第 6 章　最大似然估计

如果回归模型存在非线性，常使用最大似然估计法(MLE)。

6.1　最大似然估计法的定义

假设随机向量$\boldsymbol{y}$的概率密度函数为$f(\boldsymbol{y};\boldsymbol{\theta})$，其中$\boldsymbol{\theta}$为 K 维未知参数向量，$\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}$。

$\boldsymbol{\Theta}$为参数空间，即参数$\boldsymbol{\theta}$所有可能取值所构成的集合。

通过抽取随机样本$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$来估计$\boldsymbol{\theta}$。

假设$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$为 iid，则样本数据的联合密度函数为$f(\boldsymbol{y}_1;\boldsymbol{\theta})\, f(\boldsymbol{y}_2;\boldsymbol{\theta})\cdots f(\boldsymbol{y}_n;\boldsymbol{\theta})$。

在抽样前，$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$为随机向量。

抽样后，$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$有了特定的样本值，可将样本联合密度函数视为在$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$给定情况下，未知参数$\boldsymbol{\theta}$的函数。

定义**似然函数**(likelihood function)为

$$L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n) = \prod_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{y}_i; \boldsymbol{\theta})$$

似然函数与联合密度函数完全相等，只是$\boldsymbol{\theta}$与$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$的角色互换，即把$\boldsymbol{\theta}$作为自变量，而视$\{\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n\}$为给定。

为了运算方便，常把似然函数取对数：

$$\ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_n) = \sum_{i=1}^{n} \ln f(\boldsymbol{y}_i; \boldsymbol{\theta})$$

"最大似然估计法"(Maximum Likelihood Estimation，简记 MLE 或 ML)的思想：给定样本取值后，该样本最有可能来自参数$\boldsymbol{\theta}$为何值的总体。

寻找$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}}$，使得观测到样本数据的可能性最大，即最大化对数似然函数(loglikelihood function)：

$$\max_{\boldsymbol{\theta}\in\Theta}\ \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})$$

最大似然估计量$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}}$可写为，

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} \equiv \arg\max\ \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})$$

其中，“argmax”(argument of the maximum)表示能使 $\ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})$ 最大化的 $\boldsymbol{\theta}$ 取值。

假设存在唯一内点解，一阶条件：

$$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y}) \equiv \frac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \equiv \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})}{\partial \theta_K} \end{pmatrix} = \boldsymbol{0}$$

一阶条件要求，对数似然函数的梯度向量(gradient，偏导数、斜率)$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta};\ \boldsymbol{y})$为$\mathbf{0}$，实际上是$K$个未知参数$(\theta_1\ \theta_2\ \cdots\ \theta_K)$，$K$个方程的方程组。

该向量也称“得分函数”(score function)或“得分向量”(score vector)。

得分函数$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta};\ \boldsymbol{y})$是$\boldsymbol{y}$的函数，也是随机向量。

在下面，记真实参数为$\boldsymbol{\theta}_0$，而$\boldsymbol{\theta}$为该参数的任何可能取值。

命题(得分函数的期望为 0)

如果似然函数正确(correctly specified)，则

$$\mathrm{E}\left[\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})\right]=\boldsymbol{0}$$

其中，$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})$表示得分函数$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})$在$\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$处的取值。

例 假设随机样本$y_i \sim N(\theta_0, 1)$，$i=1,\cdots,n$。则样本数据的对数似然函数为，

$$L(\theta)=-\frac{n}{2}\ln 2\pi-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)^2$$

其得分函数为，

$$s(\theta)=\frac{\partial L(\theta)}{\partial\theta}=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)$$

故得分函数的期望值为，

$$\mathrm{E}\left[s(\theta)\right]=\sum_{i=1}^{n}\left[\mathrm{E}(y_i)-\theta\right]=\sum_{i=1}^{n}\left[\theta_0-\theta\right]$$

在$\theta=\theta_0$处，

$$\mathrm{E}\left[s(\theta)\right]\Big|_{\theta=\theta_0} = \sum_{i=1}^{n}\left[\theta_0 - \theta\right]\Bigg|_{\theta=\theta_0} = 0$$

此结果与上述命题一致。

得分函数可分解为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}) &\equiv \frac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{n} \ln f(\boldsymbol{y}_i;\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \ln f(\boldsymbol{y}_i;\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \equiv \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{s}_i(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}_i)\end{aligned}$$

其中，$\boldsymbol{s}_i(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}_i)\equiv\dfrac{\partial\ln f(\boldsymbol{y}_i;\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}$为第 i 个观测值对得分函数的贡献。

在上例中，$s(\theta;\boldsymbol{y})=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)$，而$s_i(\theta,y_i)=(y_i-\theta)$。

二阶条件要求，对数似然函数的黑赛矩阵(Hessian matrix)

$$\frac{\partial^2\ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{\theta}\,\partial\boldsymbol{\theta}'}\equiv\frac{\partial\left(\dfrac{\partial\ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{\theta}}\right)}{\partial\boldsymbol{\theta}'}$$

为负定矩阵，即对数似然函数为严格凹函数(strictly concave)。黑赛矩阵可分解为

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}) \equiv \frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{\theta}\,\partial\boldsymbol{\theta}'} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}_i)}{\partial\boldsymbol{\theta}\,\partial\boldsymbol{\theta}'} \equiv \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}_i)$$

