operatorname{tg} \varphi_1^t = \frac{\left[\sin(\varphi_1 + \psi_0) \cos \varphi_0 + \cos \theta_0 \sin \varphi_0 \cos(\varphi_1 + \psi_0) \right] \sin \theta_1 + \sin \varphi_0 \sin \theta_0 \cos \theta_1}{\left[\cos \theta_0 \cos(\varphi_1 + \psi_0) \cos \varphi_0 - \sin \varphi_0 \sin(\varphi_1 + \psi_0) \right] \sin \theta_1 + \cos \varphi_0 \sin \theta_0 \sin \theta_1} \\ \cos \theta_1^t = -\sin \theta_1 \cos(\varphi_1 + \psi_0) \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \cos \theta_1 \\ \operatorname{tg} \psi_1^t = \frac{\left[\sin(\varphi_1 + \psi_0) \cos \psi_1 + \cos \theta_1 \sin \psi_1 \cos(\varphi_1 + \psi_0) \right] \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \sin \psi_1 \sin \theta_1}{\left[\cos \theta_1 \cos(\varphi_1 + \psi_0) \cos \psi_1 - \sin \psi_1 \sin(\varphi_1 + \psi_0) \right] \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \cos \psi_1 \sin \theta_1} \\ \operatorname{tg} \varphi_2^t = \frac{\left[\sin(\varphi_2 + \psi_0) \cos \varphi_0 + \cos \theta_0 \sin \varphi_0 \cos(\varphi_2 + \psi_0) \right] \sin \theta_2 + \sin \varphi_0 \sin \theta_0 \cos \theta_2}{\left[\cos \theta_0 \cos(\varphi_2 + \psi_0) \cos \varphi_0 - \sin \varphi_0 \sin(\varphi_2 + \psi_0) \right] \sin \theta_2 + \cos \varphi_0 \sin \theta_0 \sin \theta_2} \\ \cos \theta_2^t = -\sin \theta_2 \cos(\varphi_2 + \psi_0) \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \cos \theta_2 \\ \operatorname{tg} \psi_2^t = \frac{\left[\sin(\varphi_2 + \psi_0) \cos \psi_2 + \cos \theta_2 \sin \psi_2 \cos(\varphi_2 + \psi_0) \right] \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \sin \psi_2 \sin \theta_2}{\left[\cos \theta_2 \cos(\varphi_2 + \psi_0) \cos \psi_2 - \sin \psi_2 \sin(\varphi_2 + \psi_0) \right] \sin \theta_0 + \cos \theta_0 \cos \psi_2 \sin \theta_2} \end{array} \right. \quad (31)$$

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

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial (\Phi^t, \Theta^t, \varphi_1^t, \theta_1^t, \psi_1^t, \varphi_2^t, \theta_2^t, \psi_2^t)}{\partial (\varphi_0, \theta_0, \psi_0, \varphi_1, \theta_1, \psi_1, \varphi_2, \theta_2)} = \\
& = \begin{bmatrix}
\boxed{\begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{\partial \varphi_1^t}{\partial \varphi_0} & \frac{\partial \varphi_1^t}{\partial \theta_0} & \boxed{\begin{matrix} \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 \\ \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 \end{matrix}} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{\partial \theta_1^t}{\partial \varphi_0} & \frac{\partial \theta_1^t}{\partial \theta_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 \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 \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 \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 & \boxed{\begin{matrix} \frac{\partial \theta_2^t}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial \theta_2^t}{\partial \theta_2} \\ \frac{\partial \psi_2^t}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial \psi_2^t}{\partial \theta_2} \end{matrix}}
\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] \quad (32)
\end{aligned}$$

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.