

第 3 章 小样本 OLS

3.1 古典线性回归模型的假定

“最小二乘法”(Ordinary Least Square, OLS)是单一方程线性回归模型的基本估计方法。“古典线性回归模型”(Classical Linear Regression Model)的假定如下。

假定 3.1 线性假定(linearity)。总体(population)模型为

$$y_i = \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_K x_{iK} + \varepsilon_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

n 为样本容量，解释变量 x_{ik} 的第一个下标表示第 i 个观测值，第二个下标则表示第 k 个解释变量 ($k = 1, \dots, K$)。

如有常数项，令第一个解释变量为单位向量，即 $x_{i1} \equiv 1, \forall i$ 。

$\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_K$ 为待估参数，称为“回归系数” (regression coefficients)。

线性假设的含义是 x_{ik} 对 y_i 的边际效应为常数，比如 $\frac{\partial E(y_i)}{\partial x_{i1}} = \beta_1$ 。

如果边际效应可变，可加入平方项 (x_{ik}^2) 或交叉互动项 ($x_{ik} x_{im}$)。

比如, $y_i = \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_K x_{iK} + \gamma x_{ik} x_{im} + \varepsilon_i$

则 x_{ik} 对 y_i 的平均边际效应为 $\frac{\partial E(y_i)}{\partial x_{ik}} = \beta_k + \gamma x_m$ 。

只要把高次项也作为解释变量来看待, 则依然满足线性假定。

总体模型也称“数据生成过程”(Data Generating Process, DGP)。

记第 i 个观测数据为 $\mathbf{x}_i \equiv (x_{i1} \ x_{i2} \ \cdots \ x_{iK})'$, $\boldsymbol{\beta} \equiv (\beta_1 \ \beta_2 \ \cdots \ \beta_K)'$, 则

$$y_i = \mathbf{x}_i' \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

把所有个体的方程叠放可得

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}'_1 \\ \mathbf{x}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}'_n \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

定义 $\mathbf{y} \equiv (y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n)'$, 数据矩阵 $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_n)'$, $\boldsymbol{\varepsilon} \equiv (\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \cdots \ \varepsilon_n)'$, 则

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

假定 3.2 严格外生性(strict exogeneity)

$$E(\varepsilon_i | \mathbf{X}) = E(\varepsilon_i | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = 0 \quad (i = 1, \dots, n)$$

ε_i 均值独立于所有解释变量的观测数据，而不仅仅是同一观测数据 \mathbf{x}_i 中的解释变量。

ε_i 与所有解释变量都不相关，即 $\text{Cov}(\varepsilon_i, x_{jk}) = 0, \forall j, k$ 。此假定很强，在第 5 章可放松。

均值独立仅要求 $E(\varepsilon_i | \mathbf{X}) = c$ ， c 为某常数，不一定为 0。

当回归方程有常数项时，如果 $E(\varepsilon_i | \mathbf{X}) = c \neq 0$ ，总可以把 c 归入常数项要求。

命题 $E(\varepsilon_i) = 0$ ，即扰动项的无条件期望为 0。

证明：根据迭代期望定律， $E(\varepsilon_i) = E_X \underbrace{E(\varepsilon_i | \mathbf{X})}_{=0} = E_X(0) = 0$ 。

定义 如果随机变量 X, Y 满足 $E(XY) = 0$ ，则称 X, Y 正交 (orthogonal)。

命题 解释变量与扰动项正交。

证明： $0 = \text{Cov}(x_{jk}, \varepsilon_i) = E(x_{jk}\varepsilon_i) - E(x_{jk})\underbrace{E(\varepsilon_i)}_{=0} = E(x_{jk}\varepsilon_i)$ 。

假定 3.3 不存在“严格多重共线性”(strict multicollinearity), 即数据矩阵 \mathbf{X} 满列秩, $\text{rank}(\mathbf{X}) = K$, 其中“rank”表示矩阵的秩。

如果不满足此条件, 则 $\boldsymbol{\beta}$ “不可识别”(unidentified), 因为 \mathbf{X} 中某个或多个变量为多余。

根据 OLS 估计, $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}$ 。

如 \mathbf{X} 满列秩, $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ 正定, 故 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 存在; 反之, $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 不存在。

实际数据不易出现严格多重共线性。

如果出现, Stata 也会自动识别。

假定 3.4 球型扰动项(spherical disturbance), 即扰动项满足“同方差”、“无自相关”的性质,

$$\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}) = \text{E}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}' | \mathbf{X}) = \sigma^2 \mathbf{I}_n = \begin{pmatrix} \sigma^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma^2 \end{pmatrix}$$

\mathbf{I}_n 为 n 阶单位矩阵。

协方差矩阵 $\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})$ 的主对角线元素都等于 σ^2 , 即满足“条件同方差”(conditional homoskedasticity); 反之, 则存在“条件异方差”(conditional heteroskedasticity)。

协方差矩阵 $\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})$ 的非主对角线元素都为0, 不同个体的扰动项之间无“自相关”(autocorrelation); 反之, 则存在自相关。

3.2 OLS 的代数推导

对于 β 的任意假想值 $\tilde{\beta}$ ，记个体 i 的拟合误差(即残差，residual)为 $e_i = y_i - \mathbf{x}_i' \tilde{\beta}$ 。

将所有个体的残差叠放，可得残差向量 $\mathbf{e} \equiv (e_1 \ e_2 \ \cdots \ e_n)' = \mathbf{y} - \mathbf{X} \tilde{\beta}$ 。

最小二乘法寻找能使残差平方和(Sum of Squared Residuals, SSR) $\sum_{i=1}^n e_i^2$ 最小的 $\tilde{\beta}$ 。

几何上，一元回归就是寻找最佳拟合的回归直线；
二元回归就是寻找最佳拟合的回归平面；
多元回归，则寻找最佳拟合的回归超平面(superplane)。

最小化问题:

$$\min_{\tilde{\beta}} \text{SSR}(\tilde{\beta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \mathbf{e}'\mathbf{e} \quad (\text{平方和写成向量内积})$$

$$= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta}) \quad (\text{残差向量的表达式})$$

$$= (\mathbf{y}' - \tilde{\beta}'\mathbf{X}')(\mathbf{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta}) \quad (\text{矩阵转置性质})$$

$$= \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\tilde{\beta} - \tilde{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{y} + \tilde{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\tilde{\beta} \quad (\text{乘积展开})$$

$$= \mathbf{y}'\mathbf{y} - 2\mathbf{y}'\mathbf{X}\tilde{\beta} + \tilde{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\tilde{\beta} \quad (\text{合并同类项})$$

$(\mathbf{y}'\mathbf{X}\tilde{\beta})' = \tilde{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{y}$ (对称矩阵), 为 1×1 常数, 故相等, 可合为 $2\mathbf{y}'\mathbf{X}\tilde{\beta}$ 。

