四元数と三次元座標変換

@phykm

2017 年 4 月 7 日

概要

四元数が、三次元座標変換に「使える」とはどういう意味かという話。

1　概要

次の事実が基本的である。

- $SU(2)$ は $SO(3)$ の二重被覆、特に全射準同型がある。
- これらのリー代数には「$SO(3)$ 上その軸での回転生成子」という有用な解釈がある。
- $\mathbb{H}$ に適当なノルムを定義すると、この単位球は $SU(2)$ に積について同型。
- $\mathfrak{su}(2)$ から $SU(2)$ への全射指数写像を $\mathbb{H}$ に移すと、非常に単純な式になる。

$SO(3)$ の行列要素を直接要求されるということはあまりなく、それらへの注文は大抵「ある軸 $\boldsymbol{v}$ についての θ 回転」またはその組み合わせといった形で現れる。ところが、こうした要素を一般的に $SO(3)$ そのままの形で格納しようとすると複雑になるのでこれは採りたくない (x, y, z 軸ではなく一般の軸での回転行列を想像してみよう)。ところで、「ある軸まわりの回転」であれば、その軸に相当するリー代数からの指数写像で作ることができる。しかし、$SO(3)$ は単連結ではないので、その二重被覆 $SU(2)$ でこれを計算してから、この準同型で $SO(3)$ に写像する。$SU(2)$ は $\mathbb{H}$ のノルム球に積と群演算について同型になり、しかも $\mathfrak{su}(2)$ の指数写像の像は、かなり簡単に計算することができる。そこで、「ある軸 $\boldsymbol{v}$ についての θ 回転」に相当する $SO(3)$ 要素を $\mathbb{H}$ 単位球の要素で格納しておく、という戦略が成り立つ。もちろん、この要素にかぎらず任意の回転を $\mathbb{H}$ の元として格納できるが、「ある軸まわりの回転」は特に $\mathfrak{su}(2)$ からの指数写像の像として、具体的な $\mathbb{H}$ での値を書き下すことができる。

2　登場人物

Definition 2.1. 以下で扱うリー群、リー代数、四元数を定義する。

- 3 次元回転群を $SO(3) = \{R \in GL(\mathbb{R}, 3) | RR^T = 1, \mathrm{det}R = 1\}$ とする。これは 3 次元リー群である。[*1]
- 2 次元ユニタリー群を $SU(2) = \{U \in GL(\mathbb{C}, 2) | UU^\dagger = 1, \mathrm{det}U = 1\}$ とする。これは 3 次元リー群で

[*1] リー群とは、ハウスドルフ位相群かつ、多様体であり、群演算全てが可微分写像であるようなものとする。本稿ではこれについて一般的な話はしないが、幾つかの概念は引用する。

ある。

- 4 要素 $\{e_0, e_1, e_2, e_3\}$ で自由生成される $\mathbb{R}$ 上線形空間に次の積を入れて $\mathbb{R}module$ 構造を忘却した環を四元数 $\mathbb{H}$ とする。

$$(\sum_{i=0}^{3} v^i e_i)(\sum_{j=0}^{3} w^j e_j) = (v^0 w^0 - \sum_{i=1}^{3} v^i w^i)e_0 + \epsilon_{ijk} v^i w^j e_k \tag{1}$$

ただし、ϵ_{ijk} は $ijk : 1, 2, 3$ について完全反対称なテンソル成分で $\epsilon_{123} = 1$ とする。

- $SO(3)$ のリー代数は原点 1 まわりの条件式の微分によって $\mathfrak{so}(3) = \{A \in M(\mathbb{R}, 3) | A + A^T = 0\}$ であるが、次をその基底とする。[*2]

$$L_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

$$L_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3}$$

$$L_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{4}$$

この意味は、それぞれ選択された軸に対して、のこりの軸の巡回順方向に回すような回転生成子である。パラメータ θ でこの指数写像 $\exp(\theta X_i)$ を作ると、これは i 軸の角度 θ 回転に相当する。このリー代数について構造定数は次のようになる。

$$[L_i, L_j] = \epsilon_{ijk} L_k \tag{5}$$

- 同様の計算で $SU(2)$ のリー代数 $\mathfrak{su}(2) = \{B \in M(\mathbb{C}, 2) | B + B^\dagger = 0, \mathrm{Tr}B = 0\}$ であるが、次をその基底とする。

$$S_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$S_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$S_3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} \tag{8}$$

実質スピン行列の $-i$ 倍である。物理ではユニタリ変換生成子を物理量に関連付けることがある *(Stone 定理)* が、これをエルミートにするために、そのリー代数としての構造定数が *(*実リー代数であっても*)* 虚数になってしまうにもかかわらず、虚数単位 i を乗ずる習慣がある。ここではリー代数に戻るために

