PROCEEDINGS OF SCIENCE

矩问题与谱函数

Ryan Abbott,[a,*] **William Jay**[b] **和 Patrick Oare**[c]

[a]物理系，哥伦比亚大学，美国纽约州纽约市，邮编 *10027*[b]物理系，科罗拉多州立大学，美国科罗拉多州柯林斯堡，邮编 *80523*[c]物理系，布鲁克海文国家实验室，美国纽约州厄普顿，邮编 *11973*

电子邮箱：rwa2110@columbia.edu

Nevanlinna-Pick 插值和矩问题利用因果性所提供的解析结构，为涂抹谱函数给出严格的界限。本文集讨论 Nevanlinna-Pick 插值和矩问题，并回顾了一些有用的结果，包括一个简单的证明：Nevanlinna–Pick 插值中的因果数据空间是凸的。

第*42*届国际格点场论研讨会（*LATTICE2025*），*2025*年*11*月*2*日至*8*日，塔塔基础研究院，印度孟买

*报告人

© 作者根据知识共享署名-非商业性使用-禁止演绎 4.0 国际许可协议（CC BY-NC-ND 4.0）保留版权。保留将文本和数据挖掘、人工智能训练及类似技术用于商业目的的所有权利。ISSN 1824-8039。由 SISSA Medialab 出版。

https://pos.sissa.it/

arXiv:2602.11260v1 [hep-lat] 11 Feb 2026

1. 引言

解析延拓在物理科学中无处不在，尤其是在格点场论中。解析延拓问题的一个例子是根据欧几里得格点数据重建谱密度，这需要对拉普拉斯变换进行数值求逆。

$$C_E(t) = \int dE\, \rho(E) e^{-Et}, \tag{1}$$

其中 $C_E(t)$ 是欧几里得时间格点关联函数，而 $\rho(E)$ 是其对应的谱密度。为解决这个病态反问题，人们提出了多种方法，包括 Backus-Gilbert [1, 2] 和 Hansen-Lupo-Tantalo [3] 方法；后者促成了近期若干唯象学应用 [4, 5], , 此外还有许多其他方法 [6–10]。这些方法的一个难点在于，它们都通过引入偏差使问题变得可处理，从而导致难以量化的系统不确定性。Nevanlinna-Pick 插值 [11, 12] 和矩问题 [13] 近来被用作研究方法，利用因果性所要求的解析结构，对展宽谱函数推导严格界限，从而能够精确量化系统不确定性。最近，在凝聚态物理领域，人们也以略有不同的视角运用了基于 Nevanlinna–Pick 插值的类似方法 [12, 14, 15]。本会议论文集将从一个统一的视角回顾 Nevanlinna-Pick 插值和矩问题，并介绍将这些方法应用于格点量子场论关联函数的进一步进展。具体而言，第 2 节回顾这些方法，而第3节则给出一个简明证明，说明因果关联函数构成的空间是凸集。

2. 解析性方法回顾

Nevanlinna–Pick（NP）插值和 Hamburger 矩问题都旨在根据由欧几里得时间数据推导出的、关于 ρ 的一组约束，重建有关正密度 ρ 的信息。在 NP 情形下，ρ_{NP} 是通常的谱密度；而在 Hamburger 情形下，ρ_{Moment} 是与转移矩阵相关联的谱密度；二者在形式上通过 [13] 联系起来

$$\rho_{\mathrm{NP}}(E) = \lambda \rho_{\mathrm{Moment}}(\lambda) \tag{2}$$

其中，$\lambda = e^{-aE}$ 是与能量 E 相关联的转移矩阵本征值。在本文中，两种不同的谱密度 ρ_{NP} 和 ρ_{Moment} 将交替使用，并记作 ρ。为简单起见，我们只考虑 Hamburger 矩问题，它对应于交错费米子热关联函数的情形（Wilson 类费米子所涉及的 Stieltjes 矩问题和 Hausdorff 矩问题见参考文献 [13]）。