目标函数 $\text{SSR}(\tilde{\beta})$ 是 $\tilde{\beta}$ 的二次函数(二次型)。

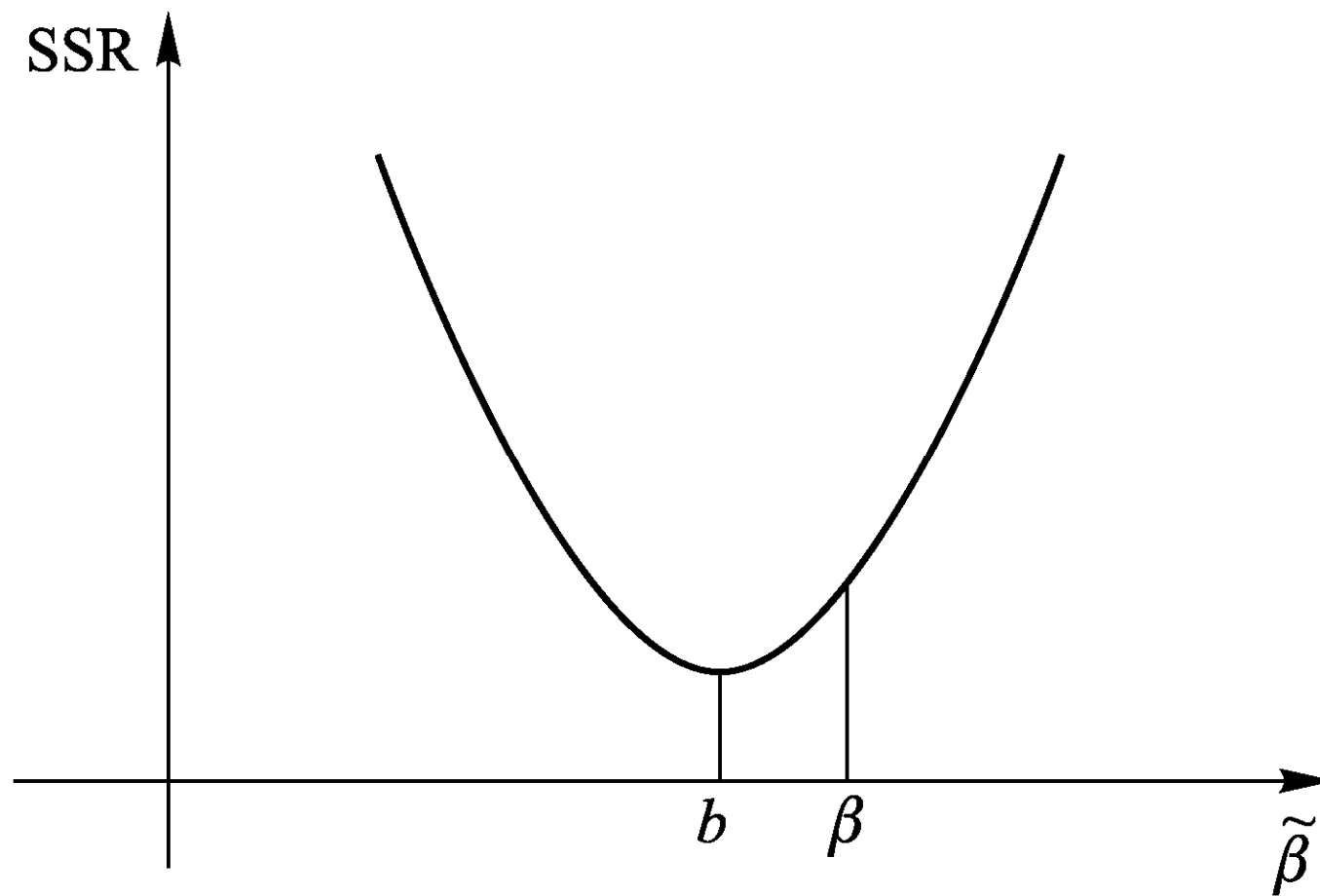


图 3.1 参数的假想值 $\tilde{\beta}$ 、真实值 β 与 OLS 估计值 b

向量微分的规则：

记 $\mathbf{a} = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_K)'$ ，则 $\mathbf{a}'\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \sum_{i=1}^K a_i \tilde{\beta}_i$ 。

$$\frac{\partial(\mathbf{a}'\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\boldsymbol{\beta}}} \equiv \left(\frac{\partial(\mathbf{a}'\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_1} \quad \frac{\partial(\mathbf{a}'\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_2} \quad \cdots \quad \frac{\partial(\mathbf{a}'\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_K} \right)' = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_K)' = \mathbf{a}$$

类似于对一次函数求导。假设 \mathbf{A} 为 K 阶对称矩阵，可证：

$$\frac{\partial(\tilde{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\boldsymbol{\beta}}} \equiv \left(\frac{\partial(\tilde{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_1} \quad \frac{\partial(\tilde{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_2} \quad \cdots \quad \frac{\partial(\tilde{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{\partial\tilde{\beta}_K} \right)' = 2\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\beta}}$$

类似于对二次函数求导。

使用向量微分规则，可得最小化的一阶条件：

$$\frac{\partial(\text{SSR})}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} = -2\mathbf{X}'\mathbf{y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}} = 0$$

最小二乘估计量 \mathbf{b} 满足：

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{K \times K} \mathbf{b}_{K \times 1} = \mathbf{X}'_{K \times n} \mathbf{y}_{n \times 1} \quad (\text{正规方程组, } K \text{ 个方程, } K \text{ 个未知数})$$

$$\mathbf{X}'\mathbf{y} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})\mathbf{b} = \mathbf{0} \quad (\text{移项})$$

$$\mathbf{X}' \underbrace{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})}_{=\mathbf{e}} = \mathbf{0} \quad (\text{向左提取共同的矩阵因子 } \mathbf{X}')$$

因此， $\mathbf{X}'\mathbf{e} = \mathbf{0}$ ，其中残差向量 $\mathbf{e} \equiv \mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}$ 。

残差向量 \mathbf{e} 与解释变量 \mathbf{X} 正交，是 OLS 的一大特征。

求解可得 OLS 估计量：

$$\mathbf{b} \equiv (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}$$

二阶条件要求黑赛矩阵(Hessian)

$$\frac{\partial^2(\text{SSR})}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}} \partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}'} \equiv \frac{\partial \left(\frac{\partial \text{SSR}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} \right)}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}'} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \text{SSR}}{\partial^2 \tilde{\beta}_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \text{SSR}}{\partial \tilde{\beta}_1 \partial \tilde{\beta}_K} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 \text{SSR}}{\partial \tilde{\beta}_K \partial \tilde{\beta}_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \text{SSR}}{\partial^2 \tilde{\beta}_K} \end{pmatrix} = 2\mathbf{X}'\mathbf{X} \quad \text{为正定矩阵}$$

因为 \mathbf{X} 满列秩，故 $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ 正定。

被解释变量的“拟合值”(fitted values)或“预测值”(predicted values):

$$\hat{\mathbf{y}} \equiv (\hat{y}_1 \ \hat{y}_2 \ \cdots \ \hat{y}_n)' \equiv \mathbf{X}\mathbf{b}$$

可把被解释变量 \mathbf{y} 分解为两个正交的部分，即 $\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}} + \mathbf{e}$ ，而 $\hat{\mathbf{y}}$ 与 \mathbf{e} 正交，因为

$$\hat{\mathbf{y}}'\mathbf{e} = (\mathbf{X}\mathbf{b})'\mathbf{e} = \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{e} = \mathbf{b}' \cdot \mathbf{0} = \mathbf{0}$$

对于扰动项方差 $\sigma^2 = \text{Var}(\varepsilon_i)$ 的估计：

$$s^2 \equiv \frac{1}{n-K} \sum_{i=1}^n e_i^2$$

其中， $(n-K)$ 为自由度。为什么除以 $(n-K)$ 而不除以 n ?

