基于齐性空间与李群表示论的旋转位置编码(RoPE)推导

Gemini Thought Partner

2025 年 11 月 22 日

摘要

本文旨在通过齐性空间（Homogeneous Spaces）的表示论视角，严格推导旋转位置编码（Rotary Positional Embeddings, RoPE）。我们首先定义平移群在空间上的作用，利用内积不变性导出位置编码必须是正交群的线性表示。随后，利用 $SO(2N)$ 李代数中嘉当子代数（Cartan Subalgebra）的结构，处理高维交换群（$\mathbb{Z}^2, \mathbb{Z}^3$）的情形，自然地导出了多维 RoPE 的一般公式。

1 一般框架：齐性空间与群表示

1.1 问题设定

考虑齐性空间 $X = \mathbb{R}^{d_{\text{model}}} \times G$，其中 G 是离散平移群（如 $\mathbb{Z}, \mathbb{Z}^2$ 等），$V = \mathbb{R}^{d_{\text{model}}}$ 是词嵌入空间。群 G 在 X 上的作用 τ_t 定义为：

$$\tau_t(\boldsymbol{x}, p) = (\boldsymbol{x}, p + t), \quad \forall t, p \in G, \boldsymbol{x} \in V \tag{1}$$

即平移仅作用于位置分量。我们寻找映射 $f : X \to V$，形式为分离变量：

$$f(\boldsymbol{x}, p) = \Phi(p)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

其中 $\Phi : G \to GL(V)$ 是矩阵值函数，且 $\Phi(0) = I$。

1.2 不变性与同态性质

RoPE 的核心要求是内积的相对位置不变性：

$$\langle f(\boldsymbol{x}, p), f(\boldsymbol{y}, q)\rangle = \langle f(\boldsymbol{x}, p + t), f(\boldsymbol{y}, q + t)\rangle \tag{3}$$

代入分离变量形式，得：

$$\psi(\boldsymbol{x})^T \Phi(p)^T \Phi(q)\psi(\boldsymbol{y}) = \psi(\boldsymbol{x})^T \Phi(p + t)^T \Phi(q + t)\psi(\boldsymbol{y}) \tag{4}$$

由于 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ 的任意性，这蕴含矩阵恒等式：

$$\Phi(p)^T \Phi(q) = \Phi(p + t)^T \Phi(q + t) \tag{5}$$

由此我们可以导出两个关键性质：

- **正交性 (Orthogonality)**：令 $q=p, t=-p$，得 $\Phi(p)^T\Phi(p)=I$。故 $\Phi(p)\in O(d_{\text{model}})$。
- **群同态 (Group Homomorphism)**：利用正交性 $\Phi^T=\Phi^{-1}$ 及相对位置依赖性，可推导得：
$$\Phi(p+k)=\Phi(p)\Phi(k) \tag{6}$$

这表明 Φ 是群 G 到正交群 $O(d_{\text{model}})$ 的一个（实数域上的）正交表示。

2 李代数结构：$\mathfrak{so}(2N)$ 的嘉当子代数

为了处理多维位置（如 $\mathbb{Z}^2, \mathbb{Z}^3$），我们需要研究交换群的表示。这涉及到李代数中的交换子代数结构。

2.1 李代数与指数映射

对于李群 G，其同态由李代数 $\mathfrak{g}$ 中的生成元决定。通过指数映射 $\exp:\mathfrak{g}\to G$，我们可以将群元素表示为 e^A。对于 $SO(d)$，其李代数 $\mathfrak{so}(d)$ 由反对称矩阵组成。

2.2 嘉当子代数 (Cartan Subalgebra)

对于高维平移群 $G=\mathbb{Z}^k$ $(k\geq 2)$，由于它是阿贝尔群（交换群），其在 $O(d)$ 中的像也必须相互交换。事实上我们可以确定 $O(d)$ 的极大交换子群，这在Lie理论中称为紧李群 $O(d)$ 的**极大环面**。

注记 1. *事实上不用Lie理论，只要线性代数即可知道：一组相互交换的实反对称矩阵可以被同时块对角化。做简单的数学归纳法即可。*

注记 2 (连续延拓性与交换条件的必要性)**.** *RoPE 设计的一个核心卖点是 NTK 感知插值（NTK-aware Scaled RoPE）或者处理非整数位置的能力。我们希望位置编码函数 $f(\mathbf{x},p)$ 不仅对 $p\in\mathbb{Z}$ 有定义，而且对 $p\in\mathbb{R}$ 也有意义（例如在插值时）。*

如果我们要求映射：
$$\Phi(t_1,t_2)=\Phi(t_1\mathbf{e}_1+t_2\mathbf{e}_2) \tag{7}$$
对于任意实数 $t_1,t_2\in\mathbb{R}$ 都构成同态，那么就必须要求：
$$\exp(t_1A)\exp(t_2B)=\exp(t_2B)\exp(t_1A),\quad \forall t_1,t_2 \tag{8}$$
这才是李代数生成元交换 $[A,B]=0$ 的充要条件。

如果放弃 $[A,B]=0$：我们就只能定义“网格上的 RoPE”，而无法定义“连续的 RoPE”。例如 $SO(3)$ 上就有反例。反例中，如果你取 $t=0.5$（转 90°），$R_x(\pi/2)$ 和 $R_y(\pi/2)$ 就不再交换了，相对位置编码的性质就会在非整数点失效。

