arXiv:2601.03815v1 [stat.ME] 7 Jan 2026

高维精度矩阵二次型： $p > n$ 的估计框架

Shizhe Hong [1]、**Weiming Li**[1] **和 Guangming Pan** [2]

[1] *School of Statistics and Data Science, Shanghai University of Finance and Economics, e-mail:* hong.shizhe@163.sufe.edu.cn; li.weiming@shufe.edu.cn

[2] *School of Physical and Mathematical Sciences, Nanyang Technological University , e-mail:* gmpan@ntu.edu.sg

摘要： 我们提出一种新颖的估计框架，用于高维情形下精度矩阵的二次型泛函，尤其适用于特征维度 p 超过样本量 n 的情形。当 $p < n$ （即 $p/n \to c < 1$）时，传统的基于矩的估计量经过偏差校正后仍然相合。然而，一旦$p > n$，这些方法便会彻底失效，这凸显了由于秩亏和高维复杂性所导致的两种情形之间的根本区别。我们的方法结合谱矩表示与约束优化，解决了这些问题，并在温和的矩条件下实现相合估计。

所提出的框架为广泛的高维统计量推断提供了统一的方法。我们通过两个典型示例展示其用途：投资组合优化中的最优夏普比率，以及回归分析中的复相关系数。模拟研究表明，所提出的估计量有效克服了传统方法无法逾越的 $p > n$ 障碍。

MSC2020 学科分类： 主要分类 62H12；次要分类 62F10。**关键词与短语：** 估计、高维数据、精度矩阵、二次型。

1. 引言

设 $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_p)^\top$ 为一个随机向量，其均值为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$。对于固定向量 $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^p$，考虑二次型

$$\tau_p(\mathbf{a}) \triangleq \mathbf{a}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{a}, \tag{1.1}$$

它定义了$\mathbf{a}$ 相对于精度矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$的精度加权平方范数。这一基本量源自多元统计理论，并通过$\mathbf{a}$的具体形式，在不同领域有着广泛的应用。在投资组合理论中， $\tau_p(\boldsymbol{\mu})$ 表示平方最优夏普比率，而 $\tau_p(\mathbf{1}_p)$ 的倒数则给出全局最小方差（Campbell 等人，1997），其中 $\mathbf{1}_p$ 表示 p维全 $\mathbf{1}$ 向量；在统计分类中， $\tau_p(\mathbf{x}_0 - \boldsymbol{\mu})$ 衡量$\mathbf{x}_0$ 与

总体均值（Mclachlan，2004）；在多元回归和典型相关分析中，$\tau_p(\mathbf{a})$ 出现在复相关系数中，其中$\mathbf{a}$ 是边际协方差向量（Anderson，2003）。机器学习（Wang 等人，2007）和信号检测（Zoubir 等人，2018）中也有进一步的应用。尽管 τ_p 无处不在，但在实践中很少能直接观测到它，因为协方差矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 通常需要根据数据进行估计，而向量$\mathbf{a}$ 则可能因应用场景不同而已知或未知。

在估计 τ_p 时，传统矩方法适用于 $p < n$，对应于渐近区间 $p/n \to c \in [0, 1)$。给定 $\mathbf{a}$ 已知，且有 n 个独立同分布观测 $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ 来自总体 $\mathbf{x}$，我们构造估计量如下。样本协方差矩阵

$$\mathbf{S}_n = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^\top,$$

其中 $\bar{\mathbf{x}} = n^{-1}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i$，作为 $\mathbf{\Sigma}$的矩估计量。代入估计量 $\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^{-1}\mathbf{a}$ 在 τ_p 固定（ p 为固定值（$n \to \infty$, $c = 0$）时是 τ_p 的相合估计，但当 $p/n \to c \in (0,1)$ 时需要进行偏差校正。具体而言，在这一 $p < n$区间内，Bai 等人 (2007); Pan (2014) 证明了

$$\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^{-1}\mathbf{a} = \frac{\tau_p}{1-c_n} + o_p(||\mathbf{a}||^2), \quad c_n \triangleq p/n.$$

这使得通过缩放矩估计量（$1 - c_n$）$\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^{-1}\mathbf{a}$可以进行相合估计。当 $\mathbf{a}$ 未知并以估计值代替时，在保持解析可处理性的同时，需要进行二阶偏差校正；详见 Bai 等人 (2009); Zheng 等人 (2014) 的技术细节。

当 $p > n$ 时，由于样本协方差矩阵$\mathbf{S}_n$存在秩亏，对 τ_p 进行估计在统计上颇具挑战。这一局限在将摩尔－彭若斯广义逆$\mathbf{S}_n^+$ 代入 τ_p时显而易见，结果为

$$\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^+\mathbf{a} = m_1\left\{\mathbf{a}^\top\left(m_0\mathbf{\Sigma} + \mathbf{I}\right)^{-1}\mathbf{a} - \mathbf{a}^\top\left(m_0\mathbf{\Sigma} + \mathbf{I}\right)^{-2}\mathbf{a}\right\} + o_p(||\mathbf{a}||^2), \qquad (1.2)$$

如 $c_n \to c \in (1, \infty)$，其中 m_0 和 m_1 是两个正数常量，取决于比值 c_n 以及 $\mathbf{\Sigma}$的特征值（见补充材料中的 S.7 节）。关键在于，这个极限并非目标参数 $\tau_p = \mathbf{a}^\top\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{a}$ 的一一函数；因此，无法从 $\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^+\mathbf{a}$ 或其极限中唯一恢复 τ_p。图 1 展示了中等维度与高维情形之间的差异。当 $p < n$ 时，τ_p 与 $\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^{-1}\mathbf{a}$ 的极限之间存在单射关系，因此原则上可以恢复 τ_p。与此形成鲜明对比的是，当 $p > n$时，情况发生了根本变化：映射不再是单射，$\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^+\mathbf{a}$ 的相同极限值可能对应不同的 τ_p。这种不可识别性使得无法使用基于伪逆的方法对 τ_p 进行相合估计，并揭示了高维情形下推断的根本障碍。改善 $\mathbf{\Sigma}^{-1}$ 估计的其他方法包括正则化技术，例如采用 ℓ_0/ℓ_1 约束的基于稀疏性的方法（Friedman 等人，2008；Cai 等人，2011；Sun 和 Zhang，2013；Fan 和 Lv，2016；

Zhang 等人，2025）、收缩估计量（Ledoit 和 Wolf，2004，2012，2017，2018），以及基于因子模型结构开发的方法（Fan 等人，2008，2013，2018；Daniele 等人，2025）。然而，将这些方法直接应用于二次型（例如 τ_p）存在问题：相合性通常依赖于稀疏性或低秩假设，而代入估计量通常存在偏差，因为它们无法恢复 $\mathbf{a}$ 与 $\mathbf{\Sigma}$的特征向量之间的内积。

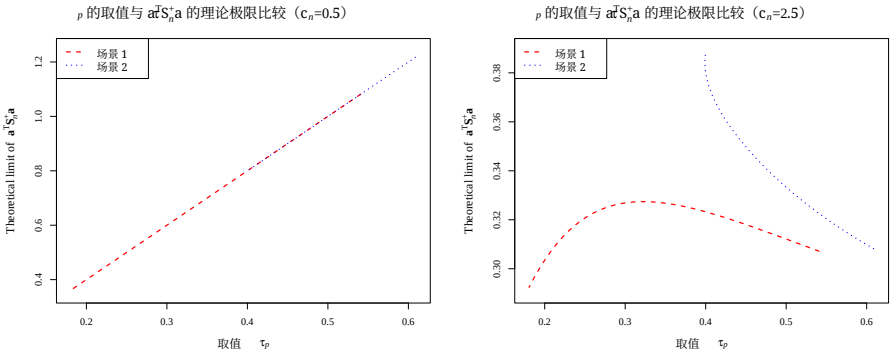

图1： τ_p 与$\mathbf{a}^\top\mathbf{S}_n^+\mathbf{a}$ （理论极限）的比较，针对 $p = 200$ with$\mathbf{\Sigma} = \left(r^{|i-j|}\right)_{i,j=1}^{p}$，其中 r 从 0.3 变化到 0.7。在场景 1 中，$\mathbf{a}$ 是所有元素均等于$1/\sqrt{p}$的均匀向量；在场景 2 中，$\mathbf{a}$的前八个元素为 $1/\sqrt{8}$，其余元素为零。

本文提出了一种新框架，用于在 $p > n$这一具有挑战性的情形下估计高维二次型 τ_p 。我们的方法依赖于对 τ_p进行谱重新解释。具体而言，设 $\mathbf{\Sigma}$ 的谱分解为

$$\mathbf{\Sigma} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top,$$

其中 $\{\lambda_i\}_{i=1}^p$ 为特征值，$\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^p$ 为对应的特征向量。于是，二次型可表示为

$$\tau_p = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1} \mathbf{a} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i^{-1} (\mathbf{a}^\top \mathbf{u}_i)^2 = \int x^{-1} dF^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x), \tag{1.3}$$

其中函数

$$F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x) = \sum_{i=1}^{p} (\mathbf{a}^\top \mathbf{u}_i)^2 \mathbb{I}(\lambda_i \leq x)$$

是相对于 $\mathbf{\Sigma}$ 的向量经验谱分布（VESD），其中 (Bai 和 Silverstein，2010）。该分布编码了 与的特征结构之间的相互作用

的特征结构。用 $F^{\mathbf{\Sigma}}$ 表示 τ_p , $^{\mathbf{a}}$ 便可将原始估计问题转化为逼近该谱测度的问题。与经典矩方法不同，我们的方法不要求$\mathbf{S}_n$可逆，从而克服了 $p > n$ 情形中固有的秩亏。因此，对 $F^{\mathbf{\Sigma}}$, $^{\mathbf{a}}$ 的相合估计量可得到τ_p的相合代入估计量。

我们的理论贡献分两个阶段展开。首先，利用随机矩阵理论的工具，我们针对设计向量$\mathbf{a}$ 已知的基准情形，建立了一个全面的VESD估计框架。这一理想化分析包括：(1) 证明在温和的矩条件下，由$\mathbf{S}_n$ 和$\mathbf{a}$ 构造的样本VESD统计量依概率收敛；(2) 通过复分析获得 $F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}$ 所有矩的相合估计量；(3) 将这些矩的估计值与约束线性规划相结合，重构总体加权经验谱分布。其次，我们通过引入系统的偏差校正方案，将该框架扩展到更贴近现实的$\mathbf{a}$未知情形。当$\mathbf{a}$由其代入估计量替代时，这一扩展为投资组合优化和高维相关分析提供了有效的统计方法。