其中，$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y}_i)$为第 i 个观测值对黑赛矩阵的贡献。

在上例中，$\boldsymbol{H}(\theta;\boldsymbol{y}) = \frac{\partial s(\theta)}{\partial\theta} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)}{\partial\theta} = -n$，而 $\boldsymbol{H}_i(\theta;y_i) = \frac{\partial s_i(\theta)}{\partial\theta} = \frac{\partial(y_i-\theta)}{\partial\theta} = -1$。

6.2 线性回归模型的最大似然估计

例 假设$X \sim N(\mu, \sigma^2)$，其中σ^2已知，得到一个样本容量为 1 的样本$x_1 = 2$，求对μ的最大似然估计。

似然函数为$L(\mu) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{ \dfrac{-(2-\mu)^2}{2\sigma^2} \right\}$。

似然函数在$\hat{\mu} = 2$处取最大值，见图 6.1。

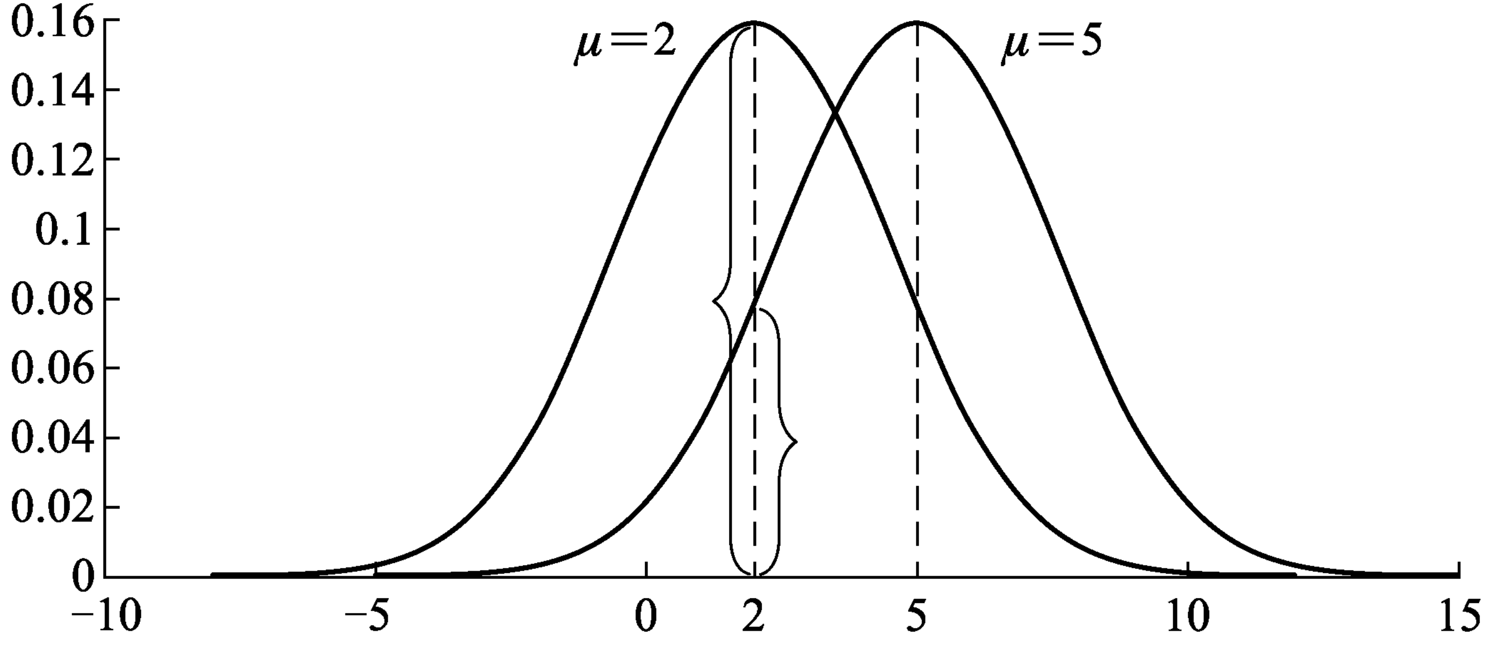

图 6.1　选择参数使观测到样本的可能性最大

例(非正式)　某人操一口浓重的四川口音，则判断他最有可能来自四川。

考虑线性回归模型：

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$$

假设$\boldsymbol{\varepsilon}\,|\,\boldsymbol{X}\sim N(\boldsymbol{0},\sigma^2\boldsymbol{I}_n)$，则$\boldsymbol{y}\,|\,\boldsymbol{X}\sim N(\boldsymbol{X\beta},\sigma^2\boldsymbol{I}_n)$，条件密度函数为：

$$f(\boldsymbol{y}\,|\,\boldsymbol{X})=(2\pi\sigma^2)^{-n/2}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta})'(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta})\right\}$$

用假想$\tilde{\boldsymbol{\beta}}, \tilde{\sigma}^2$代替真实$\boldsymbol{\beta}, \sigma^2$，取对数可得

$$\ln L(\tilde{\boldsymbol{\beta}}, \tilde{\sigma}^2) = -\frac{n}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln \tilde{\sigma}^2 - \frac{1}{2\tilde{\sigma}^2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}})'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}})$$

