

クォータニオンによる座標変換

2005.07.18 Y.S.Kim

<http://www.purose.net/~y.kim/>

クォータニオン $q = w + xi + yj + zk$ による座標変換について、少しだけ触れようと思います。ここで w, x, y, z は実数であり、 i, j, k は虚数単位として

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1$$

$$ij = -ji = k$$

$$jk = -kj = i$$

$$ki = -ik = j$$

という性質を持ちます。 $ijkijk\dots$ と並べて隣り合う虚数単位同士の積を考えると、ある虚数単位とその右隣の虚数単位の積が、さらに右隣の虚数単位になっていることがわかります。逆にある虚数単位とその左隣の虚数単位の積は、さらに左隣の虚数単位になりますが、符号が反転します。

クォータニオン同士の積を、次のように定義します。 $q_1 = w_1 + x_1i + y_1j + z_1k$, $q_2 = w_2 + x_2i + y_2j + z_2k$ とおくと、

$$\begin{aligned} q_1q_2 &= (w_1 + x_1i + y_1j + z_1k)(w_2 + x_2i + y_2j + z_2k) = \\ &= (w_1w_2 + x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2) + \{(w_1x_2 + w_2x_1 + y_1z_2 - y_2z_1)i \\ &+ (w_1y_2 + w_2y_1 + z_1x_2 - z_2x_1)j + (w_1z_2 + w_2z_1 + x_1y_2 - x_2y_1)k\} \end{aligned}$$

実数の場合の $(a + b + c + d)(e + f + g + h)$ の計算同様に括弧を開いた形になります。ところで、これをクォータニオン $q = w + xi + yj + zk$ を実数 w とベクトル $\mathbf{V} = (x, y, z)$ を用いて、 $q = (w, \mathbf{V})$ と表現すると、クォータニオン同士の積は、 $q_1 = (w_1, \mathbf{V}_1), q_2 = (w_2, \mathbf{V}_2)$ とおいた場合、

$$\begin{aligned} q_1q_2 &= (w_1, \mathbf{V}_1)(w_2, \mathbf{V}_2) \\ &= (w_1w_2 - \mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2, w_1\mathbf{V}_2 + w_2\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) \end{aligned}$$

と表す事ができます。先ほどと同じく括弧を開いた形となりますが、ベクトル部分同士の積については、虚数単位同士の積がベクトルの外積と良く似た性質を持つが、同じ虚数単位同士の積だけは外積と違って 0 にならずに -1 となり、その結果実数部分に $-\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2$ が出てくる事だけ注意すれば、ややこしい式に見えますが、導出は容易でしょう。また、この式からわかるように

$$q_1q_2 \neq q_2q_1$$

であり、クォータニオン同士の積は可換ではありません。

クォータニオン同士の加減算は、ベクトル同様成分同士の加減算となります。

$$q_1 \pm q_2 = (w_1 \pm w_2, \mathbf{V}_1 \pm \mathbf{V}_2)$$

ところで、複素数 $a + bi$ ($i^2 = -1$) において、共役複素数 $a - bi$ との積を取ると、その結果は $a^2 + b^2$ となり、これが複素平面上での原点から (a, b) までの距離になり、これをもって複素数 $a + bi$ の大きさとするのは良く知られていることですが、クォータニオンでも同様に、 $q = (w, \mathbf{V})$ に対して $\bar{q} = (w, -\mathbf{V})$ とすると、

$$q\bar{q} = w^2 + |\mathbf{V}|^2 - w\mathbf{V} + w\mathbf{V} - \mathbf{V} \times \mathbf{V} = w^2 + |\mathbf{V}|^2$$

となるので、クォータニオンの大きさ $|q|$ も同様に、

$$|q|^2 = q\bar{q} = w^2 + \mathbf{V}^2$$

と定義します。すなわち、

$$q \cdot \frac{\bar{q}}{|q|^2} = \frac{\bar{q}}{|q|^2} q = 1$$

となるので、逆クォータニオン q^{-1} を

$$q^{-1} = \frac{\bar{q}}{|q|^2}$$

と定義すると、

$$qq^{-1} = q^{-1}q = 1$$

となることがわかります。

ところで、複素数 $a + bi$ に虚数単位 i を掛けると

$$(a + bi)i = -b + ai$$

となり、複素数平面上の点 (a, b) が 90 度回転する事が知られています。では、クォータニオンの場合には、虚数単位を掛けるとどうなるのでしょうか。

まずは、 $q = w + xi + yj + zk$ に i を掛けてみます。当然

$$qi \neq iq$$

なので、両方考えてみると

$$qi = wi + zj - yk - x$$

$$iq = wi - zj + yk - x$$

となります。そこで、 $q_1 = w_1 + x_1i + y_1j + z_1k$, $q_2 = w_2 + x_2i + y_2j + z_2k$ とおいて $q_1 = qi$, $q_2 = iq$ とおくと、

$$\begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_2 & y_2 & z_2 & w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

と行列表記することができます。これを見ると、符号がいくつか変化しつつ、4つの要素のうち2つが入れ替わっているのがわかります。元の座標のひとつが消失し、4つ目の要素が出てきているので、3次元空間における変換には使いづらいでしょう。そこで、どちらから掛けても同じ成分が入れ替わっている性質に注目し、 iqi を計算してみると

$$iqi = i(qi) = iq_1 = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

即ち、

$$iqi = \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と表す事ができます。 (x, y, z) だけ取り出して 3 次元座標として用いるならば、これは x 成分を反転、すなわち yz 平面に関して対称な像に移る変換となります。が、これは回転によって実現できる変換ではないことが容易に想像できます。