本文结构如下。第2 节在$\mathbf{a}$已知的假设下，建立估计框架并阐述其理论性质。第3 节将该框架扩展到更贴近现实的$\mathbf{a}$ 未知情形，并通过两个应用加以说明：(i) 最优夏普比率的估计；(ii) 回归中的复相关推断。所有证明及其他技术性结果均置于补充材料中。

2. 已知 $\mathbf{a}$ 时的二次型估计

2.1. 模型与假设

本节介绍在基准情形下估计二次型 $\tau_p = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{a}$ 的理论框架，其中向量 $\mathbf{a}$ 已知。在总体层面，我们采用位置–尺度分解

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{A}\mathbf{z}, \tag{2.1}$$

该分解适用于任何具有有限二阶矩的随机向量，其中

(1) $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ 是$\mathbf{x}$的均值向量，且$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p\times p}$ 是一个满秩矩阵，使得$\mathbf{A}\mathbf{A}^\top = \mathbf{\Sigma}$ （总体协方差矩阵）；(2) $\mathbf{z} = (z_1, \ldots, z_p)^\top \in \mathbb{R}^p$ 是$\mathbf{x}$ 的标准化形式，其中 $\mathrm{E}(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$ 且 $\mathrm{E}(\mathbf{z}\mathbf{z}^\top) = \mathbf{I}_p$。

我们的主要假设如下。

假设（a）。维度（p, n）以如下方式趋于无穷：

$$p = p_n = O(n) \quad \text{and} \quad c_n = p/n \to c \in (0, \infty). \tag{2.2}$$

假设 (b)。对于任意谱范数有界的确定性矩阵$\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{p\times p}$，

$$\mathrm{E}\left|\mathbf{z}^\top\mathbf{Q}\mathbf{z} - \mathrm{tr}\mathbf{Q}\right|^2 = o(p^2).$$

假设 (c)。 $\mathbf{\Sigma}$ 的特征值一致地有界，且远离零和无穷大；也就是说，存在常数 a 和 b，使得

$$0 < a \leq \liminf_{p\to\infty} \lambda_{\min}\left(\mathbf{\Sigma}\right) \leq \limsup_{p\to\infty} \lambda_{\max}\left(\mathbf{\Sigma}\right) \leq b < \infty.$$

假设 (d)。对于任意确定性单位向量 $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^p$ ($\|\mathbf{t}\| = 1$),

$$\mathrm{E}\left|\mathbf{z}^\top\mathbf{t}\right|^4 = O(1). \tag{2.3}$$

为简单起见，我们将 $\|\mathbf{a}\| = 1$ 规范化。这并不失一般性：写作$\mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|\cdot\mathbf{a}_0$，其中 $\|\mathbf{a}_0\| = 1$，可得 $\tau_p(\mathbf{a}) = \|\mathbf{a}\|^2\tau_p(\mathbf{a}_0)$；因此，只要 $\|\mathbf{a}\|$ 有界，对一般$\mathbf{a}$的结果便可通过重新缩放立即得到。

注释 2.1。 假设 (a)规定了高维渐近情形，其中包括 $p > n$ 这一特例。假设 (b)仅施加温和的结构条件，允许$\mathbf{z}$的各分量之间存在一般的依赖关系，并且与 Bai 和 Zhou(2008)关于特征值分布分析的框架一致。假设 (c)保证的谱保持良态，避免其在 p 增大时出现退化或发散。假设 (d)对$\mathbf{z}$的线性投影的四阶矩加以界定，从而确保二次型分析所需的集中性质。

2.2. 样本向量经验谱分布的收敛

我们首先回顾随机矩阵理论中的两个基本概念。对于任意厄米矩阵$\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{p\times p}$，其谱分解为$\mathbf{T} = \sum_{i=1}^p \lambda_i^{\mathbf{T}}\boldsymbol{\xi}_i\boldsymbol{\xi}_i^\top$:

1. 矩阵$\mathbf{T}$ 的经验谱分布（ESD）定义为

$$F^{\mathbf{T}}(x) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^p \mathbb{I}(\lambda_i^{\mathbf{T}} \leq x),$$

其中 $\mathbb{I}(\cdot)$是指示函数。

2. 对于任意单位向量$\mathbf{t} \in \mathbb{R}^p$ （$\|\mathbf{t}\| = 1$），矩阵$\mathbf{T}$ 相对于$\mathbf{t}$ 的向量经验谱分布（VESD）定义为

$$F^{\mathbf{T},\mathbf{t}}(x) = \sum_{i=1}^p w_i^{\mathbf{t}}\mathbb{I}(\lambda_i^{\mathbf{T}} \leq x),$$

其中 $w_i^{\mathbf{t}} \triangleq (\mathbf{t}^\top\boldsymbol{\xi}_i)^2$ 为投影权重。

样本协方差矩阵的经验谱分布的收敛性质 $F^{\mathbf{S}_n}$ $\mathbf{S}_n$ 自 Marˇcenko 和 Pas- tur (1967) 的开创性工作以来，便得到了广泛研究。重要的扩展包括 Silverstein (1995)，其在具有线性依赖结构且满足有限二阶矩条件的情况下证明了收敛性；以及 Bai 和 Zhou(2008)，其证明了在假设 (b) 所规定的一般依赖结构下的收敛性。我们的分析主要将采用 Bai 和 Zhou (2008) 的结果，其中收敛性由 $F^{\mathbf{S}_n}$ 的斯蒂尔切斯变换刻画，

$$m_n(z) \triangleq \int \frac{1}{x-z} dF^{\mathbf{S}_n}(x), \quad z \in \mathbb{C}^+ \triangleq \{z \in \mathbb{C} : \Im(z) > 0\}.$$

集合 $\mathbb{C}^+$ 表示上半复平面。

引理 2.1 (Bai 和 Zhou (2008))。 在假设 *(a)-(b)-(c)* 下，斯蒂尔切斯变换 $m_n(z)$ 关于 $F^{\mathbf{S}_n}$ 几乎必然收敛，即

$$m_n(z) - m(z) \xrightarrow{a.s.} 0, \quad \forall z \in \mathbb{C}^+, \tag{2.4}$$

其中 $m(z)$是方程的唯一解

$$m(z) = \int \frac{1}{x(1-c_n-c_n z m(z)) - z} dF^{\mathbf{\Sigma}}(x) \tag{2.5}$$

在集合 $\{z \in \mathbb{C}^+ : -(1-c_n)/z + c_n m(z) \in \mathbb{C}^+\}$ 中。

注 2.2。 引理2.1 给出了斯蒂尔切斯变换 $m_n(z)$ 的几乎必然收敛。通过斯蒂尔切斯变换的反演定理，该引理保证经验谱分布 $F^{\mathbf{S}_n}$ 弱收敛至一个极限分布。此外，伴随斯蒂尔切斯变换

$$\underline{m}(z) \triangleq -\frac{1-c_n}{z} + c_n m(z)$$

将不动点方程（2.5）转化为另一种标准形式

$$z = -\frac{1}{\underline{m}(z)} + \int \frac{c_n x}{1+\underline{m}(z)x} dF^{\mathbf{\Sigma}}(x), \tag{2.6}$$

由此可以推导出极限谱分布的支撑集（Silverstein 和 Choi，1995）。我们将这个方程称为 Marˇcenko–Pastur（MP）方程。

接下来，我们研究样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_n$ 相对于确定性向量$\mathbf{a}$的向量经验谱分布 $F^{\mathbf{S}_n,\,\mathbf{a}}$ 的收敛性。其斯蒂尔切斯变换为

$$s_n(z) \triangleq \int \frac{1}{x-z} dF^{\mathbf{S}_n,\mathbf{a}}(x), \quad z \in \mathbb{C}^+. \tag{2.7}$$

定理 2.1。 在假设 *(a)-(b)-(c)-(d)* 下， $F^{\mathbf{S}_n,\ \mathbf{a}}$ 的斯蒂尔切斯变换 $s_n(z)$依概率收敛，即

$$s_n(z) - s(z) \xrightarrow{i.p.} 0 \quad \forall z \in \mathbb{C}^+, \tag{2.8}$$

其中

$$s(z) = \mathbf{a}^\top \left(-z\mathbf{I}_p - z\underline{m}(z)\mathbf{\Sigma}\right)^{-1}\mathbf{a} \ = \int \frac{1}{-z - z\underline{m}(z)x} dF^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x), \tag{2.9}$$

且 $\underline{m}(z)$ 是 *MP* 方程 (2.6)中定义的伴随斯蒂尔切斯变换。

注 2.3。 定理 2.1 表明，斯蒂尔切斯变换 $s_n(z)$ 收敛。根据反演定理，这意味着向量经验谱分布$_{F^{\mathbf{S}_n,\mathbf{a}}}$弱收敛。这将 Bai 等人 (2007) 的开创性工作从独立同分布情形推广到了$\mathbf{z}$中更一般的依赖结构。当向量经验谱分布中的样本协方差 $\mathbf{S}_n$ 被稳健散布估计量取代时，结论同样成立，例如 Tyler 的 M-估计量（Tyler，1987）或空间符号协方差矩阵（Locantore 等人，1999），适用于椭圆分布。更多讨论见 Bai 和 Zhou(2008)。

2.3. $F^{\mathbf{\Sigma}}$的矩的估计,$\mathbf{a}$

现在我们研究向量经验谱分布 $F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}$ 的矩估计。第 j 阶矩为

$$\alpha_j \triangleq \int x^j dF^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x) = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Sigma}^j \mathbf{a}, \quad j \in \mathbb{N},$$

其中 $\mathbb{N}$ 表示正整数集合。准确估计这些矩对于向量经验谱分布分析至关重要。

定理 2.1 揭示了，尽管样本向量经验谱分布 $F\mathbf{S}_n,\ \mathbf{a}$在高维下偏离了 $F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$ 二者之间的联系仍通过链接函数（2.9）得以保留。借助复分析技巧，我们得到了一个精确的矩重构公式

$$\alpha_j = (-1)^j \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z s(z) \underline{m}'(z)}{\underline{m}^{j+1}(z)} dz, \quad j \in \mathbb{N}, \tag{2.10}$$