随机变量 $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 必须满足 K 个正规方程 $\mathbf{X}'\mathbf{e} = \mathbf{0}$ ，故只有其中 $(n-K)$ 个 e_i 是相互独立（自由）的。

经过校正后，才是无偏估计， $E(s^2) = \sigma^2$ 。

如果样本容量 n 很大($n \rightarrow \infty$)，则 $\frac{n-K}{n} \rightarrow 1$ ，是否进行“小样本校正”并没有多少差别。

称 $s = \sqrt{s^2}$ 为“回归方程的标准误差”(standard error of the regression)，简称“回归方程的标准误”。

称某统计量的标准差为该统计量的“标准误”(standard error)。

3.3 OLS 的几何解释

\hat{y} 是 y 向超平面 X 的投影(projection), 因为 e 与 X 正交。

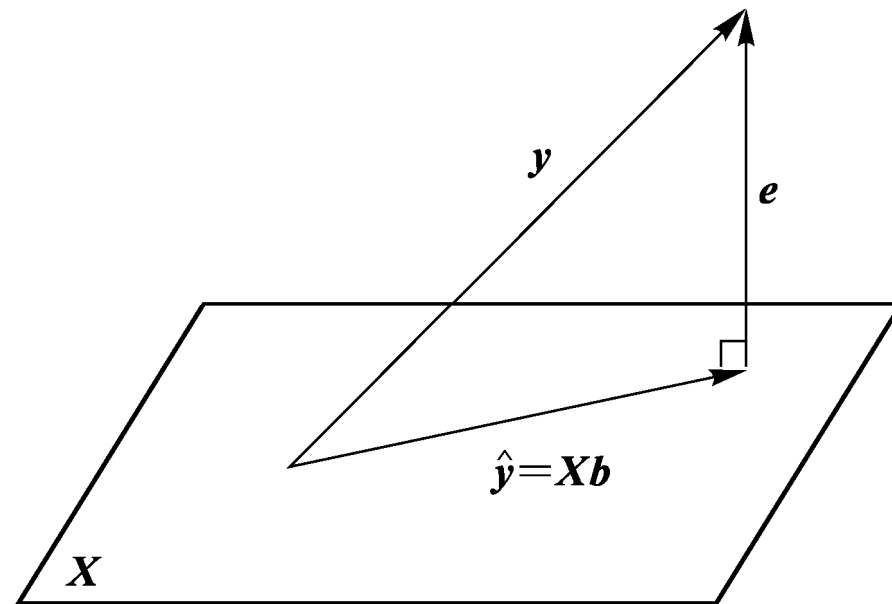


图 3.2 最小二乘法的正交性

由于 $\hat{\mathbf{y}} \equiv \mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{X} \underbrace{(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}}_{=\mathbf{b}} \equiv \mathbf{P}\mathbf{y}$ ，故 $\mathbf{P} \equiv \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'$ 称为“投影矩阵” (projection matrix)。

用 \mathbf{P} 左乘任何向量，就得到该向量在超平面 \mathbf{X} 上的投影。

由于 $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{P}\mathbf{y} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y} \equiv \mathbf{M}\mathbf{y}$ ，故 $\mathbf{M} \equiv \mathbf{I}_n - \mathbf{P}$ 称为“消灭矩阵” (annihilator matrix)。

用消灭矩阵 \mathbf{M} 左乘任何向量，就得到该向量对超平面 \mathbf{X} 投影后的残差向量。

矩阵 \mathbf{P} 与 \mathbf{M} 的性质(参见习题):

(i) $\mathbf{P}\mathbf{X} = \mathbf{X}$; (自己的投影还是自己)

(ii) $\mathbf{P}\mathbf{e} = \mathbf{0}$; (垂直于 \mathbf{X} 的向量 \mathbf{e} 投影于 \mathbf{X} 则退化为一个点)

(iii) $\mathbf{M}\mathbf{X} = \mathbf{0}$; (自己对自己投影, 其残差为 $\mathbf{0}$)

(iv) \mathbf{P} 与 \mathbf{M} 都是对称阵;

(v) $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$; (再次投影的效果等于一次投影)

(vi) $\mathbf{M}^2 = \mathbf{M}$ 。 (再次消灭的效果等于一次消灭)

把残差写成 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的函数：

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) = \underbrace{\boldsymbol{M}\boldsymbol{X}}_{=0}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon}$$

把残差平方和写为 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的函数：

$$\text{SSR} = \boldsymbol{e}'\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon})'\boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{M}'\boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{M}^2\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{M}\boldsymbol{\varepsilon}$$

3.4 拟合优度

如果回归方程有常数项，则 $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$ 可分解为：

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2$$

其中, $\bar{y} \equiv \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$ 为样本均值。

被解释变量 y_i 的离差平方和可分为两部分, 即可由模型解释的部分 $\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$, 与无法由模型解释的残差部分 $\sum_{i=1}^n e_i^2$ 。

平方和分解公式能成立正是由于 OLS 的正交性(参见习题)。

定义 “拟合优度” (goodness of fit) R^2 为

$$0 \leq R^2 \equiv \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \leq 1$$

拟合优度 R^2 也称“可决系数” (coefficient of determination)。

可以证明(参见习题), 在有常数项的情况下, 拟合优度等于被解释变量 y_i 与拟合值 \hat{y}_i 之间相关系数的平方, 即 $R^2 = [\text{Corr}(y_i, \hat{y}_i)]^2$ 。

R^2 越高, 拟合程度越好。

缺点: 如果增加解释变量, R^2 只增不减, 因为至少可让新增解释变量的系数为 0 而保持 R^2 不变。

通过调整自由度, 对解释变量过多(模型不够简洁)进行惩罚。

定义 校正拟合优度 (adjusted R^2) \bar{R}^2 为

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2 / (n - K)}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 / (n - 1)}$$

缺点: \bar{R}^2 可能为负。

无论 R^2 还是 \bar{R}^2 , 只反映拟合程度好坏, 除此无太多意义。

评估回归方程是否显著, 应使用 F 检验(R^2 与 F 统计量有联系)。

如果回归模型无常数项，则平方和分解公式不成立。仍可将 $\sum_{i=1}^n y_i^2$ 分解为：

$$\sum_{i=1}^n y_i^2 = \mathbf{y}'\mathbf{y} = (\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{e})'(\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{e}) = \hat{\mathbf{y}}'\hat{\mathbf{y}} + 2\underbrace{\hat{\mathbf{y}}'\mathbf{e}}_{=0} + \mathbf{e}'\mathbf{e} = \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2$$

定义“非中心 R^2 ” (Uncentered R^2):

$$R_{uc}^2 \equiv \frac{\hat{\mathbf{y}}'\hat{\mathbf{y}}}{\mathbf{y}'\mathbf{y}} = 1 - \frac{\mathbf{e}'\mathbf{e}}{\mathbf{y}'\mathbf{y}}$$

如果无常数项，则 Stata 汇报 R_{uc}^2 。

3.5 OLS 的小样本性质

(1) 线性性：OLS 估计量 $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}$ 为 \mathbf{y} 的线性组合。

(2) 无偏性： $E(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = \boldsymbol{\beta}$ ，即 \mathbf{b} 不会系统地高估或低估 $\boldsymbol{\beta}$ 。

