Рассмотрим колебательно-вращательный гамильтониан в следующей форме

$$H = \frac{1}{2}\mathbf{p}^{+}\mathbb{G}_{22}\mathbf{p} + \mathbf{J}^{+}\mathbb{G}_{12}\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{J}^{+}\mathbb{G}_{11}\mathbf{J}$$

в блочном виде

$$H = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{J}^{+} & \mathbf{p}^{+}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{G}_{11} & \mathbb{G}_{12}\\ \mathbb{G}_{12}^{+} & \mathbb{G}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{J}^{+} & \mathbf{p}^{+}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix},$$

где

$$\mathbb{B} = \begin{bmatrix}\mathbb{I} & \mathbb{A}\\ \mathbb{A}^{+} & \mathbb{a}\end{bmatrix}.$$

В результате дифференцирования гамильтониана по блочному вектору $\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}$ получим блочный вектор производных $\begin{bmatrix}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{J}}\\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}\end{bmatrix}$:

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{J}}\\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}\end{bmatrix} = \mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Для ясности перепишем это соотношение покомпонентно

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{J}} = \mathbb{G}_{11}\mathbf{J} + \mathbb{G}_{12}\mathbf{p}$$
$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbb{G}_{12}^{+}\mathbf{J} + \mathbb{G}_{22}\mathbf{p}.$$

Напомним, что производная обратной матрицы $\frac{d}{d\mathbf{q}}\mathbb{M}^{-1}(\mathbf{q})$ связана с производной $\frac{d}{d\mathbf{q}}\mathbb{M}(\mathbf{q})$ следующим соотношением

$$\frac{d}{d\mathbf{q}}\mathbb{M}^{-1}(\mathbf{q}) = -\mathbb{M}^{-1}(\mathbf{q})\left[\frac{d}{d\mathbf{q}}\mathbb{M}(\mathbf{q})\right]\mathbb{M}^{-1}(\mathbf{q}).$$

Воспользуемся этим соотношением при дифференцировании гамильтониана в блочном виде по вектору обобщенных координат $\mathbf{q}$.

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{J}^{+} & \mathbf{p}^{+}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\frac{\partial \mathbb{B}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}$$

Рассмотрим, как будут выглядеть уравнения для производных, если переписать гамильтониан при помощи Эйлеровых углов $\mathbf{\Omega_e}$ и импульсов $\mathbf{p_e}$. Блочный вектор $\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}$ связан с блочным вектором $\begin{bmatrix}\mathbf{J}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}$ следующей матрицей

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

Подставим это соотношение в гамильтониан

$$H = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}^+ & \mathbf{p}^+\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{W}^+ & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{G}_{11} & \mathbb{G}_{12}\\ \mathbb{G}_{12}^+ & \mathbb{G}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Продифференцируем гамильтониан по блочному вектору $\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}$:

$$\begin{bmatrix}\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}}\\ \dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbb{W}^+ & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{G}_{11} & \mathbb{G}_{12}\\ \mathbb{G}_{12}^+ & \mathbb{G}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Производная гамильтониана по вектору обобщенных координат $\mathbf{q}$ также получается простой

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}^+ & \mathbf{p}^+\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{W}^+ & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\frac{\partial \mathbb{B}}{\partial \mathbf{q}}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Так как от углов Эйлера $\mathbf{\Omega_e}$ зависит только матрица $\mathbb{W}$, то производная по ним представляет собой сумму двух слагаемых:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}^+ & \mathbf{p}^+\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial \mathbb{W}^+}{\partial \mathbf{\Omega_e}} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{0}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix} +$$

$$+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}^+ & \mathbf{p}^+\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{0}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial \mathbb{W}}{\partial \mathbf{\Omega_e}} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Легко заметить, что слагаемые переходят друг друга при транспонировании, а т.к. они являются скалярами, то они равны. Следовательно, выражение для этой производной сводится к удвоенному слагаемому

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} = \begin{bmatrix}\mathbf{p_e}^+ & \mathbf{p}^+\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial \mathbb{W}^+}{\partial \mathbf{\Omega_e}} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{0}\end{bmatrix}\mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbb{W} & \mathbb{0}\\ \mathbb{0} & \mathbb{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p_e}\\ \mathbf{p}\end{bmatrix}.$$

Последняя производная не представляется в той же степени в матричном виде, как остальные производные. Двигаясь по компонентам вектора $\mathbf{\Omega_e}$ мы будем получать разные производные $\dfrac{\partial \mathbb{W}}{\partial \mathbf{\Omega_e}}$, которые являются матрицами, и после подстановки их в квадратичную форму будем получать число. То есть, для того, чтобы получить три производные по Эйлеровым углам в рамках одного вычисления, необходимо составить трехмерный тензор $\dfrac{\partial \mathbb{W}}{\partial \mathbf{\Omega_e}}$ и осуществить свертку по двум индексам в ходе вычисления по формуле выше. (С вычислительной точки зрения это не даст никаких преимуществ, потому что операции с матрицами в специализированных библиотеках оптимизированы намного лучше чем операции с тензорами.) Если раскрыть это матричное произведение используя индивидуальные матрицы, то выражение существенно упрощается

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} = \mathbf{p_e}^{+} \frac{\partial \mathbb{W}^{+}}{\partial \mathbf{\Omega_e}} \left(\mathbb{G}_{11} \mathbb{W} \mathbf{p_e} + \mathbb{G}_{12} \mathbf{p} \right).$$

Заметим, что выражение в скобках может быть выражено через производную $\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}}$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}} = \mathbb{W}^{+} \left(\mathbb{G}_{11} \mathbb{W} \mathbf{p_e} + \mathbb{G}_{12} \mathbf{p} \right) \quad \Longrightarrow \quad \mathbb{V} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}} = \mathbb{G}_{11} \mathbb{W} \mathbf{p_e} + \mathbb{G}_{12} \mathbf{p},$$

где

$$\mathbb{V} = \left(\mathbb{W}^{+} \right)^{-1} = \begin{bmatrix} \sin\theta \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ \sin\theta \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \cos\theta & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Таким образом, производные гамильтониана по Эйлеровым углам могут быть найдены через производные по Эйлеровым импульсам по следующим соотношениям

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{\Omega_e}} = \mathbf{p_e}^{+} \frac{\partial \mathbb{W}^{+}}{\partial \mathbf{\Omega_e}} \mathbb{V} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p_e}}.$$