其中，$\underline{m}'(z)$表示函数 $m(z)$的导数，围道 $\mathcal{C}$ 沿正向取向，并包围 $F^{\mathbf{S}_n}$的极限谱分布的支撑集。该表示式通过斯蒂尔切斯变换 $m(z)$和 $s(z)$直接表示总体矩。将它们的样本对应量代入，即得估计量

$$\hat{\alpha}_j = (-1)^j \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z s_n(z) \underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz, \quad j \in \mathbb{N}, \tag{2.11}$$

其中

$$\underline{m}_n(z) \triangleq -\frac{1-c_n}{z} + c_n m_n(z).$$

为分析$\hat{}\alpha_j$的渐近性质，我们需要对$\mathbf{S}_n$ 进行谱范数控制，以确保围道积分有效。

假设 (b*)。随机向量$\mathbf{z}$ 满足以下条件之一：

(i) 轻尾独立性： $\{z_j\}_{j=1}^p$ 为独立同分布，且 $\mathrm{E}|z_1|^4 < \infty$；或 (ii) 对数凹性：$\mathbf{z}$ 具有对数凹密度。

注 2.4。 这些条件为高维情形下提供了充分的谱控制。它们保证当 $p, n \to \infty$ 时， $||\mathbf{S}_n|| = O(1)$几乎必然成立，从而确保存在一个固定围道 $\mathcal{C}$ ，当 p, n足够大时，该围道包围$\mathbf{S}_n$ 的所有特征值。另请注意，在此假设下，假设 (b) 和 (d) 均自动成立。

定理 2.2。 在假设 *(a)*、*(b*)*、*(c)* 下，矩估计量$\hat{}\alpha_j$满足

$$\hat{\alpha}_j - \alpha_j \xrightarrow{i.p.} 0, \quad as\ n, p \to \infty, \tag{2.12}$$

对任意固定整数 $j \in \mathbb{N}$。

注 2.5. 定理 2.2 确立了矩估计量 $\hat{}\alpha_j$. 实际上，$\hat{}\alpha_j$ 可以通过围道积分计算，利用柯西留数定理，在由 $m_n(z)$ 的零点和$\mathbf{S}_n$的特征值确定的极点处计算留数，即可得到显式公式。所有阶数的矩都有闭式表达式，但其复杂度会随 j的增大而迅速上升。例如，一阶矩有一个相对简单的公式：

$$\hat{\alpha}_1 = n\mathbf{a}^\top \mathbf{S}_n \mathbf{a} - \sum_{i=1}^{\psi} \frac{\eta_i s_n'(\eta_i) + s_n(\eta_i)}{\underline{m}_n'(\eta_i)}, \tag{2.13}$$

其中 $\psi = \min\{p, n-1\}$ 以及 $\eta_1 > \cdots > \eta_\psi$是 $m_n(z)$ 的零点。对于更高阶的矩（$j \geq 2$），公式涉及大量高达 j阶导数的求和。为处理这一复杂性，我们在附录 A.1中提供了 Mathematica 代码，可生成精确的符号表达式。

2.4. VESD 估计

为估计向量经验谱分布 $F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$，我们采用由 Kong 和 Valiant (2017) 提出的矩匹配方法，该方法最初用于 ESD 估计。其基本思想是在细网格上用离散测度逼近目标分布，并通过匹配前 k 个矩来确定权重，其中 k 是控制所使用矩数量的调节参数。由于该方法仅依赖于矩估计，因此可以自然地扩展到向量经验谱分布情形。为完整起见，下面对该过程进行总结。

算法 1 VESD 的估计 $F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$

步骤 1。 选择一个调节参数 k。使用（2.11）计算前 k 个矩$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = (\hat{\alpha}_1,\ldots,\hat{\alpha}_k)^\top$。

步骤 2. 选择两个数 $0 < a_0 < b_0 < \infty$，使得区间 $(a_0,\ b_0)$ 包含 $\cup_{p=1}^{\infty}\text{supp}(F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}})$[1], 的闭包，其中 $\text{supp}(F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}})$ 表示 $F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$ 的支撑集。在 $[a_0, b_0]$ 上定义网格点，步长为 $h \le 1/\max\{n,p\}$:

$$d_i = a_0 + (i-1)h, \quad i = 1,\ldots,t \quad \text{with} \quad t = \left\lfloor \frac{b_0 - a_0}{h} \right\rfloor + 1.$$

步骤 3. 针对 $\mathbf{q} = (q_1,\ldots,q_t)^\top \in \mathbb{R}^t$ 求解以下线性规划:

$$\hat{\mathbf{q}} = \arg\min_{\mathbf{q}} \|\mathbf{M}\mathbf{q} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{q} \ge 0,\ \mathbf{1}_t^\top \mathbf{q} = 1,$$

$\mathbf{M}$ 的第 (i,j) 个元素由 d_j^i 给出。

步骤 4.构造估计量:

$$\hat{F}^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x) = \sum_{i=1}^{t} \hat{q}_i \mathbb{I}\{d_i \le x\}, \quad \text{where } \hat{\mathbf{q}} = (\hat{q}_1,\ldots,\hat{q}_t)^\top.$$

定理 2.3. 假设假设 *(a)-(b*)-(c)* 成立。此外，如果调节参数 $k = k_n$ 满足

$$k_n \to \infty, \quad \frac{k_n}{\log n} \to 0, \tag{2.14}$$

则有

$$W_1(\hat{F}^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}, F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}) \xrightarrow{i.p.} 0,$$

其中 $W_1(\cdot,\cdot)$ 表示分布函数之间的 *1-Wasserstein* 距离。

注 2.6。 增长条件（2.14）平衡了两种误差来源：用有限个矩表示 $F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}$ 所产生的逼近误差，以及根据数据估计高阶矩产生的估计误差。增大 k_n 会减小逼近误差，而限制其增长速率则能控制估计高阶矩固有的方差膨胀。

2.5. 高维二次型的推断

形如以下形式的二次型

$$\tau_p = \int \frac{1}{x}\, dF^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x) = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{a}$$

在高维统计学中发挥着基础性作用。给定一个通过算法 $F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$ 得到的 VESD 估计量 $\hat{}1$， τ_p 的一个自然估计量是相应的代入泛函

$$\hat{\tau}_p = \int \frac{1}{x} d\hat{F}^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x). \tag{2.15}$$

[1]注意， $F^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}$ 对每个维度 p都有定义。

根据假设 (c)， τ_p 是 $F^{\mathbf{\Sigma}_{\text{关于}}\mathbf{a}}$ 在 Wasserstein 距离 W_1下的连续泛函。根据定理 2.3，估计量 $\hat{}F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$ 是一致的，因此 $\hat{}\tau_p$ 也一致。

有限样本不稳定性。尽管朴素插件估计量 $\hat{}\tau_p$ 在渐近意义上有效，但在有限样本情形下可能不稳定。算法 1 通过求解一个匹配有限个经验矩的线性规划（LP），重构 $\hat{}F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$。在实践中，高阶矩估计可能剧烈波动，有时会产生不合规的值（例如负的估计值）。这些不稳定性会通过 LP 传递，导致 $\hat{}F^{\mathbf{\Sigma},\ \mathbf{a}}$ 较为粗糙，并使 $\hat{}\tau_p$ 噪声较大。

稳定矩输入。为在不改变渐近性质的前提下提高稳定性，我们在将矩估计输入 LP 之前对其进行正则化。利用简单的 Jensen 型不等式，

$$\alpha_1^j \le \alpha_j \quad \text{and} \quad a_0^j < \alpha_j < b_0^j, \quad j \ge 1, \tag{2.16}$$

我们构造截断矩估计量

$$\begin{aligned}
\hat{\alpha}_{1,\text{tr}} &\triangleq \min\big\{\max\{\hat{\alpha}_1, a_0\}, b_0\big\}, \\
\hat{\alpha}_{j,\text{tr}} &\triangleq \min\big\{\max\{\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_{1,\text{tr}}^j - \delta\}, b_0^j\big\}, \quad j \ge 2,
\end{aligned}$$

其中 $\delta > 0$ 是一个任意小的常数，用于确保严格不等式。此外，LP 中的 j 阶矩约束以 $1/\hat{}\alpha_{j,\ \text{tr}}$ 加权，以减小高阶矩变异性的影响。使用这些稳定化输入可得到更可靠的 VESD 估计量，进而得到更稳定的 τ_p 代入估计量，称为

$$\hat{\tau}_{p,\text{stab}} \triangleq \int \frac{1}{x} d\hat{F}^{\mathbf{\Sigma},\mathbf{a}}(x)\Big|_{\hat{\mathbf{q}}\leftarrow\hat{\mathbf{q}}_{\text{stab}}},$$

其中，$\hat{}\mathbf{q}_{\text{stab}}$ 通过求解以下线性规划得到：

$$\hat{\mathbf{q}}_{\text{stab}} = \arg\min_{\mathbf{q}} \|(\mathbf{M}\mathbf{q}) \oslash \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\text{tr}} - \mathbf{1}_k\|_1 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{q} \ge 0,\ \mathbf{1}_t^\top \mathbf{q} = 1,$$

其中，$\mathbf{M}$ 定义见算法1，$\hat{}\boldsymbol{\alpha}_{\text{tr}} = (\hat{}\alpha_{1,\ \text{tr}},\ \ldots,\ \hat{}\alpha_{k,\ \text{tr}})^\top$，而“$\oslash$”表示逐元素除法。

定理2.4。 在假设*(a)*、*(b*)*和*(c)*成立，且 $k = k_n$ 满足 $k_n \to \infty$ 和 $k_n/\log n \to 0$时，朴素估计量和稳定化估计量均是一致的，即：

$$\hat{\tau}_p - \tau_p \xrightarrow{i.p.} 0 \quad \textit{and} \quad \hat{\tau}_{p,\text{stab}} - \tau_p \xrightarrow{i.p.} 0,$$