证明：抽样误差(sampling error)为

$$\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y} - \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) - \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\boldsymbol{\varepsilon} \equiv \mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}$$

其中，记 $\mathbf{A} \equiv (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'$ 。所以

$$E(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta} | \mathbf{X}) = E(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}) = \mathbf{A} \underbrace{E(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})}_{=0} = \mathbf{0} \quad (\text{严格外生性})$$

移项可得， $E(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = \boldsymbol{\beta}$ 。在此证明中，严格外生性不可或缺。

推论 无条件期望 $E(\mathbf{b}) = \boldsymbol{\beta}$ 。

证明： $E(\mathbf{b}) = E_{\mathbf{X}} E(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = E_{\mathbf{X}} (\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}$ (常数的期望仍为常数)。

(3) 估计量 \mathbf{b} 的方差为 $\text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 。

证明： $\text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = \text{Var}(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta} | \mathbf{X})$ ($\boldsymbol{\beta}$ 是常数)
 $= \text{Var}(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}) = \mathbf{A} \text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}) \mathbf{A}' = \mathbf{A} \sigma^2 \mathbf{I}_n \mathbf{A}'$
 $= \sigma^2 \mathbf{A} \mathbf{A}' = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{X} (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$

球形扰动项假定是证明的关键。

如存在条件异方差，则方差表达式不同，应使用“稳健标准误” (robust standard error)，参见第 5 章。

(4) “高斯-马尔可夫定理” (Gauss-Markov Theorem): 最小二乘法是最佳线性无偏估计 (Best Linear Unbiased Estimator, 简记 BLUE), 即在所有线性无偏估计中, 最小二乘法的方差最小。

证明: OLS 估计量 \mathbf{b} 为线性无偏估计。

假设 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为任一线性无偏估计, 需证明 $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) \geq \text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X})$, 即 $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) - \text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X})$ 为半正定矩阵。

$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) - \text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X})$ 半正定, 则 $\text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X})$ 的主对角线元素 (即方差) 一定小于或等于 $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X})$ 的主对角线上对应元素 (参见习题)。

由于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为线性估计, 故存在常数矩阵 $\mathbf{C}_{K \times n}$, 使得 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{C}\mathbf{y}$ 。

已知 $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{y}$ ，其中 $\mathbf{A} \equiv (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ 。定义 $\mathbf{D} \equiv \mathbf{C} - \mathbf{A}$ ，则

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{C}\mathbf{y} = (\mathbf{D} + \mathbf{A})\mathbf{y} = \mathbf{D}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) + \mathbf{b} = \mathbf{DX}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b}$$

利用 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的无偏性可得，

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) = \mathbf{E}(\mathbf{DX}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b} | \mathbf{X}) = \mathbf{DX}\boldsymbol{\beta} + \underbrace{\mathbf{D}\mathbf{E}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})}_{=\mathbf{0}} + \underbrace{\mathbf{E}(\mathbf{b} | \mathbf{X})}_{=\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{DX}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}$$

对于任意 $\boldsymbol{\beta}$ ，都有 $\mathbf{DX}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$ ，故 $\mathbf{DX} = \mathbf{0}$ 。 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的表达式简化为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \underbrace{\mathbf{DX}}_{=\mathbf{0}}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b}$$

$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的抽样误差为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b} - \boldsymbol{\beta} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{D} + \mathbf{A})\boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\begin{aligned}
\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) &= \text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta} | \mathbf{X}) = \text{Var}[(\mathbf{D} + \mathbf{A})\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}] = (\mathbf{D} + \mathbf{A}) \text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})(\mathbf{D} + \mathbf{A})' \\
&= \sigma^2 (\mathbf{D} + \mathbf{A})(\mathbf{D}' + \mathbf{A}') = \sigma^2 (\mathbf{D}\mathbf{D}' + \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{D}'}_{=\mathbf{0}} + \underbrace{\mathbf{D}\mathbf{A}'}_{=\mathbf{0}} + \mathbf{A}\mathbf{A}') \\
&= \sigma^2 [\mathbf{D}\mathbf{D}' + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}] \quad (\mathbf{D}\mathbf{A}' = \underbrace{\mathbf{D}\mathbf{X}}_{=\mathbf{0}}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \mathbf{0})
\end{aligned}$$

$$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}} | \mathbf{X}) - \text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X}) = \sigma^2 [\mathbf{D}\mathbf{D}' + (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}] - \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 \mathbf{D}\mathbf{D}'$$

由于 $\mathbf{D}\mathbf{D}'$ 为半正定矩阵，故高斯-马尔可夫定理成立。

如果没有球型扰动项的假定，则最小二乘法不是 BLUE，还存在其他更优的线性无偏估计，参见第 7 章。

(5)方差的无偏估计： $E(s^2 | \mathbf{X}) = \sigma^2$ 。

证明：因为

$$E(s^2 | \mathbf{X}) = E\left(\frac{\mathbf{e}'\mathbf{e}}{n-K} \mid \mathbf{X}\right) = E\left(\frac{\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon}}{n-K} \mid \mathbf{X}\right) = \frac{1}{n-K} E(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X})$$

故只要证明 $E(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} | \mathbf{X}) = (n-K)\sigma^2$ ，即可。

定义 任意方阵 \mathbf{A} 的迹(trace)就是其主对角线元素之和，记为 $\text{trace}(\mathbf{A})$ 。

迹运算的性质：

$$\text{trace}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{trace}(\mathbf{A}) + \text{trace}(\mathbf{B})$$

$\text{trace}(k\mathbf{A}) = k \text{ trace}(\mathbf{A})$, k 为常数

$\text{trace}(\mathbf{AB}) = \text{trace}(\mathbf{BA})$ 只要 \mathbf{AB} 与 \mathbf{BA} 都存在

如果 \mathbf{A} 为 1×1 矩阵(常数), 则 $\text{trace}(\mathbf{A}) = \mathbf{A}$ 。

$$\text{E}(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \mid \mathbf{X}) = \text{E}[\text{trace}(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \mid \mathbf{X})] \quad (\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \text{ 为 } 1 \times 1)$$

$$= \text{E}[\text{trace}(\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}' \mid \mathbf{X})] \quad (\boldsymbol{\varepsilon}' \text{ 与 } \mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \text{ 换次序})$$

$$= \text{trace}[\text{E}(\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}' \mid \mathbf{X})] \quad (\text{期望算子与迹算子换次序})$$

$$= \text{trace}[\mathbf{M}\sigma^2\mathbf{I}_n] \quad (\text{球型扰动项})$$

$$= \sigma^2 \text{trace}(\mathbf{M}) \quad (\text{迹运算的线性性})$$

$$\text{trace}(\mathbf{M}) = \text{trace}\left[\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\right] \quad (\text{消灭矩阵 } \mathbf{M} \text{ 的定义})$$

$$= \text{trace}(\mathbf{I}_n) - \text{trace}\left[\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\right] \quad (\text{迹运算的线性性})$$

$$= n - \text{trace}\left[(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}\right] \quad (\mathbf{X} \text{ 与 } (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \text{ 互换})$$

$$= n - \text{trace}(\mathbf{I}_K) \quad (\mathbf{X}'\mathbf{X} \text{ 为 } K \times K \text{ 矩阵})$$

$$= n - K \quad (K \text{ 阶单位阵的迹为 } K)$$

对协方差阵 $\text{Var}(\mathbf{b} | \mathbf{X})$ 的无偏估计为 $s^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ ，在 Stata 中记为“VCE” (Variance-Covariance Matrix Estimated)。

