arXiv:2602.03740v1 [math.PR] 3 Feb 2026

区域随机场空间矩与陪域之间的相容性

Xavier Emery[1], [2*]和 Christian Lantu´ejoul[3]

[1]智利大学采矿工程系，智利圣地亚哥。[2]智利大学先进采矿技术中心，智利圣地亚哥。[3]巴黎高等矿业学院 PSL 大学 Statistiques et Images，法国巴黎。

*通讯作者。电子邮箱：xemery@ing.uchile.cl；其他作者：christian.lantuejoul@minesparis.psl.eu；

摘要

尽管任意对称半正定映射都可以作为高斯随机场的非中心协方差，但众所周知，当随机场的取值属于两点集时，这些条件便不再充分。因此，问题在于：映射 ρ：$\mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 要成为取值于 $\mathbb{R}$ 的子集 $\mathcal{E}$ 中的随机场的非中心协方差，需要满足哪些充要条件？本文先给出$\mathcal{E}$ 为实数轴闭子集时的一般情形条件，再考察若干特定情形。特别地，若$\mathcal{E} = \mathbb{R}$ 或 $\mathbb{Z}$，则证明这些条件可简化为 ρ 对称且半正定。若$\mathcal{E}$ 是闭区间或两点集，则充要条件更为严格：仅凭 ρ 的对称性、半正定性以及上下有界性，已不足以保证存在一个取值于$\mathcal{E}$ 且以 ρ 为其非中心协方差的随机场。对于半变异函数和高阶空间矩，以及多元随机场，也得到了类似的刻画。

关键词：半正定性、完全正性、角正不等式、间隙不等式、Mercer 条件。

1 引言

本文探讨定义在指标集 $\mathbb{X}$ 上、取值于集合 $\mathcal{E}$的随机场建模中的基本问题。在下文中，$\mathbb{X}$ 将表示任意有限或无限的点集，例如平面、球面或有限图的顶点等。至于取值集合或陪域 $\mathcal{E}$，它将是 $\mathbb{R}$的子集；也就是说，随机场取实数值，这在空间统计学的应用中最为常见（Chil`es& Delfiner，2012）、数学形态学（Serra，1982）、随机几何（Chiu 等，2013）、机器学习（Sch¨olkopf & Smola，2002）以及科学计算（Ghanem &Spanos，1991）。

一个随机场 Z，其指标集为 $\mathbb{X}$、陪域为 $\mathcal{E}$，是定义在同一概率空间 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ 上的一组随机变量。非正式地说，它可以看作分量取值于 $\mathcal{E}$ 的随机向量，只不过这类分量的个数（$\mathbb{X}$ 的基数）可以是无穷的。为给出正式定义，我们赋予实数轴 $\mathbb{R}$ 以

通常拓扑，并设

$$
\begin{aligned}
Z : (\mathbb{X}, \Omega) &\to \mathcal{E} \\
(x, \omega) &\mapsto Z(x, \omega) = \omega(x),
\end{aligned}
$$

其中：

- 对于固定的 x，映射 $\omega \mapsto Z(x, \omega)$ 是 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ 上的一个随机变量；
- 对于固定的 ω，映射 $x \mapsto Z(x, \omega)$ 称为随机场的一个实现（又称轨迹或样本路径）；

- $\Omega = \mathcal{E}^{\mathbb{X}}$ 是随机场所有可能实现的集合，称为样本空间；
- $\mathcal{A}$ 是 Ω 的 Borel σ-代数，称为事件空间，事件是样本空间的一个 Borel 子集；

- $\mathbb{P}$ 是一个概率测度，为事件空间中的每个元素赋予一个介于 0 和 1 之间的概率：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{P} : \mathcal{A} &\to [0, 1] \\
A &\mapsto \mathbb{P}(A) = \int_{\omega \in A} \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega),
\end{aligned}
$$

其中 $\mathbb{P}$ 是可列可加的，且 $\mathbb{P}(\Omega) = 1$。

若对所有 $x \in \mathbb{X}$，随机变量 $Z(x, \cdot)$ 关于概率测度 $\mathbb{P}$ 平方可积，则实值随机场在 $\mathbb{X}$ 的每一点都具有有限的期望和方差，并且任意一对点之间都具有有限的（自）协方差函数和半变异函数。协方差函数和半变异函数是许多研究随机场的学科中的基础工具，尤其是空间统计学中克里金技术的构建基石。期望、方差、中心化协方差、非中心协方差和半变异函数定义如下：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}(Z(x, \cdot)) &:= \int_{\Omega} Z(x, \omega) \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega), \quad x \in \mathbb{X}, \\
\mathbb{V}(Z(x, \cdot)) &:= \int_{\Omega} Z^2(x, \omega) \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega) - \mathbb{E}^2(Z(x, \cdot)), \quad x \in \mathbb{X}, \\
\mathbb{C}(Z(x, \cdot), Z(y, \cdot)) &:= \int_{\Omega} Z(x, \omega) Z(y, \omega) \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega) - \mathbb{E}(Z(x, \cdot))\, \mathbb{E}(Z(y, \cdot)), \quad x, y \in \mathbb{X}, \\
\rho(x, y) &:= \int_{\Omega} Z(x, \omega) Z(y, \omega) \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega), \quad x, y \in \mathbb{X}, \\
g(x, y) &:= \frac{1}{2} \int_{\Omega} [Z(x, \omega) - Z(y, \omega)]^2 \mathbb{P}(\mathrm{d}\omega) - \frac{1}{2} \mathbb{E}^2(Z(x, \omega) - Z(y, \omega)), \quad x, y \in \mathbb{X},
\end{aligned}
$$

分别如此。若要使半变异函数存在，可以将 $Z(x, \cdot)$ 在任意 $x \in \mathbb{X}$ 处平方可积这一假设，放宽为增量 $Z(x, \cdot) - Z(y, \cdot)$ 对任意一对 $(x, y) \in \mathbb{X}^2$ 都平方可积。

已知期望和非中心协方差，便足以确定方差、中心化协方差和半变异函数。然而，虽然任意一个定义在 $\mathbb{X}$上、陪域为 $\mathcal{E}$ 的函数都可以作为定义在 $\mathbb{X}$上的某个随机场的期望，但对于定义在 ρ 上的函数 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 要成为定义在 $\mathbb{X}$上的某个随机场的非中心协方差函数，需要满足哪些条件，目前尚不十分清楚。一个必要条件（Schoenberg，1938年）是 ρ必须是对称且半正定的：

1. 对称性：对于任意 $x, y \in \mathbb{X}$，$\rho(x, y) = \rho(y, x)$。

2. 半正定性：对于任意正整数 n、 $\mathbb{X}$ 中的任意点集 $x_1, \ldots, x_n$ 以及任意一组实数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$，有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_k \, \lambda_\ell \, \rho(x_k, x_\ell) \geq 0. \tag{1}$$

此外，根据 Daniell-Kolmogorov 延拓定理（Billingsley，1995），这些条件足以确保存在一个具有协方差函数 ρ的零均值高斯随机场，也就是说，它们确保了 ρ与由整个实数轴构成的陪域之间的相容性： $\mathcal{E} = \mathbb{R}$。

然而，当陪域是 $\mathbb{R}$ 的真子集时，情况就远没有这么简单了。文献中得到广泛研究的一个特殊情形是两点集 $\mathcal{E} = \{-1, 1\}$，针对该情形，已经建立了比半正定性更强的关于 ρ 的条件（Armstrong，1992；Emery，2010；Lachièze-Rey，2015；Matheron，1989、1993；McMillan，1955；Quintanilla，2008；Shepp，1967）。对于其他陪域（例如有界区间或半有界区间），非中心协方差的相容性刻画是一个由来已久的问题（Slepian，1972）；据作者所知，该问题至今仍未解决。作者仅了解到以下几项工作：Sondhi（1983）提出通过变换高斯随机场，生成具有给定边缘分布和给定协方差函数的随机场；Matheron（1989）研究了协方差模型与给定类别的正值随机场（欧几里得空间中的对数正态随机场）之间的相容性；M¨uller 等人（2012）提出通过谱模拟方法，在实数轴上生成取值于 $[-1, 1]$ 且具有指定平稳协方差函数的随机场。然而，所有这些工作都针对随机场的特定边缘分布，而这超出了其陪域的定义范畴。

在此背景下，本文探讨如何确定充分且必要的条件，以确保非中心协方差函数，或半变异函数、高阶空间矩等其他结构性工具，与随机场的陪域或取值集合相容。我们强调，我们的结果适用于定义在任意点集 $\mathbb{X}$ 上的实值随机场；包含这些点的环境空间（例如欧几里得空间、球面或图）并不重要。

全文结构如下：第 2 节介绍一些背景材料，并引入与陪域以及实矩阵或实函数相关的量，以下将这些量统称为间隙。这些量将在刻画非中心协方差、半变异函数和高阶矩时发挥关键作用，相关内容将在第 3 节（基于矩阵间隙）和第4 节（基于函数间隙）中介绍。结论见第 5节。附录 A考察了若干特定陪域（整个实数轴、不含或包含零元素的相对整数集、两点集、有界区间以及非负半轴）。为使行文更为流畅，引理和定理的证明均置于附录 B 中。

2 背景材料

记号：在全文中， $\mathbb{R}^n$ 的元素均表示为行向量，即一个分量水平排列的向量 r
其各分量按水平方向排列。

2.1 定义

定义 1（迹内积）。 对于任意正整数 n， n 阶实矩阵空间可赋予一个称为迹内积的标量积：

$$\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \rangle = tr(\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{B}^\top) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} a_{k\ell}\, b_{k\ell},$$

其中 $tr(\cdot)$ 为迹算子，$\top$ 为转置，$\boldsymbol{A} = [a_{k\ell}]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 与 $\boldsymbol{B} = [b_{k\ell}]_{k,\ \ell=1}^{n}$。

定义 2 (γ-实方阵的间隙)。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的子集， n 是正整数，且 $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$ 是实方阵（实值二维数组）。我们将 γ-间隙定义为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$ 上的

$$\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = \inf\{\boldsymbol{z}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{z}^{\top} : \boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n\}. \tag{2}$$

由于迹在循环排列下保持不变，也可以写成:

$$\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = \inf\{\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{z}^{\top}\boldsymbol{z}\rangle : \boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n\}.$$

术语“间隙”借自 Laurent和Poljak (1996) 为整数向量（一维数组）引入的间隙概念 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{Z}^n$:

$$\zeta(\boldsymbol{\lambda}, \{-1, 1\}) = \inf\{|\boldsymbol{z}\boldsymbol{\lambda}^{\top}| : \boldsymbol{z} \in \{-1, 1\}^n\}.$$

该向量 ζ-间隙与我们的矩阵 γ-间隙之间的关系如下：若 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{Z}^n$、$\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\lambda}^{\top}\boldsymbol{\lambda}$和 $\mathcal{E} = \{-1, 1\}$，则 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = \zeta^2(\boldsymbol{\lambda}, \mathcal{E})$。

定义 3 (γ-多维数组的间隙)。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的子集， n 和 q 是正整数，且 $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k_1,\ldots,k_q}]_{k_1,\ldots,k_q=1}^{n}$ 是实值 q维数组。我们将 γ-间隙 定义为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$ 上的

$$\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = \inf\left\{\sum_{k_1=1}^{n} \cdots \sum_{k_q=1}^{n} \lambda_{k_1,\ldots,k_q}\, z_{k_1} \ldots z_{k_q} : (z_1, \ldots, z_n) \in \mathcal{E}^n\right\}. \tag{3}$$

对于 $q = 2$，此定义与定义 *2* 相符。

定义 4 (η-实方阵的间隙)。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的子集， n 为正整数，且 $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$ 是实方阵（实值二维数组）。我们将 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$ 上的 η-间隙 定义为

$$\eta(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = \sup\left\{\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\,[z_k - z_\ell]^2 : (z_1 \ldots z_n) \in \mathcal{E}^n\right\}. \tag{4}$$

若不会引起混淆，我们将简单地称 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$ 上的“间隙”，而不特别说明 g ^{w}它是 γ-间隙还是 η-间隙。

前述矩阵间隙的概念可推广到适当希尔伯特空间中的函数间隙，如以下定义所示。

定义 5 (平方可积函数的希尔伯特空间，关于 $\mathbb{X}^2$)。 设 μ 是 $\mathbb{X}^2$上的正测度。我们将 $L^2(\mathbb{X}^2, \mu)$ 定义为定义在 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 上的实值函数空间，其中的函数关于 μ平方可积，并配备标量积

$$\langle f, g\rangle_{\mu} = \int_{\mathbb{X}^2} f(x, y)\, g(x, y)\, \mathrm{d}\mu(x, y), \quad f, g \in L^2(\mathbb{X}^2, \mu),$$

以及范数 $\|f\|_{\mu} = \sqrt{\langle f, f\rangle_{\mu}}$。

定义 6 (γ-间隙实函数)。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的子集， μ 是 $\mathbb{X}^2$ 上的有限正测度，且 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^2, \mu)$。我们将 λ 在 $\mathcal{E}$ 上的 γ-间隙 定义为

$$\gamma(\lambda, \mathcal{E}, \mu) = \inf\left\{\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x, y)\, z(x)\, z(y)\, \mathrm{d}\mu(x, y) : z \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}} \ \textit{and}\ \|\varphi_z\|_{\mu} < +\infty\right\}, \tag{5}$$

其中 $\varphi_z\colon (x,\ y) \mapsto \varphi_z(x,\ y) = z(x)z(y)$。

定义 7 (η-实函数的间隙)。设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$ 的一个子集，μ 是 $\mathbb{X}^2$ 上的有限正测度，且 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^2, \mu)$。我们将 λ 在 $\mathcal{E}$ 上的 η-间隙 定义为

$$\eta(\lambda, \mathcal{E}, \mu) = \sup\left\{\frac{1}{2}\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x,y)\,[z(x)-z(y)]^2\,\mathrm{d}\mu(x,y) : z \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}} \ \textit{and}\ \|\psi_z\|_\mu < +\infty\right\}, \quad (6)$$

其中 $\psi_z\colon (x,y) \mapsto \psi_z(x,y) = [z(x) - z(y)]^2$。

2.2 性质

˘设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$ 的一个子集，且 $\mathcal{E}$ 是其关于原点的对称集。以下性质显然成立：

- $0 \in \mathcal{E} \implies \gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) \leq 0$。
- $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \breve{\mathcal{E}}) = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$;
- $\mathcal{E} \subset \mathcal{E}' \implies \gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) \geq \gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}')$;
- $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E} \cup \mathcal{E}') \leq$取最小值 $(\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})\ \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}'))$;
- $\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E} \cup \breve{\mathcal{E}}) \leq \gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E})$;