[*2] リー代数とは、リー群の群演算微分写像に関する左不変ベクトル場に、リー括弧積 $[-,-]$ を入れた物を本義とする。左不変性によって、実質これは群単位元近傍だけで計算することができる。しかしそれにしても、行列を (単位元を通るようにしたパラメータで) 微分するという演算で行列群のリー代数が計算できるというのは飛躍があると思われるだろう。それについては、次のように考えることができる。行列群を、その成分を取り出すことで一般線形群 $GL(\mathbb{R}, n), GL(\mathbb{C}, n)$ へ可微分群準同型に写像できる。この写像は明らかに単射であり、フルランクである。行列群の行列成分それ自体を微分するということは、この可微分埋め込みを微分することにほかならない。それはフルランク準同型であるから元の行列群の構造は損なわれないし、リー括弧積 $[-,-]$ は微分写像をその準同型に持つので、リー代数としての構造もまた保たれる。よって、単に行列を単位元近傍で微分するだけで、元のリー群のリー代数の、$\mathfrak{gl}(n)$ での成分表示を得ることになる。各行列群を定義する制約下から、このようなベクトルを次元の数だけ見つければ、実質的にリー代数を得たことになる。

$-i$ で相殺している。この基底ベクトルの選択および係数は、$SO(3)$ への準同型について、先の $\mathfrak{so}(3)$ に対応するように選ばれている。構造定数はふたたび次である。

$$[S_i, S_j] = \epsilon_{ijk} S_k \tag{9}$$

- $\mathbb{H}$ 上、共役演算 $(-)^* : \mathbb{H} \to \mathbb{H}$ を $(v^0 e_0 \sum_{i=1}^3 v^i e_i)^* = v^0 e_0 - \sum_{i=1}^3 v^i e_i$ とする。これは $\mathbb{H}$ の乗法について次を満たす。

$$(vw)^* = w^* v^* \tag{10}$$

この時、$\mathbb{H}$ 上のノルム $|-|$ を

$$vv^* = |v|^2 e_0 \tag{11}$$

であるように定める。これは実質 $|v^i e_i| = \sum_i (v^i)^2$ と同じである。このとき、ノルムは乗法的

$$|vw|^2 e_0 = vww^* v^* = v|w|^2 e_0 v^* = |v|^2 |w|^2 e_0 \tag{12}$$

であるので、特に $\mathbb{H}^\times = \{v \in \mathbb{H} | |v| = 1\}$ は群になる。これを四元数の単位球とする。$\mathbb{R}^4$ からの誘導位相に関してこれは S^3 に位相同型な位相群、特にリー群でもある。

3 基本的事実と証明

Proposition 3.1. $SU(2)$ の随伴表現[*3]は、$\mathfrak{su}(2)$ の行列についてのヒルベルトシュミット内積について等長であり、かつ $\{S_i\}_i$ はこの内積に関して正規直交基底である。

Proof. $SU(2)$ 随伴表現は $Ad(g)(A) = gAg^{-1}$ であるが、$\mathfrak{su}(2)$ に、行列のヒルベルトシュミット内積

$$\langle A, B \rangle = \mathrm{Tr} A^\dagger B \tag{13}$$

を入れると、$SU(2)$ 随伴表現の作用は、共役なユニタリー行列を左右からかけるものであり、トレースの巡回性から明らかに等長である。$\{S_i\}_i$ が正規直交であることは単純計算による。 □

Proposition 3.2. $SU(2)$ 随伴表現を媒介して、準同型 $C : SU(2) \to SO(3)$ がある。このとき、この微分によるリー代数の準同型 $dC : \mathfrak{su}(2) \to \mathfrak{so}(3)$ で先に定義した基底 $\{L_i\}_i, \{S_i\}_i$ が対応する。

Proof. ベクトル空間の同型 $\phi : \mathfrak{su}(2) \simeq \mathbb{R}^3$ を

$$a^i S_i \mapsto (a^i)_i \tag{14}$$

[*3] 随伴表現とは、リー群の、そのリー代数上での表現で、左右微分写像を介して行われるそれである。つまり G の随伴表現とは、線形空間としてそのリー代数 $\mathfrak{g}$ をとり、その作用は $Ad : g \mapsto A \in \mathfrak{g} \mapsto dL_g dR_{g^{-1}} A$ である。ここで L_g は g の左作用、R_g は g の右作用、d はその微分写像であることを意味する。この計算は行列群においては、群の要素でリー代数を挟むことによって計算できるのだが、再びそれが何故であるか気になるはずである。それは次のように考える。行列それ自体を微分することは、$GL(-, n)$ への埋め込みを微分していることに等しいことを先の注でみた。従って、(大雑把には) 各種の演算を行列表示のまま行ってもよい。リー代数の元 A がリー群 G 上、$C(0) = 1$ であるような可微分曲線 $C(t)$ の微分係数だとしよう。この $g \in G$ による左移動は $gC(t)$、右移動は $C(t)g$ したがって、$Ad(g)(A) = \frac{d}{dt} gC(t)g^{-1} = gAg^{-1}$ である。