当 n、$p \to \infty$时。

注2.7。 定理2.4 表明 τ_p 仅使用基于矩的 VESD 估计量，无需进行矩阵求逆，即可得到一致估计。相同的

框架也适用于 $F^{\boldsymbol{\Sigma},\,\mathbf{a}}$ 的其他光滑线性泛函。此外，尽管朴素的插件估计量是一致的，采用截断矩和加权矩仍可保持渐近有效性，并提高有限样本稳定性。

我们通过模拟评估所提出估计量 $\hat{\tau}_p$ 和 $\hat{\tau}_{p,\,\mathrm{stab}}$的有限样本性能。数据生成形式为 $\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{z}$，其中 $\mathbf{z}$ 由独立同分布的标准正态分量组成。我们考虑两种协方差结构：

情形1。 对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_{11}, \ldots\ldots, \sigma_{pp})$，其中 $\sigma_{ii} = 2.5 + 2i/p$，$i = 1, \ldots, p$；

情形2。 带状矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = (\sigma_{ij})$ 定义为

$$\sigma_{ii} = 2.5, \quad i = 1, \ldots, p; \quad \sigma_{i,i\pm1} = 0.8, \quad i = 1, \ldots, p-1,$$

以及 $\sigma_{ij} = 0$ 其他情况。

对于设计向量 $\mathbf{a}$，我们考察两种具有代表性的设置：

稠密设置 1： 前 $p/2$ 个分量为 $\sqrt{0.8}/\sqrt{p}$，其余 $p/2$ 个分量为 $\sqrt{1.2}/\sqrt{p}$。

稀疏设置 1： 前八个条目为 $1/\sqrt{8}$，其余均为零。

这些协方差结构与设计向量的组合，使我们能够评估估计量在$\boldsymbol{\Sigma}$中同时存在异质性和依赖关系，以及稀疏程度各异的$\mathbf{a}$时的表现。

在线性规划中，我们将支撑区间固定为 $(a_0, b_0) = (0.3, 5)$，使用$k = 4$ 个矩和 $h = 1/p$ 步长，并将截断阈值设为 $\delta = 0.01$，以计算 $\hat{\tau}_{p,\,\mathrm{stab}}$。维数比选为 $c_n \in \{1.25, 1.5\}$。所有结果均基于 5000 次重复实验。

表 1 报告了样本量为 $n = 200$、400 和 800 时，使用（2.11）得到负矩估计值的次数。结果表明，当 p和 n都较小时，矩截断对于构造 $\hat{\tau}_{p,\mathrm{stab}}$ 至关重要，这一问题在情形1中尤为明显。表 2 给出了 $n = 400$、800 和 1600 时 $\hat{\tau}_{p,\,\mathrm{stab}}$ 的经验偏差和方差。随着 n 和 p 增大，偏差和方差均趋近于零，为 $\hat{\tau}_{p,\,\mathrm{stab}}$ 的一致性提供了经验证据。

TABLE 1
Number of negative moment estimates obtained using (2.11) from 5000 replications.

c_n	Case	稠密设置 1			稀疏设置 1		
		$n = 200$	$n = 400$	$n = 800$	$n = 200$	$n = 400$	$n = 800$
1.25	情形1	479	118	8	1657	1094	702
	情形2	45	0	0	49	1	0
1.5	情形1	605	204	26	1762	1335	911
	情形2	56	2	0	101	6	0

TABLE 2 *Empirical biases (variances) of* $\hat{\tau}_{p,\text{stab}}$ *from 5000 replications.*

$(c_n,\ n)$	情形1		情形2	
	稠密设置 1	稀疏设置 1	稠密设置 1	稀疏设置 1
(1.25,400)	0.0348(0.0068)	0.0367(0.0045)	0.0214(0.0026)	0.0194(0.0031)
(1.25,800)	0.0220(0.0025)	0.0258(0.0028)	0.0128(0.0008)	0.0096(0.0012)
(1.25,1600)	0.0148(0.0012)	0.0164(0.0011)	0.0082(0.0003)	0.0058(0.0007)
(1.5,400)	0.0378(0.0083)	0.0408(0.0066)	0.0244(0.0033)	0.0226(0.0049)
(1.5,800)	0.0249(0.0033)	0.0286(0.0029)	0.0144(0.0011)	0.0121(0.0015)
(1.5,1600)	0.0161(0.0015)	0.0192(0.0015)	0.0091(0.0004)	0.0065(0.0007)

3. 当 a 未知时的估计

3.1. 估计框架

当向量 $\mathbf{a}$ 未知时，通常可以方便地将 τ_p 重新参数化为

$$\tau_p = \kappa_{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{a}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{a}_0, \quad \text{where} \quad \kappa_{\mathbf{a}} = \|\mathbf{a}\|^2, \quad \mathbf{a}_0 = \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|}.$$

这种重新参数化将尺度 $\kappa_{\mathbf{a}}$ 与方向 $\mathbf{a}_0$，分离开来，不仅提高了高维情形下的数值稳定性，还有助于进行相合估计。随后可以分别对标量 $\kappa_{\mathbf{a}}$ 进行估计，而 $\mathbf{a}_0$ 则通过其代入估计量 $\hat{\mathbf{a}}_0 = \hat{\kappa}_{\mathbf{a}}^{-1/2}\hat{\mathbf{a}}$ 进行近似。

在此设置下，将统计量 $\hat{\mathbf{a}}_0$ 中的未知方向向量 $\mathbf{a}_0$ 替换为其估计量 $\hat{\tau}_p$ 通常会引入不可忽略的偏差，这源于矩估计量 $\{\hat{\alpha}_j\}$（定义见（2.11））的估计误差。这些估计量涉及斯蒂尔切斯变换 $s_n(z)$，该变换取决于 $\mathbf{a}_0$ 的真实值，因而不可观测。由于 $s_n(z)$ 无法获得，我们必须基于可观测量进行分析

$$\hat{s}_n(z) \triangleq \hat{\mathbf{a}}_0^\top (\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p)^{-1} \hat{\mathbf{a}}_0.$$

然而，$\hat{s}_n(z)$通常并不一致；也就是说，$\hat{s}_n(z) - s_n(z) \not\to 0$ 对于 $z \in \mathbb{C}^+$。为了解决这一问题，我们分析$\hat{s}_n(z)$的极限行为，并推导其与 $s_n(z)$之间的明确关系。确定这一关系后，我们以严谨的方式校正由此产生的偏差，随后便可应用第τ_p 2节中提出的 估计程序来构造最终估计量。

尽管整体偏差校正框架是统一的，但其具体实施因问题而异，需要分别推导。我们通过以下两个具有代表性的应用来说明这一框架：估计最优夏普比率和复相关系数。在这两个应用中，$\hat{s}_n(z)$与 $s_n(z)$之间的关系恰好是线性的，因此偏差校正尤为简单。

3.2. 最优夏普比率的估计

夏普比率源于均值—方差范式（Markowitz，1952年），是投资组合理论中衡量风险调整收益的基本指标，反映了

预期超额收益与波动率之间的权衡。在固定风险约束下，并假设资产收益向量遵循模型（2.1），平方最优夏普比率（亦称先知夏普比率）为

$$\theta_p = \boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}.$$

准确估计 θ_p 对于风险调整后的绩效评估和投资组合优化都至关重要。针对高维情形下的 θ_p 估计，人们提出了各种方法，既包括为经典情形 $p < n$ 开发的方法，也包括在 $p > n$ 时、满足额外结构性假设的情况下适用的方法（Kan 和 Zhou, 2007；Bai 等人, 2009；El Karoui, 2010；Ao 等人, 2018；Fan 等人, 2021）。近期进展可参见 Lu 等人（2024）、Kan 等人（2024）、Meng 等人（2025）等文献。

在本节中，我们将所提出的框架用于估计最优夏普比率 θ_p ，且不施加限制性结构性假设。由于 θ_p与二次型 τ_p 在$\mathbf{a} = \boldsymbol{\mu}$时相吻合，因此第2 节的结果为理论基础；我们采用第3.1 节中的偏差校正程序，以处理通过样本均值 $\hat{\mathbf{a}}$ 估计 $\mathbf{a} = \bar{\mathbf{x}}$。

由于 θ_p 涉及 $\boldsymbol{\mu}$ 的无约束欧几里得范数（假设 $\boldsymbol{\mu} \neq \mathbf{0}$），我们采用与第3.1节相同的重新参数化方式，

$$\theta_p = \kappa_{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{\mu}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0, \quad \text{where} \quad \kappa_{\boldsymbol{\mu}} = \|\boldsymbol{\mu}\|^2, \quad \boldsymbol{\mu}_0 = \frac{\boldsymbol{\mu}}{\|\boldsymbol{\mu}\|}.$$

随后，分别估计这两个分量：

$$\hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}} = \left| \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i \neq j} \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j \right|, \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_0 = \hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1/2} \bar{\mathbf{x}}.$$

为估计 $\boldsymbol{\mu}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0$，我们首先推导 $\hat{s}_n(z)$ 中的偏差，并对其进行调整。明确计算可得：

$$\begin{aligned} \hat{s}_n(z) &= \hat{\boldsymbol{\mu}}_0^\top \left(\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p \right)^{-1} \hat{\boldsymbol{\mu}}_0 \\ &= \boldsymbol{\mu}_0^\top \left(\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p \right)^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 - \hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \cdot \frac{1 + z\underline{m}_n(z)}{z\underline{m}_n(z)} + o_p(1). \end{aligned}$$

因此，我们定义如下偏差调整函数：

$$s_{n,\mathrm{SR}}(z) \triangleq \hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \left[\bar{\mathbf{x}}^\top \left(\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p \right)^{-1} \bar{\mathbf{x}} + \frac{1 + z\underline{m}_n(z)}{z\underline{m}_n(z)} \right],$$

然后用它来构造矩估计量（参见第 6 页的（2.10））

$$\hat{\alpha}_{j,\mathrm{SR}} = (-1)^j \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z s_{n,\mathrm{SR}}(z) \underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz, \quad j \geq 1. \tag{3.1}$$

结合算法 1，可得到 VESD $F^{\boldsymbol{\Sigma},\, \boldsymbol{\mu}_0}$ 的估计量 $\hat{F}^{\boldsymbol{\Sigma},\, \boldsymbol{\mu}_0}$。最后， θ_p 的估计量为

$$\hat{\theta}_p = \hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}} \int x^{-1} d\hat{F}^{\boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\mu}_0}(x).$$