对于 $a \in \mathbb{R}$, • $\gamma(\mathbf{\Lambda}, a\,\mathcal{E}) = a^2\,\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$;

对于 $a \in \mathbb{R}_{>0}$, • $\gamma(a\,\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = a\,\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$;

- $\gamma(\cdot, \mathcal{E})$ 是凹函数：

$$\gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \omega_k\,\mathbf{\Lambda}_k, \mathcal{E}\right) \geq \sum_{k=1}^{K} \omega_k\,\gamma(\mathbf{\Lambda}_k, \mathcal{E}),$$

对于所有和为 1 的非负实数 $\omega_1, \ldots, \omega_K$，当 $K = +\infty$ 时，这个不等式仍然成立，并且可推广到连续情形：将权重 $\omega_1, \ldots, \omega_K$ 替换为概率分布，并将离散求和替换为积分。

上述性质也适用于函数的 γ-间隙。它是矩阵 γ-间隙的连续版本，只需将 $\gamma(\lambda, \mathcal{E}, \mu)$ 替换为 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$。

对于矩阵的 η-间隙（以及推广而言，函数的 η-间隙），有：

- $\eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) \geq 0$;
- $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = \eta(\mathbf{\Lambda}', \mathcal{E})$，若 $\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}'$ 是对角矩阵;
- $\eta(\mathbf{\Lambda}, \breve{\mathcal{E}}) = \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$;
- $\mathcal{E} \subset \mathcal{E}' \implies \eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) \leq \eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}')$;
- $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E} \cup \mathcal{E}') \geq$最大值 $(\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})\ \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}'))$;
- $\eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E} \cup \breve{\mathcal{E}}) \geq \eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E})$;
- $\eta(\mathbf{\Lambda}, a\,\mathcal{E}) = a^2\,\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$ 对于 $a \in \mathbb{R}$;
- $\eta(a\,\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) = a\,\eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E})$ 对于 $a \in \mathbb{R}_{>0}$;
- $\eta(\cdot, \mathcal{E})$ 是凸的：对于所有和为 1 的非负实数 $\omega_1, \ldots, \omega_K$，

$$\eta\left(\sum_{k=1}^{K} \omega_k\,\mathbf{\Lambda}_k, \mathcal{E}\right) \leq \sum_{k=1}^{K} \omega_k\,\eta(\mathbf{\Lambda}_k, \mathcal{E}).$$

同样，若 $K = +\infty$，该不等式仍然成立，并且可以推广到连续情形。

矩阵或函数的 γ-间隙与 η-间隙，对于特定矩阵族和/或子集 $\mathcal{E}$，可以完全或部分确定。特别地，下列引理成立。

引理 1。设 $\mathbf{\Lambda}$ 是一个实对称半正定矩阵。那么 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) \geq 0$，并且$\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = 0$ 只要 $0 \in \mathcal{E}$成立。

引理 2。 设 $\mathbf{\Lambda}$是一个至少有一个负特征值的实对称矩阵。那么$\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = -\infty$ 对集合 $\mathbb{R}$、 $\mathbb{Q}$、 $\mathbb{Z}$ 和 $\mathbb{Z} \setminus \{0\}$ 中的每一个都成立。

推论 1. 设 $\mathbf{\Lambda}$ 为实对称矩阵。则， $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}) = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{Q}) = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{Z}) = 0$或 $-\infty$。

引理 3. 设 $\mathbf{\Lambda}$ 为实对称矩阵。则， $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{N}) = 0$ 或 $-\infty$。

引理 4. 设 $\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$ 为实矩阵。则， $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = -\gamma(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Delta}, \mathcal{E})$，其中 $\mathbf{\Delta}$ 是一个对角矩阵，其第 k 个对角线元素为 $\delta_{kk} = \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}$。

推论 2. 设 $\mathbf{\Lambda}$ 为实对称矩阵。则， $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}) = \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{Q}) = \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) = \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{Z}) = \eta(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{N}) = 0$ 或 $+\infty$。

推论 3. 若 $\mathbf{\Lambda}$的所有非对角线元素均为非正（即 $\mathbf{\Lambda}$ 是 Z 矩阵），则 $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = 0$。

一般而言，确定给定实方阵 $\mathbf{\Lambda}$ 的 γ-间隙是一个 NP 难问题。对于闭半直线 $\mathbb{R}_{\geq 0}$上的矩阵，确定其 γ-间隙也是如此：正如下文定理 1 的证明所示，判断 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) = 0$ 还是$\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) = -\infty$，等同于判断 $\mathbf{\Lambda}$ 是否属于完全正矩阵锥，而这是一项 NP 难问题（Dickinson 与 Gijben，2014）。另一个例子是计算秩一对称半正定矩阵的 γ-间隙，这等价于计算实向量的 ζ-间隙；对于元素属于 $\mathcal{E} = \{-1, 1\}$ 的向量，已证明这是一项 NP 难问题（Laurent 与 Poljak，1996）。同样，对于$\mathcal{E} = \{-1, 1\}$，确定具有非负元素的对称矩阵的 η-间隙，是一个 NP 难的最大割问题（Goemans 与 Williamson，1995）。

3 离散情形下的间隙不等式

本节给出一个映射成为陪域为 $\mathcal{E} \subseteq \mathbb{R}$ 的随机场的非中心协方差、半变异函数或高阶空间矩的充要条件。这些条件涉及定义 γ-间隙和 η-间隙不等式2至 4 中引入的间隙。

3.1 非中心协方差函数的刻画

定理 1。 设 $\mathcal{E}$ 是实数轴的一个闭子集。那么，映射 $\rho\colon \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上且取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的非中心协方差，当且仅当它满足以下两个条件：

1. 对称性： $\rho(x, y) = \rho(y, x)$，对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*2.* 间隙不等式：对任意正整数 n、任意实方阵 $\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$ 以及任意点集 $x_1, \ldots, x_n \subset \mathbb{X}$，均有

$$\langle \mathbf{\Lambda}, \boldsymbol{R} \rangle = \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\, \rho(x_k, x_\ell) \geq \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}), \tag{7}$$

其中 $\boldsymbol{R} = [\rho(x_k, x_\ell)]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 且 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E})$ 是 γ-间隙，即 $\mathbf{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$上的间隙，按照定义 2。此外，若将 $\mathbf{\Lambda}$限制为对称矩阵，则该定理的结论仍然成立。

注记 1. 间隙不等式（7）等价于

$$\langle \mathbf{\Lambda}, \boldsymbol{R} \rangle \leq \sup \left\{ \boldsymbol{z} \mathbf{\Lambda} \boldsymbol{z}^{\top} : \boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n \right\},$$

将 $\mathbf{\Lambda}$ 代入（7）并用 $-\mathbf{\Lambda}$替换即可看出这一点。

注 2。定理*1* 推广了两个著名结果（详情见附录*A*）：

- 对于 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$，这相当于说明非中心协方差是一个对称半正定函数（*Schoenberg，1938年*）。
- 对于 $\mathcal{E}=\{-1,1\}$，这相当于说明非中心协方差是一个对称角正半定函数（*McMillan，1955年*）。

注 3. 定理*1* 在 $\mathcal{E}$ 不是闭集时可能不成立。为此，我们考虑$\mathcal{E}=\mathbb{R}_{>0}$ （开半轴）的情形。在这种情况下，任意实方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的间隙均为负或零，因为对于任意固定向量 $\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^n_{>0}$，

$$\gamma(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E})\le\lim_{a\to 0^+}(a\boldsymbol{z})\boldsymbol{\Lambda}(a\boldsymbol{z})^\top=0.$$

因此，当*1* 时，定理的对称性和间隙不等式条件均成立ρ 恒等于零。然而，零函数不可能是定义在 $\mathbb{X}$上的严格正随机场的非中心协方差；它只能是几乎必然在 $\mathbb{X}$的每一点都等于零的随机场的非中心协方差。即使 $\mathcal{E}$ 有界，也可能出现同样的情况，例如当它是开区间（0，1）。

对于有界非闭集，有如下结果。

定理2。设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的一个有界子集。映射 $\rho:\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是定义在 $\mathbb{X}$上、取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的非中心协方差序列的逐点极限，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：$\rho(x,y)=\rho(y,x)$ 对任意 x、$y\in\mathbb{X}$均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意正整数 n、任意实对称矩阵$\boldsymbol{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^n$以及 $\mathbb{X}$中的任意点集 $x_1,\ldots,x_n$，均有

$$\langle\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{R}\rangle\ge\gamma(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E}),\tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{R}=[\rho(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^n$。

3.2 半变异函数的刻画

本节中，我们仅讨论定义在 $\mathbb{X}$ 上的无漂移随机场，即增量的期望为零的随机场（Chil`es & Delfiner，2012）。在这种情况下，随机场的半变异函数 $Z=\{Z(x,\omega):x\in\mathbb{X},\ \omega\in\Omega\}$ 定义为

$$g(x,y):=\frac{1}{2}\int_\Omega[Z(x,\omega)-Z(y,\omega)]^2\,\mathbb{P}(\mathrm{d}\omega),\quad x,y\in\mathbb{X}.$$

定理3. 设 $\mathcal{E}$ 为 $\mathbb{R}$的闭子集。映射 $g:\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是 $\mathbb{X}$ 上无漂移且取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的半变异函数，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：$g(x,y)=g(y,x)$ 对任意 x、$y\in\mathbb{X}$成立。*2.* 间隙不等式：对任意正整数 n、$\mathbb{X}$中的任意点集 $x_1,\ldots,x_n$ 以及任意实对称矩阵$\boldsymbol{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^n$，有

$$\langle\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{G}\rangle=\sum_{k=1}^n\sum_{\ell=1}^n\lambda_{k\ell}\,g(x_k,x_\ell)\le\eta(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E}),$$

其中 $\boldsymbol{G}=[g(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^n$和 $\eta(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E})$ 是 η-间隙，定义见 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在 $\mathcal{E}$上的定义 *3*。

通过为 $\mathbf{\Lambda}$选择对角矩阵，可以看出映射 g 在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$的对角线上必须为零。因此，定理 3 可以改述如下：

定理4。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$的一个闭子集。映射 g： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是 $\mathbb{X}$ 上取值于 $\mathcal{E}$ 且无漂移随机场的半变异函数，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性： $g(x,y)=g(y,x)$，对任意 x、 $y\in\mathbb{X}$均成立。*2.* $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$对角线上的值： $g(x,x)=0$，对任意 $x\in\mathbb{X}$ 均成立。*3.* 间隙不等式：对于任意正整数 n、 $\mathbb{X}$ 中的任意点集 x_1、…、 x_n，以及任意零对角元实对称矩阵$\mathbf{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$，均有

$$\langle\mathbf{\Lambda},\boldsymbol{G}\rangle=\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,g(x_k,x_\ell)\le\eta(\mathbf{\Lambda},\mathcal{E}),\tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{G}=[g(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^{n}$。

注4。 对于 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$，定理*4* 得出一个众所周知的结果：对称函数是无漂移随机场的变差函数，当且仅当它在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上为零且条件负半定，详情见附录*A* 。

3.3 协方差函数之外空间矩的刻画

定理 1 经适当调整后，可用于判断定义在 $\mathbb{X}^q$ 上的映射 ρ 是否可能是取值于 $\mathbb{R}$ 的紧子集中的随机场 Z 在 $\mathbb{X}$ 上的 $q\in\mathbb{N}_{\ge2}$ 阶空间矩，即对于 $\mathbb{X}$ 中的任意点集 $x_1,\ldots,x_q$，是否可以写成 $\rho(x_1,\ldots,x_q)=\mathbb{E}(Z(x_1)\ldots Z(x_q))$。证明是对定理 1 证明的直接推广（见附录 B），故从略。

定理5. 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$ 的闭子集， q 是大于 1 的整数。映射ρ_q： $\mathbb{X}^q\to\mathbb{R}$ 是取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场在 $\mathbb{X}$ 上的第 q 阶空间矩，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性： $\rho_q(x_1,x_2,\ldots,x_q)=\rho_q(x_{\sigma_1},x_{\sigma_2},\ldots,x_{\sigma_q})$ 对于任意点集 $x_1,\ldots,x_q\in\mathbb{X}$ 以及 $\{1,\ldots,q\}$ 的任意排列 $\{\sigma_1,\ldots,\sigma_q\}$ 均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意正整数 n、 $\mathbb{X}$ 中的任意点集 $x_1,\ldots,x_n$，以及任意实值 q 维数组 $\mathbf{\Lambda}=[\lambda_{k_1,\ldots,k_q}]_{k_1,\ldots,k_q=1}^{n}$，有

$$\sum_{k_1=1}^{n}\cdots\sum_{k_q=1}^{n}\lambda_{k_1,\ldots,k_q}\,\rho_q(x_{k_1},\ldots,x_{k_q})\ge\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathcal{E}),$$

其中 $\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathcal{E})$ 是 γ在 $\mathcal{E}$ 上的间隙，依据定义 *3*。

例1。 设 $q=2q'$ 为偶整数。那么，映射

$$\rho_q(x_1,\ldots,x_q)=haf\big([\rho(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^{q}\big),$$

其中 ρ： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是对称半正定函数，*haf* 是哈夫尼安，是一个有效的 q阶随机场空间矩，其取值于 $\mathbb{R}$。实际上， ρ_q 不过是一个协方差函数为 ρ 的零均值高斯随机场的 q阶空间矩（*Isserlis*，*1918*）。

回顾一下，对称矩阵 $\boldsymbol{R}=[r_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{q}$ 的哈夫尼安定义如下：

$$haf(\boldsymbol{R})=\sum_{K,L}r_{k_1,\ell_1}\ldots r_{k_{q'},\ell_{q'}},$$

其中，求和遍历集合 $\{1,\ldots,q\}$ 分解为两个互不相交的子集 $K=\{k_1,\ldots,k_{q'}\}$ 和 $L=\{\ell_1,\ldots,\ell_{q'}\}$ 的所有方式，使得 $k_1<\ldots<k_{q'}$、$\ell_1<\ldots<\ell_{q'}$ 和 $k_i<\ell_i$ 对于 $i=1,\ldots,q'$ 均成立。