そもそも、行列による座標変換を考えてみると、たとえば $\mathbf{r}(x, y, z)$ は、基底ベクトル $\mathbf{i} = (1, 0, 0), \mathbf{j} = (0, 1, 0), \mathbf{k} = (0, 0, 1)$ を用いて

$$\mathbf{r}(x, y, z) = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$$

と表すことができますが、変換によって基底ベクトルがそれぞれ $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$ に変化し、その結果 \mathbf{r} が $\mathbf{r}'(x', y', z')$ に変化したとすると

$$\begin{aligned} \mathbf{i}' &= (i_x, i_y, i_z) \\ \mathbf{j}' &= (j_x, j_y, j_z) \\ \mathbf{k}' &= (k_x, k_y, k_z) \end{aligned}$$

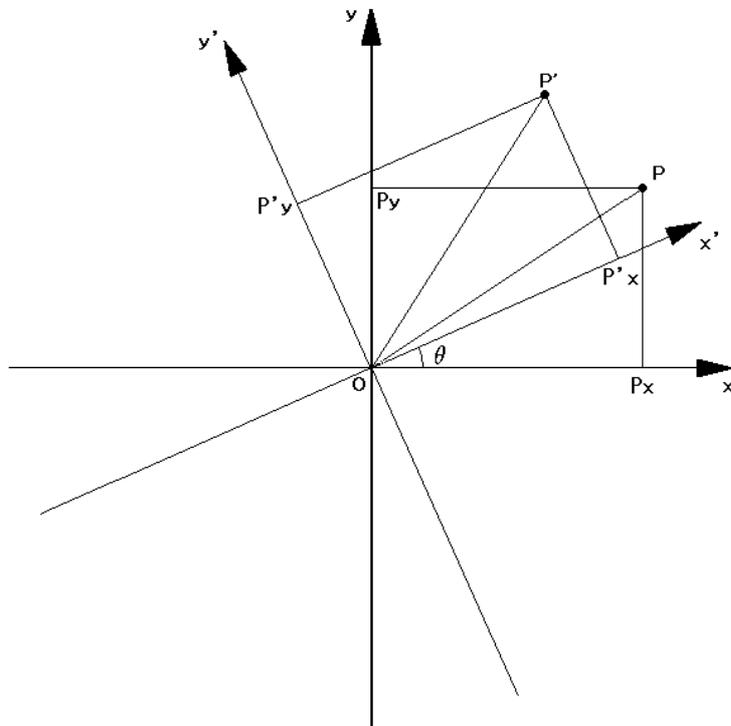
とおくと、

$$\begin{aligned} x\mathbf{i}' + y\mathbf{j}' + z\mathbf{k}' &= (xi_x + yj_x + zk_x, xi_y + yj_y + zk_y, xi_z + yj_z + zk_z) \\ &= \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i_x & i_y & i_z \\ j_x & j_y & j_z \\ k_x & k_y & k_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と表す事ができます。つまり、座標変換に用いる行列は、変化した単位ベクトルの成分を並べたものであるということがわかります。たとえば 2 次元 xy 平面における回転の式

$$\begin{pmatrix} x' & y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

においては、 x 軸方向の基底ベクトル $(1, 0)$ が $(\cos \theta, \sin \theta)$ に、 y 軸方向の基底ベクトル $(0, 1)$ が $(-\sin \theta, \cos \theta)$ になっていることが容易にわかるでしょう。



上図において、 x, y 軸方向の基底ベクトルをそれぞれ $i = (1, 0), j = (0, 1)$ とすると、点 P への位置ベクトル P は

$$P = xi + yj$$

と表すことができます。ただし、 $x = |P_x|, y = |P_y|$ です。そして $\angle P'_x O P_x = \theta$ として、 $P' = x'i' + y'j'$ とすると、回転の性質から $|i'| = |j'| = 1$ および図の位置関係により、 x', y' 軸方向の基底ベクトルはそれぞれ $i' = (\cos \theta, \sin \theta), j' = (-\sin \theta, \cos \theta)$ となりますので、

$$P'(x', y') = x \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

従って、

$$\begin{pmatrix} x' & y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

と書くことができます。この場合は回転変換であるので基底ベクトルの大きさや位置関係が不変ですが、それにこだわらず i', j' を任意に操作すれば、拡大縮小やせん断などの変換も可能です。3次元座標系においても同様です。

それを踏まえると、3次元座標系における座標変換の行列

$$\begin{pmatrix} i_x & i_y & i_z \\ j_x & j_y & j_z \\ k_x & k_y & k_z \end{pmatrix}$$

が回転を表す為の条件は、

- それぞれの基底ベクトルの長さが1のまま不変であること
- それぞれの基底ベクトルのなす角度が不変であること

となります。即ち、

$$|\mathbf{i}| = |\mathbf{j}| = 1$$

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = 0$$

$$\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$$

とまとめることができます。そこでさきほどの i_{ij} の行列表記をもう一度見てみると

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

であり、 x, y, z 成分についての変換だけ見ると、上の2つの条件は満たしているのですが、 $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = -\mathbf{k}$ となってしまうようです。ところが、これがもし $-i_{ij}$ だったとすると

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となり、 $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$ となってくれることがわかります。例によって x, y, z 成分だけ取り出すと、これは x 軸を中心に180度回転させる変換であることがわかります。 $-j_{ij}, -k_{ij}$ も同様に、それぞれ y 軸、 z 軸中心の180度回転となります。