定理 3.1。 假设定理*2.3* 的条件成立，且 $\|\boldsymbol{\mu}\|$ 有界。则有

$$\hat{\theta}_p - \theta_p \xrightarrow{i.p.} 0,$$

当 n、$p \to \infty$。

注 3.1。 定理3.1证明了平方夏普比率估计量 θ_p的一致性。实际应用中，附录 A.2 提供了用于生成式（3.1）中基于残差的矩估计量的 Mathematica 代码。

注 3.2 （均值-方差前沿的扩展）。 平方最优夏普比率 θ_p 是刻画均值-方差前沿（MVF）的关键量之一（Merton，1972）。MVF 完全由以下关于 $\boldsymbol{\mu}$和 $\boldsymbol{\Sigma}$的关键二次与双线性泛函刻画：

$$\mathbf{1}_p^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}_p, \quad \mathbf{1}_p^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}, \quad \boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}.$$

因此，我们的估计框架可以自然地扩展到对整个 MVF 进行估计。

为稳定对 $\mathbf{1}_p^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}$ 的估计（当 $\|\mathbf{1}_p\|$ 和 $\|\boldsymbol{\mu}\|$ 的尺度可能不同时），我们对这些向量进行归一化，并使用其单位长度版本：

$$\mathbf{1}_0 = \frac{\mathbf{1}_p}{\sqrt{p}}, \qquad \boldsymbol{\mu}_0 = \frac{\boldsymbol{\mu}}{\|\boldsymbol{\mu}\|}.$$

然后，$\mathbf{1}_p^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} = \sqrt{p}\|\boldsymbol{\mu}\| \, \mathbf{1}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0$ 和 $\mathbf{1}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0$ 可以通过极化恒等式表示为：

$$\mathbf{1}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0 = \tfrac{1}{2}\Big[(\mathbf{1}_0 + \boldsymbol{\mu}_0)^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{1}_0 + \boldsymbol{\mu}_0) - \mathbf{1}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}_0 - \boldsymbol{\mu}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_0\Big].$$

因此，对这些标准化形式应用相同的估计方法，即可一致地估计在高维情形下恢复有效前沿所需的所有泛函，而无需施加额外的结构性假设。

3.3. 复相关系数的估计

复相关系数（MCC）用于量化单变量响应 y 与一组预测变量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ 之间的线性依赖关系，定义如下：

$$\rho_p \triangleq \max_{\alpha \in \mathbb{R}^p} \mathrm{Cor}(y, \alpha^\top \mathbf{x}).$$

它还可以用方差和协方差表示为等价形式：

$$\rho_p^2 = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}^\top \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}}{\sigma_{yy}}, \tag{3.2}$$

其中 $\sigma_{yy} = \mathrm{Var}(y)$、 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}} = \mathrm{Cov}(\mathbf{x})$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y} = \mathrm{Cov}(\mathbf{x}\ y)$。在线性回归中，$\rho_p^2$ 衡量了 y 中由 $\mathbf{x}$ 解释的方差比例，因此可作为

拟合优度的关键指标。准确估计 ρ_p^2 对于统计推断和预测建模至关重要。

假设我们观测到一个大小为 n 的样本，其中包含独立同分布对 $\{(y_i, \mathbf{x}_i) : i = 1, \ldots\ldots, n\}$。记 $\mathbf{y} = (y_1, \ldots\ldots, y_n)^\top \in \mathbb{R}^p$ 和 $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \ldots\ldots, \mathbf{x}_n) \in \mathbb{R}^{p\times n}$。$\rho_p^2$ 的一种常规估计量是其经验对应量，即决定系数 R^2,

$$R^2 = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}^\top \mathbf{S}_{\mathbf{xx}}^{-1} \mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{s_{yy}}, \tag{3.3}$$

其中，样本协方差量定义如下:

$$s_{yy} = \frac{1}{n-1}\mathbf{y}^\top \mathbf{P}_1 \mathbf{y}, \quad \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}\mathbf{P}_1\mathbf{X}^\top, \quad \mathbf{s}_{\mathbf{x}y} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}\mathbf{P}_1\mathbf{y},$$

其中，$\mathbf{P}_1 = \mathbf{I}_n - \mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^\top/n$ 表示中心化投影矩阵。这里，s_{yy}、$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}$和$\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}$ 分别是σ_{yy}、$\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{xx}}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}$的无偏矩估计量。

该 R^2 统计量在 p与 n相当的高维情形下存在严重偏差。当 $p < n$时，已有若干偏差校正估计量被提出，例如参见Zheng 等人 (2014)；Li 和 Hong (2024)；Hong 等人(2025)。相比之下，对于 $p > n$，该 R^2 统计量不再有明确定义。将式（$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}^{-1}$ （3.3）中的$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}^{+}$ 替换为其摩尔–彭若斯伪逆，会得到一个退化统计量:

$$R^2 = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}^\top \mathbf{S}_{\mathbf{xx}}^{+} \mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{s_{yy}} = \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{P}_1\mathbf{X}(\mathbf{X}\mathbf{P}_1\mathbf{X}^\top)^{+}\mathbf{X}^\top\mathbf{P}_1\mathbf{y}}{\mathbf{y}^\top\mathbf{P}_1\mathbf{y}} \equiv 1.$$

事实上，当 $p > n$ 时，拟合响应 $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}_1\mathbf{X}^\top(\mathbf{X}\mathbf{P}_1\mathbf{X}^\top)^{+}\mathbf{X}\mathbf{P}_1\mathbf{y}$ 与投影后的数据 $\mathbf{P}_1\mathbf{y}$ 重合，因此实现了完美的样本内拟合。这种退化现象凸显了当 $p > n$ 时需要采用替代方法。为解决这一问题，Kong 和 Valiant (2018) 基于多项式逼近提出了一个线性模型的 ρ_p^2 估计量。

接下来，我们将所提出的估计框架应用于 MCC ρ_p^2。如式(3.2)所示，ρ_p^2 可以表示为一个具有$\mathbf{a} = \sigma_{yy}^{-1/2}\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}$的二次型函数，这使我们能够利用第 2 节的一般结果，同时纳入针对具体问题的调整。

沿用第3.1节的相同策略，我们将交叉协方差向量分解为尺度和方向，由此得到归一化表示

$$\rho_p^2 = \kappa_\sigma\, \boldsymbol{\sigma}_0^\top \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{xx}}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_0, \quad \text{where} \quad \kappa_\sigma = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}^\top\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}}{\sigma_{yy}}, \quad \boldsymbol{\sigma}_0 = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}}{\|\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}\|}.$$

标量 κ_σ 和向量 $\boldsymbol{\sigma}_0$ 可通过以下方式估计

$$\hat{\kappa}_\sigma = \left| \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i\neq j} \frac{(y_i - \bar{y})(y_j - \bar{y})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^\top(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})}{s_{yy}} \right|, \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{\sqrt{s_{yy}\hat{\kappa}_\sigma}},$$

其中 $\bar{y} = (1/n)\sum_{i=1}^{n} y_i$ 和 $\bar{\mathbf{x}} = (1/n)\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i$。为恢复 $\boldsymbol{\sigma}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_0$，我们分析 $\hat{s}_n(z)$ 的极限。明确计算表明

$$\begin{aligned}\hat{s}_n(z) &= \hat{\boldsymbol{\sigma}}_0^\top (\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p)^{-1} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_0 \\ &= z^2 \underline{m}_n^2(z) \boldsymbol{\sigma}_0^\top (\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\sigma}_0 + \kappa_\sigma^{-1}(1 + z\underline{m}_n(z)) + o_p(1).\end{aligned}$$

基于这一关系，我们定义偏差校正函数

$$s_{n,\mathrm{MCC}}(z) = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_0^\top (\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} - z\mathbf{I}_p)^{-1} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_0 - \hat{\kappa}_\sigma^{-1}(1 + z\underline{m}_n(z))}{z^2 \underline{m}_n^2(z)},$$

并利用它构造矩估计量：

$$\hat{\alpha}_{j,\mathrm{MCC}} = (-1)^j \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z s_{n,\mathrm{MCC}}(z) \underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz, \qquad j \geq 1. \tag{3.4}$$

将其与算法 1 相结合，可得到 VESD $F^{\boldsymbol{\Sigma},\, \boldsymbol{\sigma}_0}$ 的估计量 $\hat{F}^{\boldsymbol{\Sigma},\, \boldsymbol{\sigma}_0}$。最后，我们将 ρ_p^2 估计为

$$\hat{\rho}_p^2 = \hat{\kappa}_\sigma \int x^{-1} d\hat{F}^{\boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\sigma}_0}(x).$$

定理 3.2。 假设向量 $\left(y,\ \mathbf{x}^\top\right)^\top$ 满足定理 *2.3* 的条件。则有

$$\hat{\rho}_p^2 - \rho_p^2 \xrightarrow{i.p.} 0,$$

当 $n, p \to \infty$ 时。

注 3.3。 定理 3.2 证明了所提出的估计量在高维渐近条件下具有一致性，其中 $p/n \to c \in (0, \infty)$。这保证了在现代高维情形下对 MCC 进行有效推断，并解决了经典方法失效的问题，例如标准 R^2 统计量，该统计量在 $p > n$ 时由于完美的样本内拟合而退化为 1。为便于实现，附录A.3 提供了用于生成式 (3.4) 中基于残差的矩估计量的 Mathematica 代码。

4. 模拟

我们通过模拟研究评估所提出的平方最优夏普比率 θ_p 和平方多重相关系数 ρ_p^2 估计量的性能。作为比较，我们还考虑了两种基于收缩的估计量，它们使用样本协方差矩阵的收缩版本来近似总体协方差矩阵。相应的 θ_p 和 ρ_p^2 估计量定义为

$$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}} = \bar{\mathbf{x}}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathrm{Sh1}}^{-1} \bar{\mathbf{x}}, \quad \hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}} = \bar{\mathbf{x}}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathrm{Sh2}}^{-1} \bar{\mathbf{x}}$$

and

$$\hat{\rho}^2_{\mathrm{Sh1}} = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathrm{Sh1}}^{-1} \mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{s_{yy}}, \quad \hat{\rho}^2_{\mathrm{Sh2}} = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathrm{Sh2}}^{-1} \mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{s_{yy}},$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{Sh1}}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{Sh2}}$ 分别表示 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中 Ledoit 和 Wolf(2015) 和 Ledoit 和 Wolf(2018) 提出的收缩估计量。对于 ρ_p^2 的估计，我们还纳入了 Kong 和 Valiant (2018) 提出的估计量，记为 $\hat{\rho}^2_{\mathrm{Kong}}$。