两种方法都通过对 *Stieltjes* 变换 $G(z)$ 给出严格界限，从而提供关于 ρ 的信息，其定义为

$$G(z) = \int \frac{\rho(x)\, dx}{z - x + i0}. \tag{3}$$

注意，由于 ρ 的正定性，ρ 的 Stieltjes 变换满足 $\mathrm{Im}\ G(z) \geq 0$，只要 $\mathrm{Im}\ z \geq 0$，因此 G 可以视为映射 $G\colon \mathbb{H} \to \mathbb{H}$，其中 $\mathbb{H} = \{z \in \mathbb{C} \mid \mathrm{Im}\, c \geq 0\}$ 是上半平面。在 Nevanlinna-Pick 插值中，Stieltjes 变换在物理上

被解释为关联函数的解析延拓，而式（3）恰好是 Källén-Lehmann 谱表示。在这两种情况下 $G(z)$ 也可根据以下关系解释为平滑后的谱函数

$$\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G(x_0 + i\epsilon) = \int dx\, \rho(x) K^{\text{Cauchy}}_{x_0,\epsilon}(x), \tag{4}$$

该式适用于有限 ϵ，其中 $K^{\text{Cauchy}}_{x_0\,\epsilon}(\omega)$ 是定义如下的柯西核：

$$K^{\text{Cauchy}}_{x_0,\epsilon}(x) = \frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\frac{1}{x - (x_0 + i\epsilon)} = \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{(x - x_0)^2 + \epsilon^2}. \tag{5}$$

正如参考文献 [11]，所指出的，这为基于解析性的方法与其他依赖重构展宽谱密度的方法建立了联系。在 $\epsilon \to 0$ 的极限下，柯西核趋近于 $\delta(x - x_0)$，从而得到标准关系

$$\rho(x) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G(x + i\epsilon) \tag{6}$$

在数学文献中，这称为斯蒂尔切斯–佩龙反演公式。

Nevanlinna-Pick 插值与 Hamburger 矩问题在实际应用中的最大差异，在于如何将给定的一组欧几里得时间关联器数据转换为问题的输入。Pick 插值假设 $G(z)$ 已通过关系式在一组离散的（虚）松原频率 $\{i\omega_\ell\}$ 处求得

$$G(i\omega_\ell) = \int_0^\infty C_E(t) e^{-i\omega_\ell t}\, dt \tag{7}$$

其中 $C_E(t)$ 是欧几里得时间关联函数。请注意，若从字面上理解前述方程，似乎该方法假定在所有时间$t > 0$上都已知关联函数，而在大多数蒙特卡洛计算中，关联函数仅在离散时间点 $t \in \{0, \ldots\ldots, N_t - 1\}$ 上已知。一种可能的做法是通过插值来估算能量域输入数据（详情见参考文献 [11]）。相比之下，Hamburger 矩问题直接处理欧几里得数据，将关联函数视为分布的矩：

$$C_E(t) \equiv C_t = \int d\lambda\, \lambda^t \rho(\lambda). \tag{8}$$

Nevanlinna–Pick 插值和 Hamburger 矩问题的一项核心数学结果，是存在矩阵正定条件；这些条件对于解的存在既是必要的，也是充分的。对于 Nevanlinna-Pick 插值，正性条件最自然的表述方式是针对单位圆盘 $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| \le 1\}$ 上的插值问题，其正性条件由以下定理给出：

定理1 (Pick [16])。设 $z_1, \ldots, z_n, w_1, \ldots, w_n \in \mathbb{D}$。则存在 $f\colon \mathbb{D} \to \mathbb{D}$ 使得$f(z_i) = w_i$ 对所有 $i \in \{1, \ldots, n\}$ 成立，当且仅当 Pick 矩阵

$$P_{ij} \equiv \frac{1 - w_i w_j^*}{1 - z_i z_j^*} \tag{9}$$

是正定的。

尽管该定理不能直接应用于 $\mathbb{H}$上的物理插值问题，但通过适当的共形映射，可以将其转化为 $\mathbb{D}$ 上的插值问题；详情请参阅参考文献 [11, 12, 17] 。与此同时，对于 Hamburger 矩问题，正性条件直接以关联函数的形式表述：