3.4 多元随机场

对于 $\mathbb{X}$ 上的多元随机场 $\boldsymbol{Z}=(Z_1,\ldots\ldots,Z_p)$，非中心协方差和半变异函数变为矩阵值函数：

$$\boldsymbol{\rho}(x,y):=\int_{\Omega}\boldsymbol{Z}^{\top}(x,\omega)\boldsymbol{Z}(y,\omega)\,\mathbb{P}(\mathrm{d}\omega),\quad x,y\in\mathbb{X},$$
$$\boldsymbol{g}(x,y):=\frac{1}{2}\int_{\Omega}[\mathbf{1}^{\top}\boldsymbol{Z}(x,\omega)-\boldsymbol{Z}^{\top}(y,\omega)\mathbf{1}]^2\,\mathbb{P}(\mathrm{d}\omega),\quad x,y\in\mathbb{X},$$

后者称为伪半变异函数（Myers，1991年）。

第3.1节和3.2 节的所有结果都可以推广到多变量情形，只需将 $\boldsymbol{Z}$视为定义在 $\mathbb{X}\times\{1,\ldots,p\}$上的单变量随机场。另一种方法是调整前述定理的 $Z_1\ldots\ldots,Z_p$使单变量随机场的陪域 $\mathcal{E}=\mathcal{E}_1\times\ldots\times\mathcal{E}_p$ 可以不同，即处理形式为 p元随机场 $\boldsymbol{Z}$的陪域。在最一般的情形下，该陪域可以是 $\mathbb{R}^p$ 的闭子集，而不仅仅是 $\mathbb{R}$的闭集的笛卡尔积。例如，在矿产资源评价中，可以考虑用陪域为 $\mathcal{E}=[0,100]\times\{0,1\}$的二元随机场联合建模矿石品位和岩性域，或用 p元随机场建模一组组成变量，其中 $\mathcal{E}$ 为 p维标准单纯形。

由此可得到定理1 和4的以下直接多变量推广，其中涉及定义 γ-间隙和 η-间隙的多变量推广，二者见定义2和4。证明略。

定理6。设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}^p$ 的闭子集。矩阵值映射 $\boldsymbol{\rho}:\ \mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}^{p\times p}$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathcal{E}$ 的 p 变量随机场的非中心矩阵值协方差，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：$\boldsymbol{\rho}(x,y)=\boldsymbol{\rho}^{\top}(y,x)$，对任意 x、$y\in\mathbb{X}$ 均成立。*2.* 间隙不等式：对任意正整数 n、任意实对称矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k\,\ell=1}^{p\times n}$ 以及任意点集 $x_1,\ldots,x_n\subset\mathbb{X}$，均有

$$\langle\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{R}\rangle\geq\gamma(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E}),$$

其中 $\boldsymbol{R}=[\boldsymbol{\rho}(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^{n}$ 且 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E})=\inf\{\boldsymbol{z}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{z}^{\top}:\ \boldsymbol{z}\in\mathcal{E}^n\}$。

特别地，如果 $\mathcal{E}=\mathbb{R}^p$，间隙不等式可化为半正定性限制（矩阵 $\boldsymbol{R}$ 必须是半正定的）。

定理7。设 $\mathcal{E}$是 $\mathbb{R}^p$的一个闭子集。当且仅当满足以下条件时，矩阵值映射 $\boldsymbol{g}$：$\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}^{p\times p}$是定义在 $\mathbb{X}$ 上且取值于 $\mathcal{E}$的 p元随机场的矩阵值伪半变异函数：

1. 对称性：对于任意 x、$y\in\mathbb{X}$，$\boldsymbol{g}(x、y)=\boldsymbol{g}^{\top}(y、x)$。*2.* 对角值：对于任意 $x\in\mathbb{X}$，$\boldsymbol{g}(x、x)$ 的对角元均等于0。*3.* 间隙不等式：对于任意正整数 n、$\mathbb{X}$中的任意点集 x_1、……、x_n，以及任意具有零对角元的实对称矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k}^{p\times n}$，$\ell=1$，有

$$\langle\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{G}\rangle\leq\eta(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E}),$$

其中 $\boldsymbol{G}=[\boldsymbol{g}(x_k,x_\ell)]_{k,\ \ell=1}^{n}$以及 $\eta(\boldsymbol{\Lambda},\mathcal{E})=$上确界$_{\boldsymbol{z}\in\mathcal{E}^n}\{\boldsymbol{z}(\boldsymbol{\Delta}-\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{z}^{\top}\}$，$\boldsymbol{\Delta}$是阶数为 $p\times n$ 的对角矩阵，其第 k 条对角线上的元素为第 k

行中各元素之和。

特别是，如果 $\mathcal{E}=\mathbb{R}^p$，间隙不等式就简化为 Gesztesy 和 Pang (2017) 提出的条件负半定限制：矩阵 $\boldsymbol{G}$ 必须是条件负半定的，即 $\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{G}\boldsymbol{\lambda}^\top \le 0$ 对所有 $\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^{p\times n}$ 其元素之和为零的情况均成立。

4 连续情形下的间隙不等式

本节中，我们提出用核 而非矩阵来重述前面的定理，也就是说，我们将离散框架转换为连续框架。

定理 8 (非中心化协方差，紧致陪域)。 设 $\mathcal{E}$ 是$\mathbb{R}$ 的紧子集，且 μ 是 $\mathbb{X}^2$上的任意正有限测度。函数 $\rho\in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$ 是取值于 $\mathcal{E}$ 、定义在 $\mathbb{X}$ 上的随机场的非中心化协方差，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性： $\rho(x,y)=\rho(y,x)$ 对任意 $x,y\in\mathbb{X}$均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意函数 $\lambda\in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$，有

$$\langle\lambda,\rho\rangle_\mu=\int_{\mathbb{X}^2}\lambda(x,y)\,\rho(x,y)\,\mathrm{d}\mu(x,y)\ge\gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu),\tag{10}$$

其中 γ（λ、$\mathcal{E}$、μ）是根据定义 γ的 λ在 $\mathcal{E}$上的间隙，其中 6。
此外，如果将 λ 和 μ 限制为对称矩阵，定理的结论仍然成立。

注 *5*。当 $\mu(x,y)$ 是两个狄拉克测度 $\delta_x(x_1,\ldots,x_n)$ 和 $\delta_y(x_1,\ldots,x_n)$ 的乘积时，间隙不等式 *(10)* 归结为不等式 *(7)*。然而，与选择狄拉克测度相对应的情况（狄拉克测度在 $\mathbb{X}\setminus\{x_1,\ldots,x_n\}$ 上为零，因此不是正测度，而只是非负测度）要求不仅对任意实方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 陈述间隙不等式，还要对矩阵的任意阶数 (n) 以及 $\mathbb{X}$ 中支撑点 $x_1,\ldots,x_n$ 的任意选择陈述间隙不等式。在这方面，定理 *8* 的一个优点是：将定理 *1* 中涉及所有可能的整数 n 以及 $\mathbb{X}$ 中点 $x_1,\ldots,x_n$ 的离散表述，替换为涉及 $\mathbb{X}^2$ 上单个正测度 μ 的表述。

相应地，定理 8 可推广至半变异函数、高阶空间矩以及多变量情形，如下所示（证明略）。

定理 9 (半变异函数，紧致陪域)。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$ 的一个紧子集，且 $\mathbb{X}^2$ 上的 μ 是任意正有限测度。映射 $g\in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、无漂移且取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的半变异函数，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性： $g(x,y)=g(y,x)$，对任意 $x,y\in\mathbb{X}$ 均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意函数 $\lambda\in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$，有

$$\langle\lambda,g\rangle_\mu=\int_{\mathbb{X}^2}\lambda(x,y)\,g(x,y)\,\mathrm{d}\mu(x,y)\le\eta(\lambda,\mathcal{E},\mu),\tag{11}$$

其中 $\eta(\lambda,\mathcal{E},\mu)$ 是 λ 在 $\mathcal{E}$上的 η-间隙，依据定义 7。
函数 λ 可以限制为在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上为零，前提是额外的条件是同样的限制对 g 成立。

定理 10 （高阶空间矩，紧致陪域）。 设 $\mathcal{E}$ 是 $\mathbb{R}$ 的紧子集， q 是大于 1 的整数，且 μ 是 $\mathbb{X}^q$ 上任意的正有限测度。函数 $\rho_q\in L^2(\mathbb{X}^q,\mu)$ 是取值于 $\mathcal{E}$ 、定义在 $\mathbb{X}$ 上的随机场的 q 阶空间矩，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：对于任意点集 $x_1, \ldots, x_q \in \mathbb{X}$ 以及 $\{1, \ldots, q\}$ 的任意排列 $\{\sigma_1, \ldots, \sigma_q\}$，$\rho_q(x_1, x_2, \ldots, x_q) = \rho_q(x_{\sigma_1}, x_{\sigma_2}, \ldots, x_{\sigma_q})$。*2.* 间隙不等式：对于任意函数 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^q, \mu)$，有

$$\int_{\mathbb{X}^q} \lambda(\boldsymbol{x})\, \rho_q(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\mu(\boldsymbol{x}) \geq \gamma(\lambda, \mathcal{E}, \mu), \tag{12}$$

其中 $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_q)$ 且

$$\gamma(\lambda, \mathcal{E}, \mu) = \inf \left\{ \int_{\mathbb{X}^q} \lambda(\boldsymbol{x})\, \varphi_z(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\mu(\boldsymbol{x}) : z \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}} \text{ and } \varphi_z \in L^2(\mathbb{X}^q, \mu) \right\}. \tag{13}$$

满足 $\varphi_z(\boldsymbol{x}) = z(x_1) \times \ldots \times z(x_q)$。

定理 11 (矩阵值协方差，紧陪域)。设 $\mathcal{E}$ 是$\mathbb{R}^p$ 的一个紧子集，μ 是定义在 $\mathbb{X}^2$上的任意正有限测度。矩阵值函数 $\boldsymbol{\rho} = [\rho_{ij}]_{i\ ,j=1}^{p}$满足 $\rho_{ij} \in L^2(\mathbb{X}^2, \mu)$，当且仅当它满足以下条件时，才是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathcal{E}$ 的 p元随机场的非中心协方差：

1. 对称性：对于任意 $x, y \in \mathbb{X}$，有 $\boldsymbol{\rho}(x, y) = \boldsymbol{\rho}^{\top}(y, x)$。*2.* 间隙不等式：对于任意满足 $\lambda_{ij} \in L^2(\mathbb{X}^2, \mu)$的矩阵值函数 $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_{ij}]_{i\ ,j=1}^{p}$，有

$$\langle \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\rho} \rangle_{\mu} := \int_{\mathbb{X}^2} tr\left(\boldsymbol{\lambda}(x, y)\, \boldsymbol{\rho}(y, x)\right)\, \mathrm{d}\mu(x, y) \geq \gamma(\boldsymbol{\lambda}, \mathcal{E}, \mu), \tag{14}$$

其中 $\gamma(\boldsymbol{\lambda}, \mathcal{E}, \mu) =$ 下确界 $\left\{ \int_{\mathbb{X}^2} tr\left(\boldsymbol{z}(x)\ \boldsymbol{\lambda}(x, y)\ \boldsymbol{z}^{\top}(y)\right) \mathrm{d}\mu(x, y) : \boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}} \right\}$。

多元情形也可以通过将 p元随机场在 $\mathbb{X}$ 上视为定义在 $\mathbb{X} \times \{1, \ldots, p\}$上的单变量随机场来处理，这相当于在定理 $\mathbb{X}$中用 $\mathbb{X} \times \{1, \ldots, p\}$替换 8。这种替代方法假设所有场分量的取值都属于同一个紧致 $\mathcal{E}$，因此不如定理 11灵活。

无紧致陪域的情形处理起来更为复杂。要进行简洁明了的处理，需要对集合 $\mathbb{X}$（要求其为度量空间）、可容许协方差函数类（要求其为连续函数）以及测度 μ（要求其为乘积测度）附加假设，如下述定理所示；该定理适用于 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$、$\mathbb{R}_{\geq 0}$ 或 $\mathbb{R}_{\leq 0}$ 的情形。

定理 12 (非中心协方差，无界陪域)。设 $\mathbb{X}$ 为度量空间，ϖ 为 $\mathbb{X}$ 上的正有限测度，$\mu = \varpi \times \varpi$ 为 $\mathbb{X}^2$ 上相应的乘积测度，并且 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$、$\mathbb{R}_{\geq 0}$ 或 $\mathbb{R}_{\leq 0}$。连续函数 $\rho : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的非中心协方差，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：$\rho(x, y) = \rho(y, x)$对于任意 x、$y \in \mathbb{X}$均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意对称连续函数 λ：$\mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$，有

$$\langle \lambda, \rho \rangle_{\mu} = \int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x, y)\, \rho(x, y)\, \mathrm{d}\mu(x, y) \geq \gamma(\lambda, \mathcal{E}, \mu). \tag{15}$$

注6。如果 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$，ϖ 是具有连续密度的测度，并且 λ 是可分函数，则间隙不等式（*15*）归结为定义正型函数（亦称正半定核）的 *Mercer* 条件，该条件定义于 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$：

$$\int_{\mathbb{X}^2} g(x)\, \rho(x, y)\, g(y)\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y \geq 0, \tag{16}$$

对于任意 g 在 $\mathbb{X}$ 上连续且平方可积（*Mercer*，*1909*年）。

5 总结

我们推导出一组不等式，它们是对称函数成为指标集为 $\mathbb{X}$ 且陪域 $\mathcal{E}$ 为 $\mathbb{R}$的闭子集或紧子集的随机场的非中心协方差、半变异函数或高阶矩的充要条件。这些不等式推广了已知结果，特别是：当 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$时，非中心协方差类与对称正半定函数类相同；当 $\mathcal{E}=\{-1,1\}$时，则与对称角正半定函数类相同；而当 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$时，半变异函数类与在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上取零的对称条件负半定函数类相同。在连续框架下，还可得到关于正半定算子的 Mercer 条件。

每个不等式的关键组成部分有：1. 一个测试矩阵 $\mathbf{\Lambda}$ （离散框架）或一个测试函数 λ（连续框架），它们充当观察视角，用以考察一个待定的协方差、半变异函数或高阶矩；2. 一个我们称为间隙 的量，它取决于陪域以及测试矩阵或测试函数，但不取决于指标集 $\mathbb{X}$ ，也不取决于正在考察的待定协方差、半变异函数或高阶矩。

所提出的形式体系不仅揭示了它与概率论和随机过程理论之间的联系，也揭示了它与拓扑学、代数、分析学、组合优化和凸几何之间的联系。我们的结果有助于深入理解在给定陪域的条件下可实现的协方差核的谱理论；这一理论仍处于起步阶段。