分两步最大化。第一步，给定$\tilde{\sigma}^2$，选择最优$\tilde{\boldsymbol{\beta}}$。第二步，代入第一步的最优$\tilde{\boldsymbol{\beta}}$，选择最优$\tilde{\sigma}^2$。

第一步。由于$\tilde{\boldsymbol{\beta}}$只出现在第三项中，故等价于使$(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}})'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}})$最小，正是 OLS 的目标函数$\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}$。

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{ML}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{OLS}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$$

第二步。对数似然函数变为$-\dfrac{n}{2}\ln 2\pi - \dfrac{n}{2}\ln\tilde{\sigma}^2 - \dfrac{1}{2\tilde{\sigma}^2}\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}$，称为“集中对数似然函数”(concentrated log likelihood function)，因为$\tilde{\boldsymbol{\beta}}$的取值已在第一步固定，称为“concentrated with respect to $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$”。对$\tilde{\sigma}^2$求导可得

$$-\frac{n}{2}\frac{1}{\tilde{\sigma}^2} + \frac{1}{2\tilde{\sigma}^4}\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e} = 0$$

求解σ^2的 MLE 估计量为

$$\hat{\sigma}^2_{\mathrm{ML}} = \frac{\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}}{n} \neq \hat{\sigma}^2_{\mathrm{OLS}} = \frac{\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}}{n-K} \equiv s^2$$

MLE 对$\boldsymbol{\beta}$的估计与 OLS 一样，但对σ^2的估计略有不同，此差别在大样本下消失。

由于 OLS 估计量s^2是对σ^2的无偏估计，故 MLE 估计量$\hat{\sigma}^2_{\mathrm{ML}}$是有偏的(小样本性质)。

MLE 的主要优点是大样本性质良好，比如一致性、最小渐近方差。

6.3　最大似然估计的数值解

最大似然估计通常没有解析解，只能寻找“数值解”(numerical solution)。

方法一为“网格搜索”(grid search)：

如果待估参数θ为一维，且大致知道取值范围，比如$\theta \in (0,1)$。

如果待估参数$\boldsymbol{\theta}$为多维，或对$\boldsymbol{\theta}$的取值范围所知不多，网格搜索不现实。

方法二为“高斯-牛顿法”(Gauss-Newton method)。

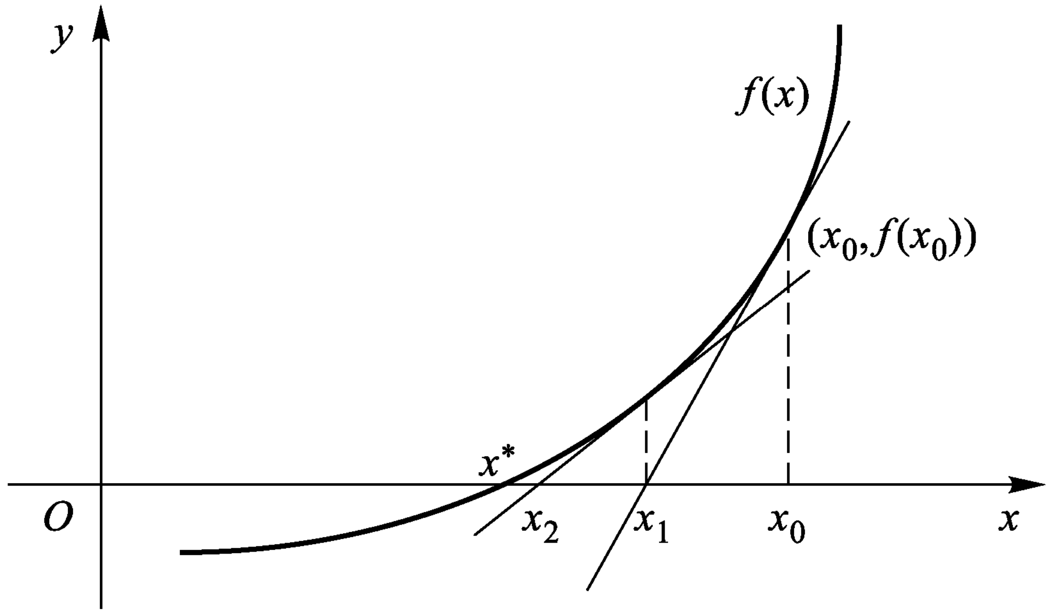

图 6.2　牛顿法

牛顿法收敛很快，是二次的。比如，如果本次迭代的误差为 0.1，则下次迭代的误差约为 0.1^2。

如果初始值 x_0 选择不当，可能出现迭代不收敛的情形。

使用牛顿法得到的可能只是“局部最大值”(local maximum)，而非“整体最大值”(global maximum)。

牛顿法也适用于多元函数的情形 $f(\boldsymbol{x})=0$，将切线替换为(超)切平面即可。

如对原函数 $f(x)$ 作二阶近似(二阶泰勒展开)，称为“牛顿-拉夫森法”(Newton-Raphson method)。

6.4 信息矩阵与无偏估计的最小方差

定义**信息矩阵**(information matrix)为对数似然函数的黑塞矩阵之期望值(对 $\boldsymbol{y}$ 求期望)的负数，

$$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}) \equiv -\mathrm{E}\left[\frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'}\right]$$