では一般のクォータニオン q の場合はどうでしょうか。 $p = xi + yj + zk$ と
して、 $p' = -qpq$ の大きさが変化しないかどうか、まず確認してみましょう。

$$q\bar{q} = |q|^2$$

$$\overline{(q_1q_2)} = \overline{q_2q_1}$$

を用いると、

$$|p'|^2 = qpq\overline{(qpq)} = qpq(\bar{q})(\bar{p})(\bar{q})$$

$$= |q|^2|p|^2|q|^2$$

となるので、 $|q| = 1$ ならクォータニオン p の長さは保たれます。しかし、実
数部分を計算すると、 $q = (w, \mathbf{V}), p = (0, \mathbf{r})$ とおくと、クォータニオン q の
実数部分を $Re(q)$ と表すことにすると、

$$Re(-qpq) = Re((w, \mathbf{V})(0, \mathbf{r})(w, \mathbf{V}))$$

$$= Re((- \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}, w\mathbf{r} + \mathbf{V} \times \mathbf{r})(w, \mathbf{V})) = -2w\mathbf{V} \cdot \mathbf{r}$$

より、必ずしも 0 のままではないので、結局ベクトル部分の長さは変化して
しまうことになります。

そこで $-i = i^{-1}$ であることに注目して再び計算してみると

$$|p'|^2 = qpq^{-1}\overline{(qpq^{-1})} = qpq^{-1}(\overline{q^{-1}})(\bar{p})(\bar{q})$$

$$= |q|^2|p|^2|q^{-1}|^2 = |p|^2$$

となり、 q の大きさによらず p の大きさは不変です。さらに、

$$Re(q) = \frac{q + \bar{q}}{2}$$

$$\overline{q^{-1}} = \frac{q}{|q|^2}$$

を用いて実数部分を計算すると、

$$2Re(p') = 2Re(qpq^{-1}) = qpq^{-1} + (\overline{q^{-1}})(\bar{p})(\bar{q})$$

$$= qpq^{-1} + q\bar{p}\frac{\bar{q}}{|q|^2} = q(p + \bar{p})q^{-1} = 2Re(p)$$

となり、実数部分も不変ですから、ベクトル部分の大きさも不変であること
がわかります。

そこでもう一押し、この変換が回転であることを示す為に、まず行列表記してみましょう。 qpq^{-1} においては、 q の大きさは相殺するので、最初から $|q| = 1$ でいいでしょう。 $q = \omega + \alpha i + \beta j + \gamma k, p = w + xi + yj + zk$ とおくと、

$$\begin{aligned}
 qp &= \omega p + \alpha ip + \beta jp + \gamma kp = \\
 \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} & \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
 & \left. + \begin{pmatrix} 0 & \gamma & 0 & 0 \\ -\gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega \end{pmatrix} \right\} \\
 &= \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega & \gamma & -\beta & -\alpha \\ -\gamma & \omega & \alpha & -\beta \\ \beta & -\alpha & \omega & -\gamma \\ \alpha & \beta & \gamma & \omega \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

となります。同様に pq^{-1} については

$$\begin{aligned}
 pq^{-1} &= -\alpha pi - \beta pj - \gamma pk + p\omega \\
 &= \begin{pmatrix} x & y & z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega & \gamma & -\beta & \alpha \\ -\gamma & \omega & \alpha & \beta \\ \beta & -\alpha & \omega & \gamma \\ -\alpha & -\beta & -\gamma & \omega \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

よって、 qpq^{-1} の行列表記次のようになります。

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} \omega & \gamma & -\beta & -\alpha \\ -\gamma & \omega & \alpha & -\beta \\ \beta & -\alpha & \omega & -\gamma \\ \alpha & \beta & \gamma & \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega & \gamma & -\beta & \alpha \\ -\gamma & \omega & \alpha & \beta \\ \beta & -\alpha & \omega & \gamma \\ -\alpha & -\beta & -\gamma & \omega \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 - 2(\beta^2 + \gamma^2) & 2(\gamma\omega + \alpha\beta) & 2(\alpha\gamma - \beta\omega) & 0 \\ 2(\alpha\beta - \gamma\omega) & 1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2) & 2(\alpha\omega + \beta\gamma) & 0 \\ 2(\alpha\gamma + \beta\omega) & 2(\beta\gamma - \alpha\omega) & 1 - 2(\alpha^2 + \beta^2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

左上の 3×3 の行列が、 x, y, z に対する変換行列になります。

早速、これを

$$\begin{pmatrix} i_x & i_y & i_z \\ j_x & j_y & j_z \\ k_x & k_y & k_z \end{pmatrix}$$

と対応させて、

$$|\mathbf{i}| = |\mathbf{j}| = 1$$

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = 0$$

$$\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$$

であるかどうか調べてみましょう。まず、

$$\begin{aligned} |\mathbf{i}|^2 &= \{1 - 2(\beta^2 + \gamma^2)\}^2 + \{2(\gamma\omega + \alpha\beta)\}^2 + \{2(\alpha\gamma - \beta\omega)\}^2 \\ &= 1 - 4(\beta^2 + \gamma^2) + 4(\beta^2 + \gamma^2)^2 + 4(\gamma^2\omega^2 + \alpha^2\beta^2 + 2\alpha\beta\gamma\omega) \\ &\quad + 4(\alpha^2\gamma^2 + \beta^2\omega^2 - 2\alpha\beta\gamma\omega) \\ &= 1 + 4\gamma^2(\alpha^2 + \gamma^2 + \omega^2) + 4\beta^2(\alpha^2 + \beta^2 + \omega^2) - 4(\beta^2 + \gamma^2) + 8\beta^2\gamma^2 \\ &= 1 + 4\gamma^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) + 4\beta^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 4(\beta^2 + \gamma^2) \\ &= 1 + 4(\beta^2 + \gamma^2)(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 4(\beta^2 + \gamma^2) = 1 \end{aligned}$$