3.6 对单个系数的 t 检验

假定 3.5 在给定 \mathbf{X} 的情况下, $\boldsymbol{\varepsilon}|\mathbf{X}$ 的条件分布为正态, 即 $\boldsymbol{\varepsilon}|\mathbf{X} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ 。

考虑对单个系数进行检验, “原假设” (null hypothesis, 零假设) 为 $H_0: \beta_k = \bar{\beta}_k$, 其中 $\bar{\beta}_k$ 为给定常数。

通常 $\bar{\beta}_k = 0$, 检验变量 x_{ik} 的系数是否显著地不等于 0。

假设检验是概率意义上的反证法, 即首先假设原假设成立, 然后看在原假设成立的前提下, 是否导致不太可能发生的“小概率事件”在一次抽样的样本中出现。

如果小概率事件竟在一次抽样中被观测到，则说明原假设不可信，应该拒绝原假设，接受“替代假设”(alternative hypothesis, 备择假设) $H_1: \beta_k \neq \bar{\beta}_k$ 。

如果未知参数 β_k 的估计值 b_k 离 $\bar{\beta}_k$ 较远，则倾向于拒绝原假设。这类检验称为“沃尔德检验”(Wald test)。

在衡量距离远近时，绝对距离依赖变量单位，需以标准差为基准来考虑相对距离。

由于 $\boldsymbol{\varepsilon} | \boldsymbol{X} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I}_n)$ ，而 $\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\varepsilon}$ 为 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的线性函数，故 $(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\beta}) | \boldsymbol{X}$ 服从正态分布。

进 一 步 ， $E(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\beta} | \boldsymbol{X}) = \mathbf{0}$ ， $\text{Var}(\boldsymbol{b} | \boldsymbol{X}) = \sigma^2 (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}$ ， 故

$$(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta}) | \mathbf{X} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}).$$

在原假设 “ $H_0: \beta_k = \bar{\beta}_k$ ” 成立的情况下，其第 k 个分量 $(b_k - \bar{\beta}_k) | \mathbf{X} \sim N(0, \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1})$ ，其中 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}$ 为矩阵 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 的 (k, k) 元素，而 $\sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}$ 为 b_k 的方差。

$$\text{如果 } \sigma^2 \text{ 已知，则统计量 } z_k \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{\sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}}} \sim N(0, 1)。$$

通常 σ^2 未知，称为“厌恶参数” (nuisance parameter): 虽然对 σ^2 不感兴趣，但 σ^2 却出现在表达式中。

合格的“检验统计量” (test statistic) 须满足两个条件：能够根据样本数据计算；概率分布已知。

以估计值 s^2 来替代 σ^2 ，可得 t 统计量。

定理(t 统计量的分布) 在假定 3.1-3.5 均满足，且原假设“ $H_0: \beta_k = \bar{\beta}_k$ ”也成立的情况下， t 统计量

$$t_k \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\text{SE}(b_k)} \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{s^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}}} \sim t(n - K)$$

其中， $\text{SE}(b_k)$ 是 b_k 的“估计标准误差” (estimated standard error)，简称“标准误”。

证明：将统计量 t_k 变形：

$$t_k \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{s^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}}} = \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{\sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}}} \cdot \sqrt{\frac{\sigma^2}{s^2}} = \frac{z_k}{\sqrt{s^2/\sigma^2}} = \frac{z_k}{\sqrt{\frac{\mathbf{e}'\mathbf{e}}{(n-K)\sigma^2}}} \equiv \frac{z_k}{\sqrt{q/(n-K)}}$$

其中, $z_k \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{\sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})_{kk}^{-1}}}$, $q \equiv \frac{\mathbf{e}'\mathbf{e}}{\sigma^2}$ 。

已知 $z_k \sim N(0,1)$, 下面将证明,

(1) $q | \mathbf{X} \sim \chi^2(n-K)$;

(2) $z_k | \mathbf{X}$ 与 $q | \mathbf{X}$ 相互独立,

则根据 t 分布的定义, $\frac{z_k}{\sqrt{q/(n-K)}} \sim t(n-K)$ 。

$$(1) \quad q \equiv \frac{\mathbf{e}'\mathbf{e}}{\sigma^2} = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon}}{\sigma^2} = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}'}{\sigma}\mathbf{M}\frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{\sigma} \quad (\text{二次型}).$$

由于 $\boldsymbol{\varepsilon}|\mathbf{X} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$, 故 $\frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{\sigma}|\mathbf{X} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n)$ 。已知消灭矩阵 \mathbf{M} 为“幂等矩阵” (idempotent matrix, 即 $\mathbf{M}^2 = \mathbf{M}$)。

根据线性代数知识, 对于幂等矩阵 \mathbf{M} , $\text{rank}(\mathbf{M}) = \text{trace}(\mathbf{M}) = n - K$ 。

根据数理统计知识, $q|\mathbf{X} \sim \chi^2(n - K)$ 。由于 \mathbf{M} 不满秩, $q|\mathbf{X}$ 的自由度降为 $(n - K)$ 。

(2) $z_k \equiv \frac{b_k - \bar{\beta}_k}{\sqrt{\sigma^2 (X'X)^{-1}_{kk}}}$ 是 \mathbf{b} 的函数, q 是 \mathbf{e} 的函数, 故只要证明 \mathbf{b} 与 \mathbf{e} 相互独立即可。

由于 $\mathbf{b} = \boldsymbol{\beta} + \mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}$ 与 $\mathbf{e} = \mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon}$ 都是正态扰动项 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的线性函数, 故 (\mathbf{b}, \mathbf{e}) 的联合分布也是正态, 故只要证明 $\text{Cov}(\mathbf{b}, \mathbf{e}) = \mathbf{0}$ 即可。

$$\text{Cov}(\mathbf{b}, \mathbf{e} \mid \mathbf{X}) = \text{Cov}(\boldsymbol{\beta} + \mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \mid \mathbf{X}) \quad (\text{代入 } \mathbf{b} \text{ 与 } \mathbf{e} \text{ 表达式})$$

$$= \text{Cov}(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon} \mid \mathbf{X}) \quad (\text{去掉常数 } \boldsymbol{\beta})$$

$$= \text{E}(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{M}) - \underbrace{\text{E}(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon})}_{=\mathbf{0}} \underbrace{\text{E}(\mathbf{M}\boldsymbol{\varepsilon})'}_{=\mathbf{0}'} \quad (\text{协方差矩阵公式})$$

$$= \mathbf{A}\text{E}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')\mathbf{M} = \sigma^2 \mathbf{A}\mathbf{M} = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{M} = \sigma^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \underbrace{(\mathbf{M}\mathbf{X})'}_{=\mathbf{0}} = \mathbf{0}$$

(OLS 的正交性)

t 检验的步骤

第一步：计算 t_k 。如果 $|t_k|$ 很大，则 H_0 较不可信。如果 H_0 为真，则 $|t_k|$ 很大的概率将很小(为小概率事件)，不应在抽样中观测到。

第二步：计算“显著性水平”(significance level)为 α 的“临界值”(critical value) $t_{\alpha/2}(n-K)$

$$P\{t(n-K) > t_{\alpha/2}(n-K)\} = P\{t(n-K) < -t_{\alpha/2}(n-K)\} = \alpha/2$$