一维情形下，$-\dfrac{\partial^2 \ln L}{\partial \theta^2}$为对数似然函数的二阶导数之负数。

对数似然函数为凹函数，故二阶导数为负数，加负号为正数。

$-\dfrac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{y})}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}'}$表示对数似然函数在$\boldsymbol{\theta}$空间中的曲率(curvature)，取期望值之后为平均曲率(对$\boldsymbol{y}$进行平均)。

如果曲率大，对数似然函数陡峭，较易根据样本分辨真实$\boldsymbol{\theta}$的位置；反之，如果曲率小，对数似然函数平坦，不易根据样本判断真实$\boldsymbol{\theta}$的位置。

如果似然函数完全平坦，则似然函数不存在唯一最大值，MLE 没有唯一解；则无法根据样本数据来判断$\boldsymbol{\theta}$的位置。

$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta})$包含了$\boldsymbol{\theta}$是否容易估计的信息，故称“信息矩阵”。

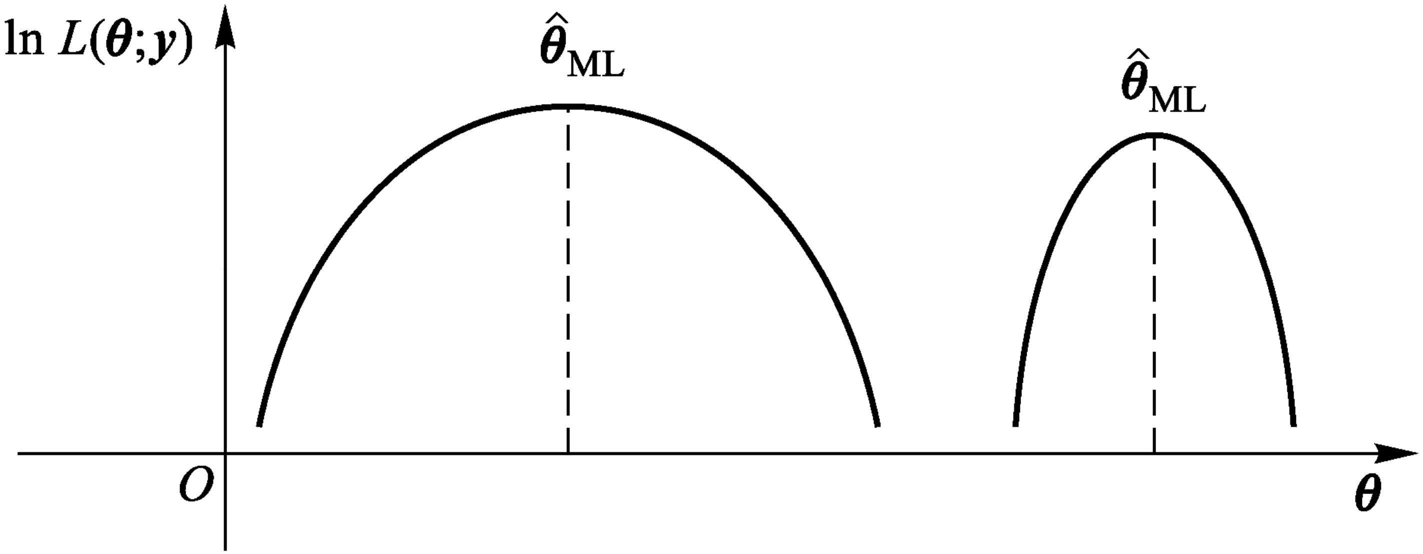

图 6.3　平坦(左)与陡峭(右)的对数似然函数

命题 (信息矩阵等式)

在 $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_0$ 处，以下“信息矩阵等式”(information matrix equality)成立，

$$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0) \equiv -\mathrm{E}\left[\frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'}\right]$$

$$= \mathrm{E}\left[\frac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \frac{\partial \ln L(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta}'}\right] = \mathrm{E}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y}) s(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y})'\right]$$

证明参见附录。

命题 (得分函数的方差为信息矩阵)

在 $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_0$ 处，信息矩阵 $\mathrm{I}(\boldsymbol{\theta}_0)$ 就是得分函数的协方差矩阵 $\mathrm{Var}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})\right]$。

证明：

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})\right] &= \mathrm{E}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})'\right] - \underbrace{\mathrm{E}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})\right]}_{=0}\underbrace{\mathrm{E}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})\right]}_{=0}{}' \\ &= \mathrm{E}\left[s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})s(\boldsymbol{\theta}_0;\boldsymbol{y})'\right] \\ &= \boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)\end{aligned}$$

最后一步用到了信息矩阵等式。

假设$\hat{\boldsymbol{\theta}}$是对真实参数$\boldsymbol{\theta}_0$的任意无偏估计，则在一定的正则条件(regularity conditions)下，$\hat{\boldsymbol{\theta}}$的方差不会小于$[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1}$，即$\mathrm{Var}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \geq [\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1}$。

称$[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1}$为“克莱默-劳下限”(Cramer-Rao Lower Bound)。

无偏估计所能达到的最小方差与信息矩阵有关。曲率$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)$越大，则$[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1}$越小，无偏估计可能达到的最小方差越小。