定理 2 (Hamburger [18])。 设 $C_0, \ldots, C_{n-1} \in \mathbb{R}$。则存在一个 $\rho \geq 0$，其矩为 $\{C_l\}$，当且仅当汉克尔矩阵

$$H_{ij} \equiv (C_{i+j})_{i,j=0}^{n-1} = \begin{pmatrix} C_0 & C_1 & C_2 & \ldots \\ C_1 & C_2 & C_3 & \ldots \\ C_2 & C_3 & C_4 & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{10}$$

是正定的。

3. 因果子集的几何

在数学文献中，通常假设插值数据具有无限精度且不存在不确定性。相比之下，格点场论计算通常采用蒙特卡洛方法，这会产生带有噪声、精度有限且不确定性相对较大的欧几里得数据。在此背景下，重要的不仅是判断给定的一组固定数据是否存在因果插值，还要考察因果一致的数据集在所有可能的欧几里得数据构成的空间中如何分布。为此，假设一组插值节点 $\vec{z} = (z_1, \ldots, z_n) \in \mathbb{D}^n$ 是精确已知且固定的，[1] 并定义*Pick* 空间 $\mathbb{P}_{\vec{z}}$ 为所有满足皮克判据的 $\vec{w} \in \mathbb{D}^n$ 所构成的集合，即：

$$\mathbb{P}_{\vec{z}} = \left\{ (w_1, \ldots, w_n) \;\middle|\; \frac{1 - w_i w_j^*}{1 - z_i z_j^*} \succeq 0 \right\}. \tag{11}$$

类似地，对于 Hamburger 矩问题，也可以定义一个类似的空间

$$\mathbb{P}_H = \left\{ (C_0, \ldots, C_{n-1}) \;\middle|\; (C_{i+j})_{i,j=0}^{(n-1)/2} \succeq 0 \right\}. \tag{12}$$

这两个问题的几何性质背后的一个关键事实是，它们的因果空间都是凸的。对于$\mathbb{P}_H$，这一点显而易见，因为正定汉克尔矩阵构成正定矩阵集合的一个线性子空间，而正定矩阵集合是凸集。近期，物理学文献中关于谱函数的 Ref. [14] 也利用了半正定汉克尔矩阵的凸性。对于 $\mathbb{P}_{\vec{z}}$，由于 Pick 矩阵并非关于输入 $\{w_i\}$ 的线性函数，其凸性便不那么显而易见。不过，只需稍微转换一下视角，就能轻松证明，无论如何选择 $\vec{z}$，$\mathbb{P}_{\vec{z}}$ 都是凸的，由此得到以下引理：

引理 1. 对于任意固定的插值节点集 $\{z_i\}$，*Pick* 空间 $\mathbb{P}_z$ 是凸的。[2]

[1]对于将 Pick 插值应用于格点场论的情况也是如此，因为插值节点是根据松原频率得出的，而这些频率在解析上是已知的 [11, 12]。[2]据作者所知，这一结果在物理学文献中似乎尚属首次。不过，鉴于相关主题的文献极为丰富，且证明十分简单，这一结果很可能早已为人所知。数学文献中也提及了凸性，例如 Ref. [19]。

证明。 设 $w^{(0)}, w^{(1)} \in \mathbb{P}_z$，并令 $\lambda \in [0,1]$为任意值。于是只需证明以下凸线性组合

$$w^{(\lambda)} = (1-\lambda)w^{(0)} + \lambda w^{(1)} \tag{13}$$

也包含在 $\mathbb{P}_z$ 中。根据定理 1 ，存在 f_0， f_1： $\mathbb{D} \to \mathbb{D}$ 使得

$$\begin{aligned} f_0(z_i) &= w_i^{(0)} \\ f_1(z_i) &= w_i^{(1)} \end{aligned} \tag{14}$$