其中， $t(n-K)$ 服从 $t(n-K)$ 分布。 $t(n-K)$ 大于 $t_{\alpha/2}(n-K)$ ，或小于 $-t_{\alpha/2}(n-K)$ 的概率都是 $\alpha/2$ 。通常 $\alpha = 5\%$ ，则 $\alpha/2 = 2.5\%$ 。有时 $\alpha = 1\%$ 或 10% 。

第三步：如果 t_k 落入“拒绝域”(rejection region)，则拒绝 H_0 ； t_k 落入“接受域”(acceptance region)，则接受 H_0 。

拒绝域分布在 t 分布两边，称为“双边检验”(two-tailed)。

计算 p 值

定义 给定检验统计量的样本观测值，称原假设可被拒绝的最小显著性水平为此假设检验问题的 p 值(probability value，即 p -value)。

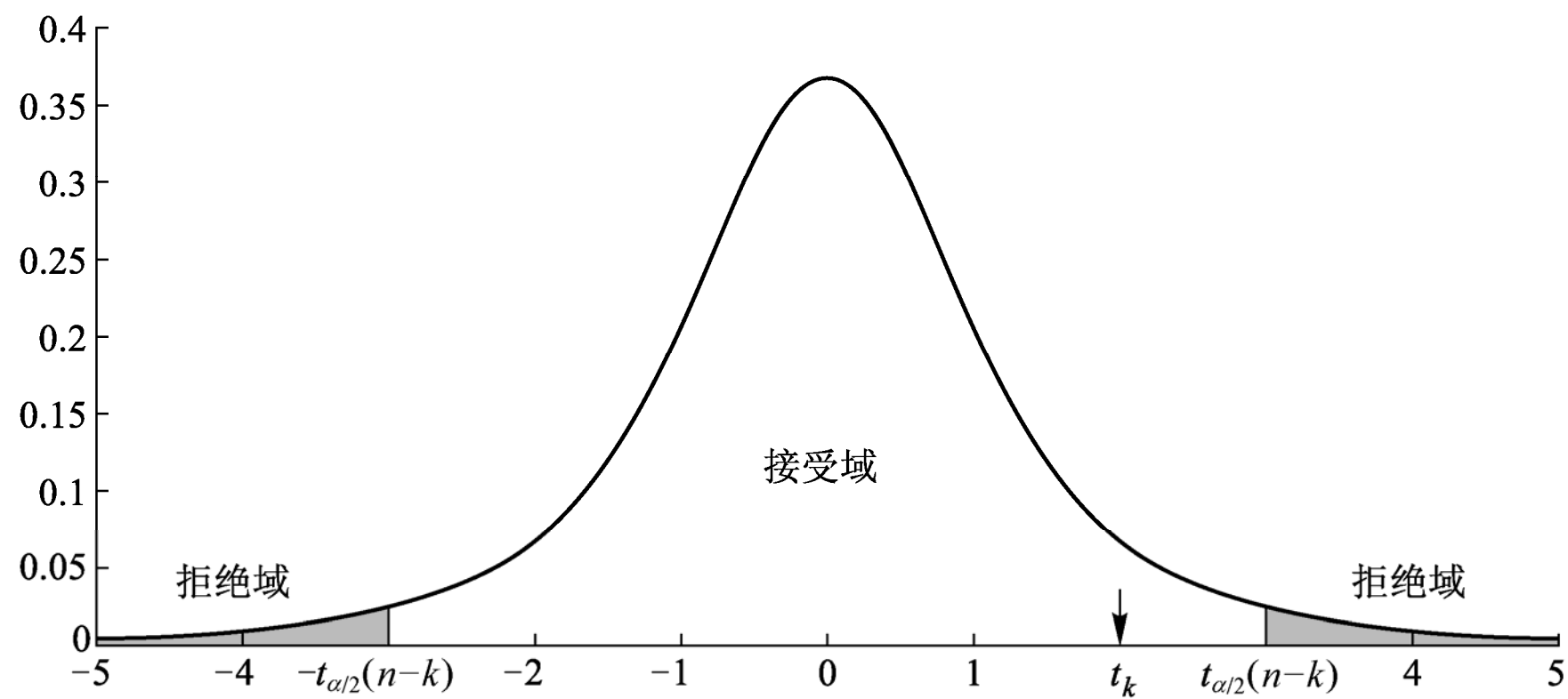


图 3.3 t 检验

在 t 检验中, p 值为 $P(t > |t_k|) \times 2$, 其中 t_k 为检验统计量的样本观测值。

p 值越小则越倾向于拒绝原假设。

【例】 p 值 = 0.03, 则可在 5% 的显著性水平上拒绝原假设。而且, “ p 值 = 0.03” 还可在 3% 的显著性水平上拒绝原假设。

使用 p 值进行假设检验一般比临界值更有信息量。

当 Stata 直接给出 p 值时, 就不需要知道临界值了。

计算置信区间

假设“置信度”(confidence level)为 $(1-\alpha)$ (比如 $\alpha=5\%$, 则 $1-\alpha=95\%$), 要找到“置信区间”(confidence interval), 使得该区间覆盖真实参数 β_k 的概率为 $(1-\alpha)$ 。

由于 $\frac{b_k - \beta_k}{\text{SE}(b_k)} \sim t(n-K)$, 故

$$P\left\{-t_{\alpha/2} < \frac{b_k - \beta_k}{\text{SE}(b_k)} < t_{\alpha/2}\right\} = 1 - \alpha \quad (t_{\alpha/2} \text{ 的定义})$$

$$P\{b_k - t_{\alpha/2} \text{SE}(b_k) < \beta_k < b_k + t_{\alpha/2} \text{SE}(b_k)\} = 1 - \alpha \quad (\text{不等式变形})$$

即置信区间为 $[b_k - t_{\alpha/2} \text{SE}(b_k), b_k + t_{\alpha/2} \text{SE}(b_k)]$ 。

置信区间是随机区间，随着样本不同而不同。

如果置信度为 95%，抽样 100 次，得到 100 个置信区间，大约 95 个置信区间能覆盖到真实参数 β_k 。

第 I 类错误与第 II 类错误

定义 “第 I 类错误” (Type I error)指的是，虽然原假设为真，但却根据观测数据做出了拒绝原假设的错误判断，即“弃真”。第 I 类错误的发生概率为 $P(\text{reject } H_0 | H_0)$ 。

定义 “第 II 类错误”(Type II error)指的是，虽然原假设为假(替代假设为真)，但却根据观测数据做出了接受原假设的错误判断，即“存伪”。第 II 类错误的发生概率为 $P(\text{accept } H_0 | H_1)$ 。

除非增加样本容量，减少第 I 类错误的发生概率，必然导致第 II 类错误的发生概率增加，反之亦然。

在进行检验时，一般先指定可接受的发生第 I 类错误的最大概率，即“显著性水平”，比如 5%；而不指定第 II 类错误的发生概率(通常更难计算)。

定义 称“1 减去第 II 类错误的发生概率”为统计检验的“功效”或“势”(power)，即“ $1 - P(\text{accept } H_0 | H_1)$ ”。换言之，功效为在原假设为错误的情况下，拒绝原假设的概率。