在古典线性回归模型中，可证明(参见附录)

$$[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & 2\sigma^4/n \end{pmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{\theta}_0 = (\boldsymbol{\beta}\ \ \sigma^2)'$。由于 $\mathrm{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{OLS}}) = \sigma^2(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}$，故 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{ML}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{OLS}}$均达到了无偏估计的最小方差。

命题 在高斯-马尔可夫定理中，如果加上扰动项为正态分布的假定，则 OLS 是“最佳无偏估计”(Best Unbiased Estimator，简记 BUE)，而不仅仅是 BLUE。

克莱默-劳下限的结论可推广到渐近分布的情形。

在一定的正则条件下，对于真实参数$\boldsymbol{\theta}_0$的渐近正态一致估计 (Consistent and Asymptotically Normally distributed estimators，简记 CAN)所能达到的最小方差为$\left[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)\right]^{-1}$，即克莱默-劳下限。

6.5　最大似然法的大样本性质

定理(MLE 的大样本性质) 在一定的正则条件下，MLE 估计量拥有以下良好的大样本性质。

(1) 一致性，即$\operatorname*{plim}_{n\to\infty}\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} = \boldsymbol{\theta}_0$。

(2) 渐近有效性，即渐近协方差矩阵$\mathrm{Avar}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}}) = n[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1}$，在大样本下达到了克莱默-劳下限。

(3) 渐近正态，即$\sqrt{n}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} - \boldsymbol{\theta}_0\right) \xrightarrow{d} N\left(\boldsymbol{0}, n\left[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)\right]^{-1}\right)$，可近似地认为$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} \xrightarrow{d} N\left(\boldsymbol{\theta}, \left[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)\right]^{-1}\right)$。

证明 (选读)

定理 (不变性) 如果将参数$\boldsymbol{\theta}$“参数变换”(reparameterize)为$\boldsymbol{\alpha} \equiv \boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta})$，则对$\boldsymbol{\alpha}$的最大似然估计就是$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathrm{ML}} = \boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}})$。

其中，$\boldsymbol{g}(\cdot)$可以是多维函数，也不要求$\boldsymbol{\alpha}$与$\boldsymbol{\theta}$有一一对应的函数关系。

利用最大似然估计的不变性，有时可以大大简化计算。

【例】对$(\mu^2 + \sigma^2)$的最大似然估计就是$(\hat{\mu}^2_{\mathrm{ML}} + \hat{\sigma}^2_{\mathrm{ML}})$。

6.6 MLE 估计量的渐近协方差矩阵

在大样本下，最大似然估计量的渐近协方差矩阵为

$$\text{Avar}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}) = n[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)]^{-1} = n\left\{-\text{E}\left[\frac{\partial^2 \ln L(\boldsymbol{\theta}_0; \boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'}\right]\right\}^{-1}$$

此表达式依赖于未知参数$\boldsymbol{\theta}_0$，有三种估计方法。

1．期望值法。如果知道黑塞矩阵期望值的具体函数形式，则直接以$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}$替代$\boldsymbol{\theta}_0$可得，

$$\widehat{\text{Avar}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}) = n\left\{-\text{E}\left[\frac{\partial^2 \ln L(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}};\boldsymbol{y})}{\partial\hat{\boldsymbol{\theta}}\,\partial\hat{\boldsymbol{\theta}}'}\right]\right\}^{-1}$$

黑塞矩阵通常包含复杂的非线性函数，期望值可能无解析解。

2．观测信息矩阵法。以$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}$替代$\boldsymbol{\theta}_0$后，将期望算子忽略掉：

$$\widehat{\text{Avar}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}) = n\left[-\frac{\partial^2 \ln L(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}};\boldsymbol{y})}{\partial\hat{\boldsymbol{\theta}}\,\partial\hat{\boldsymbol{\theta}}'}\right]^{-1}$$

此法称为“观测信息矩阵”(Observed Information Matrix，

简记 OIM)法。但二阶偏导数可能不易计算。

3．梯度向量外积或 BHHH 法。利用信息矩阵等式，用 $\sum_{i=1}^{n}\hat{\boldsymbol{s}}_i\hat{\boldsymbol{s}}_i'$ 来估计 $\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)$：

$$\text{即}\ \widehat{\text{Avar}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}) = n\left(\sum_{i=1}^{n}\hat{\boldsymbol{s}}_i\hat{\boldsymbol{s}}_i'\right)^{-1}$$

其中，$\hat{\boldsymbol{s}}_i \equiv \dfrac{\partial \ln f(\boldsymbol{y}_i;\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}})}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ 为第 i 个观测值对得分函数的贡献之估计值。此法称为“梯度向量外积”(Outer Product of Gradients，简记 OPG)或 BHHH 法，只需计算一阶偏导数；

且协方差估计量总是非负定的(nonnegative definite)，而 OIM 法的协方差估计量无此保证。

这三种方法在大样本下渐近等价(asymptotically equivalent)。

在有限样本中，计算结果可能差别较大，甚至导致统计推断作出不同的结论，参见 Greene (2012, p.522)。

这三种方法都建立在似然函数正确的前提上。如果似然函数不正确，则三种方法都失效，应使用稳健标准误。

6.7　三类渐近等价的统计检验

对于线性回归模型，检验原假设$H_0:\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0$，其中$\boldsymbol{\beta}_{K\times 1}$为未知参数，$\boldsymbol{\beta}_0$已知，共有 K 个约束。