であることが確認できます。 $|\mathbf{j}|^2$ についても同様に、

$$\begin{aligned} |\mathbf{j}|^2 &= \{1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2)\}^2 + \{2(\alpha\omega + \beta\gamma)\}^2 + \{2(\alpha\beta - \gamma\omega)\}^2 \\ &= 1 - 4(\alpha^2 + \gamma^2) + 4(\alpha^2 + \gamma^2)^2 + 4(\alpha^2\omega^2 + \beta^2\gamma^2 + 2\alpha\beta\gamma\omega) \\ &\quad + 4(\alpha^2\beta^2 + \gamma^2\omega^2 - 2\alpha\beta\gamma\omega) \\ &= 1 + 4\alpha^2(\alpha^2 + \beta^2 + \omega^2) + 4\gamma^2(\beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 4(\alpha^2 + \gamma^2) + 8\alpha^2\gamma^2 \\ &= 1 + 4\alpha^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) + 4\gamma^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 4(\alpha^2 + \gamma^2) \\ &= 1 + 4(\alpha^2 + \gamma^2)(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 4(\alpha^2 + \gamma^2) = 1 \end{aligned}$$

となります。 $\mathbf{i} \cdot \mathbf{j}$ については

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \cdot \mathbf{j} &= 2\{1 - 2(\beta^2 + \gamma^2)\}(\alpha\beta - \gamma\omega) \\ &\quad + 2(\gamma\omega + \alpha\beta)\{1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2)\} + 4(\alpha\gamma - \beta\omega)(\alpha\omega + \beta\gamma) \\ &= 2\alpha\beta\{1 - 2(\beta^2 + \gamma^2) + 1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2)\} + 2\gamma\omega\{1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2) \\ &\quad - 1 + 2(\beta^2 + \gamma^2)\} + 2\gamma\omega(2\alpha^2 - 2\beta^2) + 2\alpha\beta(2\gamma^2 - 2\omega^2) \\ &= 2\alpha\beta(2 - 2\alpha^2 - 2\beta^2 - 4\gamma^2 + 2\gamma^2 - 2\omega^2) \\ &\quad + 2\gamma\omega(2 - 2\alpha^2 - 2\gamma^2 + 2\beta^2 + 2\gamma^2 + 2\alpha^2 - 2\beta^2) \\ &= 2\alpha\beta\{2 - 2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2)\} = 0 \end{aligned}$$

となり、 $\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = 0$ であることも確認されました。

次に、 $\mathbf{k}'(k'_x, k'_y, k'_z) = \mathbf{i} \times \mathbf{j}$ を計算してみると、

$$\begin{aligned}
k'_x &= i_y j_z - i_z j_y \\
&= 4(\gamma\omega + \alpha\beta)(\alpha\omega + \beta\gamma) - 2(\alpha\gamma - \beta\omega)\{1 - 2(\alpha^2 + \beta^2)\} \\
&= 4\alpha\gamma\omega^2 + 4\beta\omega\gamma^2 + 4\beta\omega\alpha^2 + 4\alpha\gamma\beta^2 - 2(\alpha\gamma - \beta\omega)\{1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2)\} \\
&= 2\alpha\gamma(2\omega^2 + 2\beta^2 - 1 + 2\alpha^2 + 2\gamma^2) + 2\beta\omega(2\gamma^2 + 2\alpha^2 + 1 - 2\alpha^2 - 2\gamma^2) \\
&= 2\alpha\gamma\{2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 1\} + 2\beta\omega = 2(\alpha\gamma + \beta\omega) = k_x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k'_y &= i_z j_x - i_x j_z \\
&= 4(\alpha\gamma - \beta\omega)(\alpha\beta - \gamma\omega) - 2(\alpha\omega + \beta\gamma)\{1 - 2(\beta^2 + \gamma^2)\} \\
&= 2\alpha\omega(-2\gamma^2 - 2\beta^2) + 2\beta\gamma(2\alpha^2 + 2\omega^2) - 2(\alpha\omega + \beta\gamma)(1 - 2\beta^2 - 2\gamma^2) \\
&= -2\alpha\omega + 2\beta\gamma\{2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) - 1\} = 2(\beta\gamma - \alpha\omega) = k_y
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k'_z &= i_x j_y - i_y j_x \\
&= \{1 - 2(\beta^2 + \gamma^2)\}\{1 - 2(\alpha^2 + \gamma^2)\} - 4(\alpha\beta + \gamma\omega)(\alpha\beta - \gamma\omega) \\
&= 1 - 2(\alpha^2 + \beta^2 + 2\gamma^2) + 4(\alpha^2 + \gamma^2)(\beta^2 + \gamma^2) - 4(\alpha^2\beta^2 - \gamma^2\omega^2) \\
&= 1 - 2(\alpha^2 + \beta^2 + 2\gamma^2) + 4\gamma^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \omega^2) \\
&= 1 - 2(\alpha^2 + \beta^2) = k_z
\end{aligned}$$