对于两者 i。定义函数 f_λ： $\mathbb{D} \to \mathbb{D}$ 为[3]

$$f_\lambda(z) = (1-\lambda)f_0(z) + \lambda f_1(z). \tag{15}$$

合并式（13）至（15）即可得到结果

$$f_\lambda(z_i) = w_i^{(\lambda)} \tag{16}$$

对于两者 i，即 f_λ插值 $w^{(\lambda)}$，因此 $w\ (\lambda) \in \mathbb{P}_z$根据定理 1，这正如预期。 □

这里的证明相当一般，适用于任意定义域上的 Nevanlinna-Pick 插值，只要目标域是凸集即可。特别是，这意味着 $\mathbb{H}$ 上的原始插值问题具有相同的凸性性质，同时也提供了另一种证明，说明只要将 Hamburger 矩问题重新诠释为无穷远处的插值问题， $\mathbb{P}_H$ 就是凸的（另见参考文献 [13]以及原始数学文献 [20]）。凸性的另一个直接推论是，Pick 空间的边界恰好由极值插值问题构成，也就是说，这些问题的 Pick 矩阵是奇异的，且插值函数唯一。

4. 展望

因果性和解析性对欧几里得时间关联函数以及从中提取的实时间信息都提供了强有力的约束。对于精确数据，Nevanlinna–Pick 插值和矩问题提供了直接利用这些约束的方法。鉴于文献 [21] 中将 NP 插值应用于不确定数据所取得的可喜成果，以及与之密切相关的兰乔斯方法在含噪关联函数上的应用也取得了成功（见文献 [22–25]），对于实际的格点场论计算而言，不久之后或许也能获得同样严格的界限。尽管仍需开展更多工作，但这些方法的拓展最终或许能够用于构造结合格点关联函数全部信息的界限。接下来的一个重要问题是，哪些关联函数组合能够建立最强的界限。在这方面，值得强调的是，矩问题能够利用矩阵关联函数来约束谱函数（见文献 [13]）。矩阵关联函数已广泛用于从许多系统中提取谱信息（例如通过广义特征值问题），因此，利用多个算符提取谱函数，很可能对减少不确定性、提高未来计算的精度至关重要，也将有助于实现原本无法完成的新计算。

[3]请注意，由于单位圆盘是凸集， f_λ 的像包含在 $\mathbb{D}$ 之内。

致谢

我们感谢 Norman Christ、Sarah Fields 和 Matteo Saccardi 就本文提出的宝贵讨论和意见。RA 是欧内斯特·坎普顿·亚当斯博士后研究员，其经费部分来自哥伦比亚大学的欧内斯特·坎普顿·亚当斯物理研究基金，部分来自美国能源部资助（编号 DE-SC0011941）。PO 的经费部分来自美国能源部科学办公室核物理办公室的资助，合同编号 DE-SC0012704（布鲁克海文国家实验室）。

参考文献

[1] G. Backus 和 F. Gilbert，地球整体数据的分辨能力，*Geophys. J. Int.* **16**(1968) 169。
[2] M.T. Hansen、H.B. Meyer 和 D. Robaina，从深度非弹性散射到重味半轻子衰变：格点量子色动力学中多强子末态的总衰变率，*Phys.Rev.*