(1) 沃尔德检验(Wald Test)

通过$\boldsymbol{\beta}$的无约束估计量$\hat{\boldsymbol{\beta}}_U$与$\boldsymbol{\beta}_0$的距离来进行检验。如果$H_0$正确，则$(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U-\boldsymbol{\beta}_0)$的绝对值不应该很大。沃尔德统计量：

$$W\equiv(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U-\boldsymbol{\beta}_0)'[\mathrm{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U)]^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U-\boldsymbol{\beta}_0)\xrightarrow{d}\chi^2(K)$$

K 为约束条件的个数，证明类似于第 5 章对于线性假设“$H_0: \boldsymbol{R\beta} = \boldsymbol{r}$”的大样本检验。$t$ 检验、F 检验都是 Wald 检验。

(2) 似然比检验 (Likelihood Ratio Test，简记 LR)

无约束的似然函数最大值$\ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U)$比有约束的似然函数最大值$\ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathrm{R}})$更大，因为在无约束条件下的参数空间$\boldsymbol{\Theta}$比有约束条件下(即$H_0$成立时)参数的取值范围更大。

在此例中，有约束的估计量$\hat{\boldsymbol{\beta}}_R = \boldsymbol{\beta}_0$。

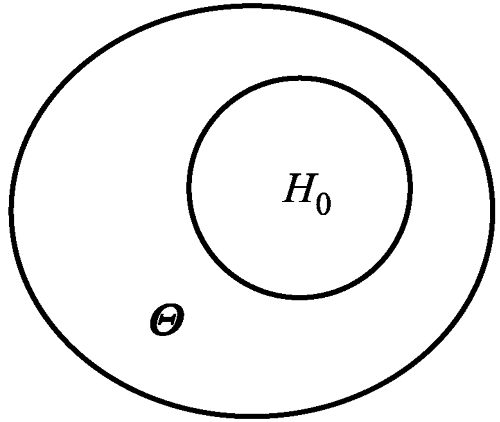

图 6.5　无约束与有约束的参数空间

如果H_0正确，则$\ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U) - \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)$不应该很大。LR 统计量：

$$\mathrm{LR} \equiv -2\ln\left[\frac{L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)}{L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U)}\right] = 2\left[\ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U) - \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)\right] \xrightarrow{d} \chi^2(K)$$

证明方法是，将对数似然函数作二阶泰勒展开(根据 MLE 一阶条件，一阶项为 0)。

F 统计量的另一表达式 $F = \dfrac{(\boldsymbol{e}^{*\prime}\boldsymbol{e}^{*} - \boldsymbol{e}'\boldsymbol{e})/(K-1)}{\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}/(n-K)}$，可视为 LR 统计量。

(3) 拉格朗日乘子检验(Lagrange Multiplier Test，简记 LM)：

考虑有约束条件的对数似然函数最大化问题：

$$\max_{\tilde{\boldsymbol{\beta}}} \ \ln L(\tilde{\boldsymbol{\beta}})$$

$$s.t. \ \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_0$$

引入拉格朗日乘子函数，

$$\max_{\tilde{\boldsymbol{\beta}}, \boldsymbol{\lambda}} \ \ln L(\tilde{\boldsymbol{\beta}}) - \boldsymbol{\lambda}'(\tilde{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}_0)$$

其中，$\boldsymbol{\lambda}$为拉格朗日乘子向量。

如果$\hat{\boldsymbol{\lambda}} \approx \mathbf{0}$，则说明此约束条件不“紧”(tight)或不是“硬约束”(binding constraint)，加上此约束条件不会使似然函数的最大值下降很多，即原假设H_0很可能成立。

根据一阶条件(对$\tilde{\boldsymbol{\beta}}$求导)可知，$\hat{\boldsymbol{\lambda}} = \dfrac{\partial \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}}$。LM 统计量：

$$\mathrm{LM} \equiv \left(\frac{\partial \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} \right)' \left[\boldsymbol{I}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R) \right]^{-1} \left(\frac{\partial \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} \right) \xrightarrow{d} \chi^2(K)$$

其中，$\boldsymbol{I}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)$为信息矩阵在$\hat{\boldsymbol{\beta}}_R$处的取值。由于$\dfrac{\partial \ln L(\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}}$为“得分函数”(score function)，故也称“得分检验”(score test)；而$\boldsymbol{I}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)$为得分函数的协方差矩阵。

在$\hat{\boldsymbol{\beta}}_U$处，$\dfrac{\partial \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_U)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} = \mathbf{0}$。如$H_0$成立，则在$\hat{\boldsymbol{\beta}}_R$处，也应有$\dfrac{\partial \ln L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_R)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} \approx \mathbf{0}$，而 LM 统计量反映此接近程度。