这里的一个小定理是：连通李群交换等价于其李代数交换。其证明强烈依赖于连续情形的Lie导子，其在离散情形下没有明显类似物；就好比离散马尔科夫链有一个生成元，演化就是生成元做矩阵乘法；而连续马尔科夫链有的是一个无穷小生成元。

在李理论中，这对应于寻找 $\mathfrak{so}(d)$ 的**嘉当子代数** $\mathfrak{h}$。设 $d_{\text{model}} = 2N$。$\mathfrak{so}(2N)$ 的嘉当子代数 $\mathfrak{h}$ 是所有形式如下的矩阵组成的集合：

$$H(\boldsymbol{\theta}) = \bigoplus_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} 0 & -\theta_j \\ \theta_j & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\theta_1 & & & \\ \theta_1 & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & -\theta_N \\ & & & \theta_N & 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

任何相互交换的生成元集合都可以（通过全局共轭作用）被包含在同一个嘉当子代数中。这不仅保证了它们可以同时对角化，还确定了其几何形式为 N 个独立平面的旋转。

注记 3. 事实上绝大部分李群的*maximal torus*（或其李代数的*Cartan subalgbra*）的结构是存在且在共轭意义下唯一的；这一点也有相当多有趣的证明，比如基于*Morse theory*的；而后者正是关于梯度下降的最优美的数学理论。

3 具体推导：1D, 2D 与 3D RoPE

3.1 1D RoPE ($G = \mathbb{Z}$)

群由单个生成元 $1 \in \mathbb{Z}$ 生成。设其对应的李代数元素为 $A \in \mathfrak{so}(d)$。

$$\Phi(m) = \exp(A \cdot m) \tag{10}$$

根据谱分解，我们总可以找到基底使得 A 位于嘉当子代数中，即 A 为块对角矩阵，第 j 个块为 $\begin{pmatrix} 0 & -\theta_j \\ \theta_j & 0 \end{pmatrix}$。则作用在第 j 个子空间上的算子为：

$$\Phi(m)_j = \begin{pmatrix} \cos(m\theta_j) & -\sin(m\theta_j) \\ \sin(m\theta_j) & \cos(m\theta_j) \end{pmatrix} \tag{11}$$

3.2 2D RoPE ($G = \mathbb{Z}^2$)

群由两个生成元 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2$ 生成。设对应的李代数元素为 A, B。由于 $\mathbb{Z}^2$ 交换，必须有 $[A, B] = AB - BA = 0$。这意味着 A, B 属于同一个嘉当子代数 $\mathfrak{h}$。因此它们拥有相同的块对角结构：

$$A = \bigoplus_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} 0 & -\theta_j^A \\ \theta_j^A & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \bigoplus_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} 0 & -\theta_j^B \\ \theta_j^B & 0 \end{pmatrix} \tag{12}$$

位置编码矩阵为：

$$\Phi(m, n) = e^{Am} e^{Bn} = e^{Am+Bn} \tag{13}$$

在第 j 个子空间上，旋转角度叠加：

$$\alpha_j(m, n) = m\theta_j^A + n\theta_j^B \tag{14}$$

最终公式为：

$$\Phi(m, n)_j = \begin{pmatrix} \cos\left(m\theta_j^A + n\theta_j^B\right) & -\sin\left(m\theta_j^A + n\theta_j^B\right) \\ \sin\left(m\theta_j^A + n\theta_j^B\right) & \cos\left(m\theta_j^A + n\theta_j^B\right) \end{pmatrix} \tag{15}$$

3.3 3D RoPE ($G = \mathbb{Z}^3$)

对于视频或体素数据，群为 $\mathbb{Z}^3$，生成元对应李代数元素 A, B, C。根据**最大环面 (Maximal Torus)** 原理，这三个相互交换的矩阵均位于 $\mathfrak{so}(2N)$ 的嘉当子代数 $\mathfrak{h}$ 中。

$$\Phi(m, n, k) = \exp(Am + Bn + Ck) \tag{16}$$

对于第 j 个特征对，总旋转角为三个维度的线性组合：

$$\Theta_j = m\theta_j^A + n\theta_j^B + k\theta_j^C \tag{17}$$

这就构成了 3D RoPE 的一般形式。实际应用中，通常通过设置某些 θ_j 为 0 来实现维度的正交切分（例如前 1/3 通道编码 m，中间 1/3 编码 n 等），但这只是本框架下的一个特例。

注记 4. *qwen3-vl的技术报告提出的交错式3DRoPE也不过是该框架的一个小小例子。*

4 结论

通过引入 $X = \mathbb{R}^d \times G$ 的齐性空间结构，RoPE 被自然地解释为平移群 G 在 L^2 空间上的正交表示。利用李代数 $\mathfrak{so}(d)$ 的嘉当子代数理论，我们严格证明了对于任意维度的阿贝尔平移群 $\mathbb{Z}^k$，其位置编码必然表现为特征空间内的成对旋转，且旋转角度是位置坐标的线性函数，从而给出了一般意义上的PoPE

$$f(\boldsymbol{x}, p) = \Phi(p)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{18}$$

。