在线性规划的实现中，我们将矩阶数设为 $k = 4$，步长设为 $h = 1/p$。此外，我们进行了以下两项调整：

(i) 矩估计与加权。为提高高阶矩估计的数值稳定性，我们使用矩估计量 $\hat{\alpha}_{j,\ \mathrm{SR}}$ 和 $\hat{\alpha}_{j,\ \mathrm{MCC}}$ 的截断版本$\delta = 0.01$，并按照第 2.4 节所述，求解相应的加权目标线性规划。

(ii) 数据驱动的支撑区间选择。 注意到，向量经验谱分布 $F^{\boldsymbol{\Sigma}}$、$\boldsymbol{\mu}_0$和 $F^{\boldsymbol{\Sigma}}$、$\boldsymbol{\sigma}_0$的支撑集位于 $\boldsymbol{\Sigma}$的谱上，我们采用 Ledoit 和 Wolf（2015）提出的方法估计特征值。令 $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_p$ 表示排序后的估计值。随后，我们将工作区间设为 $[a_0, b_0] = [0.8\lambda_{p-1}, 1.2\lambda_2]$，以降低对极端值的敏感性。

对于Kong 和 Valiant (2018) 提出的方法，我们将逼近阶数设为 4，并采用与我们的 LP 实现相同的工作区间 $[a_0, b_0]$。

接下来，我们概述夏普比率和 MCC 实验的数据生成设定，并报告相应的数值结果。

4.1. 最优夏普比率的估计

数据按照以下方式生成

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{z}.$$

我们考虑潜向量 $\mathbf{z}$ 的两种分布设定：

模型 1（独立性）。$\mathbf{z}$ 由独立同分布的标准正态分量构成。**模型 2（对数凹性）。**$\mathbf{z}$ 服从如下形式的椭圆分布

$$\mathbf{z} = \frac{1}{\sqrt{p+1}}\xi\mathbf{u},$$

其中，$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^p$ 在单位球面 $\mathbb{S}^{p-1}$上服从均匀分布，且与 $\xi \sim \mathrm{Gamma}(p, 1)$ 相互独立。

对于协方差结构 $\boldsymbol{\Sigma}$，我们考察两种情形：

情况 3。 对角矩阵 $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_{11}, \ldots, \sigma_{pp})$，前 $p/2$ 个对角元素为 3，其余 $p/2$ 个元素为 1。5；**案例 4**。 托普利兹矩阵 $\mathbf{\Sigma} = (\sigma_{ij})$，其中 $\sigma_{ij} = 2 \cdot 0.3^{|i-j|}$。

均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 定义了两种情形：

稠密设置 2： 所有分量均为 $1/\sqrt{p}$；
稀疏设置 2： 第一项为 0.6，第二项为 0.8，其余均为零。

维数比设为 $c_n \in \{1.25, 1.5\}$，样本量为 $n \in \{400, 800, 1600\}$，所有结果均基于 5000 次独立重复试验。

表 3-4 展示了三个估计量 $\hat{}$ $\hat{}$ $\hat{}$ 的经验偏差和方差θ_p、 θ_{Sh1} 和 θ_{Sh2}。在所有设置下， θ_p 的偏差和方差均会随 n 和 p增大而减小，证实了其一致性。相比之下， θ_{Sh1}和 θ_{Sh2} 的偏差即使在大样本下仍不可忽略，表明这些基于收缩的估计量不一致。

4.2. MCC 的估计

数据由以下模型生成

$$\begin{pmatrix} y \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} = \mathbf{\Sigma}_{y\mathbf{x}}^{1/2} \mathbf{z}_{y\mathbf{x}},$$

其中， $\mathbf{\Sigma}_{y\mathbf{x}}$是$(y,\ \mathbf{x}^\top)^\top$的协方差矩阵，而$\mathbf{z}^{y\mathbf{x}}$是一个$(p+1)$维潜向量。$\mathbf{z}^{y\mathbf{x}}$ 的分布设定遵循**模型 1** 和**模型 2**，其中维度 p 替换为 $p+1$。协方差块 $\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{xx}}$ 采用与**情况 3** 和**案例 4**相同的结构，而方向向量 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}y}$ 由**稠密设置 2** 和**稀疏设置 2**定义。我们始终固定 $\sigma_{yy} = 1$ ，维度设定与夏普比率实验中的相同。

表 5–6 基于 5000 次重复抽样，展示了四种估计量 $\hat{}\rho_p^2$、 $\hat{}\rho_{\text{Sh1}}^2$、 $\hat{}\rho_{\text{Sh2}}^2$ 和 $\hat{}\rho_{\text{Kong}}^2$的经验偏差和方差。结果表明， $\hat{}\rho_p^2$ 和 $\hat{}\rho_{\text{Kong}}^2$ 均具有一致性，因为随着(n, p)增大，它们的偏差和方差均减小，而基于收缩的估计量仍存在偏差。尽管 $\hat{}\rho_{\text{Kong}}^2$ 的偏差较小，但其方差明显大于其他竞争方法。因此，所提出的估计量 $\hat{}\rho_p^2$ 在所有方法中达到了最小的均方误差。

附录 A：围道积分的计算

A.1. (2.11)的计算

令 $\psi = \min\{p, n-1\}$，并用 $\lambda_1^{\mathbf{S}_n} > \lambda_2^{\mathbf{S}_n} > \cdots > \lambda_\psi^{\mathbf{S}_n}$表示 $\mathbf{S}_n$ 的非零特征值。令 $\eta_1 > \cdots > \eta_\psi$为 $m_n(x)$ 的零点，它们满足

TABLE 3
Empirical biases (variances) of the three estimators of θ_p from 5000 replications under Model 1.

情况 3，稠密设置 2			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0334(0.0422)	1.1953(0.0111)	1.4094(0.0144)
(1.25,800)	0.0155(0.0219)	1.1953(0.0056)	1.4034(0.0073)
(1.25,1600)	0.0130(0.0123)	1.1978(0.0029)	1.4031(0.0037)
(1.5,400)	0.0331(0.0472)	1.4468(0.0132)	1.6941(0.0736)
(1.5,800)	0.0182(0.0274)	1.4458(0.0066)	1.6868(0.0150)
(1.5,1600)	0.0150(0.0141)	1.4489(0.0032)	1.6856(0.0041)
情况 3（稀疏设置 2）			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0533(0.0250)	1.3513(0.0128)	1.5620(0.0164)
(1.25,800)	0.0341(0.0126)	1.3513(0.0065)	1.5564(0.0083)
(1.25,1600)	0.0275(0.0064)	1.3525(0.0033)	1.5548(0.0042)
(1.5,400)	0.0661(0.0304)	1.6072(0.0140)	1.8521(0.0701)
(1.5,800)	0.0413(0.0155)	1.6049(0.0072)	1.8436(0.0166)
(1.5,1600)	0.0328(0.0080)	1.6066(0.0035)	1.8410(0.0045)
案例 4（稠密设置 2）			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0346(0.0149)	1.4395(0.0154)	1.7363(0.0216)
(1.25,800)	0.0221(0.0076)	1.4394(0.0076)	1.7320(0.0105)
(1.25,1600)	0.0176(0.0037)	1.4429(0.0039)	1.7346(0.0053)
(1.5,400)	0.0459(0.0193)	1.6972(0.0178)	2.0476(0.0252)
(1.5,800)	0.0289(0.0097)	1.6965(0.0089)	2.0417(0.0125)
(1.5,1600)	0.0213(0.0047)	1.6998(0.0043)	2.0434(0.0060)
案例 4，稀疏设置 2			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0456(0.0312)	1.3188(0.0139)	1.6218(0.0196)
(1.25,800)	0.0209(0.0151)	1.3184(0.0070)	1.6169(0.0098)
(1.25,1600)	0.0100(0.0079)	1.3201(0.0035)	1.6174(0.0049)
(1.5,400)	0.0643(0.0404)	1.5755(0.0154)	1.9319(0.0218)
(1.5,800)	0.0324(0.0194)	1.5723(0.0078)	1.9229(0.0110)
(1.5,1600)	0.0200(0.0102)	1.5740(0.0039)	1.9227(0.0054)

TABLE 4
Empirical biases (variances) of the three estimators of θ_p from 5000 replications under Model 2.

情况 3（稠密设置 2）			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0372(0.0427)	1.1955(0.0111)	1.4175(0.0145)
(1.25,800)	0.0167(0.0221)	1.1955(0.0056)	1.4069(0.0073)
(1.25,1600)	0.0125(0.0122)	1.1979(0.0029)	1.4040(0.0037)
(1.5,400)	0.0354(0.0476)	1.4469(0.0132)	1.8217(73.1198*)
(1.5,800)	0.0207(0.0276)	1.4460(0.0066)	1.6941(0.0959)
(1.5,1600)	0.0163(0.0144)	1.4489(0.0032)	1.6881(0.0041)
情况 3，稀疏设置 2			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0546(0.0252)	1.3512(0.0128)	1.5696(0.0165)
(1.25,800)	0.0353(0.0127)	1.3514(0.0065)	1.5598(0.0083)
(1.25,1600)	0.0275(0.0063)	1.3525(0.0033)	1.5557(0.0041)
(1.5,400)	0.0667(0.0308)	1.6071(0.0140)	1.9734(65.8021*)
(1.5,800)	0.0425(0.0156)	1.6049(0.0072)	1.8504(0.0854)
(1.5,1600)	0.0339(0.0081)	1.6066(0.0035)	1.8434(0.0045)
案例 4，稠密设置 2			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0365(0.0150)	1.4390(0.0155)	1.7427(0.0218)
(1.25,800)	0.0226(0.0077)	1.4392(0.0076)	1.7353(0.0106)
(1.25,1600)	0.0178(0.0037)	1.4428(0.0039)	1.7365(0.0054)
(1.5,400)	0.0472(0.0196)	1.6968(0.0178)	2.0553(0.0255)
(1.5,800)	0.0289(0.0098)	1.6964(0.0089)	2.0458(0.0125)
(1.5,1600)	0.0216(0.0047)	1.6998(0.0043)	2.0453(0.0060)
案例 4，稀疏设置 2			
$(c_n,\ n)$	方法		
	$\hat{\theta}_p$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh1}}$	$\hat{\theta}_{\mathrm{Sh2}}$
(1.25,400)	0.0476(0.0322)	1.3189(0.0139)	1.6291(0.0198)
(1.25,800)	0.0214(0.0150)	1.3185(0.0070)	1.6207(0.0098)
(1.25,1600)	0.0105(0.0079)	1.3202(0.0035)	1.6195(0.0049)
(1.5,400)	0.0660(0.0406)	1.5756(0.0154)	1.9405(0.0220)
(1.5,800)	0.0338(0.0200)	1.5724(0.0078)	1.9273(0.0111)
(1.5,1600)	0.0204(0.0102)	1.5740(0.0039)	1.9246(0.0054)

*较大的方差源于少数重复抽样，在这些重复抽样中，最小特征值估计值 λ_p 由 Ledoit 和 Wolf (2015) 得出，接近于零，从而使某些特征值 $\hat{\mathbf{\Sigma}}_{\mathrm{Sh2}}$ 趋近于零；参见 Ledoit 和 Wolf (2018) 中的 (6.4) 和 (6.6)。

TABLE 5
Empirical biases (variances) of the four estimators of ρ_p^2 from 5000 replications under Model 1.