致谢

本研究由智利国家研究与发展署资助并支持 [，经费来自 ANID CIA250010 和 ANID Fondecyt 1250008]。

声明

利益冲突。 作者声明，他们未意识到任何可能影响本文所报告工作的经济利益或个人关系。本文不包含作者开展的任何涉及人类参与者的研究。

A 各类特定陪域概述

A.1 取值于 $\mathbb{R}$ or $\mathbb{Z}$ 的随机场

定理13。 设 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$ *or* $\mathbb{Z}$。映射 $\rho\colon \mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的非中心协方差，当且仅当满足以下条件：

1. 对称性： $\rho(x,y)=\rho(y,x)$ 对任意 $x,y\in\mathbb{X}$。*2.* 半正定性：对任意正整数 n、任意点集 $x_1,\dots,x_n$ 属于 $\mathbb{X}$以及任意实数集 $\lambda_1,\dots,\lambda_n$，不等式 *(1)* 成立。

定理14. 设 $\mathcal{E}=\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{Z}$。映射 g： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是一个取值于 $\mathcal{E}$ 、定义在 $\mathbb{X}$ 上的随机场的半变异函数，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性： $g(x,y)=g(y,x)$ ，对任意 $x,y\in\mathbb{X}$ 均成立。*2.* $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上的值： $g(x,x)=0$ ，对任意 $x\in\mathbb{X}$ 均成立。*3.* 条件负半定性：对于任意正整数 n、任意点集x_1、…、x_n （属于 $\mathbb{X}$），以及任意一组和为零的实数 λ_1、……、λ_n ，均有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_k\,\lambda_\ell\,g(x_k,x_\ell)\le 0. \tag{17}$$

A.2 取值于 $\mathbb{Z} \setminus \{0\}$ 的随机场

引理 5。 对于实对称半正定矩阵 $\mathbf{\Lambda}$，$\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathbb{Z}\setminus\{0\}) = \gamma_n \det(\mathbf{\Lambda})^{\frac{1}{n}}$，其中 γ_1，γ_2，…，称为 *Hermite*常数。特别地，有（*Blichfeldt*，*1929*；*Cassels*，*1997*；*Conway*与*Sloane*，*1998*，）

- $[\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5, \gamma_6, \gamma_7, \gamma_8, \gamma_{24}] = [1, \sqrt{\frac{4}{3}}, \sqrt[3]{2}, \sqrt{2}, \sqrt[5]{8}, \sqrt[6]{\frac{64}{3}}, \sqrt[7]{64}, 2, 4]$
- $\frac{1}{\pi}\left[2\Gamma\left(1+\frac{n}{2}\right)\right]^{\frac{2}{n}} \leq \gamma_n \leq \frac{2}{\pi}\Gamma\left(2+\frac{n}{2}\right)^{\frac{2}{n}}$
- $\gamma_n \leq n$ *for any* $n \in \mathbb{N}$
- $\gamma_n \leq \frac{2n}{3}$ *for any* $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$
- $\frac{1}{2\pi \mathrm{e}} \lesssim \frac{\gamma_n}{n} \lesssim \frac{1.744}{2\pi \mathrm{e}}$ *for large* n.

定理 15. 设 $\rho\colon\ \mathbb{X}\times\mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是一个对称半正定函数。那么，$\rho + \varepsilon\,\delta$ 定义为

$$\rho(x,y) + \varepsilon\,\delta(x,y) = \begin{cases} \rho(x,y) \ \textit{if } x \neq y \\ \rho(x,x) + \varepsilon \ \textit{otherwise,} \end{cases}$$

若 $\varepsilon \geq 1$，则它是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathbb{Z}\setminus\{0\}$ 的某个随机场的非中心协方差。此外，若对于任意 $x \in \mathbb{X}$，都有 $\rho(x,x) \geq \frac{1}{3}$，则关于 ε 的条件可简化为 $\varepsilon \geq \frac{2}{3}$。

A.3 二元随机场

定义8 (McMillan，1955年)。 单位过程是一个取值于 $\{-1,1\}$ 的随机场。

定义 9 (McMillan，1955年)。 方阵 $\mathbf{\Lambda}$ 是角正的，如果 $\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \{-1,1\}) \geq 0$.

定理 16 (McMillan，1955年)。 映射 $\rho\colon\ \mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是 $\mathbb{X}$ 中某个单位过程的非中心协方差，当且仅当它满足以下条件：

1. 对称性：$\rho(x,y) = \rho(y,x)$ 对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*2.* $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上的值：$\rho(x,x) = 1$ 对任意 $x \in \mathbb{X}$ 均成立。*3.* 角正不等式：对于任意正整数 n、任意点集 x_1、……、x_n（属于 $\mathbb{X}$）以及任意角正矩阵 $\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ \ell=1}^{n}$，均有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\,\rho(x_k, x_\ell) \geq 0. \tag{18}$$

定理17。 设 $\rho\colon\ \mathbb{X}\times\mathbb{X}\to[-1,1]$ 是一个随机场的非中心协方差 d 取值于 $[-1,1]$。那么，由下式定义的映射 ρ^*

$$\rho^*(x,y) = \begin{cases} \rho(x,y) \ \textit{if } x \neq y \\ 1 \ \textit{otherwise,} \end{cases}$$

是 $\mathbb{X}$ 中某个单位过程的非中心协方差。

下一个定理给出一类实对称矩阵 $\mathbf{\Lambda}$，对于这类矩阵，无需计算所有可能实现对应的 $\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \{-1,1\})$ 即可求出间隙 $\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{z}^\top$。$\boldsymbol{z} \in \{-1,1\}^n$因此，将定理 1 应用于这些矩阵，可为给定映射 ρ 成为单位过程的可实现非中心协方差提供必要条件。

定理 18. 映射 $\rho\colon\ \mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 成为 $\mathbb{X}$ 中的单位过程的非中心协方差的必要条件为：

1. 对称性：$\rho(x,y) = \rho(y,x)$ 对于任意 x、$y \in \mathbb{X}$。

2. 哈达玛变换不等式：对于任意正整数 n、 $\mathbb{X}$ 中的任意点集 x_1、…、 x_n 以及 $\{1,\dots,n\}$ 中的任意整数 u、 v，有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}(u,v)\,\rho(x_k,x_\ell)\geq b_m(n-q(u,v))-q(u,v)^2, \tag{19}$$

其中

- $\lambda_{k\ell}(u,v)=(-1)^{\sum_{j=1}^{m}[b_j(k)b_j(u)+b_j(\ell)b_j(v)]}$
- $\boldsymbol{b}(a)=[b_j(a)]_{j=1}^{m}$ 是 a 的二进制表示
- $m=1+\lfloor\log_2(n)\rfloor$，其中 $\lfloor\cdot\rfloor$ 为向下取整函数
- $q(u,v)=b_m(\boldsymbol{r}(u,v))\,\mathbf{1}^\top$
- $\boldsymbol{r}(u,v)=[r_i(u,v)]_{i=1}^{n}$ 其中 $r_i(u,v)=\boldsymbol{b}(u)\veebar\boldsymbol{b}(v))\,\boldsymbol{b}(i)^\top$
- $b_m(\boldsymbol{a})=[b_m(a_1)\dots,b_m(a_n)]$，其中 $b_m(\cdot)$ 是二进制表示中最右边的位（最低有效位）

- $\veebar$ 是异或（模2按位相加）
- $\mathbf{1}$ 是一个 n维全 *1* 行向量。

特别地，如果 $u=v$，那么 $q(u,v)=0$ 且（*19*）的右端可简化为$b_m(n)$，即 0 当 n 为偶数时，以及 1 当 n为奇数时。

定理 19. 映射 $g\colon\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to[0,2]$ 是 $\mathbb{X}$ 中某个单位过程的半变异函数，当且仅当满足以下条件：

1. 对称性： $g(x,y)=g(y,x)$ 对任意 $x,y\in\mathbb{X}$均成立。*2.* 间隙不等式：对于任意正整数 n、任意点集 $x_1,\dots,x_n$（属于 $\mathbb{X}$）以及任意实矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=[\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^{n}$，有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,g(x_k,x_\ell)\leq\eta(\boldsymbol{\Lambda},\{-1,1\})=\sigma(\boldsymbol{\Lambda})-\gamma(\boldsymbol{\Lambda},\{-1,1\}), \tag{20}$$

其中 $\sigma(\boldsymbol{\Lambda})=\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}$。

注7。作为定理*19*的一个特例，若 $\boldsymbol{\Lambda}=\boldsymbol{\lambda}^\top\boldsymbol{\lambda}$ 其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 是一个 n维行向量，其元素为 $\lambda_1,\dots,\lambda_n$，则式（*20*）变为

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,g(x_k,x_\ell)\leq\sigma^2(\boldsymbol{\lambda})-\zeta^2(\boldsymbol{\lambda}), \tag{21}$$

其中 $\sigma(\boldsymbol{\lambda})=\sum_{k=1}^{n}\lambda_k$ 且 $\zeta(\boldsymbol{\lambda})=$下确界$\{|\boldsymbol{z}\boldsymbol{\lambda}^\top|:\ \boldsymbol{z}\in\{-1,1\}^n\}$ 是向量 ζ的 $\boldsymbol{\lambda}$ 间隙。等价地，映射 $g/4$是取值于 $\{0,1\}$的随机场的半变异函数，它满足 *Laurent* 和 *Poljak*（*1996*）定义的间隙不等式。这些不等式还蕴含许多其他著名不等式，尤其是负型不等式和超度量不等式（*Galli*等人，*2012*）。

定理20（Emery 等人，2026）。映射 g： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是 $\mathbb{X}$ 中无漂移单位过程的半变异函数，当且仅当它具有以下表示形式：

$$g(x,y)=\frac{2}{\pi}\int_0^1\arccos C_t(x,y)\,\mathrm{d}t,$$

其中，对于任意 $t\in[0,1]$, C_t： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to[-1,1]$ 是一个对称半正定映射，在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$的对角线上取值为1。

A.4 取值于有界闭区间的随机场

定理 21. 映射 ρ： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 成为定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $[-1,1]$ 的随机场的非中心协方差的必要但不充分条件为：

1. 对称性： $\rho(x,y)=\rho(y,x)$ 对任意 $x,y\in\mathbb{X}$ 均成立。*2.* 有界性： $\rho(x,y)\in[-1,1]$ 对任意 $x,y\in\mathbb{X}$ 均成立。*3.* 半正定性：对于任意正整数 n、任意点集 $x_1,\ldots,x_n$（属于 $\mathbb{X}$）以及任意实数集 $\lambda_1,\ldots,\lambda_n$，有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_k\,\lambda_\ell\,\rho(x_k,x_\ell)\geq 0. \tag{22}$$

定理 21 的表述有些令人不安，因为它意味着，给定一个对称半正定函数（即使它是有界的），也可能不存在一个以该函数为非中心协方差的有界随机场。一个例子见 McMillan(1955年)：对于 $\sigma\in(\frac{2\sqrt{2}}{\pi},\ 1]$ 以及 $\theta\in\mathbb{R}\setminus\mathbb{Q}$，映射 ρ： $\mathbb{Z}\times\mathbb{Z}\to[-1,1]$ 定义如下

$$\rho(x,y)=\begin{cases}\sigma^2\cos(2\pi\theta(x-y))\ \text{if}\ x\neq y\\ 1\ \text{otherwise,}\end{cases}$$

是对称、有界且半正定的，但不是定义在 $\mathbb{Z}$ 取值于 $[-1,1]$上的任何随机场的协方差函数。更简单的例子包括$\sigma=1$和 $\theta\in\mathbb{R}$中的纯余弦协方差（ $\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ 以及更一般地，任意相关函数 ρ 在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 中不属于单位过程协方差函数集合（见上一节）：由于它在 $\mathbb{X}\times\mathbb{X}$ 的对角线上等于**1**，这意味着取值于 $[-1,1]$ 且具有ρ 作为其协方差的随机场必然是单位过程，但此类过程不允许存在在原点处光滑的平稳协方差函数（Matheron，1989年）。

下一条定理给出了一个充要条件。

定理 22。 映射 ρ： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 成为定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $[-1,1]$ 的随机场的非中心协方差的充要条件是其具有如下形式

$$\rho(x,y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{1}\arcsin C_t((x,u),(y,v))\mathrm{d}t\,\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v,\quad x,y\in\mathbb{X}, \tag{23}$$

其中，对于任意 $t\in[0,1]$、 C_t： $(\mathbb{X}\times[-1,1])^{\,2}\to[-1,1]$ 是一个对称半正定映射，在 $(\mathbb{X}\times[-1,1])^{\,2}$的对角线上取值1 。

例2。 令 $a\in[0,1]$，并考虑与 t 无关的可分协方差：

$$C_t((x,u),(y,v))=C(x,y)\,C'(u,v)$$

with

$$C'(u,v)=\begin{cases}1\ \textit{if}\ u=v\\ a\ \textit{otherwise.}\end{cases}$$

表示式（*23*）导出如下映射：

$$\rho_a(x,y)=\frac{2}{\pi}\arcsin(aC(x,y)),\quad x,y\in\mathbb{X},$$

这是取值于 $[-1,1]$的随机场的非中心协方差。例如，若$a=\frac{1}{2}$，已知 ρ_a 是标准高斯随机场的 $[-1,1]$均匀变换的协方差

协方差为 C （*Sondhi*，*1983年*）所述的高斯随机场；而对于 $a = 1$，它是单位过程的非中心协方差（*McMillan*，*1955年*）。

A.5 取值于 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 的随机场

定义 10. 实对称矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 称为共正矩阵，当且仅当 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) \geq 0$（*Hiriart-Urruty 与 Seeger*，*2010*，定义 *1.1*）。

定义 11. 实对称矩阵 $\boldsymbol{R}$ 称为完全正矩阵，如果它可以因子分解为 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^\top$，其中 $\boldsymbol{B}$ 是一个元素非负的（不一定是方阵的）矩阵（*Hall Jr. 与 Newman*，*1963*）。

定义 12. 实对称矩阵 $\boldsymbol{R}$ 称为双重非负矩阵，如果它是半正定的且元素非负。

定理 23. 映射 $\rho\colon \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 的随机场的非中心协方差的充要条件为：

1. 对称性：$\rho(x, y) = \rho(y, x)$ 对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*2.* 完全正性：对任意正整数 n 及任意点集 $x_1, \ldots, x_n$（属于 $\mathbb{X}$），$\boldsymbol{R} = [\rho(x_k, x_\ell)]_{k,\ell=1}^n$ 均为完全正矩阵。等价地，对任意共正矩阵 $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^n$，有

$$\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{R} \rangle = \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\, \rho(x_k, x_\ell) \geq 0.$$

