从拉普拉斯本征函数视角推导球谐位置编码 (Spherical Harmonic PE)

Gemini Thought Partner

2025 年 11 月 23 日

摘要

本文是关于位置编码统一理论的第三部分。继旋转位置编码（RoPE, S^1）和图位置编码（Graph LPE, 任意图）之后，我们进一步探讨二维球面 S^2 上的位置编码。通过将球面视为齐性空间 $S^2 \cong SO(3)/SO(2)$，我们利用 $SO(3)$ 群的 Casimir 算子（即球面拉普拉斯算子）的谱分解，推导出球谐函数作为自然的几何基底。本文展示了这种编码如何自然地满足旋转等变性，并通过加法定理实现了与 RoPE 异曲同工的"相对位置内积"性质。

1 几何背景与齐性空间结构

1.1 空间定义

考虑单位球面流形 $S^2 = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \|\boldsymbol{x}\| = 1\}$。球面上的点通常由球坐标 (θ, ϕ) 描述，其中 $\theta \in [0, \pi]$ 为极角，$\phi \in [0, 2\pi)$ 为方位角。

1.2 群结构

三维旋转群 $G = SO(3)$ 在 S^2 上传递作用。固定北极点 $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)$，其稳定子群（Isotropy Subgroup）是绕 z 轴的二维旋转群 $SO(2)$。因此，球面可以看作齐性空间（商空间）：

$$S^2 \cong SO(3)/SO(2) \tag{1}$$

这表明定义在球面上的位置编码应当具有 $SO(3)$ 群表示论的内蕴结构。

2 算子视角：拉普拉斯-贝尔特拉米算子

如同在圆周 S^1 和图结构上一样，我们寻找几何结构上的自然微分算子。在李代数 $\mathfrak{so}(3)$ 中，二次 Casimir 算子（对应物理中的角动量算子平方 L^2）在位置空间的坐标表示正是**球面拉普拉斯算子** Δ_{S^2}。

在球坐标系下，Δ_{S^2} 写作：

$$\Delta_{S^2} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2}$$

3 本征函数：球谐函数 (Spherical Harmonics)

我们通过求解拉普拉斯算子的本征方程（Helmholtz 方程）来寻找函数空间的基底：

$$-\Delta_{S^2} f(\theta,\phi) = \lambda f(\theta,\phi) \tag{3}$$

3.1 谱分解

该方程的解是离散的。特征值 λ 仅依赖于阶数 l：

$$\lambda_l = l(l+1), \quad l = 0,1,2,\dots \tag{4}$$

对于每个固定的 l，对应的特征子空间 V_l 维数为 $2l+1$。其归一化正交基为**球谐函数** $Y_{l,m}(\theta,\phi)$，其中 $m \in \{-l,\dots,l\}$。

3.2 解析形式

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{5}$$

其中：

- P_l^m 为**连带勒让德多项式**，负责 θ 维度的几何震荡。
- $e^{im\phi}$ 为复指数函数，负责 ϕ 维度的震荡（这正是 RoPE 在 S^1 上的形式）。

4 球谐位置编码 (SPE) 的构造

基于上述谱分析，我们定义球面位置 $\boldsymbol{x}(\theta,\phi)$ 的编码为截断到最大频率 $L_{\max}$ 的球谐函数向量拼接：

$$\mathrm{PE}(\theta,\phi) = \bigoplus_{l=0}^{L_{\max}} \begin{pmatrix} Y_{l,-l}(\theta,\phi) \\ \vdots \\ Y_{l,0}(\theta,\phi) \\ \vdots \\ Y_{l,l}(\theta,\phi) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{D_{\text{total}}} \tag{6}$$

总维度为 $D_{\text{total}} = \sum_{l=0}^{L_{\max}}(2l+1) = (L_{\max}+1)^2$。

5 性质分析

5.1 旋转变换性质：Wigner D-矩阵

RoPE 在 S^1 上满足 $f(x+t) = e^{imt} f(x)$。在 S^2 上，情况从阿贝尔群推广到了非阿贝尔群。$SO(3)$ 在特征子空间 V_l 上的作用是不可约表示。对于任意旋转 $R \in SO(3)$：

$$Y_{l,m}(R^{-1}\boldsymbol{x}) = \sum_{k=-l}^{l} D_{km}^l(R) Y_{l,k}(\boldsymbol{x}) \tag{7}$$

写作向量形式：

$$\boldsymbol{y}_l(R\cdot\boldsymbol{x})=\mathbf{D}^l(R)\boldsymbol{y}_l(\boldsymbol{x}) \tag{8}$$

其中 $\mathbf{D}^l(R)$ 是 $2l+1$ 维的 **Wigner D-矩阵**。这表明 SPE 是**旋转等变 (Rotationally Equivariant)** 的。

5.2 相对位置性质：加法定理

RoPE 的核心优势在于内积仅依赖相对位置。SPE 完美继承了这一特性。考虑两点 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\in S^2$，利用球谐函数**加法定理 (Addition Theorem)**：

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}^*(\boldsymbol{x}_1)Y_{l,m}(\boldsymbol{x}_2)=\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2) \tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{x}_1\cdot\boldsymbol{x}_2=\cos\gamma$ 是两点间大圆距离的余弦值，P_l 是勒让德多项式。

这意味着，位置编码的点积 Attention 仅依赖于两点的**相对夹角** γ，实现了完美的旋转不变性：

$$\langle \mathrm{PE}(\boldsymbol{x}_1),\mathrm{PE}(\boldsymbol{x}_2)\rangle\propto\sum_l P_l(\cos\gamma) \tag{10}$$

6 总结：三种几何空间的统一图谱

下表展示了 RoPE、Graph LPE 和 Spherical PE 如何在同一数学框架下统一：

特性	RoPE (1D 序列 / S^1)	Spherical PE (3D 球面 S^2)	Graph LPE (任意图结构)
底层空间	齐性空间 $S^1\cong U(1)$	齐性空间 $S^2\cong SO(3)/SO(2)$	一般拓扑图 $G=(V,E)$
核心算子	$\Delta=-\frac{d^2}{dx^2}$	Δ_{S^2} (Casimir Operator)	$L=I-D^{-1/2}AD^{-1/2}$
本征函数	e^{imx}	$Y_{l,m}(\theta,\phi)$	特征向量 $\boldsymbol{\phi}_k$
群表示	$e^{im\theta}$ (标量相位)	$\mathbf{D}^l(R)$ (Wigner D-矩阵)	排列群 S_N (隐式等变)
相对位置核	$\cos(m\Delta x)$	$P_l(\cos\gamma)$	热核 / 扩散距离

表 1: 基于拉普拉斯算子本征函数的位置编码统一框架