进行检验时，通常知道第 I 类错误的发生概率，不知道第 II 类错误的发生概率。

拒绝原假设，比较理直气壮，因为知道犯错概率（显著性水平）。

接受原假设，比较没有把握，通常不知犯错概率（可能较高）。

3.7 对线性假设的 F 检验

检验回归方程的显著性，即检验原假设 “ $H_0: \beta_2 = \dots = \beta_K = 0$ ” (β_1 为常数项)。

更一般地，检验 m 个线性假设是否同时成立：

$$H_0: \underbrace{\mathbf{R}}_{m \times K} \underbrace{\boldsymbol{\beta}}_{K \times 1} = \underbrace{\mathbf{r}}_{m \times 1}$$

其中， \mathbf{r} 为 m 维列向量， \mathbf{R} 为 $m \times K$ 矩阵， $\text{rank}(\mathbf{R}) = m$ ，即 \mathbf{R} 满行秩，没有多余或自相矛盾的方程。

例 对于模型 $y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \varepsilon$ ，检验“ $H_0: \beta_2 = \beta_3$ 且 $\beta_4 = 0$ ”。

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{因为}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_2 - \beta_3 \\ \beta_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wald 检验原理： \mathbf{b} 是 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计量，如果 H_0 成立，则 $(\mathbf{Rb} - \mathbf{r})$ 应比较接近 $\mathbf{0}$ 。

定理(F 统计量的分布) 在假定 3.1-3.5 均满足，且原假设“ $H_0: \mathbf{R}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{r}$ ”也成立的情况下，则 F 统计量

$$F \equiv \frac{(\mathbf{Rb} - \mathbf{r})' [\mathbf{R}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{R}']^{-1} (\mathbf{Rb} - \mathbf{r}) / m}{s^2} \sim F(m, n - K)$$

证明：由于 $s^2 = \mathbf{e}'\mathbf{e} / (n - K)$ ，可将 F 写成

$$F \equiv \frac{(\mathbf{Rb} - \mathbf{r})' [\sigma^2 \mathbf{R}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{R}']^{-1} (\mathbf{Rb} - \mathbf{r}) / m}{(\mathbf{e}'\mathbf{e} / \sigma^2) / (n - K)} \equiv \frac{w / m}{q / (n - K)}$$

其中, $w \equiv (\mathbf{R}\mathbf{b} - \mathbf{r})' [\sigma^2 \mathbf{R}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{R}']^{-1} (\mathbf{R}\mathbf{b} - \mathbf{r})$ 。

下面将证明:

(1) $w | \mathbf{X} \sim \chi^2(m)$;

(2) $q | \mathbf{X} \sim \chi^2(n - K)$; (已在 t 检验定理中证明)

(3) $w | \mathbf{X}$ 与 $q | \mathbf{X}$ 相互独立,

则根据 F 分布的定义, $\frac{w/m}{q/(n - K)} \sim F(m, n - K)$ 。

(1) 定义 $\boldsymbol{v} \equiv \boldsymbol{R}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{r}$ 。在 H_0 成立的情况下,

$$\boldsymbol{v} \equiv \boldsymbol{R}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{r} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\beta})$$

由于 \boldsymbol{b} 为正态, 故 $\boldsymbol{v} | \boldsymbol{X}$ 为 m 维正态, 且 $E(\boldsymbol{v} | \boldsymbol{X}) = \mathbf{0}$, 方差为

$$\text{Var}(\boldsymbol{v} | \boldsymbol{X}) = \text{Var}[\boldsymbol{R}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\beta}) | \boldsymbol{X}] = \boldsymbol{R}\text{Var}(\boldsymbol{b})\boldsymbol{R}' = \sigma^2 \boldsymbol{R}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{R}'$$

根据数理统计知识,

$$w \equiv (\boldsymbol{R}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{r})' [\sigma^2 \boldsymbol{R}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{R}']^{-1} (\boldsymbol{R}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{r}) = \boldsymbol{v}' [\text{Var}(\boldsymbol{v} | \boldsymbol{X})]^{-1} \boldsymbol{v} \sim \chi^2(m)$$

由于 \boldsymbol{R} 满行秩, 故 $[\boldsymbol{R}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{R}']^{-1}$ 存在。

(3) w 是 \mathbf{b} 的函数, q 是 \mathbf{e} 的函数, 由于 \mathbf{b} 与 \mathbf{e} 相互独立, 故 $w|\mathbf{X}$ 与 $q|\mathbf{X}$ 相互独立。