注释 8。 完全正核的集合是一个闭凸锥，是有限阶完全正矩阵锥的无限维类比。关于该锥的拓扑描述，请读者参阅 *Dobre 等 (2016)* 和 *Burgdorf 等 (2017)*。

定理 24。 映射 $\rho\colon \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 要成为定义在 $\mathbb{X}$ 上且取值于 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 的随机场的非中心协方差，必须满足以下条件：

1. 对称性：$\rho(x, y) = \rho(y, x)$，对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*2.* 非负性：$\rho(x, y) \geq 0$，对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*3.* 半正定性：对于任意正整数 n、任意点集 $x_1, \ldots, x_n$（属于 $\mathbb{X}$）以及任意实数集 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$，均有

$$\sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_k\, \lambda_\ell\, \rho(x_k, x_\ell) \geq 0. \tag{24}$$

只有当 $\mathbb{X}$ 至多包含四个点时，这些条件才是充分的。

定理 25。 映射 $\rho\colon \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 成为取值于 $\mathbb{R}_{\geq 0}$、定义在 $\mathbb{X}$ 上的随机场的非中心协方差的充分条件为：

1. 对称性：$\rho(x, y) = \rho(y, x)$ 对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*2.* 正性：$\rho(x, y) > 0$ 对任意 $x, y \in \mathbb{X}$ 均成立。*3.* 对数半正定性：对于任意正整数 n、任意点集 x_1、…、x_n（属于$\mathbb{X}$）以及任意实数 λ_1、…、λ_n，均有

$$\sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \lambda_k\, \lambda_\ell\, \ln(\rho(x_k, x_\ell)) \geq 0. \tag{25}$$

B 证明

引理 1的证明。 根据半正定性的定义， γ-间隙 $\mathbf{\Lambda}$非负。此外， $\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{z}^\top = 0$ 当 $\boldsymbol{z} = \mathbf{0}$ 时，结论成立，证明完毕。

□

引理 2 的证明。存在 $\boldsymbol{z}_0 \in \mathbb{R}^n$ 使得 $\boldsymbol{z}_0\,\mathbf{\Lambda}\,\boldsymbol{z}_0^\top < 0$。根据连续性， $\mathbb{R}^n$ 包含 $\boldsymbol{z}_0$的一个邻域 $\mathcal{N}$，使得对于任意 $\boldsymbol{z} \in \mathcal{N}$，都有 $\boldsymbol{z}\,\mathbf{\Lambda}\,\boldsymbol{z}^\top < 0$。在此邻域内，可以找到坐标为有理数且非零的 $\boldsymbol{z}_1$ 。因此，存在一个整数 a，使得 $a\boldsymbol{z}_1$ 属于 $(\mathbb{Z}\setminus\{0\})^n$ 和 $(a\boldsymbol{z}_1)\ \mathbf{\Lambda}(a\boldsymbol{z}_1)^\top < 0$。由于 a 可以任意大， $a^2\,\boldsymbol{z}_1\mathbf{\Lambda}\,\boldsymbol{z}_1^\top$的绝对值也可以任意大，这证明了 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{Z}\setminus\{0\}) = -\infty$。由于集合 $\mathbb{R}$、$\mathbb{Q}$ 和 $\mathbb{Z}$ 包含 $\mathbb{Z}\setminus\{0\}$，结论成立。

□

引理 3的证明。 我们首先注意到 $\boldsymbol{z}\,\mathbf{\Lambda}\,\boldsymbol{z}^\top = 0$ 当 $\boldsymbol{z}$ 是零向量时，因此$\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0})$ 和 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{N})$ 都是非正的。现在我们区分两种情况：

1. $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) = 0$。由于 $\mathbb{N} \subset \mathbb{R}_{\geq 0}$，我们有 $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) \leq \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{N})$；因此， $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{N}) = 0$。
2. $\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}_{\geq 0}) < 0$。于是， $\mathbf{\Lambda}$ 至少有一个负特征值，且该引理的证明与引理 2 的证明类似，只需分别用 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 和 $\mathbb{N}^n$ 替换 $\mathbb{R}^n$ 和 $(\mathbb{Z}\setminus\{0\})^n$。

□

引理的证明 4。 该证明依赖于以下恒等式，它对任意 $\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots\ldots, z_n)$ 均成立：

$$\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,[z_k - z_\ell]^2 = \boldsymbol{z}(\mathbf{\Delta} - \mathbf{\Lambda})\boldsymbol{z}^\top.$$

□

推论的证明 3。 在所述条件下， $\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Delta}$ 是具有非负对角元素的对角占优矩阵，因此它是半正定的，且其 γ-间隙为正或零（引理 4）。对于一个 n维向量 $\boldsymbol{z}$ ，其所有分量都等于同一元素 z （取自 $\mathcal{E}$），由此可见 $\boldsymbol{z}(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Delta})\boldsymbol{z}^\top = 0$，证明完毕。

□

定理 1的必要性证明。 设 $Z = \{Z(x,\ \omega)\colon\ x \in \mathbb{X},\ \omega \in \Omega\}$ 是一个取值于 $\mathcal{E}$的随机场。我们有

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,Z(x_k,\omega)\,Z(x_\ell,\omega) \geq \inf\left\{\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k,\ell}\,z_k\,z_\ell : (z_1,\ldots,z_n) \in \mathcal{E}^n\right\},\quad \omega \in \Omega.$$

根据间隙的定义，可得

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,Z(x_k,\omega)\,Z(x_\ell,\omega) \geq \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}),\quad \omega \in \Omega.$$

接下来只需对两边取期望，即可得到（7）。

充分性。我们首先证明，充分性条件可以限制在实对称矩阵 $\mathbf{\Lambda}$上。一方面，任意实方阵 $\mathbf{\Lambda}$ 都可表示为一个对称矩阵$\mathbf{\Sigma} = [\sigma_{k\ell}]^n_{k,\ \ell=1}$ 与一个反对称矩阵$\boldsymbol{A} = [\alpha_{k\ell}]^n_{k,\ \ell=1}$之和。另一方面，对于任意$z_1$，$\ldots\ldots$，$z_n \in \mathcal{E}$ 以及 x_1，$\ldots\ldots$，$x_n \in \mathbb{X}$， $\sum_{k=1}^n\sum_{\ell=1}^n \alpha_{k\ell}\,z_k\,z_\ell = \sum_{k=1}^n\sum_{\ell=1}^n \alpha_{k\ell}\,\rho(x_k,\ x_\ell) = 0$ 由于

的对称性 ρ。特别地，这意味着 $\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E}) = \gamma(\mathbf{\Sigma},\ \mathcal{E})$。因此，间隙不等式（7）等价于

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\sigma_{k\ell}\,\rho(x_k,x_\ell) \geq \gamma(\mathbf{\Sigma},\mathcal{E}).$$

为完成充分性部分的证明，我们根据$\mathcal{E}$ 是实直线、闭半直线 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 或 $\mathbb{R}_{\leq 0}$、紧子集还是闭子集来区分四种情形；后者是最一般的情形，但我们为前三种具有独立意义的情形提供证明。

情形 1： $\mathcal{E} = \mathbb{R}$。设 $\mathbf{\Lambda}$ 为实对称矩阵。若它至少有一个负特征值，则间隙不等式（7）自动成立，这是根据引理 2。若 $\mathbf{\Lambda}$ 的所有特征值均为非负，即若 $\mathbf{\Lambda}$ 是半正定的，则 γ（$\mathbf{\Lambda}$, $\mathbb{R}$）$= 0$（引理1），且间隙不等式变为

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k\ell}\,\rho(x_k,x_\ell) = \mathbf{1}(\mathbf{\Lambda}\circ\boldsymbol{R})\mathbf{1}^\top \geq 0,$$

其中 1 是一个 n 维全 1 行向量，$\boldsymbol{R} = [\rho(x_k,x_\ell)]_{k,\ell=1}^{n}$，且 $\circ$ 是 Hadamard 积。只要 ρ 是对称半正定函数，这些不等式便成立，这意味着 $\boldsymbol{R}$ 是对称半正定矩阵，并且由舒尔乘积定理可知 $\mathbf{\Lambda}\circ\boldsymbol{R}$ 亦然。反之，对于满足 $\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^n$ 的 $\mathbf{\Lambda} = \boldsymbol{\lambda}^\top\boldsymbol{\lambda}$，可见间隙不等式 (7) 蕴含 $\boldsymbol{R}$ 必为半正定矩阵。因此，充分性条件等价于 ρ 为对称半正定函数。为完成证明，我们援引 Daniell-Kolmogorov 延拓定理，它保证在 $\mathbb{X}$上存在以 ρ为协方差函数的零均值高斯随机场（Doob，1953，定理 3.1）。

情形 2：$\mathcal{E} = \mathbb{R}_{\geq 0}$（情形 $\mathcal{E} = \mathbb{R}_{\leq 0}$的处理方式类似）。设 x_1，……，x_n是 $\mathbb{X}$中的一个点集，且 ρ是满足定理 1 条件的映射。根据引理 3，对于所有实对称矩阵 $\mathbf{\Lambda}$，间隙不等式 (7) 均自动成立，但以下情形除外：$\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathbb{R}_{\geq 0}) = 0$，这对应于所谓的共正矩阵（定义 10）。这证明了实对称矩阵 $\boldsymbol{R} = [\rho(x_k,x_\ell]_{k,\ell=1}^{n}$ 必属于完全正矩阵锥；在赋予迹内积的实矩阵向量空间中，该锥是共正锥的对偶（Hall Jr. & Newman，1963）。特别地，$\boldsymbol{R}$ 具有如下形式的因式分解（Dannenberg & Sch¨urmann，2023）

$$\boldsymbol{R} = \sum_{j=1}^{m}\alpha_j\,\boldsymbol{z}_j^\top\boldsymbol{z}_j, \tag{26}$$

其中 m为正整数，α_1，…，α_m为和为 1 的非负实数，且$\boldsymbol{z}_1,\ldots,\boldsymbol{z}_m$是 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$的元素。因此，$\boldsymbol{R}$是随机向量的非中心协方差矩阵，该随机向量取 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$，且以概率 α_j等于 $\boldsymbol{z}_j$。

基于移除该随机向量的最后一个分量后，得到的缩减随机向量具有非中心协方差矩阵 $[\rho(x_k,\ x_\ell]_{k\ \ell=1,}^{n-1}$ 这一事实，很容易证明，对于不同的 n 值以及在 $\mathbb{X}$ 中对 x_1，…，x_n 的不同选择，所得到的随机向量的有限维分布是一致的。因此，可以应用 Daniell-Kolmogorov 延拓定理，断言存在一个定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 的随机场，其非中心协方差函数为 ρ。

情形3： $\mathcal{E}$ **是** $\mathbb{R}$的紧子集。设 ρ： $\mathbb{X}\times\mathbb{X}\to\mathbb{R}$ 是满足定理条件1和2的映射。设 $\mathcal{C}(\Omega)$为样本空间 $\Omega = \mathcal{E}^{\mathbb{X}}$上的所有连续函数构成的集合。赋予上确界范数后，$\mathcal{C}(\Omega)$是一个赋范向量空间。设 $\mathcal{G}$ 是

$\mathcal{C}(\Omega)$中形如 $\omega \mapsto Z(x_k,\ \omega)\, Z(x_\ell,\ \omega)$的函数集合，其中 x_k 和 x_ℓ 分别是 $\mathbb{X}$ 中的点，而 $Z(\cdot,\ \omega)$ 是Ω中的一个元素。设 $\mathcal{M}$ 是由$\mathcal{G} \cup \{1\}$张成的 $\mathcal{C}(\Omega)$的线性子空间，其中1：$\omega \mapsto 1$ 是常函数。

定义线性算 p子 $\mathbb{E}$ on $\mathcal{M}$ 如下：
(a) $\mathbb{E}(\alpha_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^n \alpha_k g_k) = \alpha_0 + \sum_{k=1}^n \alpha_k\, \mathbb{E}(g_k)$ 对任意 $g_1, \ldots, g_n \in \mathcal{G}$和 $\alpha_0, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{R}$成立。(b) $\mathbb{E}(Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot)) = \rho(x_k, x_\ell)$ 对任意 $x_k, x_\ell \in \mathbb{X}$成立。
后一条件是有意义的，因为 ρ 是一个对称映射。前一条件尤其意味着 $\mathbb{E}(1) = 1$。可以证明（见下文引理 6 ）算子$\mathbb{E}$ 在 $\mathcal{M}$上定义良好。

设 n 为正整数，λ_0 为实数，$\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^n$ 为实方阵，且 d
$x_1, \ldots, x_n$ 为 $\mathbb{X}$的一个点集。假设对每个 $\omega \in$，以下不等式均成立 Ω:

$$\lambda_0 + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, Z(x_k, \omega)\, Z(x_\ell, \omega) \geq 0.$$

等价地，$\lambda_0 \geq -\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E})$。若间隙不等式（7）成立，则有：

$$-\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, \mathbb{E}(Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot)) \geq 0,$$

这意味着

$$\mathbb{E}\left\{\lambda_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot)\right\} = \lambda_0 + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, \mathbb{E}(Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot)) \geq 0,$$

因此，以下蕴含关系成立：

$$\lambda_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot) \geq 0 \implies \mathbb{E}\left\{\lambda_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \lambda_{k\ell}\, Z(x_k, \cdot)\, Z(x_\ell, \cdot)\right\} \geq 0,$$

即，线性算子 $\mathbb{E}$ 在 $\mathcal{M}$上是非负的。这意味着它是范数有界的（Quin-tanilla，2008年，补充材料，断言9.1.2）。根据Hahn-Banach连续延拓定理（Buskes，1993，定理2），$\mathbb{E}$ 可以延拓为 $\mathcal{C}(\Omega)$上的范数有界线性非负算子。

根据Tychonoff定理，$\Omega = \mathcal{E}^{\mathbb{X}}$ 相对于乘积拓扑是一个紧空间。此外，由于 $\mathcal{E}$ 是一个Hausdorff（又称分离）空间，Ω也具有这一性质。因此，我们可以应用Riesz-Markov-Kakutani表示定理（Rudin，1987年，定理2.14），断言存在Ω上的一个非负Borel测度 $\mathbb{P}$，使得对于每个 $f \in \mathcal{C}(\Omega)$，$\mathbb{E}(f) = \int_\Omega f(\omega)\mathbb{P}(\mathrm{d}\omega)$。这是一个概率测度，因为 $\mathbb{E}(1) = 1$。对于 $f = Z(x_k,\ \cdot)Z(x_\ell,\ \cdot)$，可得

$$\rho(x_k, x_\ell) = \mathbb{E}(Z(x_k, \cdot)Z(x_\ell, \cdot)) = \int_\Omega Z(x_k, \omega)Z(x_\ell, \omega)\mathbb{P}(\mathrm{d}\omega),$$