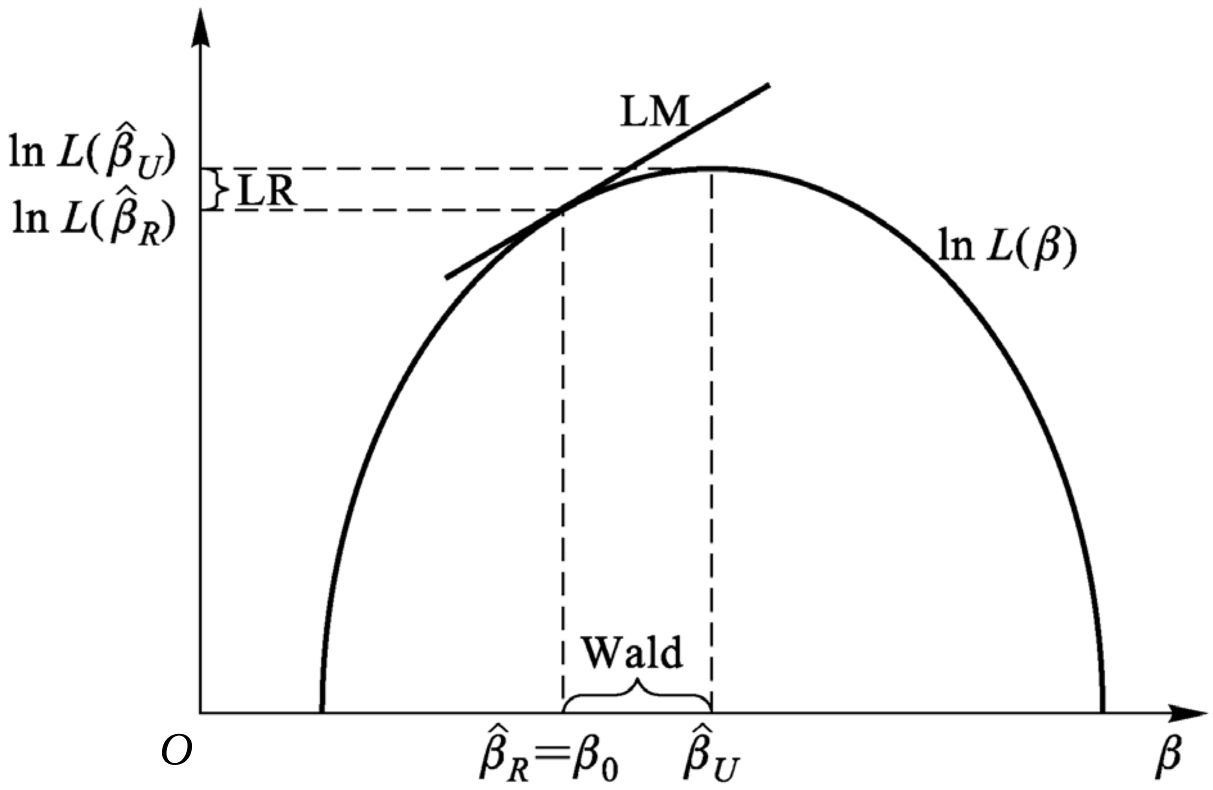

图 6.6　三类渐近等价的统计检验

Wald 检验仅利用无约束估计的信息，LM 检验仅利用有约束估计的信息，而 LR 检验同时利用二者的信息。

这三类检验在大样本下渐近等价，但小样本性质不同。

实际应用中究竟采取哪种检验常取决于“无约束估计”与“有约束估计”哪种更方便。

6.8 准最大似然估计法

如果随机变量不服从正态分布，却使用了以正态分布为前提的 MLE，该估计量是否一致？

对于线性模型，MLE 估计量等价于 OLS 估计量，而 OLS 估计量的一致性不依赖于正态分布的假定。

定义 使用不正确的似然函数而得到的最大似然估计，被称为**准最大似然估计** (Quasi MLE，简记 QMLE)或“伪最大似然估计”(Pseudo MLE)。

虽然 MLE 常要求随机变量服从正态，此假定可能并不强。

如果 QMLE 估计量满足以下两个条件，则为一致估计量。

(i) 模型设定的概率密度函数属于“线性指数分布

族”(linear exponential family)，即概率密度函数可以写为 $f(y;\boldsymbol{\theta})=\dfrac{p(y)e^{r(\boldsymbol{\theta})}}{q(\boldsymbol{\theta})}$的形式。

线性指数分布族包括正态分布，二项分布，泊松分布，负二项分布，Γ分布，以及逆高斯分布(inverse Gaussian)等。

(ii) 条件期望$\mathrm{E}(y\,|\,\boldsymbol{x})$的函数形式设定正确。

一般情况下，QMLE 并不一致，譬如第 14 章的 Tobit 回归。即使 QMLE 碰巧一致，$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{QML}}$的渐近方差也不再是$n\left[\boldsymbol{I}(\boldsymbol{\theta}_0)\right]^{-1}$。

假设正确的对数似然函数为$\ln L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})$，被误设为$\ln L^*(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})$，称为“准对数似然函数”(pseudo log likelihood function)。最大化$\ln L^*(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})$的结果即 QMLE 估计量，

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{QML}} \equiv \arg\max \ln L^*(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{y})$$

遵循类似于 MLE 一致性的证明步骤，可证明$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{QML}} \xrightarrow{p} \boldsymbol{\theta}^*$，其中$\boldsymbol{\theta}^*$称为“准真实值”(pseudo-true value)，通常$\boldsymbol{\theta}^* \neq \boldsymbol{\theta}_0$。

对于$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{QML}}$的大样本分布，可证明：

$$\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}}-\boldsymbol{\theta}^{*})\xrightarrow{d}N\left(0,\ \boldsymbol{A}_0^{*-1}\boldsymbol{B}_0^{*}\boldsymbol{A}_0^{*-1}\right)$$

