# 内坐标转变为直角坐标

在Geometry名称空间中，设立一个BaseInternalCoordinate类。在构造函数的参数中包含zMatrix。

## 问题描述：



图1 直角坐标系

分两步，第一步，先来定义一个右手坐标系。

内坐标前三行的三个原子，定义了一个平面。我们这里定义了*xz*平面，如图1所示。我们约定采用右手坐标系（图1中y轴指向平面以里）；我们约定旋转为逆时针旋转（站在坐标轴的正方向，面向负方向）。

具体操作如下：

先定义*z*轴。把原子0的坐标设定为（0，0，0），原子1和原子0的距离是，我们把原子0到原子1设为*z*轴。这样，原子1的坐标是（0，0，）。我们把坐标写成一个列矩阵，则有：



再定义*xz*平面。我们把原子2放在*x*轴的正方向，就定义了*xz*平面。原子2的坐标是（，0，）。



图1中没有显示的另一种情况是，如果原子2和原子0相连，则有



这种情况做类似的推导即可，我们这里对这种情况不再赘述。

第二步，把原子3放在这个已经定义的坐标系下，求出坐标。



图2 原子3的内坐标描述

已知，原子3的内坐标描述是（键长，键角，二面角），即（，，）。求，在已经定义的基础坐标系下，原子3笛卡尔坐标（*x*3，*y*3，*z*3）。

图2a描述了基础坐标系，我们称为世界0；图2b描述了另一个坐标系，我们在这里称呼它为世界1；图2c描述了另一个坐标系，我们在这里称呼它为世界2。

在世界0中，原子0的坐标（0，0，0），原子1的坐标（0，0，），原子2的坐标是（，0，）。原子3待求解。

在世界1中，原子0的坐标（0，0，），原子1的坐标（0，0，0），原子2的坐标（，0，）。原子3待求解。

在世界2中，原子0的坐标（，0，），原子1的坐标0，0，），原子2的坐标（0，0，0）。原子3待求解。

## 数学概念

为了对所有编号的原子给出一个统一的表述，我们这里要引入一些数学概念。

齐次坐标：为了同时描述旋转和平移，我们引入齐次坐标(x,y,z,w), 来表示3维向量空间中的一个点。这里w=1时，表示该向量是3维空间中的一个位置；w=0时，表示该向量是3维空间中的一个方向。

变换矩阵：我们会使用4X4矩阵与齐次坐标(x,y,z,w)相乘，进行坐标变换。



几种简单的变换矩阵：

平移矩阵

缩放矩阵

围绕X轴的旋转矩阵。当θ=90°时，Y轴将重构为Z轴，Z轴将重构为-Y轴。

围绕Y轴的旋转矩阵: 

围绕Z轴的旋转矩阵: 

通过将矩阵一个接一个地相乘，将几个变换连接在一起。其结果将是一个包含了所有变换的单一矩阵。

## 解题：

在基础坐标系（世界0）中，我们定义原子0的坐标是（0，0，0）。在世界1中，我们定义原子1的坐标是（0，0，0）。那么，在基础坐标系（世界0）中，原子1的坐标是多少呢？可以通过一个平移变换，让世界0和世界1完全重合，如下：



式中下角标表示世界的标号。

把世界1的原子1（0，0，0）代入上式，得到基础坐标系（世界0）中， 原子1的坐标是（0，0，）。

在世界1中，我们定义原子1的坐标是（0，0，0）。在世界2中，我们定义原子2的坐标是（0，0，0）。那么，在世界1中，原子2的坐标是多少呢？可以通过一个平移变换加上一个旋转变换，让世界1和世界2完全重合，如下：



这里需要注意的是，平移变换和旋转变换有先后次序，不能更换。也对应了矩阵相乘不一定符合交换律。

把世界1的原子1（0，0，0）代入上式，得到世界1中， 原子2的坐标是（，0，）。

把式（5）代入式（4），有



式（6）表达了基础坐标系（世界0），变换到世界2的变换。

如果原子2在世界2的坐标是（0，0，0），那么，在基础坐标系下（世界0）的坐标为（，0，）。

这里附加一种特殊情况，如图3所示。



图3 一种特殊情况



在世界2中，我们定义原子2的坐标是（0，0，0）。在世界3中，我们定义原子3的坐标是（0，0，0）。那么，在世界2中，原子3的坐标是多少呢？可以通过一个平移变换加两个旋转变换，让世界2和世界3完全重合，如下：



如果我们按照0、1、2、3……n这样的顺序做成一个原子链，那么，



我们用此式，可以设定世界n中的原子n坐标是（0，0，0），那么，也就知道原子n在基础坐标系（世界0）中的坐标为：



这个过程非常高效，但是，它需要顶点连续性假设。也就是说设定内坐标时，必须严格按顺序进行。