となり、 $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$ も確認されたこととなります。これにより、 $p = xi + yj + zk$ としたときの qpq^{-1} は、 (x, y, z) に対する回転であることがわかりました。

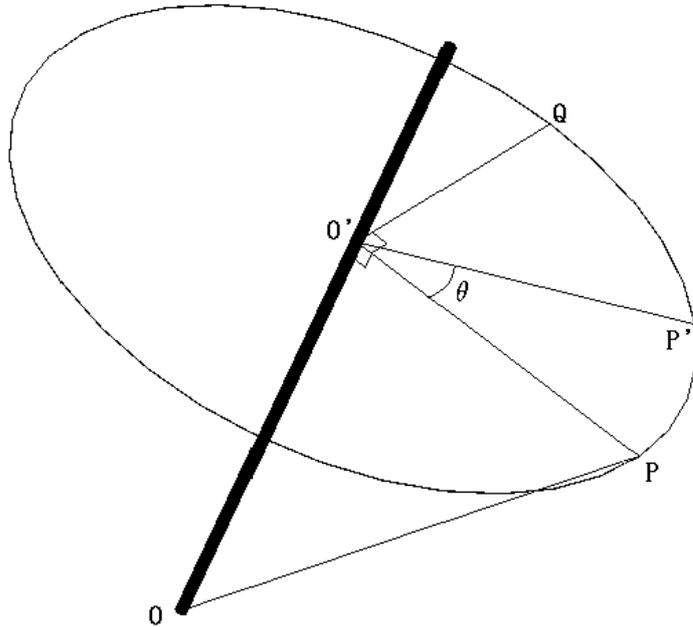
それでは、 qpq^{-1} で表される変換は、いったいどのような回転なのでしょう。そこで実際に $q = (a, \mathbf{V}), p = (0, \mathbf{r}), p' = (0, \mathbf{r}')$ として、 $p' = qpq^{-1}$ を計算してみると (ただし qpq^{-1} においては q の大きさは打ち消しあうので最初から 1 とします)。

$$\begin{aligned}
p' = qpq^{-1} &= (a, \mathbf{V})(0, \mathbf{r})(a, -\mathbf{V}) = (-\mathbf{V} \cdot \mathbf{r}, a\mathbf{r} + \mathbf{V} \times \mathbf{r})(a, -\mathbf{V}) \\
&= (0, (\mathbf{V} \cdot \mathbf{r})\mathbf{V} + a^2\mathbf{r} + 2a\mathbf{V} \times \mathbf{r} - \mathbf{V} \times \mathbf{r} \times \mathbf{V}) \\
&= (0, (a^2 - |\mathbf{V}|^2)\mathbf{r} + 2(\mathbf{V} \cdot \mathbf{r})\mathbf{V} + 2a\mathbf{V} \times \mathbf{r})
\end{aligned}$$

となります。これは、ベクトル \mathbf{r} を $\mathbf{V}'(|\mathbf{V}'| = 1)$ のまわりに角度 θ だけ回転させてベクトル \mathbf{r}' としたときの式

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \cos \theta + (\mathbf{V}' \cdot \mathbf{r})\mathbf{V}'(1 - \cos \theta) + \mathbf{V}' \times \mathbf{r} \sin \theta$$

と酷似しています (この式の導出に関しては次頁参照の事)。



上図は、点 P を回転軸 $\overrightarrow{OO'}$ を中心に θ 回転させて P' になった状態を示したものです。ただし O' は $\overrightarrow{OO'} \cdot \overrightarrow{O'P} = 0$ を満たし、Q は点 P を回転軸 $\overrightarrow{OO'}$ を中心に $\frac{\pi}{2}$ 回転させた点となります。 $\overrightarrow{OP} = \mathbf{p}$, $\overrightarrow{OP'} = \mathbf{p}'$ 、回転軸を表す単位ベクトルを \mathbf{V}' とすると、 $\overrightarrow{OO'} = (\mathbf{V}' \cdot \mathbf{p})\mathbf{V}'$ 、 $\overrightarrow{O'Q} = \mathbf{V}' \times \overrightarrow{O'P} = \mathbf{V}' \times (\overrightarrow{OP} - \overrightarrow{OO'}) = \mathbf{V}' \times \mathbf{p}$ であるから、

$$\begin{aligned}\overrightarrow{O'P'} &= \overrightarrow{O'P} \cos \theta + \overrightarrow{O'Q} \sin \theta \\ \overrightarrow{OP'} &= \overrightarrow{OO'} + \overrightarrow{O'P'}\end{aligned}$$

となり、これらをまとめると

$$\begin{aligned}\mathbf{p}' &= (\mathbf{V}' \cdot \mathbf{p})\mathbf{V}' + [\mathbf{p} - (\mathbf{V}' \cdot \mathbf{p})\mathbf{V}'] \cos \theta + \mathbf{V}' \times \mathbf{p} \sin \theta \\ &= \mathbf{p} \cos \theta + (\mathbf{V}' \cdot \mathbf{p})\mathbf{V}'(1 - \cos \theta) + \mathbf{V}' \times \mathbf{p} \sin \theta\end{aligned}$$

