Запишем гамильтониан в следующей форме

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

где $\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{J}$ – векторы внутренних координат, сопряженных им импульсов и углового момента.

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

$$\begin{aligned} &\mathbb{G}_{11} = \left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1} \\ &\mathbb{G}_{12} = -\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{G}_{22} = -\mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}, \\ &\mathbb{G}_{22} = \left(\mathrm{a} - \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{2}$$

Рассмотрим сначала производные гамильтониана по вектору обобщенных импульсов $\mathbf{p}$ и углового момента $\mathbf{J}$:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbb{G}_{22}(\mathbf{q})\mathbf{p} + \mathbb{G}_{12}^{\top}(\mathbf{q})\mathbf{J} \tag{3}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{J}} = \mathbb{G}_{12}(\mathbf{q})\mathbf{p} + \mathbb{G}_{11}(\mathbf{q})\mathbf{J} \tag{4}$$

При дифференцировании гамильтониана по обобщенным координатам $\mathbf{q}$ основную сложность представляют матрицы $\mathbb{G}_{\mathrm{ij}}(\mathbf{q})$. 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

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q}) = -\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q})\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{A}(\mathbf{q})\right]\mathbb{A}^{-1}(\mathbf{q}). \tag{5}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left[\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}\right] = -\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)\right]\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1}, \tag{6}$$

или, более кратко,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = -\mathbb{G}_{11}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)\right]\mathbb{G}_{11}. \tag{7}$$

При дифференцировании произведения матриц также действует правило Лейбница, используя которое раскрываем производную в (7).

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11} = -\mathbb{G}_{11}\left[\frac{\partial\,\mathbb{I}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top} + \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top} - \mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathbb{A}^{\top}}{\partial \mathbf{q}}\right]\mathbb{G}_{11}. \tag{8}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{22} = -\mathbb{G}_{22}\left[\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbb{A}^{\top}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} + \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial\,\mathbb{I}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A} - \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\right]\mathbb{G}_{22}, \tag{9}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{12} = -\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{G}_{11}\right]\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1} - \mathbb{G}_{11}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1} + \mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathrm{a}^{-1}\frac{\partial \mathrm{a}}{\partial \mathbf{q}}\mathrm{a}^{-1} = \tag{10}$$

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

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

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