即，存在一个随机场 $Z = \{Z(x,\ \omega) :\ x \in \mathbb{X},\ \omega \in \Omega\}$，其取值于 $\mathcal{E}$，并以 ρ作为其非中心协方差。

情形 4：$\mathcal{E}$ 是 的闭子集。令 $\mathcal{S}_n$ 为 n 阶实方阵空间，并赋予迹内积；该空间与赋予通常标量积的欧几里得空间 $\mathbb{R}^{n^2}$同构。令 $\mathcal{P}_n$ 为形如 $\boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top$的矩阵集合，其中$\boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n$。令 $\mathcal{H}_n$ 为 $\mathcal{P}_n$ 的凸包；由于 $\mathcal{E}$ 是闭集，因此它也是闭集。

我们首先证明，矩阵 $\boldsymbol{R}_n$ 属于 $\mathcal{S}_n$ 当且仅当满足间隙不等式（7）时，它属于 $\mathcal{H}_n$。一方面，由于 Carath´eodory 定理，任意元素

$\boldsymbol{R}_n$ 属于 $\mathcal{H}_n$ 的元素都可以表示为 $\mathcal{P}_n$中元素的凸组合。等价地:

$$\boldsymbol{R}_n = \int_{\mathcal{E}^n} \boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top \mathbb{P}_n(\mathrm{d}\boldsymbol{z}), \tag{27}$$

其中， $\mathbb{P}_n$是 $\mathcal{E}^n$上的概率测度。根据 γ-间隙的定义，对于任意 $\boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n$ 和 $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathcal{S}_n$，都有 $\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top \rangle \geq \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E})$，因此，对于任意 $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathcal{S}_n$，

$$\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{R}_n \rangle = \int_{\mathcal{E}^n} \langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top \rangle \, \mathbb{P}_n(\mathrm{d}\boldsymbol{z}) \geq \int_{\mathcal{E}^n} \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) \, \mathbb{P}_n(\mathrm{d}\boldsymbol{z}) = \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}), \tag{28}$$

也就是说， $\boldsymbol{R}_n$ 满足间隙不等式。

反过来，对于任意 $\boldsymbol{R}_n \in \mathcal{S}_n \setminus \mathcal{H}_n$，超平面分离定理（Boyd & Van-denberghe, 2004，例2.20）断言，存在一个超平面将$\boldsymbol{R}_n$ 和 $\mathcal{H}_n$严格分开；也就是说，存在 $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathcal{S}_n$ 和 $b \in \mathbb{R}$ ，使得对于所有$\boldsymbol{B} \in \mathcal{H}_n$，均有 $\langle \boldsymbol{\Lambda}、\ \boldsymbol{R}_n \rangle < b < \langle \boldsymbol{\Lambda}、\ \boldsymbol{B} \rangle$ 。特别地， $b \leq \inf \{\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{B} \rangle \colon \boldsymbol{B} \in \mathcal{P}_n\} = \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E})$，因此 $\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{R}_n \rangle < \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E})$，也就是说， $\boldsymbol{R}_n$ 不满足间隙不等式。

根据（27），概率测度 $\mathbb{P}_n$ 刻画了随机向量 $\boldsymbol{Z}$ （属于 $\mathcal{E}^n$ ）的分布，并以 $\boldsymbol{R}_n$ 作为其非中心协方差。

最后，我们证明：若映射 ρ 满足定理 1 的条件，则与 $\boldsymbol{R}_n = [\rho(x_k, x_\ell)]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 和 $\boldsymbol{R}_{n-1} = [\rho(x_k, x_\ell)]_{k,\ \ell=1}^{n-1}$ 相关联的概率测度 $\mathbb{P}_n$ 与 $\mathbb{P}_{n-1}$ （如（27）所定义）是相容的。这源于如下事实： $\boldsymbol{R}_{n-1}$ 是 $\boldsymbol{R}_n$ 到 $\mathcal{S}_{n-1}$上的正交投影，可通过去掉 $\boldsymbol{R}_n$的最后一行和最后一列得到；并且 $\mathcal{H}_{n-1}$ 是 $\mathcal{H}_n$ 到 $\mathcal{S}_{n-1}$上的正交投影。因此， $\boldsymbol{R}_n \in \mathcal{H}_n \Rightarrow \boldsymbol{R}_{n-1} \in \mathcal{H}_{n-1}$。这对应于如下事实：在给定（27）的情况下， $\mathbb{P}_{n-1}$ 可通过将 $\mathbb{P}_n$对 $\mathcal{E}^{n-1}$进行边缘化而得到:

$$\boldsymbol{R}_{n-1} = \int_{\mathcal{E}^{n-1}} \boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top \mathbb{P}_{n-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{z}), \ \text{with} \ \ \mathbb{P}_{n-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{z}) = \int_{z' \in \mathcal{E}} \mathbb{P}_n(\mathrm{d}(\boldsymbol{z}, z')).$$

因此，我们可以运用 Daniell-Kolmogorov 延拓定理，断言存在一个取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场 Z in $\mathbb{X}$，其非中心协方差函数为 ρ 。

□

引理 6。 线性算子 $\mathbb{E}$ 在 $\mathcal{M}$ 由上述条件 *(a)* 和 *(b)* 定义（定理 *1*充分性部分证明中的情形*3*）是良定义的。

引理 *6*的证明。 我们沿用 Quintanilla (2008年，补充材料，断言 9.1.1）。设$g \in \mathcal{M}$ 并假设它有两种不同的表示，可写为 $\mathcal{G} \cup \{1\}$ 中元素的线性组合:

$$g = \alpha_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \alpha_{k\ell} \, Z(x_k, \cdot) \, Z(x_\ell, \cdot) = \alpha'_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^{n'} \sum_{\ell=1}^{n'} \alpha'_{k\ell} \, Z(y_k, \cdot) \, Z(y_\ell, \cdot).$$

那么,

$$\alpha_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \alpha_{k\ell} \, Z(x_k, \cdot) \, Z(x_\ell, \cdot) - \alpha'_0 \cdot 1 - \sum_{k=1}^{n'} \sum_{\ell=1}^{n'} \alpha'_{k\ell} \, Z(y_k, \cdot) \, Z(y_\ell, \cdot) = g - g = 0 \cdot 1$$

也属于 $\mathcal{M}$。利用 $\mathbb{E}$ 在 $\mathcal{M}$ 上的线性性，可得

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}\Big\{\alpha_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \alpha_{k\ell} \, Z(x_k, \cdot) \, Z(x_\ell, \cdot)\Big\} - \mathbb{E}\Big\{\alpha'_0 \cdot 1 + \sum_{k=1}^{n'} \sum_{\ell=1}^{n'} \alpha'_{k\ell} \, Z(y_k, \cdot) \, Z(y_\ell, \cdot)\Big\} \\ &\quad = \mathbb{E}(0 \cdot 1) = 0 \cdot \mathbb{E}(1) = 0, \end{aligned}$$

这证明了 $\mathcal{M}$ 中同一元素的任意两种表示在 $\mathbb{E}$ 下的像相同。

□

定理 2的证明。令 $\mathcal{E}$ 表示 $\mathcal{E}$ 在 $\mathbb{R}$ 赋予通常拓扑后的闭包。一方面， $\mathcal{E}$ 是闭且有界的，因此是 $\mathbb{R}$中的一个紧集。另一方面，有

$$\gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = \inf\{\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{z}^\top : \boldsymbol{z} \in \mathcal{E}^n\} = \inf\{\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{z}^\top : \boldsymbol{z} \in \bar{\mathcal{E}}^n\} = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \bar{\mathcal{E}}).$$

因此，由于定理 1，满足条件（8）的对称映射 ρ 是定义在 Z 上、取值于 $\mathbb{X}$ 的随机场 $\mathcal{E}$的非中心协方差。

令 $\epsilon > 0$。我们将 $z \in \mathcal{E}$ 的一个 ϵ-邻域定义为 $N_\epsilon(z) = [z - \epsilon, z + \epsilon] \cap \mathcal{E}$，并定义一个映射 $\varphi_\epsilon : \mathcal{E} \to \mathcal{E}$，它将 $\mathcal{E}$ 中的每个点映射到 $\mathcal{E}$中的一个邻近点:

$$\varphi_\epsilon(z) = \dot{z}, \quad z \in \bar{\mathcal{E}},$$

其中， $\dot{z}$ 是从 $N_\epsilon(z)$ 中任意选取的一个点。

由上述随机场 Z，我们定义取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场 $Z = \varphi_\epsilon(Z)$，以及取值于 $[-\epsilon, \epsilon]$的随机场 $D = Z - Z$。 Z 的非中心协方差为

$$\begin{aligned}\rho_\epsilon(x, y) &= \mathbb{E}(\dot{Z}(x, \cdot)\dot{Z}(y, \cdot)) \\ &= \rho(x, y) + \mathbb{E}(D(x, \cdot)Z(y, \cdot)) + \mathbb{E}(Z(x, \cdot)D(y, \cdot)) + \mathbb{E}(D(x, \cdot)D(y, \cdot)).\end{aligned}$$

由于 Z 取值于有界集合 $\mathcal{E}$，且 $|D|$ 有上界 ϵ，因此可见，当 ϵ 趋于零时， ρ_ϵ逐点趋于 ρ。

□

定理 3 和4的证明。这些定理显然等价，证明方法与定理 1类似。在充分性部分（情形 4）中，只需在 $\boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^\top$ 的定义中将矩阵 $[\mathbf{1}^\top\boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}^\top\mathbf{1}]^2$ 替换为 $\mathcal{P}_n$，并将 γ-间隙替换为 η-间隙。

□

例1的证明。我们来证明 ρ_q 满足定理5的条件。对称性条件源于哈夫尼安的对称性以及映射 ρ 的对称性，该映射定义 ρ_q。至于间隙不等式，它们源于定理1 ，当 $q = 2$时。我们来考察情形 $q = 4$。设 Z 是 $\mathbb{X}$ 上的随机场，取值于 $\mathbb{R}$ ，其非中心协方差为 ρ。定义随机场 Y，它在 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 上，为 Z的两个独立副本之积。根据定理1，可以写出

$$\begin{aligned}&\sum_{k_1=1}^n \sum_{k_2=1}^n \sum_{k_3=1}^n \sum_{k_4=1}^n \lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\, \rho(x_{k_1}, x_{k_2})\rho(x_{k_3}, x_{k_4}) \\ &= \sum_{k_1=1}^n \sum_{k_2=1}^n \sum_{k_3=1}^n \sum_{k_4=1}^n \lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\, \mathbb{E}(Y(x_1, x_3)\, Y(x_2, x_4)) \\ &\geq \inf_{(z\, z') \in \mathbb{R}^2} \sum_{k_1=1}^n \sum_{k_2=1}^n \sum_{k_3=1}^n \sum_{k_4=1}^n \lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\, z\, z' \\ &\geq \inf_{(z_{k_1}, z_{k_2}, z_{k_3}, z_{k_4}) \in \mathbb{R}^4} \sum_{k_1=1}^n \sum_{k_2=1}^n \sum_{k_3=1}^n \sum_{k_4=1}^n \lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\, z_{k_1}\, z_{k_2}\, z_{k_3}\, z_{k_4} = \gamma(\mathbf{\Lambda}, \mathbb{R}),\end{aligned}$$

其中$\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k_1,\ldots,k_4}]_{k_1,\ \ldots,\ k_4=1}^{n}$。因此，根据哈夫尼安的定义，

$$\sum_{k_1=1}^{n}\sum_{k_2=1}^{n}\sum_{k_3=1}^{n}\sum_{k_4=1}^{n}\lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\,\rho_4(x_{k_1},x_{k_2},x_{k_3},x_{k_4}) \geq 3\,\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathbb{R}).$$

现在，$\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathbb{R})$ 要么为 0，要么为 $-\infty$。事实上，当 $(z_{k_1}, z_{k_2}, z_{k_3}, z_{k_4}) = (0, 0, 0, 0)$ 时，$\sum_{k_1=1}^{n}\sum_{k_2=1}^{n}\sum_{k_3=1}^{n}\sum_{k_4=1}^{n}\lambda_{k_1,k_2,k_3,k_4}\,z_{k_1}z_{k_2}z_{k_3}z_{k_4}$为零；并且，如果对某个 $(z_{k_1}, z_{k_2}, z_{k_3}, z_{k_4}) \neq (0, 0, 0, 0)$，四重和为负，那么当 a 趋于无穷大时，它趋于 $-\infty$。这意味着 $3\,\gamma(\mathbf{\Lambda},\mathbb{R}) = \gamma(\mathbf{\Lambda},\mathbb{R})$，从而完成了 $q = 4$的证明。$q > 4$ 的证明也可以通过在随机场 Y 所定义的乘积空间上进行归纳，类似地完成。

□

定理 *8*的证明。首先注意到 $L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$ 是一个希尔伯特空间（Rudin，1987年，例4.5(b)）；特别地，作为一个完备赋范空间，它是局部凸的。此外，根据里斯表示定理（Roman，2008年，定理 13.32），它是自对偶的，即等距同构于其对偶空间。

设 $\mathcal{P}$ 为 $\mathbb{X}^2$ 中形如$(x,y) \mapsto \varphi_z(x,y) = z(x)z(y)$的函数的集合，其中 $z \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}}$。设 $\mathcal{H}$ 为 $\mathcal{P}$ 的闭凸包。由于 $\mathcal{E}$ 是紧的，Tychonoff定理断言$\mathcal{E}^{\mathbb{X}}$ 关于乘积拓扑是紧的，$\mathcal{P}$ 亦然，并且根据Rudin（1991年）的定理 3.20(c)，$\mathcal{H}$也是紧的。

我们证明，函数 ρ 属于 $L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$，满足定理 8 的条件，当且仅当它属于 $\mathcal{H}$。一方面，Choquet定理（Phelps，2001年，第3章）和米尔曼定理（Rudin，1991年，定理 3.25）断言，任一元素 ρ 属于 $\mathcal{H}$，都可以表示为 $\mathcal{P}$中元素的凸组合。因此，ρ 是对称的，并且使得

$$\rho(x,y) = \int_{\mathcal{E}^{\mathbb{X}}} \varphi_z(x,y)\,\mathbb{P}(\mathrm{d}z) = \int_{\mathcal{E}^{\mathbb{X}}} z(x)z(y)\,\mathbb{P}(\mathrm{d}z), \quad x,y \in \mathbb{X}, \tag{29}$$