となります。

そこで、 $q = (a, b\mathbf{V}')$ ($|\mathbf{V}'| = 1$) とおいて両式を比べると、これらが一致する為の条件は、 $\mathbf{V}', \mathbf{p}, \mathbf{V}' \times \mathbf{p}$ が一次独立であることより、

$$a^2 - b^2|\mathbf{V}'|^2 = a^2 - b^2 = \cos \theta$$

$$2b = 1 - \cos \theta$$

$$2ab = \sin \theta$$

となります。これを満たす a, b は三角関数の倍角の公式より、直ちに

$$a = \cos \frac{\theta}{2}$$

$$b = \sin \frac{\theta}{2}$$

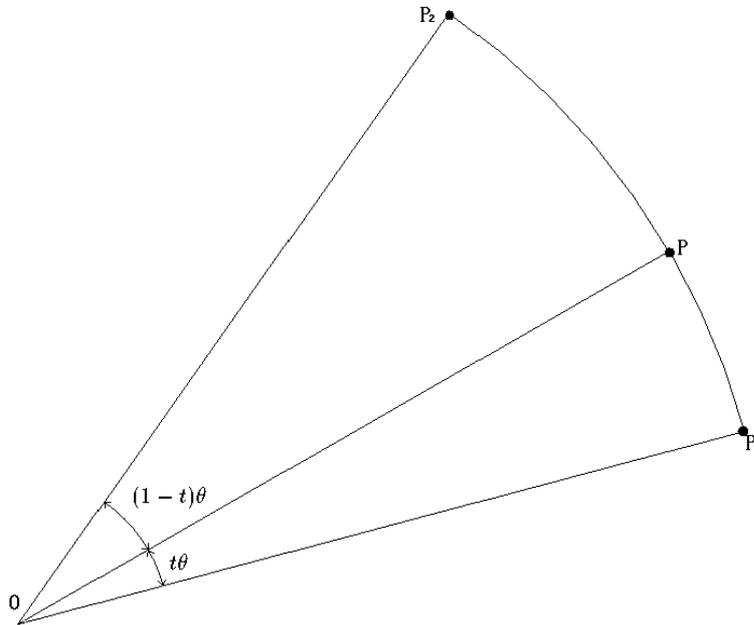
であることがわかります。これは、 $|q|^2 = a^2 + b^2|\mathbf{V}'|^2 = 1$ より、 $|q| = 1$ も満たすことがわかります。

従って、 $q = (\cos \frac{\theta}{2}, \mathbf{V} \sin \frac{\theta}{2})$ ($|\mathbf{V}| = 1$)、 $p = (0, \mathbf{r})$ 、 $p' = (0, \mathbf{r}')$ とした場合、

$$p' = qpq^{-1}$$

は、任意軸 \mathbf{V} まわりにベクトル \mathbf{r} を角度 θ だけ回転させた結果、ベクトル \mathbf{r}' を得られたという事を表す式であることがわかりました。

これを用いれば、行列による変換よりもより少ない演算回数で座標変換が可能となるメリットがあります。が、それだけならばクォータニオンを持ち出すまでもなく、最初から任意軸中心の回転の式を用いれば良いように思えます。しかし、クォータニオンを用いる最大のメリットは、何と言っても異なるクォータニオン間の補間が容易である点に尽きると思います。次ページからは、これについて説明します。



上の図は、媒介変数 t が $0 \leq t \leq 1$ の範囲で単調増加するにつれて、点 P が P_1 から P_2 へ長さを維持しながら移動する様子を描いた図です。 $\overrightarrow{OP_1} = \mathbf{p}_1, \overrightarrow{OP_2} = \mathbf{p}_2, \overrightarrow{OP} = \mathbf{p}$ とし、 $|\mathbf{p}_1| = |\mathbf{p}_2| = |\mathbf{p}| = L$ とすると

$$\begin{aligned}\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_1 &= L^2 \cos t\theta \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_2 &= L^2 \cos (1-t)\theta\end{aligned}$$

となります。ところで、

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{p}_1 + \beta \mathbf{p}_2$$

とおくと、

$$\begin{aligned}\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_1 &= \alpha L^2 + \beta \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 = \alpha L^2 + \beta L^2 \cos \theta \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_2 &= \alpha L^2 \cos \theta + \beta L^2\end{aligned}$$

となるので、これより α, β は

$$\begin{aligned}\alpha + \beta \cos \theta &= \cos t\theta \\ \alpha \cos \theta + \beta &= \cos (1-t)\theta\end{aligned}$$

より求める事ができます。計算すると、

$$\alpha = \frac{\sin (1-t)\theta}{\sin \theta}, \quad \beta = \frac{\sin t\theta}{\sin \theta}$$

となります。

即ち、点 P_1 と点 P_2 の間を長さを維持しながら動く点 P を表すことができる式は

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}_1 \sin(1-t)\theta + \mathbf{p}_2 \sin t\theta}{\sin \theta}$$

となります。但しここで、

$$|\mathbf{p}_1| = |\mathbf{p}_2|, \cos \theta = \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2}{|\mathbf{p}_1||\mathbf{p}_2|}, 0 \leq t \leq 1$$

です。ただ、この式の場合、回転前後の頂点の情報がないと、補間できません。複雑な 3 次元形状モデルでは、アニメーションのキーフレームあたりの情報量が頂点の数だけ存在し、膨大な量となることがわかります。ところが、結論から先に言うと、これをクォータニオンにそっくりそのまま置き換えることができます。即ち、回転を表すクォータニオン q_1, q_2 の間を動くクォータニオン q は

$$q = \frac{q_1 \sin(1-t)\theta + q_2 \sin t\theta}{\sin \theta}$$

となります。但しここで、

$$|q_1| = |q_2| = 1, \cos \theta = q_1 \cdot q_2, 0 \leq t \leq 1$$

です。これなら、頂点数に依存せず、高々変換に用いるクォータニオンの数程度で済みます。が、3次元空間上でのベクトルの考え方を、4つの次元を持つクォータニオンで同じように適用しているの、少々抵抗を感じざるを得ないというのが正直なところです。4次元の正規直交座標系における、2つのクォータニオン q_1 と q_2 を含む平面を取り出せば2次元の問題に帰着できそうな気もしますが...とりあえず、式を見る限りでは、 $|q| = 1$ は常に維持しているようです。ただ、そもそも大きさが変わったとしても、どのみち qpq^{-1} の計算においては、 q の大きさは打ち消しあってしまうのですが。