F 检验的步骤

第一步: 计算 F 统计量。如果 F 统计量很大, 则 H_0 较不可信。

第二步: 计算显著性水平为 α 的临界值 $F_\alpha(m, n-K)$,

$$P\{F(m, n-K) > F_\alpha(m, n-K)\} = \alpha$$

其中, $F(m, n-K)$ 服从 $F(m, n-K)$ 分布。

第三步: 如果 F 统计量落入右边拒绝域, 则拒绝 H_0 ; F 统计量

落入接受域，则接受 H_0 。拒绝域只在右侧，为“单边右侧检验”。

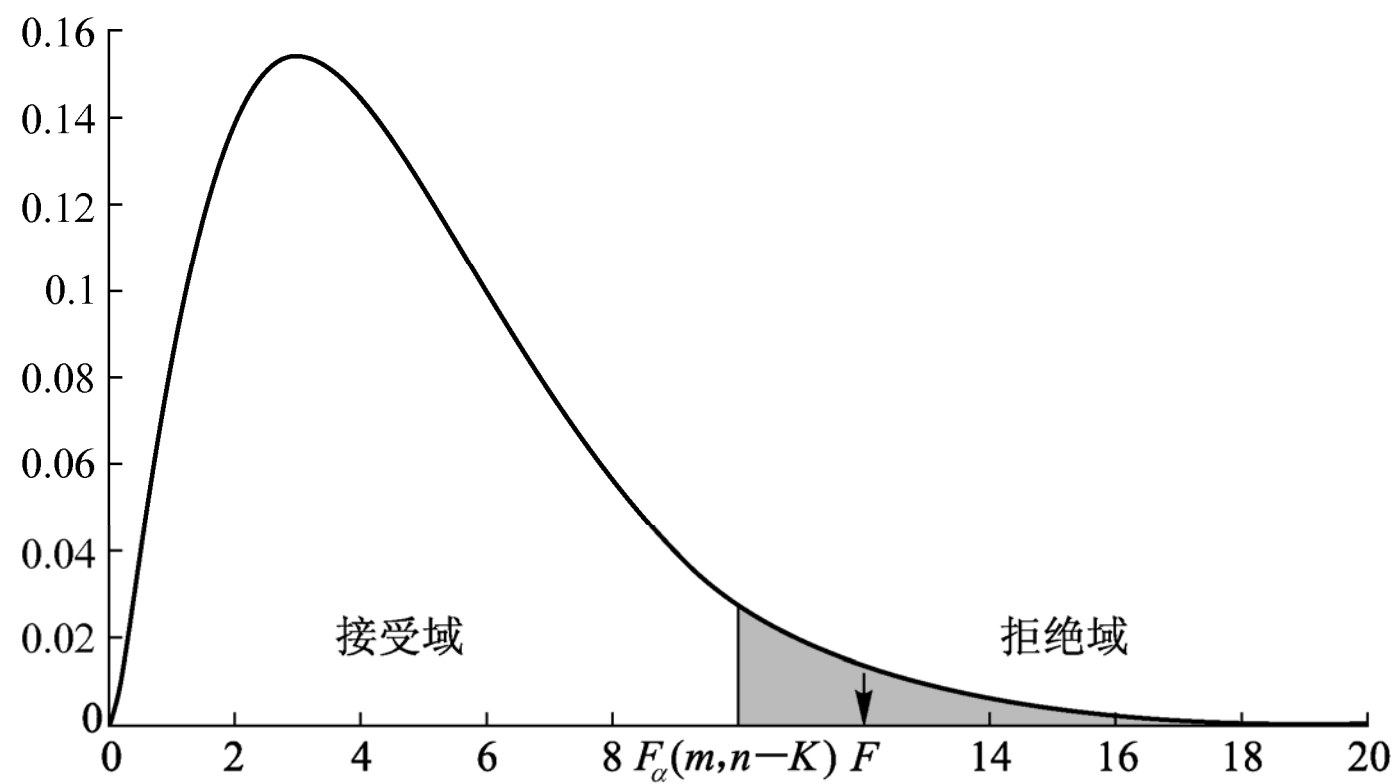


图 3.4 F 检验

3.8 F 统计量的似然比原理表达式

使用约束条件下的最小二乘法，即 “约束最小二乘法” (Restricted OLS, Constrained OLS)，可得 F 统计量的简便表达式。

考虑以下约束极值问题：

$$\begin{aligned} \min_{\tilde{\beta}} \quad & \text{SSR}(\tilde{\beta}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{R}\tilde{\beta} = \mathbf{r} \end{aligned}$$

如果 “ $H_0: \mathbf{R}\beta = \mathbf{r}$ ” 正确，则加上此约束不应使残差平方和 $\text{SSR}(\tilde{\beta})$ 的最小值增大很多。

求解此约束极值问题，可证明：

$$F = \frac{(\mathbf{e}^{*'} \mathbf{e}^* - \mathbf{e}' \mathbf{e})/m}{\mathbf{e}' \mathbf{e}/(n-K)}$$

其中， \mathbf{e} 为无约束残差， \mathbf{e}^* 为有约束残差， m 为约束条件个数。

这种通过比较“条件极值”与“无条件极值”而进行的检验，统称为“似然比检验” (Likelihood ratio test)。

命题 对于线性回归方程 “ $y_i = \beta_1 + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_K x_{iK} + \varepsilon_i$ ”，检验原假设 “ $H_0: \beta_2 = \cdots = \beta_K = 0$ ” (即该方程的显著性)的 F 统计量等于 $\frac{R^2/(K-1)}{(1-R^2)/(n-K)}$ 。

证明：由于共有 $(K-1)$ 个约束，根据似然比原理的 F 统计量为

$$F = \frac{(e^{*'}e^* - e'e)/(K-1)}{e'e/(n-K)} = \frac{\frac{(e^{*'}e^* - e'e)}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} / (K-1)}{\frac{e'e}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} / (n-K)}$$

其中， e 为无约束残差，而 e^* 为约束残差。记约束回归的拟合优度为 R_*^2 ，由于 $\frac{e'e}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = 1 - R^2$ ， $\frac{e^{*'}e^*}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = 1 - R_*^2$ ，故

$$F = \frac{[(1 - R_*^2) - (1 - R^2)] / (K-1)}{(1 - R^2) / (n-K)} = \frac{(R^2 - R_*^2) / (K-1)}{(1 - R^2) / (n-K)}$$

只需证明 $R_*^2 = 0$ 即可。

当 “ $H_0 : \beta_2 = \cdots = \beta_K = 0$ ” 成立时, $y_i = \beta_1 + \varepsilon_i$, 而 $b_1^* = \bar{y}$ (只对常数项 β_1 进行回归), 故 $\hat{y}_i^* = b_1^* = \bar{y}$ 。

由此可知 $\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i^* - \bar{y})^2 = 0$, 故 $R_*^2 = 0$ 。

3.9 分块回归与偏回归 (选读)

3.10 预 测

有时也用计量模型进行预测(prediction, forecasting), 即给定解释向量 \mathbf{x}_0 的(未来)取值, 预测被解释变量 y_0 的取值。

假设计量模型对所有观测值都成立(包括外推到未来的观测值),

$$y_0 = \mathbf{x}_0' \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_0$$

用 $\hat{y}_0 \equiv \mathbf{x}_0' \mathbf{b}$ 对 y_0 作点预测, \mathbf{b} 为 $\boldsymbol{\beta}$ 的 OLS 估计量。

“预测误差” (prediction error) $(\hat{y}_0 - y_0)$ 可写为

$$\hat{y}_0 - y_0 = \mathbf{x}_0' \mathbf{b} - \mathbf{x}_0' \boldsymbol{\beta} - \varepsilon_0 = \mathbf{x}_0' (\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta}) - \varepsilon_0$$

由于 \mathbf{b} 是 $\boldsymbol{\beta}$ 的无偏估计, 故 $E(\hat{y}_0 - y_0) = \mathbf{x}'_0 E(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta}) - E(\varepsilon_0) = 0$ 。

“无偏预测” (unbiased predictor): 用 \hat{y}_0 来预测 y_0 不会系统高估或低估。

预测 \hat{y}_0 的方差为:

$$\text{Var}(\hat{y}_0) = \text{Var}(\mathbf{x}'_0 \mathbf{b}) = \mathbf{x}'_0 \text{Var}(\mathbf{b}) \mathbf{x}_0 = \sigma^2 \mathbf{x}'_0 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$$

此方差反映由于抽样误差 $(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta})$ 所带来的预测量 \hat{y}_0 的波动。如果知道 $\boldsymbol{\beta}$, 则 $\text{Var}(\hat{y}_0) = \text{Var}(\mathbf{x}'_0 \boldsymbol{\beta}) = 0$ 。

预测误差($\hat{y}_0 - y_0$)的方差为:

$$\begin{aligned}\text{Var}(\hat{y}_0 - y_0) &= \text{Var}[\mathbf{x}'_0(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta}) - \varepsilon_0] \\ &= \text{Var}(\varepsilon_0) + \text{Var}[\mathbf{x}'_0(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta})] \\ &= \sigma^2 + \sigma^2 \mathbf{x}'_0(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0\end{aligned}$$

其中, 假设 ε_0 与 \mathbf{b} 不相关(估计 \mathbf{b} 没用到 ε_0 的信息), 故 $\text{Cov}[\mathbf{x}'_0(\mathbf{b} - \boldsymbol{\beta}), \varepsilon_0] = 0$ 。

预测误差的方差有两个来源, 即抽样误差 $\sigma^2 \mathbf{x}'_0(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_0$ (不能精确知道参数 $\boldsymbol{\beta}$), 以及 y_0 本身的不确定性(ε_0 的方差 σ^2)。

假设扰动项为正态，则 $\hat{y}_0 - y_0 \sim N\left(0, \sigma^2 + \sigma^2 \mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0\right)$ 。

用 s^2 估计 σ^2 ，得到 t 统计量：

$$\frac{\hat{y}_0 - y_0}{s\sqrt{1 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0}} \sim t(n - K)$$

y_0 的置信度为 $(1 - \alpha)$ 的置信区间为

$$\left(\hat{y}_0 - t_{\alpha/2} s \sqrt{1 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0}, \hat{y}_0 + t_{\alpha/2} s \sqrt{1 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_0} \right)$$