其中 $\mathbb{P}$ 是 $\mathcal{E}^{\mathbb{X}}$上的概率测度。此外，由于 μ有限且 $\mathcal{E}$ 有界，(29)中的任意函数 φ_z 都属于 $L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$。根据 γ-间隙的定义，对任意 $z \in \mathcal{E}^{\mathbb{X}}$和 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$，有 $\langle\lambda,\varphi_z\rangle_\mu \geq \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu)$，因此对任意 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$，

$$\langle\lambda,\rho\rangle_\mu = \int_{\mathcal{E}^{\mathbb{X}}} \langle\lambda,\varphi_z\rangle_\mu\,\mathbb{P}(\mathrm{d}z) \geq \int_{\mathcal{E}^{\mathbb{X}}} \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu)\,\mathbb{P}(\mathrm{d}z) = \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu),$$

即，ρ满足间隙不等式。反之，对任意 $\rho \in L^2(\mathbb{X}^2,\mu) \setminus \mathcal{H}$，哈恩–巴拿赫分离定理（Rudin，1991年，定理 3.4(b)）断言存在一个严格分离 ρ 与 $\mathcal{H}$的超平面，即存在 $\lambda \in L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$和 $b \in \mathbb{R}$，使得对所有 $f \in \mathcal{H}$有 $\langle\lambda,\rho\rangle_\mu < b < \langle\lambda,f\rangle_\mu$。特别地，由于 $\mathcal{P} \subset \mathcal{H}$, $b \leq \inf\{\langle\lambda,f\rangle_\mu\colon\ f \in \mathcal{P}\} = \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu)$，从而 $\langle\lambda,\rho\rangle_\mu < \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu)$，即 ρ 不满足间隙不等式。

因此，函数 ρ 在 $L^2(\mathbb{X}^2,\mu)$ 满足定理 8 的条件，当且仅当它可以表示为式（29）的形式；也就是说，当且仅当它是 $\mathbb{X}$ 上取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场的非中心协方差（其分布由概率测度 $\mathbb{P}$ 刻画）。

最后，为完成证明，请注意，$\lambda\mathrm{d}\mu$ 的反对称部分不会对式（10）中的积分产生贡献，因为 ρ的对称性，因此只有 $\lambda\mathrm{d}\mu$的对称部分起作用。

□

定理的证明 *12*。必要性。设 Z 是定义在 $\mathbb{X}$ 上、取值于 $\mathcal{E}$ 的随机场，其非中心化协方差函数为 ρ。一方面，后一个函数是对称的。另一方面，根据 γ-间隙的定义，对于任意连续函数 λ，有

$$\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x,y)\,Z(x,\cdot)\,Z(y,\cdot)\,\mathrm{d}\mu(x,y) \geq \gamma(\lambda,\mathcal{E},\mu), \tag{30}$$

其中两边的量都可能为无穷大。间隙不等式(15)可通过对(30)两边取期望值而得。

充分性。 我们针对以下情形给出证明： $\mathcal{E} = \mathbb{R}_{\geq 0}$；其余情形可用同样的方法证明。设 $\rho : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是一个对称连续函数，且不是任何定义在 $\mathbb{X}$ 上、取非负值的随机场的非中心协方差。根据定理 1，存在一个整数 n、一个点集 x_1、……、x_n 以及一个共正矩阵 $\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 使得离散间隙不等式（7）不成立：

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\, \rho(x_k, x_\ell) < 0.$$

由于 ϖ 为正且 ρ 连续，我们可以找到一个“足够小”的开球 O，其中心为 $\mathbb{X}^2$ 的原点，使得

$$\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x,y)\, \rho(x,y)\, \mathrm{d}\varpi(x)\, \mathrm{d}\varpi(y) < 0,$$

其中

- $O + (x_k,\ x_\ell) \subset \mathbb{X}$ 对所有 $k,\ \ell = 1$、……、n
- $\{O + (x_k,\ x_\ell)\colon\ k,\ \ell = 1$、……、$n\}$ 两两不相交
- λ是定义在 $\mathbb{X}^2$ 上的函数

$$\lambda(x,y) = \begin{cases} \lambda_{k\ell} \text{ if } (x - x_k, y - x_\ell) \in O \\ 0 \text{ otherwise.} \end{cases}$$

对于这个特定函数 λ 以及定义在 $\mathbb{X}$上的任意函数 z，有：

$$\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x,y)\, z(x)\, z(y)\, \mathrm{d}\varpi(x)\, \mathrm{d}\varpi(y) = \int_O \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\, z(x+x_k)\, z(y+x_\ell)\, \mathrm{d}\varpi(x+x_k)\, \mathrm{d}\varpi(y+x_\ell),$$

其中，被积函数中的双重求和是非负的，因为 $\mathbf{\Lambda}$ 是共正的。因此，间隙 $\gamma(\lambda,\ \mathbb{R}_{\geq 0},\ \mu)$是非负的，并且

$$\int_{\mathbb{X}^2} \lambda(x,y)\, \rho(x,y)\, \mathrm{d}\varpi(x)\, \mathrm{d}\varpi(y) < \gamma(\lambda, \mathbb{R}_{\geq 0}, \mu),$$

这证明 ρ 不满足函数15中的间隙不等式（ λ 如上所定义 .
□

定理*13*的证明。由于 $\gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathbb{Z}) = \gamma(\mathbf{\Lambda},\ \mathbb{R})$ 对任意实对称矩阵 $\mathbf{\Lambda}$（推论1），定理13 的条件等价于定理1 的条件，当 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$ 或$\mathbb{Z}$时，如后一个定理充分性部分（情形 1）的证明所示。

□

定理*14*的证明。我们证明，在 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$ 或 $\mathbb{Z}$时，定理14 与定理4 等价。设$\mathbf{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 是一个零对角元的实对称矩阵。引理2 保证 $\eta(\mathbf{\Lambda},\ \mathcal{E})$ 只能取两个值：

1. $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = +\infty$：若如此，间隙不等式（9）便自动成立。2. $\eta(\mathbf{\Lambda}, \mathcal{E}) = 0$。根据引理4，当且仅当矩阵 $\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Delta}$ 为半正定时，这种情况才会发生。考虑到 g 是对称的，且在 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$的对角线上为零，可得：

$$\langle \mathbf{\Lambda}, \boldsymbol{G} \rangle = \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{k\ell}\, g(x_k, x_\ell) = \langle \mathbf{\Delta} - \mathbf{\Lambda}, \widetilde{\boldsymbol{G}} \rangle,$$

~其中 $\boldsymbol{G} = [g(x_k, x_\ell)]_{k,\ell=1}^n$ 以及 $\boldsymbol{G} = [g(x_1, x_\ell) + g(x_k, x_1) - g(x_k, x_\ell)]_{k,\ell=1}^n$。因此，对于满足 $\eta(\boldsymbol{\Lambda}, \mathcal{E}) = 0$ 的矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，间隙不等式可以改写为

$$0 \le \langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{G} \rangle = \langle \boldsymbol{\Delta} - \boldsymbol{\Lambda}, \widetilde{\boldsymbol{G}} \rangle = \mathbf{1}((\boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\Delta}) \circ \widetilde{\boldsymbol{G}})\mathbf{1}^\top, \tag{31}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\Delta}$ 可以是任意一个对称半正定矩阵，且其每一列和每一行的元素之和均为零。取 $\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^\top$ 其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 是一个 $\mathbb{R}^n$ 元素之和为零的向量，可以看出 g 必须满足条件负半定性~条件（17）。反过来，若 g 是条件负半定的，则 $\boldsymbol{G}$ 是一个~半正定矩阵（Reams，1999，引理 2.4），因此，由舒尔乘积定理，$(\boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\Delta}) \circ \boldsymbol{G}$ 也是半正定的，故不等式（31）成立。

由此可知，当 $\mathcal{E} = \mathbb{R}$ 或 $\mathbb{Z}$时，定理14 的条件 3 等价于定理4的条件 3，因此这两个定理等价。

□

定理15的证明。设 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是一个阶数为 n的实对称矩阵。若 $\boldsymbol{\Lambda}$ 有负特征值，则 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathbb{Z} \setminus \{0\}) = -\infty$（引理2）和间隙不等式（7）自动成立。否则，$\boldsymbol{\Lambda}$为半正定矩阵，并且对于任意阶数为 $\boldsymbol{R}$ 的实对称半正定矩阵 n，有：

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{R} + \varepsilon \boldsymbol{I} \rangle &= \langle \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{R} \rangle + \varepsilon \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Lambda}) \\
&\ge \mathbf{1}(\boldsymbol{\Lambda} \circ \boldsymbol{R})\mathbf{1}^\top + \varepsilon n \det(\boldsymbol{\Lambda})^{\frac{1}{n}} \text{ (AM-GM inequality)} \\
&\ge 0 + \frac{\varepsilon n}{\gamma_n} \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathbb{Z} \setminus \{0\}) \text{ (Lemma 5)} \\
&\ge \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \mathbb{Z} \setminus \{0\}) \text{ (Lemma 5).}
\end{aligned}$$

因此，$\rho + \varepsilon\delta$ 满足定理 1 关于 $\mathcal{E} = \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ 的充分条件，因此是取值于 $\mathbb{Z} \setminus \{0\}$中的某个随机场的非中心协方差。

若 $\rho(x, x) \ge \frac{1}{3}$对任意 $x \in \mathbb{X}$和 $\varepsilon \ge \frac{2}{3}$均成立，则对任意 1 阶半正定矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ (即任意非负实数 λ_{11})，间隙不等式显然成立，因此上述证明可限于 $n \ge 2$的情形；此时，借助引理 5，对 的下界可简化为 2 3。

□

定理 16 的证明。必要性。设 ρ 是$\mathbb{X}$中某个单位过程的非中心协方差，$\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_k^n$ 是角正矩阵，且 x_1、……、x_n 是 $\mathbb{X}$中的点集。定理 16 的条件 1 和条件 3 可由定理 1 和定义 9 直接推出。此外，将间隙不等式 (7) 应用于 1×1 矩阵 $\boldsymbol{\Lambda} = \lambda_{11}$，在取 $\lambda_{11} = 1$ 时可得 $\rho(x, x) \ge 1$，在取 $\lambda_{11} = -1$时可得 $\rho(x, x) \le 1$，由此得到剩余条件：对任意 $x \in \mathbb{X}$，$\rho(x, x) = 1$。

充分性。假设 ρ 是 $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 上满足公式（18）的对称映射，并且对于任意 $x \in \mathbb{X}$，有 $\rho(x, x) = 1$。设 $\boldsymbol{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k,\ell=1}^n$ 为实方阵，$x_1, \ldots, x_n$ 为 $\mathbb{X}$ 中的点集。将所有元素均为 0、只有第一行第一列的元素为 1 的 $n \times n$ 阶矩阵记为 $\boldsymbol{J}$。那么，$\boldsymbol{\Lambda} + \gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \{-1, 1\}) \cdot \boldsymbol{J}$ 是角正的，应用（18）即可得到间隙不等式（7）。

□

定理17的证明。McMillan（1955）针对 $\mathbb{X} = \mathbb{Z}$ 给出了一个构造性证明。我们可以基于定理 1 提供一个更简单的替代证明。由于 ρ, ρ^* 是对称映射，因此只需证明对于任意实对称矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，间隙不等式 (7) 均成立。关键是将 $\boldsymbol{\Lambda}$ 分解为一个零对角元矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 和一个对角~矩阵 $diag(\boldsymbol{\Lambda})$，并注意到间隙 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, [-1, 1])$ 与 $\gamma(\boldsymbol{\Lambda}, \{-1, 1\})$ 相同

（Megretski，2001年，引理 2.2）。因此，对于任意点集 x_1、…、x_n，

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\lambda_{k,\ell}\,\rho^*(x_k,x_\ell) &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\bar{\lambda}_{k,\ell}\,\rho(x_k,x_\ell)+\sum_{k=1}^{n}\lambda_k\\ &\geq \gamma(\bar{\mathbf{\Lambda}},\{-1,1\})+\mathrm{tr}(\mathbf{\Lambda})\\ &= \gamma(\mathbf{\Lambda},\{-1,1\}),\end{aligned}$$

由此完成证明。

□

定理的证明 *18*. 对于 $\mathbf{\Lambda}(u,\ v)=[\lambda_{k\ell}(u,\ v)]_{k,\ \ell=1}^{n}$ 和 $\boldsymbol{z}\in\{-1,1\}^n$，有

$$\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}(u,v)\boldsymbol{z}^\top=\left[\sum_{k=1}^{n}(-1)^{\sum_{j=1}^{m}b_j(k)b_j(u)}z_k\right]\left[\sum_{\ell=1}^{n}(-1)^{\sum_{j=1}^{m}b_j(\ell)b_j(v)}z_\ell\right]:=(\boldsymbol{U}^\top\mathbf{1})(\mathbf{1}^\top\boldsymbol{V}),$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 是 n维向量，其分量为上述表达式中的各项。除非$\boldsymbol{b}(i)\circ\boldsymbol{b}(u)$ 与 $\boldsymbol{b}(i)\circ\boldsymbol{b}(v)$ 之间的比特翻转次数为奇数，否则 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$的 i个分量相同；该次数为 $r_i(u,v)=(\boldsymbol{b}(u)\veebar\boldsymbol{b}(v))\,\boldsymbol{b}(i)^\top$。因此，适当重排 $\boldsymbol{U}$和 $\boldsymbol{V}$的分量后，可将这两个向量拆分为 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{W}_1,\boldsymbol{W}_2]$和 $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{W}_1,-\boldsymbol{W}_2]$，其中 $\boldsymbol{W}_1\in\{-1,1\}^{n-q(u,v)}$，而 $q(u,v)$ 是 $[r_i(u,v)]_{i=1}^{n}$中奇数分量的个数。由此可得

$$\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}(u,v)\boldsymbol{z}^\top=\sigma_1^2-\sigma_2^2,$$

其中 σ_1和 σ_2分别是 $\boldsymbol{W}_1$和 $\boldsymbol{W}_2$各项之和。由于这些向量可以是 $\{-1,1\}^{n-q(u,v)}$和 $\{-1,1\}^{q(u,v)}$中的任意元素（因为 $\boldsymbol{z}$可以是 $\{-1,1\}^n$中的任意元素），所以 $\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}(u,\ v)\boldsymbol{z}^\top$的最小值——即 $\gamma(\mathbf{\Lambda}(u,\ v)\ \{-1,1\})$的间隙——在以下情况下取得