そこで、 $q_2 = (\cos \xi, \mathbf{V} \sin \xi)q_1$ とおいてみます。 $p_2 = q_2 p q_2^{-1}$ 、 $p_1 = q_1 p q_1^{-1}$ とすると、 $p_2 = (\cos \xi, \mathbf{V} \sin \xi)p_1(\cos \xi, -\mathbf{V} \sin \xi)$ なので、結局これも回転のクォータニオンを表すこととなります(結局頂点に対して回転操作を2回行っているに過ぎないので、回転のクォータニオン同士の積が回転のクォータニオンになるのは自明でしょう)。即ち、

$$q_1 = \left(\cos \frac{\psi_1}{2}, \mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \right)$$

$$q_2 = \left(\cos \frac{\psi_2}{2}, \mathbf{V}_2 \sin \frac{\psi_2}{2} \right)$$

とおくと、 $q_2 = (\cos \xi, \mathbf{V} \sin \xi)q_1$ を満たす ξ および \mathbf{V} が存在し、

$$(\cos \xi, \mathbf{V} \sin \xi) = q_2 q_1^{-1}$$

より、

$$\cos \xi = q_1 \cdot q_2$$

および

$$\mathbf{V} \sin \xi = -\mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \mathbf{V}_2 \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} + (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) \sin \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2}$$

であることがわかります。

そこで、この ξ, \mathbf{V} を用いて、 $q(t) = (\cos t\xi, \mathbf{V} \sin t\xi)q_1$ とおいてみます。すると、

$$\begin{aligned} q(t)pq^{-1}(t) &= (\cos t\xi, \mathbf{V} \sin t\xi)q_1pq_1^{-1}(\cos t\xi, -\mathbf{V} \sin t\xi) \\ &= (\cos t\xi, \mathbf{V} \sin t\xi)p_1(\cos t\xi, -\mathbf{V} \sin t\xi) \end{aligned}$$

となります。すなわち、 t の増分を Δt とおくと、「 p_1 を \mathbf{V} を回転軸として $2\xi\Delta t$ ずつ回転させて、最終的に $t = 1$ において p_2 に到達させる」ことができるのです。

そこで、 $q(t)$ を計算してみると

$$\begin{aligned} q(t) &= \left\{ \cos \xi t \cos \frac{\psi_1}{2} - (\mathbf{V} \sin \xi t) \cdot (\mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2}), \right. \\ &\quad \left. \mathbf{V}_1 \cos \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} + \mathbf{V} \sin \xi t \cos \frac{\psi_1}{2} + \mathbf{V} \times \mathbf{V}_1 \sin \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} \right\} \end{aligned}$$

となります。ここで、 $\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2 = \cos \theta$ とおくと、

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}_1 = \frac{1}{\sin \xi} \left(-\sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \theta \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right)$$

より、

$$\begin{aligned} \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}_1 \sin \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} &= \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left(-\sin^2 \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \theta \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right) \\ &= \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left(-\cos \frac{\psi_2}{2} + \cos^2 \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \theta \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right) \\ &= \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left\{ -\cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \frac{\psi_1}{2} (q_1 \cdot q_2) \right\} = \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left\{ -\cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \frac{\psi_1}{2} \cos \xi \right\} \end{aligned}$$

となるので、 $q(t)$ の実数部分 $Re(q(t))$ は

$$\begin{aligned} Re(q(t)) &= \cos \xi t \cos \frac{\psi_1}{2} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}_1 \sin \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} \\ &= \frac{\cos \xi t \sin \xi \cos \frac{\psi_1}{2}}{\sin \xi} - \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left\{ -\cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \frac{\psi_1}{2} \cos \xi \right\} \\ &= \frac{(\cos \xi t \sin \xi - \sin \xi t \cos \xi) \cos \frac{\psi_1}{2}}{\sin \xi} + \frac{\sin \xi t \cos \frac{\psi_2}{2}}{\sin \xi} \\ &= \frac{\sin(1-t)\xi \cos \frac{\psi_1}{2} + \sin \xi t \cos \frac{\psi_2}{2}}{\sin \xi} \\ &= \frac{\sin(1-t)\xi \cdot Re(q_1) + \sin \xi t \cdot Re(q_2)}{\sin \xi} \end{aligned}$$

となります。ここで、 $Re(q)$ はクォータニオン q の実数部を表します。

同様に、ベクトル部分についても計算してみると、まず

$$\begin{aligned}
& \mathbf{V} \sin \xi t \cos \frac{\psi_1}{2} + (\mathbf{V} \times \mathbf{V}_1) \sin \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} \\
&= \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left\{ -\mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \mathbf{V}_2 \cos^2 \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right. \\
&+ (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} - (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \\
&\quad \left. + [|\mathbf{V}_1|^2 \mathbf{V}_2 - (\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2) \mathbf{V}_1] \sin^2 \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right\} \\
&= \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left\{ -\mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \left(\cos \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} + \cos \theta \sin \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \mathbf{V}_2 \sin \frac{\psi_2}{2} \left(\cos^2 \frac{\psi_1}{2} \sin^2 \frac{\psi_1}{2} \right) \right\} = \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \left(-\mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \xi + \mathbf{V}_2 \sin \frac{\psi_2}{2} \right)
\end{aligned}$$