情况 3，稠密设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0338(0.0246)	0.9997(0.0067)	1.1539(0.0077)	0.0020(0.2228)
(1.25,800)	0.0244(0.0133)	1.0012(0.0033)	1.1539(0.0039)	0.0133(0.1208)
(1.25,1600)	0.0158(0.0077)	1.0023(0.0018)	1.1542(0.0020)	0.0053(0.0631)
(1.5,400)	0.0314(0.0281)	1.2243(0.0074)	1.4041(0.0085)	0.0029(0.4282)
(1.5,800)	0.0216(0.0170)	1.2254(0.0038)	1.4033(0.0043)	-0.00004(0.2317)
(1.5,1600)	0.0175(0.0098)	1.2268(0.0019)	1.4039(0.0022)	0.0062(0.1191)
情况 3，稀疏设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0497(0.0130)	1.1589(0.0075)	1.3106(0.0087)	-0.0052(0.2471)
(1.25,800)	0.0342(0.0067)	1.1615(0.0037)	1.3117(0.0043)	0.0040(0.1331)
(1.25,1600)	0.0264(0.0034)	1.1622(0.0019)	1.3115(0.0022)	-0.0073(0.0688)
(1.5,400)	0.0571(0.0169)	1.3837(0.0087)	1.5614(0.0101)	-0.0032(0.4486)
(1.5,800)	0.0385(0.0088)	1.3862(0.0042)	1.5618(0.0048)	-0.0124(0.2472)
(1.5,1600)	0.0284(0.0043)	1.3871(0.0021)	1.5619(0.0024)	-0.0047(0.1281)
案例 4（稠密设置 2）				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0292(0.0069)	1.1357(0.0069)	1.3754(0.0091)	-0.0050(0.0822)
(1.25,800)	0.0184(0.0033)	1.1369(0.0034)	1.3754(0.0045)	-0.0068(0.0392)
(1.25,1600)	0.0138(0.0018)	1.1383(0.0018)	1.3761(0.0023)	-0.0089(0.0209)
(1.5,400)	0.0389(0.0090)	1.3471(0.0075)	1.6303(0.0099)	-0.0087(0.1364)
(1.5,800)	0.0235(0.0043)	1.3476(0.0037)	1.6290(0.0049)	-0.0131(0.0670)
(1.5,1600)	0.0184(0.0023)	1.3496(0.0019)	1.6303(0.0025)	-0.0103(0.0333)
案例 4，稀疏设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\text{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0468(0.0165)	0.9999(0.0056)	1.2452(0.0074)	0.0030(0.0732)
(1.25,800)	0.0266(0.0081)	1.0019(0.0028)	1.2466(0.0037)	0.0105(0.0348)
(1.25,1600)	0.0109(0.0038)	1.0024(0.0014)	1.2465(0.0019)	0.0079(0.0188)
(1.5,400)	0.0590(0.0219)	1.2082(0.0065)	1.4962(0.0087)	0.0059(0.1216)
(1.5,800)	0.0363(0.0116)	1.2092(0.0031)	1.4959(0.0041)	0.0033(0.0597)
(1.5,1600)	0.0201(0.0053)	1.2103(0.0016)	1.4963(0.0021)	0.0045(0.0319)

TABLE 6
Empirical biases (variances) of the four estimators of ρ_p^2 from 5000 replications under Model 2.

情况 3，稠密设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0259(0.0241)	0.9967(0.0066)	1.1568(0.0077)	0.0011(0.2065)
(1.25,800)	0.0194(0.0132)	0.9998(0.0033)	1.1555(0.0039)	0.0130(0.1147)
(1.25,1600)	0.0130(0.0078)	1.0015(0.0017)	1.1549(0.0020)	0.0046(0.0630)
(1.5,400)	0.0235(0.0275)	1.2205(0.0074)	1.4073(0.0085)	0.0050(0.3948)
(1.5,800)	0.0181(0.0168)	1.2232(0.0038)	1.4047(0.0043)	0.0010(0.2221)
(1.5,1600)	0.0160(0.0098)	1.2256(0.0019)	1.4045(0.0022)	0.0063(0.1181)
情况 3，稀疏设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0433(0.0126)	1.1554(0.0075)	1.3130(0.0087)	-0.0055(0.2283)
(1.25,800)	0.0316(0.0066)	1.1598(0.0037)	1.3129(0.0043)	0.0034(0.1267)
(1.25,1600)	0.0245(0.0033)	1.1613(0.0019)	1.3120(0.0022)	-0.0073(0.0683)
(1.5,400)	0.0520(0.0164)	1.3796(0.0087)	1.5641(0.0102)	-0.0012(0.4088)
(1.5,800)	0.0355(0.0086)	1.3839(0.0041)	1.5630(0.0048)	-0.0133(0.2349)
(1.5,1600)	0.0270(0.0043)	1.3860(0.0021)	1.5625(0.0025)	-0.0048(0.1277)
案例 4（稠密设置 2）				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0251(0.0067)	1.1332(0.0068)	1.3777(0.0090)	-0.0070(0.0787)
(1.25,800)	0.0166(0.0033)	1.1357(0.0034)	1.3766(0.0045)	-0.0067(0.0380)
(1.25,1600)	0.0128(0.0017)	1.1376(0.0018)	1.3767(0.0023)	-0.0094(0.0207)
(1.5,400)	0.0346(0.0087)	1.3440(0.0074)	1.6328(0.0098)	-0.0069(0.1306)
(1.5,800)	0.0213(0.0042)	1.3459(0.0037)	1.6301(0.0049)	-0.0130(0.0656)
(1.5,1600)	0.0173(0.0022)	1.3487(0.0019)	1.6309(0.0026)	-0.0107(0.0326)
案例 4，稀疏设置 2				
$(c_n,\ n)$	方法			
	$\hat{\rho}_p^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh1}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Sh2}}^2$	$\hat{\rho}_{\mathrm{Kong}}^2$
(1.25,400)	0.0379(0.0161)	0.9975(0.0056)	1.2477(0.0074)	0.0016(0.0704)
(1.25,800)	0.0219(0.0079)	1.0007(0.0028)	1.2478(0.0037)	0.0105(0.0336)
(1.25,1600)	0.0084(0.0038)	1.0018(0.0014)	1.2470(0.0019)	0.0078(0.0185)
(1.5,400)	0.0509(0.0217)	1.2050(0.0065)	1.4987(0.0087)	0.0083(0.1169)
(1.5,800)	0.0328(0.0115)	1.2075(0.0031)	1.4971(0.0041)	0.0037(0.0584)
(1.5,1600)	0.0177(0.0052)	1.2095(0.0016)	1.4970(0.0021)	0.0045(0.0314)

交错不等式：

$$\lambda_1^{\mathbf{S}_n} > \eta_1 > \lambda_2^{\mathbf{S}_n} > \eta_2 > \cdots > \lambda_\psi^{\mathbf{S}_n} > \eta_\psi.$$

定义 $f_{jn}(z) = zs_n(z)m_n'(z)/m_n^{j+1}(z)$。不难验证， f_{jn}的所有极点都属于集合 $\{\lambda_1^{\mathbf{S}_n}, \ldots, \lambda_\psi^{\mathbf{S}_n}, \eta_1, \ldots, \eta_\psi\}$。因此，根据留数定理，式（2.11）中的围道积分可表示为

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{zs_n(z)\underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz = \sum_{i=1}^{\psi} \mathrm{Res}(f_{jn}, \lambda_i^{\mathbf{S}_n}) + \sum_{i=1}^{\psi} \mathrm{Res}(f_{jn}, \eta_i).$$

所有留数均可写成闭式表达式。 $\{\lambda_i^{\mathbf{S}_n}\}$ 处的留数相对简单。具体而言，

$$\mathrm{Res}(f_{jn}, \lambda_i) = -n\lambda_i^{\mathbf{S}_n}(\mathbf{a}^\top \mathbf{v}_i)^2 \mathbb{I}(j = 1),$$

其中， $\mathbf{v}_i$ 是与$\lambda_i^{\mathbf{S}_n}$对应的$\mathbf{S}_n$ 的特征向量。相比之下， $\{\eta_i\}$ 处的留数涉及更复杂的公式。为简洁起见，这里省略其显式表达式，转而提供用于计算它们的 Mathematica 代码。

```
j = 1; (* the order of moment *)
f = (z - eta) ^ (j + 1) * z * sn[z] * D[mn[z], z] / (mn[z]) ^ (j + 1);
D[f, {z, j}];
D[% * mn[z] ^ (2 j + 1), {z, 2 j + 1}] /. z -> eta;
D[mn[z], z] ^ (2 j + 1) (j)! (2 j + 1)! /. z -> eta;
Simplify[%% / %, mn[eta] == 0]
```