D

96 (2017) 094513 [1704。08993]。[3] M. Hansen、A. Lupo 和 N. Tantalo，从格点关联函数中提取谱密度

，

Phys. Rev. D 99 (2019) 094508 [1903.06476].[4] 扩展扭质量合作组（*ETMC*）合作组，利用格点量子色动力学探测能量涂抹的 *R* 比，*Phys. Rev. Lett. 130 (2023) 241901* [2212.08467].[5] 扩展扭质量合作组，来自格点量子色动力学的 τ 轻子的包含强子衰变率，*Phys. Rev. D 108 (2023)* 074513 [2308.03125].[6] *S. Lawrence*，通过拉格朗日对偶实现无模型谱重建，*2408.11766*.[7] *G. Bailas*、*S. Hashimoto* 和 *T. Ishikawa*，从欧几里得关联函数重建展宽谱函数，*PTEP 2020 (2020) 043B07* [2001.11779].[8] *M. Bruno*、*L. Giusti* 和 *M. Saccardi*，通过梅林变换从欧几里得格点关联函数获得谱密度，*Phys. Rev. D 111 (2025)* 094515 [2407.04141].[9] *J. Horak*、*J.M. Pawlowski*、*J. Rodríguez-Quintero*、*J. Turnwald*、*J.M. Urban*、*N. Wink* 等，通过高斯过程重建量子色动力学谱函数，*Phys. Rev. D 105 (2022)*036014 [2107.13464].[10] *L. Del Debbio*、*A. Lupo*、*M. Panero* 和 *N. Tantalo*，逆问题的贝叶斯解

m

及其与 *Backus–Gilbert* 方法的关系，*Eur. Phys.J. C* **85** (2025) 185 [2409。04413]。[11] T. Bergamaschi、W.I. Jay 和 P.R. Oare，强子结构、共形映射与解析延拓，2305.16190。[12] J. Fei、C.-N. Yeh 和 E. Gull，*Nevanlinna* 解析延拓，*Phys. Rev. Lett.* **126**(2021) 056402。

[13] R. Abbott、W.I. Jay 和 P.R. Oare，矩问题及矩阵值涂抹的界限 *ed* 谱函数, *2508.01377*.[14] *Y. Yu, A.F. Kemper, C. Yang* 和 *E. Gull,* 使用汉克尔投影对虚时间响应函数进行去噪, *Physical Review Research 6 (2024)* .[15] *Z. Huang, E. Gull* 和 *L. Lin,* 通过投影、极点估计和半正定松弛实现格林函数的稳健解析延拓, *Phys. Rev. B 107 (2023) 075151*[2210.04187].[16] *G. Pick,* 关于由预设函数值所导致的解析函数约束, *Math. Ann. 77 (1915) 7*.[17] *K. Nogaki* 和 *H. Shinaoka,* 玻色子内万林纳解析延拓, *J. Phys. Soc. Jap. 92 (2023)* 035001 [2305.03449].[18] *H. Hamburger,* 关于斯蒂尔切斯矩问题的推广（第一部分）, *Mathematische Annalen 81 (1920) 235*.[19] *A. Nicolau,* 内万林纳-皮克插值问题，载于《复分析与调和分析暑期学校及相关主题会议论文集》，*J. Gröhn*、*J. Heittokangas*、*R. Korhonen* 和 *J. Rättyä* 编，第 *22* 号，东芬兰大学出版物，*2016* 年。[20] *I.V. Kovalishina,* 一类插值问题的解析理论, *Mathematics of the USSR-Izvestiya 22 (1984) 419*.[21] *S. Fields* 和 *N. Christ,* 基于不确定数据的 *Nevanlinna-Pick* 插值, *2510.12136*.[22] *D.C. Hackett* 和 *M.L. Wagman,* 用于格点量子色动力学矩阵元的兰乔斯算法, *2407.21777*.[23] *D.C. Hackett* 和 *M.L. Wagman,* 用于格点量子色动力学谱学和矩阵元的分块兰乔斯算法, *2412.04444*.[24] *M.L. Wagman,* 兰乔斯算法、转移矩阵与信噪比问题, *Phys. Rev. Lett. 134 (2025)* 241901 [2406.20009].[25] *R. Abbott, D.C. Hackett, G.T. Fleming,D.A. Pefkou* 和 *M.L. Wagman,* 滤波瑞利-里兹方法就是你所需要的一切, *2503.17357*.