由于$\ln L^{*}(\boldsymbol{\theta};\ \boldsymbol{y})$并非真正的对数似然函数，信息矩阵等式不成立，故一般$\boldsymbol{A}_0^{*}\neq\boldsymbol{B}_0^{*}$，夹心估计量$\boldsymbol{A}_0^{*-1}\boldsymbol{B}_0^{*}\boldsymbol{A}_0^{*-1}$无法进简化。

基于$\boldsymbol{A}_0^{*-1}\boldsymbol{B}_0^{*}\boldsymbol{A}_0^{*-1}$的标准误差被称为“胡贝尔-怀特稳健标准误”(Huber-White robust standard errors)。

胡贝尔-怀特稳健标准误也简称为“稳健标准误”，因为它

与异方差稳健标准误是一致的。

假设用 MLE 来估计古典线性回归模型，真实模型存在异方差，但在同方差的错误设定下来求 MLE 估计量，即得到的就是 QMLE 估计量。

此$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{QML}}$依然是真实参数$\boldsymbol{\beta}$的一致估计，而胡贝尔-怀特稳健标准误就是异方差稳健的标准误。

在使用 MLE 估计非线性模型时，如果对模型的正确设定无把握，而 QMLE 估计量依然一致，应使用(胡贝尔-怀特)稳健标准误。Stata 的选择项为“`r`”或“`vce(robust)`”。

如果对于模型设定很有信心，可直接使用 OIM 或 OPG 法来估计渐近方差，没有必要使用稳健标准误。

当 QMLE 估计量不一致时，即使采用(胡贝尔-怀特)稳健标准误也无济于事，应担心估计量的一致性。

(胡贝尔-怀特)稳健标准误只是一致地估计了一个不一致估计量的方差(a consistent estimator of the variance of an inconsistent estimator)。

无论 OIM、OPG 法，还是(胡贝尔-怀特)稳健标准误都假设样本数据为 iid。如果样本数据可分为若干组，而同一组内的

观测值存在自相关，则应使用“聚类稳健标准误”(cluster-robust standard errors)，在 Stata 中由选择项“`vce(cluster *clustvar*)`”来实现。

总结：对于线性回归模型，建议总是使用稳健标准误。对于非线性模型，可分四种情况考虑。

(i) 如果对模型设定较有信心或模型拟合得较好，可不用稳健标准误。

(ii) 如果对模型设定缺乏信心，且 QMLE 为一致估计，应使用稳健标准误。

(iii) 如果对模型设定缺乏信心，但 QMLE 也不一致，应首先担心 QMLE 估计量的一致性，仅使用稳健标准误进行校正无济于事。

(iv) 对于聚类样本，应使用聚类稳健的标准误。

6.9 对正态分布假设的检验

对于线性回归模型，即使扰动项不服从正态分布，OLS 依然一致，且服从渐近正态，可用进行大样本推断；故检验扰动项是否服从正态分布意义不大。

对非线性模型，由于正态分布假定是推导 MLE 的前提，故检验扰动项是否服从正态分布可能较重要。

在某些情况下，“准最大似然估计”也一致，但毕竟不如真正的 MLE 有效率。

为了考察扰动项是否为正态，最直观的方法是画图。可把残差画成直方图(histogram)，并与正态分布的密度函数比较。

但直方图是不连续的。为得到光滑估计，可使用“核密度估计法”(kernel density estimation)，并与正态密度相比。

另一画图方法是，将正态分布的分位数(quantiles)与残差的分位数画成散点图(scatter plot)。

如果残差来自正态分布，则该图上的散点应该集中在 45°线附近。

称这种图为“分位数-分位数图”(Quantile-Quantile plot，简记 QQ plot)。

常用的检验方法利用了正态分布的偏度与峰度性质。

随机变量X的偏度为$\mathrm{E}[(X-\mu)/\sigma]^3$，峰度为$\mathrm{E}[(X-\mu)/\sigma]^4$，超额峰度为$\mathrm{E}[(X-\mu)/\sigma]^4-3$。

对于残差$\{e_1,\cdots,e_n\}$，其偏度与超额峰度的样本估计值分别为

$$\frac{1}{n\hat{\sigma}^3}\sum_{i=1}^{n}e_i^3 \quad 与 \quad \left(\frac{1}{n\hat{\sigma}^4}\sum_{i=1}^{n}e_i^4\right)-3$$

其中，$\bar{e}=0$。在扰动项服从正态分布的原假设下，这两个统计量服从正态分布。

“雅克-贝拉检验” (Jarque and Bera, 1987，简记 JB)使用它们的平方之加权平均作为检验统计量：

$$\mathrm{JB} \equiv \frac{n}{6}\left[\left(\frac{1}{n\hat{\sigma}^3}\sum_{i=1}^{n} e_i^3\right)^2 + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{n\hat{\sigma}^4}\sum_{i=1}^{n} e_i^4 - 3\right)^2\right] \xrightarrow{d} \chi^2(2)$$

JB 检验虽常用，但收敛速度较慢，对样本容量要求较高。Stata 官方程序中提供了 D'Agostino et al (1990)的改进方法，基于偏度与峰度设计了更复杂的检验统计量。

如果发现某变量不服从正态分布，有时可以通过取对数，使之变得更接近于正态分布。