となりますので (ここで外積の公式 $\mathbf{a} \times \mathbf{b} \times \mathbf{c} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a}$ を用いました) $q(t)$ のベクトル部分 $Im(q(t))$ は

$$\begin{aligned}
Im(q(t)) &= \mathbf{V}_1 \cos \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} + \mathbf{V} \sin \xi t \cos \frac{\psi_1}{2} + (\mathbf{V} \times \mathbf{V}_1) \sin \xi t \sin \frac{\psi_1}{2} \\
&= \left(\frac{\cos \xi t \sin \xi - \sin \xi t \cos \xi}{\sin \xi} \right) \mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} + \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} \mathbf{V}_2 \sin \frac{\psi_2}{2} \\
&= \frac{\sin(1-t)\xi}{\sin \xi} Im(q_1) + \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} Im(q_2)
\end{aligned}$$

となります。即ち、 $q(t)$ は、 $\cos \xi = q_1 \cdot q_2$ として

$$q(t) = \frac{\sin(1-t)\xi}{\sin \xi} q_1 + \frac{\sin \xi t}{\sin \xi} q_2$$

となり、3次元の位置ベクトルの場合と同様に導出した式と一致しました。これが、クォータニオンの球面線形補間 (SLERP: Spherical Linear interpolation) の式になります。

ただし、SLERPの式を使うにあたって、注意すべきところがあります。それは、クォータニオン $q = (\cos \frac{\psi}{2}, \mathbf{V} \sin \frac{\psi}{2})$ が、任意の軸 \mathbf{V} を回転軸とした角度 ψ の回転を表しているのですが、回転角が $2\pi + \psi$ である場合も、当然同じ回転を表すはずで、ところが、その場合のクォータニオンは

$$q' = \left(\cos \frac{2\pi + \psi}{2}, \mathbf{V} \sin \frac{2\pi + \psi}{2} \right) = \left(\cos \left(\pi + \frac{\psi}{2} \right), \mathbf{V} \sin \left(\pi + \frac{\psi}{2} \right) \right) = -q$$

となり、符号が反転しています。すなわち「同じ回転を表すクォータニオンが2つ存在する」こととなります。では、果たしてどちらのクォータニオン

を使えばいいのでしょうか？

この SLERP の式は先ほど述べた通り、 t の増分を Δt とおくと、
「 p_1 を \mathbf{V} を回転軸として $2\xi\Delta t$ ずつ回転させて、最終的に $t = 1$ において p_2 に到達させる」ことができるクォータニオンとなりますが、クォータニオン q_2 を反転させたとすると、

$$\cos \xi' = -q_1 \cdot q_2 = -\cos \xi$$

$$\begin{aligned}\mathbf{V} \sin \xi' &= \mathbf{V}_1 \sin \frac{\psi_1}{2} \cos \frac{\psi_2}{2} - \mathbf{V}_2 \cos \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} \\ &\quad - (\mathbf{V}_1 \times \mathbf{V}_2) \sin \frac{\psi_1}{2} \sin \frac{\psi_2}{2} = -\mathbf{V} \sin \xi\end{aligned}$$

となり、これにより、 $-\pi \leq \xi \leq \pi$ 、 $-\pi \leq \xi' \leq \pi$ の範囲で考えると、

$$\xi' = \begin{cases} \pi + \xi & (-\pi < \xi \leq 0) \\ \xi - \pi & (0 < \xi \leq \pi) \end{cases}$$

であることがわかります。即ち、

$$q_1 \cdot q_2 \geq 0 \left(-\frac{\pi}{2} \leq \xi \leq \frac{\pi}{2} \right) \text{ の場合 : } \frac{\pi}{2} \leq \xi' \leq \pi \text{ かつ } -\pi < \xi' \leq -\frac{\pi}{2}$$

$$\text{それ以外の場合 : } -\frac{\pi}{2} \leq \xi' \leq \frac{\pi}{2}$$

となりますので、 $q_1 \cdot q_2 \geq 0$ となるように q_2 を選ばないと、その増分 $2\xi\Delta t$ の絶対値が大きくなる為、同じ変換にたどり着くまでの経路が遠回りになってしまいます。

私がクォータニオンに対して理解しているのは、こんなところです。
なお、クォータニオンの基本的な概念や計算方法については [4] を、SLERP
の式の導出にあたっては、下記の参考文献 [1]、[2]、[3] からそれぞれ一部引
用させて頂いた事をお断りしておきます。また、引用及びリンクを快諾して
下さった金谷 一郎先生に、この場を借りて改めて御礼申し上げます。
(なお、[3] および [4] については、公開していた Web サイトは現在閉鎖さ
れ、コンタクトを取ることが出来なかった事をお詫び申し上げます)

参考文献

- [1] ベクトル・複素数・クォータニオン
(著：金谷 一郎、2003、PDF 文書)
- [2] 3D-CG プログラマーのためのクォータニオン入門
(著：金谷 一郎、2004、工学社)
- [3] Quaternion Algebra and Calculus
(著：David Eberly、1999-2002、PDF 文書)
- [4] 3D Cording Tips
(著：久保 裕一郎、1997-2001、Web ページ「宇治社中改」中の HTML
文書)

(敬称略)