で定義する。$C(g) = \phi \circ Ad(g) \circ \phi^{-1}$ で定義すれば、前命題より $C(g) \in SO(3)$ であり、また明らかに準同型である。$g(t)$ を $SU(2)$ 上原点を通る可微分曲線として、$g(t)$ はユニタリーであるから、$\frac{d}{dt}g(t) + \frac{d}{dt}g(t)^\dagger = 0$

$$\frac{d}{dt}Ad(g(t))(a^i S_i) = \frac{d}{dt}g(t)a^i S_i + a^i S_i \frac{d}{dt}g(t)^\dagger \tag{15}$$

$$= [\frac{d}{dt}g(t), a^i S_i] \tag{16}$$

$\frac{d}{dt}g(t)$ に $\mathfrak{su}(2)$ の元を入れて ϕ で変換すれば、これが dC である。

$$\phi^{-1} \circ dC \circ \phi(a^i S_i)(b^j S_j) = [a^i S_i, b^j S_j] = \epsilon_{ijk} a^i b^j S_k \tag{17}$$

従って単純な対照で $dC(S_i) = L_i$ である。 □

Theorem 3.3. $C : SU(2) \to SO(3)$ は全射であり、その ker は ± 1 である。

Proof. 任意の $R \in SO(3)$ を C の像として構成できることを示す。R は線形変換であるから、$\mathbb{R}^3$ の基底 $v_1 = (1,0,0), v_2 = (0,1,0), v_3 = (0,0,1)$ への作用だけで特徴付けられる。以下 L_1, L_2, L_3 で生成されるそれぞれの軸での回転部分群を $R_1(\theta), R_2(\theta), R_3(\theta)$ とする。どのような R も $R_1(-), R_2(-), R_3(-)$ の適当な組み合わせで表現（あるいは同じことだが相殺）でき、かつ $R_i(-)$ は C の像であることを示す。Rv_3 と v_3 のなす各を θ とする。$\theta = 0$ であれば、適当な $R_3(-)$ によって R が書ける。$\theta = \pi$ であれば $R_1(\pi)$ を作用することで $\theta = 0$ のときに帰着する。$\theta \neq 0, \pi$ とする。まず、$R_3(\alpha)Rv_3 = (a, 0, b)$ となるような $R_3(\alpha)$ を定める。次に $R_2(\beta)R_3(\alpha)Rv_3 = (0,0,1)$ となるような $R_2(\beta)$ を定める。このとき、$R_2(\beta)R_3(\alpha)Rv_1, R_2(\beta)R_3(\alpha)Rv_2$ は x, y 平面上にいるので、$R_3(\gamma)R_2(\beta)R_3(\alpha)Rv_1 = v_1, R_3(\gamma)R_2(\beta)R_3(\alpha)Rv_2 = v_2$ となるような $R_3(\gamma)$ を定められる。このとき、$R = R_3(-\alpha)R_2(-\beta)R_3(-\gamma)$ である。

$R_i(-)$ が C の像であることを言う。指数写像 $\exp(tS_i)$ は、今行列群であることから、$t \in \mathbb{R}$ の全域で定義され、それは実際に $SU(2)$ へ写像される。この時、$C(\exp(tS_i)) = R_i(t)$ である。

最後に $\ker C = \{\pm 1\}$ を示す。$g \in SU(2)$ を

$$g = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{18}$$

とおくと、ユニタリ性から、$|a|^2 + |b|^2 = 1, |c|^2 + |d|^2 = 1$ である。$Ad(g)(S_3) = S_3$ を課すと、$|a|^2 - |b|^2 = 1, |c|^2 - |d|^2 = -1$ が得られるため、$b = c = 0$ である。$\det g = 1$ であるから、$ad = 1$ である。さらに $Ad(g)(S_1) = S_1$ を課すと、$ad^* = a^* d = 1$ であるので、$a, d : \pm 1$ であり、ありえるのは $g = \pm 1$ である。実際この二つの随伴表現は恒等である。 □

Theorem 3.4. $\mathfrak{su}(2)$ における $v^i S_i$ の指数写像の C の像 $C(\exp(v^i S_i))$ は、$v = (v^1, v^2, v^3)$ 軸周りの角度 $|v|$ 回転である。