- $\sigma_1=0$，仅当 $n-q(u,\ v)$ 为偶数时才可实现；或者 $|\sigma_1|=1$，当 $n-q(u,\ v)$ 为奇数时即可实现；也就是说，无论 $n-q(u,\ v)$ 的奇偶性如何，均有 $\sigma_1=b_m(n-q(u,\ v))$；
- $|\sigma_2|=q(u,\ v)$，其总是可以达到。

由于 $q(u,\ v)$可以表示为定理的论断中所示的形式，因此通过引用 1 （必要部分）即可完成证明。

□

定理*19*的证明。该结果源于定理3以及如下事实：对于单位过程Z，其变差函数为 g，$Z-\mathbb{E}(Z)$无漂移，且具有相同的半变异函数 g。或者，它也源于定理1 以及关系 $\rho=1-g$，即非中心协方差 ρ 与半变异函数 g （单位过程）之间的关系。

□

定理*21*的证明。必要性。任何协方差函数都是对称且半正定的。此外，若随机场 Z 在 $[-1,1]$中取值，则乘积$Z(x_k,\ \cdot)\ Z(x_\ell,\ \cdot)$（即其任意两个分量之积）亦然；并且，通过取期望值，非中心协方差 $\rho(x_k,\ x_\ell)$亦然。

充分性。若定理的条件蕴含间隙不等式（7），则它们是充分的；这些不等式等价于：

$$\langle\mathbf{\Lambda},\boldsymbol{R}\rangle\leq\sup\{\boldsymbol{z}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{z}^\top:\boldsymbol{z}\in[-1,1]^n\}$$

对于任意的实对称矩阵 $\mathbf{\Lambda}$（阶数为 n）以及任意的 $\boldsymbol{R}=[\rho(x_k,\ x_\ell)]_{k,\ \ell=1}^{n}$其中 x_1，…，x_n是 $\mathbb{X}$中的点。然而，对于任何这样的 $\mathbf{\Lambda}$（Megretski，2001年，第 2.3.1 节），该不等式都无法成立。将 ρ 限制在形如 $[-a,a]$ 的更小区间内也无济于事。

□

定理 22的证明。必要性。 设 Z 是定义在 $\mathbb{X}$ 上的、具有非中心协方差ρ 且取值于 $[-1,1]$的随机场。对于 $x \in \mathbb{X}$和 $u \in [-1,1]$，令 $1_{Z(x,\cdot)>u}$为一个指示随机变量：当 $Z(x,\cdot) \geq u$时取 1，否则取 0。于是有：

$$\int_{-1}^{1} 1_{Z(x,\cdot)>u}\,\mathrm{d}u = \int_{0}^{2} 1_{Z(x,\cdot)+1>u}\,\mathrm{d}u = Z(x,\cdot)+1, \tag{32}$$

并对等式两边取期望值，

$$\int_{-1}^{1} \mathbb{E}(1_{Z(x,\cdot)>u})\,\mathrm{d}u = \mathbb{E}(Z(x,\cdot))+1. \tag{33}$$

由（32），可得：

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \mathbb{E}\left(1_{Z(x,\cdot)>u}\,1_{Z(y,\cdot)>v}\right)\,\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v &= \mathbb{E}\left((Z(x,\cdot)+1)\,(Z(y,\cdot)+1)\right)\\ &= \rho(x,y)+\mathbb{E}(Z(x,\cdot))+\mathbb{E}(Z(y,\cdot))+1.\end{aligned}$$

Emery 等人（Emery 等人 （2026，附录 C）中的论证可推出以下恒等式：

$$\frac{1}{2}\mathbb{E}\left([1_{Z(x,\cdot)>u}-1_{Z(y,\cdot)>v}]^2\right) = \frac{1}{2\pi}\int_0^1 \arccos C_{u,v;t}(x,y)\,\mathrm{d}t,$$

其中，对于每个 $t \in [0,1]$，$\{C_{u,v;t}:\ u,\ v \in [-1,1]\}$ 是联合高斯随机场族 $\{Z_{u;t}$ 的交叉协方差：$u \in [-1,1]\}$ 该族随机场具有零均值和单位方差。等价地，可以将这些随机场视为定义在 $\mathbb{X}\times[-1,1]$ 上的单个标准高斯随机场，并写作

$$\frac{1}{2}\mathbb{E}\left([1_{Z(x,\cdot)>u}-1_{Z(y,\cdot)>v}]^2\right) = \frac{1}{2\pi}\int_0^1 \arccos C_t((x,u),(y,v))\,\mathrm{d}t, \tag{34}$$

其中，对于每个 $t \in [0,1]$，C_t 是定义在 Z_t 上的$\mathbb{X}\times[-1,1]$标准高斯随机场的协方差，即 C_t 是对称、半正定的，并且在（$\mathbb{X}\times[-1,1]$）的对角线上等于 1^2。利用（32）至（34），可得

$$\rho(x,y) = 1-\frac{1}{2\pi}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{1} \arccos C_t((x,u),(y,v))\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v,$$

这与 (23) 相同。

充分性。 假设 ρ 由 (23) 给出。根据 Daniell-Kolmogorov 定理，对于每个 $t \in [0,1]$，都存在一个定义在 $\mathbb{X}\times[-1,1]$ 上的标准高斯随机场 Z_t，其协方差为 C_t。该随机场的中位数指示变量的中心化协方差 $1_{Z_t>0}$为 (McMillan，1955年)

$$\rho_t(x,u,y,v) = \frac{1}{2\pi}\arcsin C_t((x,u),(y,v)),$$

这也就是中心化指示变量$1_{Z_t>0}-\frac{1}{2}$ 的协方差。令 Y_t 为定义在 $\mathbb{X}$上的随机场，其定义如下

$$Y_t(x,\cdot) = \int_{-1}^{1}\left(1_{Z_t((x,u),\cdot)>0}-\frac{1}{2}\right)\,\mathrm{d}u, \quad x \in \mathbb{X}.$$

由表示式（23）可知，ρ是随机场Y_T的中心化协方差，其中 T是在 $[0,1]$上均匀分布的独立随机变量。这样的随机场取值于 $[-1,1]$ 且均值为零，因此 ρ 也是它的非中心协方差。

□

定理*23*的证明。参见定理1的证明，特别是充分性部分的情形 2。

□

定理 *24* 的证明。必要性。 任何协方差函数都是对称且半正定的。此外，若随机场取非负值，则其非中心协方差函数亦取非负值。

充分性。设 x_1，……，x_n 为 $\mathbb{X}$ 中的一个点集，且 ρ 为满足定理 24 条件的映射。由于矩阵 $\boldsymbol{R} = [\rho(x_k, x_\ell]_{k,\ell=1}^n$ 是对称且双重非负的，若 $n \leq 4$，则它是完全正的（Maxfield 和 Minc，1962年）。在这种情况下，ρ 是 $\mathbb{X}$ 上随机场的非中心协方差（参见定理 1 的证明）。相反，若 $n \geq 5$，已有研究表明，双重非负矩阵未必是完全正的（Burer 等人，2009；ˇStrekelj 和 Zalar，2025年），因此未必能如 (26) 那样进行分解，也就是说，在 $\mathbb{X}$ 上可能不存在以 ρ 作为其非中心协方差的随机场。

□

定理*25*的证明。设 $C\colon\ \mathbb{X} \times \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ 是任意一个对称半正定函数。Daniell-Kolmogorov 延拓定理保证存在一个零均值高斯随机场 Z 定义在 $\mathbb{X}$ 上，其协方差为 C。根据Chil`es 和 Delfiner (2012)中的公式 (A.23)，可知 $\rho = \exp(C)$是由以下定义的对数正态随机场的非中心协方差 Y：

$$Y(x, \cdot) = \exp\left(Z(x, \cdot) - \frac{C(x, x)}{2}\right), \quad x \in \mathbb{X},$$

其取值于 $\mathbb{R}_{>0}$。因此，ρ 是对称且正的，并且 $\ln(\rho) = C$ 可以是任意对称半正定函数。

□

参考文献

Armstrong, M. (1992). 正定性并不足够。*Mathematical Geology*, *24*(1), 135–143,

Billingsley, P. (1995). 《概率与测度》。Wiley。

Blichfeldt, H. (1929). 二次型的最小值与球体的最密堆积。《数学年刊》, *101*, 605–608,

Boyd, S., & Vandenberghe, L. (2004). 《凸优化》. 剑桥大学出版社。

Burer, S., Anstreicher, K., D¨ur, M. (2009). 5×5 双重非负矩阵与完全正矩阵之间的差异。《线性代数及其应用》, *431*, 1539–1552,

Burgdorf, S., Laurent, M., Piovesan, T. (2017). 关于完全正半定锥的闭包及量子着色的线性逼近。《线性代数电子期刊》, *32*, 15–40,

Buskes, G. (1993). 哈恩-巴拿赫定理综述。数学论丛 *(*数学论丛*)*, *327*, 1–49,

Cassels, J.W.（1997）。数论几何导论。柏林：Springer。

Chil`es, J., & Delfiner, P.（2012）。地统计学：空间不确定性建模（第2版）。纽约：Wiley。Chiu, S., Stoyan, D., Kendall, W., Mecke, J.（2013）。随机几何及其应用。纽约：Wiley。Conway, J., & Sloane, N.（1998）。球堆积、格与群。柏林：Springer- Verlag。Dannenberg, V., & Sch¨urmann, A.（2023）。完美余正矩阵。《数学通讯》，*31*(2), 137–156, Dickinson, P., & Gijben, L.（2014）。关于完全正锥及其对偶的成员资格问题的计算复杂性。《计算优化与应用》，*57*, 403–415, Dobre, C., D¨ur, M., Frerick, L., Vallentin, F.（2016）。无限图稳定数的余正表述。《数学规划》，*160*, 65–83, Doob, J.（1953）。随机过程。John Wiley & Sons。Emery, X.（2010）。关于具有球形、圆形和三角形变差函数的镶嵌随机场和指示随机场的存在性。《数学地球科学》，*42*(8), 969–984, Emery, X., Lantu´ejoul, C., Mery, N., Maleki, M.（2026）。迈向指示变差函数和马多图的完整刻画。*arXiv*，*arXiv:2601.19800*, , Galli, L., Kaparis, K., Letchford, A.N.（2012）。最大割问题间隙不等式的复杂性结果。《运筹学快报》，*40*, 149–152, Gesztesy, F., & Pang, M.（2017）。关于矩阵值情境下的（条件）半正定性。《数学研究》，*236*(2), 143–192, Ghanem, R., & Spanos, P.（1991）。随机有限元：谱方法。纽约：Springer。Goemans, M., & Williamson, D.（1995）。利用半定规划改进最大割和可满足性问题的近似算法。《美国计算机学会会刊》,*42*(6), 1115–1145, Hall Jr., M., & Newman, M.（1963）。共正二次型与完全正二次型。《剑桥哲学学会数学会报》，*59*, 329–339, Hiriart-Urruty, J., & Seeger, A.（2010）。共正矩阵的变分方法。《*SIAM*评论》，*52*(4), 593–629,

Isserlis, L. (1918). 关于任意个变量的正态频率分布任意阶乘积矩系数的一个公式. *Biometrika*, *12*, 134–139, Lachi`eze-Rey, R. (2015年). 双相介质二阶边缘分布的可实现性条件. *Random Structures & Algorithms*, *47*, 588–604, Laurent, M., & Poljak, S. (1996). 割多面体的间隙不等式. *European Journalof Combinatorics*, *17*(2–3), 233–254, Matheron, G. (1989年). 地质统计学中模型的内部一致性. M. Armstrong (编),*Geostatistics* (第21–38页). Kluwer Academic. Matheron, G. (1993). Une conjecture sur la covariance d'un ensemble al´eatoire (关于随机集协方差的一个猜想). C. de Fouquet (编), *Cahiers de g´eostatistique* (第107–113页). Centre de G´eostatistique, Ecole Nationale Sup´erieure des Mines de Paris, 枫丹白露. Maxfield, J., & Minc, H. (1962年). 关于矩阵方程 $X'X = A$. *Proceedings of theEdinburgh Mathematical Society*, *13*(2), 125–129, McMillan, B. (1955年). 一个问题的历史. *Journal of the Society for Industrial and AppliedMathematics*, *3*(3), 114–128, Megretski, A. (2001年). 算子理论与系统分析中二次规划的松弛. A. Borichev & N. Nikolski (编), 系统、逼近、奇异积分算子及相关主题 (第365–392页). Springer Basel AG. Mercer, J. (1909年). 正型与负型函数及其与积分方程理论的联系. *Philosophical Transactions of the Royal Society A:Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, *209*, 415–446, M¨uller, C., Rojas, C., Goodwin, G. (2012). 具有指定频谱的幅度受限信号的生成. *Automatica*, *48*(1), 153–158, Myers, D. (1991年). 伪交叉变异函数、正定性与协同克里金. 数学地质, *23*(6), 805–816, Phelps, R. (2001年). ***Choquet*定理讲义**. Springer. Quintanilla, J. (2008年). 两相随机介质两点概率函数的充要条件. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical,Physical and Engineering Sciences*, *A464*, 1761–1779, Reams, R. (1999). 近似半正定矩阵的Hadamard逆、平方根与乘积. 《线性代数及其应用》, *288*, 35–43, Roman, S. (2008年). 高等线性代数. Springer.

Rudin, W. (1987年). 实分析与复分析. McGraw-Hill. Rudin, W. (1991年). 泛函分析. McGraw-Hill. Schoenberg, I. (1938年). 度量空间与正定函数. 《美国数学会会刊》, *44*(3), 522–536, Sch¨olkopf, B., & Smola, A. (2002年). 核方法学习. 剑桥, MA: 麻省理工学院出版社. Serra, J. (1982年). 图像分析与数学形态学. 伦敦: 学术出版社. Shepp, L. (1967年). 单位过程的协方差 . 随机过程工作会议论文集 (第 205–218 页). 圣巴巴拉 , 加利福尼亚 . Slepian, D. (1972年). 关于最大熵离散平稳过程. 《贝尔系统技术期刊》, *51*(3), 629–653, Sondhi, M. (1983年). 具有指定谱密度和一阶概率密度的随机过程. 《贝尔系统技术期刊》, *62*(3), 679–701, ˇStrekelj, T., & Zalar, A. (2025年). 例外余正矩阵的构造. 《线性代数及其应用》, *727*, 368–384,