A.2. 式(3.1)的计算

应用变量替换 $u_n(z) = -1/m_n(z)$，并利用柯西积分公式，得到

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{\underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+2}(z)} dz = (-1)^j \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\tilde{\mathcal{C}}} u_n^j du_n = 0, \tag{A.1}$$

其中 $\tilde{\mathcal{C}}$ 是 $\mathcal{C}$ 的像，且不围住 u_n^j的任何极点。因此，式（3.1）中的围道积分可分解为

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{zs_{n,\mathrm{SR}}(z)\underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz =& \frac{\hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1}}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z\bar{s}_n(z)\underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz + \frac{\hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1}}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z\underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz \\ \triangleq& \hat{\kappa}_{\boldsymbol{\mu}}^{-1} \left[C_1(z) + C_2(z)\right],\end{aligned}$$

其中 $\bar{s}_n(z) = \bar{\mathbf{x}}^\top (\mathbf{S}_n - z\mathbf{I}_p)^{-1} \bar{\mathbf{x}}$。计算 $C_1(z)$ 的步骤与附录 A.1 中的完全相同，只是将 $\mathbf{a}$ 替换为 $\bar{\mathbf{x}}$。关于 $C_2(z)$ 的推导，请参阅 Li 和 Yao (2014) 中的详细分析。

A.3. 计算 (3.4)

式 3.4 中的围道积分可以采用与夏普比率情形类似的方法进行计算。利用 A.1 中的恒等式，可得

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{z s_{n,\mathrm{MCC}}(z) \underline{m}_n'(z)}{\underline{m}_n^{j+1}(z)} dz = \frac{\hat{\kappa}_\sigma^{-1}}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{\check{s}_n(z) \underline{m}_n'(z)}{z \underline{m}_n^{j+3}(z)} dz = \hat{\kappa}_\sigma^{-1} \sum_{i=1}^{\psi} \mathrm{Res}(\check{f}_{jn}, \eta_i),$$

其中

$$\check{s}_n(z) = \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{x}y}^\top \left(\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} - z\mathbf{I}_p\right)^{-1} \mathbf{s}_{\mathbf{x}y}}{s_{yy}} - 1, \quad \check{f}_{jn}(z) = \frac{\check{s}_n(z) \underline{m}_n'(z)}{z \underline{m}_n^{j+3}(z)}.$$

所有留数均可使用与夏普比率情形相同的 Mathematica 代码计算。

```
j = 1; (* the order of moment *)
f = (z - eta)^(j + 3) * D[mn[z], z] * sn[z] / z / (mn[z]) ^ (j + 3);
D[f, {z, j + 2}];
D[% * mn[z]^(2 j + 5), {z, 2 j + 5}] /. z -> eta;
D[mn[z], z] ^ (2 j + 5) (j + 2)! (2 j + 5)! /. z -> eta;
Simplify[%% / %, mn[eta] == 0]
```


经费资助

Weiming Li 的研究获得国家自然科学基金资助（项目编号：11971293、12141107）。Guang-ming Pan 的研究获得 MOE-T2EP20123-0007 资助。

补充材料

《高维精度矩阵二次型：$p > n$ 时的估计框架》的补充材料

本补充材料给出了所有定理的详细证明，并包含对（1.2）的推导。

参考文献

Anderson, T. W. (2003). 多元统计分析导论。Wiley，纽约，第3版。Ao, M. M., Li, Y. Y. 和 Zheng, X. H. (2018). 提升大型投资组合的均值-方差有效性。《金融研究评论》，32:2890–2919。Bai, Z. D., Liu, H. X. 和 Wong, W.-K. (2009). 利用随机矩阵理论增强马科维茨投资组合优化的适用性。数学金融，19:639–667。Bai, Z. D., Miao, B. Q. 和 Pan, G. M. (2007). 大样本协方差矩阵特征向量的渐近性。《概率年刊》，35:1532–1572。

Bai, Z. D. 和 Silverstein, J. W. (2010). 大维随机矩阵的谱分析。Springer，纽约，第2版。Bai, Z. D. 和 Zhou, W. (2008). 列之间不具有独立性结构的大样本协方差矩阵。《中华统计学志》，18:425–442。Cai, T., Liu, W. D. 和 Luo, X. (2011). 一种用于稀疏精度矩阵估计的约束 ℓ_1 最小化方法。《美国统计学会会刊》，106:594–607。Campbell, J. Y., Lo, A. W. 和 MacKinlay, A. C. (1997).《金融市场计量经济学》。普林斯顿大学出版社，普林斯顿。Daniele, M., Pohlmeier, W. 和 Zagidullina, A. (2025). 一种用于高维协方差矩阵估计和投资组合选择的稀疏近似因子模型。《金融计量经济学杂志》，23:nbae017。El Karoui, N. (2010). 马科维茨问题及其他带线性约束的二次规划中的高维效应：风险低估。《统计年刊》，38:3487–566。Fan, J. Q., Fan, Y. Y. 和 Lv, J. C. (2008). 利用因子模型进行高维协方差矩阵估计。《计量经济学杂志》，147:186–197。Fan, J. Q., Liao, Y. 和 Mincheva, M. (2013). 通过主正交补空间阈值化进行大规模协方差估计。《英国皇家统计学会杂志B辑：统计方法论》，75:603–680。Fan, J. Q., Liu, H. 和 Wang, W. C. (2018). 通过椭圆因子模型进行大规模协方差估计。《统计年刊》，46:1383–1414。Fan, J. Q., Weng, H. L. 和 Zhou, Y. F. (2021). 高维均值与协方差矩阵泛函的最优估计。*arXiv*预印本 *arXiv:1908.07460*。Fan, Y. Y. 和 Lv, J. C. (2016). 超大型高斯图模型中的创新型可扩展高效估计。《统计年刊》，44:2098–2126。Friedman, J., Hastie, T. 和 Tibshirani, R. (2008). 利用图形套索进行稀疏逆协方差估计。《生物统计学》，9:432–441。Hong, S. Z., Li, W. M., Liu, Q. 和 Zhang, Y. C. (2025). 对高维椭圆模型中 R^2 统计量的自适应调整。《美国统计学会会刊》，120:2372–2384。Kan, R., Wang, X. L. 和 Zheng, X. H. (2024). 多因子资产定价模型的样本内与样本外夏普比率。《金融计量经济学杂志》，155:103837。Kan, R. 和 Zhou, G. F. (2007). 参数不确定性下的最优投资组合选择。《金融与定量分析杂志》，42:621–656。Kong, W. H. 和 Valiant, G. (2017). 基于样本的谱估计。《统计年刊》，45:2218–2247。Kong, W. H. 和 Valiant, G. (2018). 次线性数据情形下可学习性的估计。《神经信息处理系统进展》，31:5455–5464。Ledoit, O. 和 Wolf, M. (2004). 一种用于大维协方差矩阵的良态估计量。《多元分析杂志》，88:365–411。Ledoit, O. 和 Wolf, M. (2012). 大规模非线性收缩估计

维协方差矩阵。《统计年刊》，40:1024–1060。Ledoit, O. 和 Wolf, M.（2015）。谱估计：大维度下协方差矩阵估计与主成分分析的统一框架。《多元分析杂志》，139:360–384。Ledoit, O. 和 Wolf, M.（2017）。用于投资组合选择的协方差矩阵非线性收缩：Markowitz 遇上金发姑娘。《金融研究评论》，30:4349–4388。Ledoit, O. 和 Wolf, M.（2018）。Stein损失下大维协方差矩阵的最优估计。《伯努利》，24(4B):3791–3832。Li, W. M. 和 Hong, S. Z.（2024）。一般独立分量模型下高维 R^2 统计量的中心极限定理。《中华统计学志》，34:2265–2275。Li, W. M. 和 Yao, J. F.（2014）。大维协方差矩阵谱的局部矩估计量。《中华统计学志》，24:919–936。Locantore, N., Marron, J., Simpson, D., Tripoli, N., Zhang, J., Cohen, K., Boente, G., Fraiman, R., Brumback, B.and Croux, C., 等（1999）。函数型数据的稳健主成分分析。《检验》，8:1–73。Lu, Y. H., Yang, Y. R. 和 Zhang, T.（2024）。投资组合优化中的双重下降：理论夏普比率与估计精度之间的博弈。*arXiv*预印本 *arXiv:2411.18830*。Markowitz, H.（1952年）。投资组合选择。《金融学杂志》，7:77–91。Marˇcenko, V. A. 和 Pastur, L. A.（1967）。某些随机矩阵集合中特征值的分布。《苏联数学文集》，1:457–483。Mclachlan, G.（2004）。判别分析与统计模式识别。John Wiley & Sons, Inc.，霍博肯，新泽西州。Meng, X. R., Cao, Y. 和 Wang, W. C.（2025）。高维投资组合优化的样本外夏普比率估计。《美国统计学会会刊》，即将发表。Merton, R.（1972）。有效投资组合前沿的解析推导。《金融与定量分析杂志》，7:1851–1872。Pan, G. M.（2014）。两类大样本协方差矩阵的比较。《亨利·庞加莱研究所年刊：概率与统计》，50:655–677。Silverstein, J. W.（1995）。大维随机矩阵特征值经验分布的强收敛。《多元分析杂志》，55:331–339。Silverstein, J. W. 和 Choi, S. I.（1995）。大维随机矩阵极限谱分布的分析。《多元分析杂志》，54:295–309。Sun, T. N. 和 Zhang, C.-H.（2013）。使用尺度化LASSO进行稀疏矩阵求逆。《机器学习研究杂志》，14:3385–3418。Tyler, D. E.（1987）。多元散布的分布无关 M估计量。《统计年刊》，15:234–251。Wang, D. F., Yeung, D. S. 和 Tsang, E. C. C.（2007）。用于支持向量机的加权马氏距离核。《IEEE神经网络汇刊》，18:1453–1462。Zhang, S. C., Wang, H. Y. 和 Lin, W.（2025）。CARE：组成数据的高精度矩阵估计

阵。《美国统计学会会刊》，120(549):305–317。Zheng, S. R., Jiang, D. D., Bai, Z. D. 和 He, X. M.（2014）。中等高维数据下复相关系数的推断。《Biometrika》，101:748–754。Zoubir, A. M., Koivunen, V., Ollila, E. 和 Muma, M.（2018）。《信号处理中的稳健统计》。剑桥大学出版社，剑桥。