Proof. $g \in SU(2)$ について、$g \exp(v^i S_i) g^{-1} = \exp(g(v_i S_i) g^{-1}) = \exp(v^i Ad(g)(S_i)) = \exp((C(g)v)^i S_i)$ である。ここで、$v_3 = (0,0,1)$ として、$R_3(\beta)R_2(\alpha)|v|v_3 = v$ なるようにとっておけば、v 軸回りの角度 $|v|$ 回

転とは、$R_3(\beta)R_2(\alpha)R_3(|v|)R_2(-\alpha)R_3(-\beta)$ のことである。$R_i(t) = C(\exp(tS_i))$ なのだから、

$$
\begin{aligned}
&R_3(\beta)R_2(\alpha)R_3(|v|)R_2(-\alpha)R_3(-\beta) && (19)\\
&= C(\exp(\beta S_3)\exp(\alpha S_2)\exp(|v|S_3)\exp(-\beta S_2)\exp(\alpha S_3)) && (20)\\
&= C(\exp((C(\exp(\beta S_3))C(\exp(\alpha S_2))|v|v_3)^i S_i)) && (21)\\
&= C(\exp((R_3(\beta)R_2(\alpha)|v|v_3)^i S_i)) && (22)\\
&= C(\exp(v^i S_i)) && (23)
\end{aligned}
$$

となる。 □

Theorem 3.5. 位相空間として $\mathbb{H}^\times \simeq SU(2) \simeq S^3$ さらに、リー群として $\mathbb{H}^\times \simeq SU(2)$

Proof. $\mathbb{H}^\times$ のノルム制約は明らかに S^3 を構成するので $\mathbb{H}^\times \simeq S^3$ は明らかである。$SU(2)$ は $\det = 1$ 条件とユニタリー性から、次のように書ける。

$$
g = \begin{bmatrix} \alpha & \beta^* \\ -\beta & \alpha^* \end{bmatrix} \text{s.t } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{24}
$$

これは α, β の成分を考えれば同様に S^3 を定める。この表示を用いると、$SU(2)$ は、実は $\mathfrak{su}(2)$ 基底ベクトルおよび単位行列を用いて

$$
g = x^0 1 + x^1 S_1 + x_2 S_2 + x_3 S_3 \ \text{ s.t } \sum_i (x^i)^2 = 1 \tag{25}
$$

と書けることがわかる。さらに、$1, S_1, S_2, S_3$ は $\mathbb{H}$ 生成元の e_0, e_1, e_2, e_3 と同じ乗法則をもつ。したがって、次はリー群の同型である。

$$
F : SU(2) \to \mathbb{H}^\times \tag{26}
$$

$$
x^0 1 + \sum_{i=1}^{3} x^i S_i \mapsto x^0 e_0 + \sum_{i=1}^{3} x^i e_i \tag{27}
$$

□

Theorem 3.6. $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{H}^\times$ を

$$
f(v) = \cos|v| + \sin|v| \sum_{i=1}^{3} v^i S_i \tag{28}
$$

で定めると、$(C \circ F^{-1} \circ f)(v) \in SO(3)$ は v 軸回りの $|v|$ 回転である。

Proof. $(v^i S_i)^2 = |v|^2$ であることを用いると、

$$
\exp(v^i S_i) = \cos|v| + \sin|v| \sum_{i=1}^{3} \frac{v^i}{|v|} S_i \tag{29}
$$

であることが示せる。左辺は C で写像したとき v 周りの $|v|$ 回転の意味を持っていたのでこれで題意である。 □

4　ありがたみについて

最終的なステートメントはつぎのようになる。

- $\mathbb{H}^\times$ が $SU(2)$ と同型であり、かつその成分を $\cos|v|, \sin|v|(v^i/|v|)$ とみなすことによって、それは $SO(3)$ では v 周り $|v|$ 回転であるとみなすことができる。
- 「v 周り $|v|$ 回転」という用法に限れば、少ない成分で $SO(3)$ の便利な要素を表現でき、かつ合成する場合の群演算も四元数のままで計算できる。
- その代わり実際の作用は少し複雑になる。$SO(3)$ 作用の行列計算の代わりに、$SU(2)$ 随伴表現を計算しなくてはならない。$\{S_i\}_i$ がヒルベルトシュミット内積について直交基底であることから、具体的には次のような公式が成り立つ。$h \in \mathbb{H}^\times, R = (C \circ F^{-1})(h) \in SO(3)$ であるとき、

$$R^i_j = \mathrm{Tr} S_i^\dagger F^{-1}(h) S_j F^{-1}(h^*) \tag{30}$$