二元离散选择模型的估计

同济大学
交通运输工程学院
叶昕 教授

学习目的

- 理解模型参数估计的基本概念
- 理解极大似然估计的思想
- 了解获得极大似然估计的数值方法
- 理解极大似然估计值的统计特性
- 理解极大似然法估计模型的统计推断
- 掌握应用统计软件**SPSS**估计二元**logit**模型及汇总模型输出结果

模型参数估计

- 如何估计Logistic回归模型中的变量系数?
- 参数估计：根据从总体中抽取的样本估计总体分布中包含的未知参数
- 常用的参数估计方法：
  - 最小二乘法
  - 极大似然法
  - 矩估计法
  - 贝叶斯估计法

如何获得Logistic回归模型的参数?

- 在线性回归模型中，可以使用最小二乘法，估计模型参数
  - 系数估计值：$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$
- Logistic回归模型给出选择的概率值，可以利用极大似然法进行模型参数估计

极大似然法 (Maximum Likelihood Estimate, MLE)

- 如果x_1, x_2 … , x_n 是一系列从总体中抽取的样本
- 总体符合某概率分布，其概率分布或密度函数可表达为 f(x, β)
- 似然函数：$L(\beta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i, \beta)$
- 对数似然函数：$LL(\beta) = \ln[\prod_{i=1}^{n} f(x_i, \beta)] = \sum_{i=1}^{n} \ln[f(x_i, \beta)]$
- 极大似然估计值：$\hat{\beta} = \mathrm{argmax}[LL(\beta)]$

MLE例子1（连续变量，有收敛形式）

- If $x_1, x_2, \ldots, x_n$ follow the same distribution
- Probability density function:

  $f(x) = (\theta + 1)x^{\theta}, 0 < x < 1;$

  $f(x) = 0$, otherwise.
- $L(\theta) = \prod_{i=1}^{n} [(\theta + 1)\, x_i{}^{\theta}] = (\theta + 1)^{n} (\prod_{i=1}^{n} x_i)^{\theta}$
- $LL(\theta) = n \ln(\theta + 1) + \theta \sum_{i=1}^{n} \ln(x_i)$
- To maximize $LL(\theta)$, let $d[LL(\theta)]/d\theta = n/(\theta+1) + \sum_{i=1}^{n} \ln(x_i) = 0$
- $\hat{\theta} = -1 - \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} \ln(x_i)}$

MLE例子2（离散变量，有收敛形式）

- If x_1, x_2, …, x_n follow Poisson distribution
- Probability function:

  $P(x) = \exp(-\lambda)\cdot\lambda^x/x!$, x is non-negative integer.
- $LL(\lambda) = \sum_{i=1}^{n}[-\lambda + x_i \ln(\lambda) - \ln(x_i!)]$

  $= -\lambda n + \sum_{i=1}^{n}[x_i \ln(\lambda) - \ln(x_i!)]$
- To maximize $LL(\lambda)$, let $d[LL(\lambda)]/d\lambda = -n + (1/\lambda)\cdot\sum_{i=1}^{n} x_i = 0$
- $\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$

MLE例子3（无收敛形式）

- If $x_1, x_2, \ldots, x_n$ follow Weibull distribution
- Probability density function: $f(x) = k \cdot x^{k-1} \cdot \exp(-x^k)$
- $L(k) = \prod_{i=1}^{n} [k \cdot x_i^{\,k-1} \cdot \exp(-x_i^{\,k})]$
- $LL(k) = \sum_{i=1}^{n} [\ln(k) + (k-1)\ln(x_i) - x_i^{\,k}]$

$= n \cdot \ln(k) + (k-1)\sum_{i=1}^{n} \ln(x_i) - \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,k}$

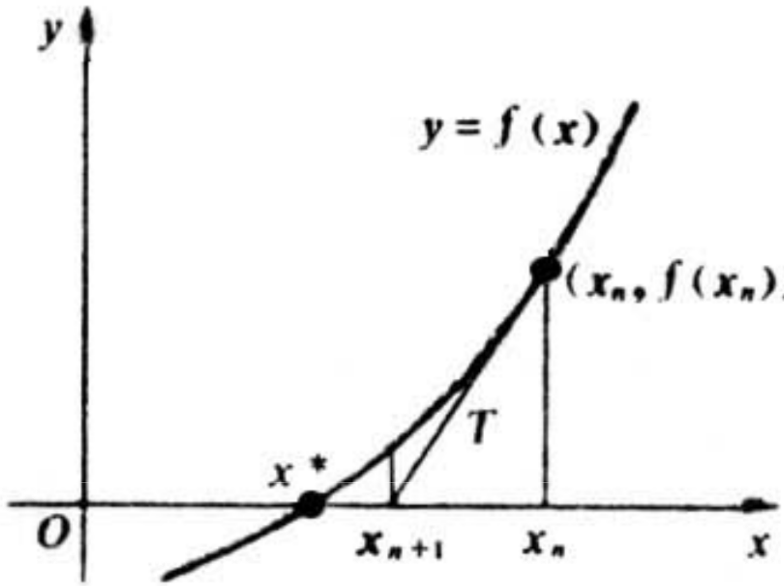
- To maximize LL(k), let $d[LL(k)]/dk = n/k + \sum_{i=1}^{n} \ln(x_i) - \sum_{i=1}^{n} \ln(x_i) x_i^{\,k} = 0$
- There is no closed form for $\hat{k}$

数值最优化方法简介

- 牛顿法 (Newton’s method)
  - ➢切线法
- 拟牛顿法 (Quasi-Newton methods)
  - ➢割线法

牛顿法 (Newton's method)

- 从初始值x_0开始，利用切线不断逼近解x^*
- 迭代公式：

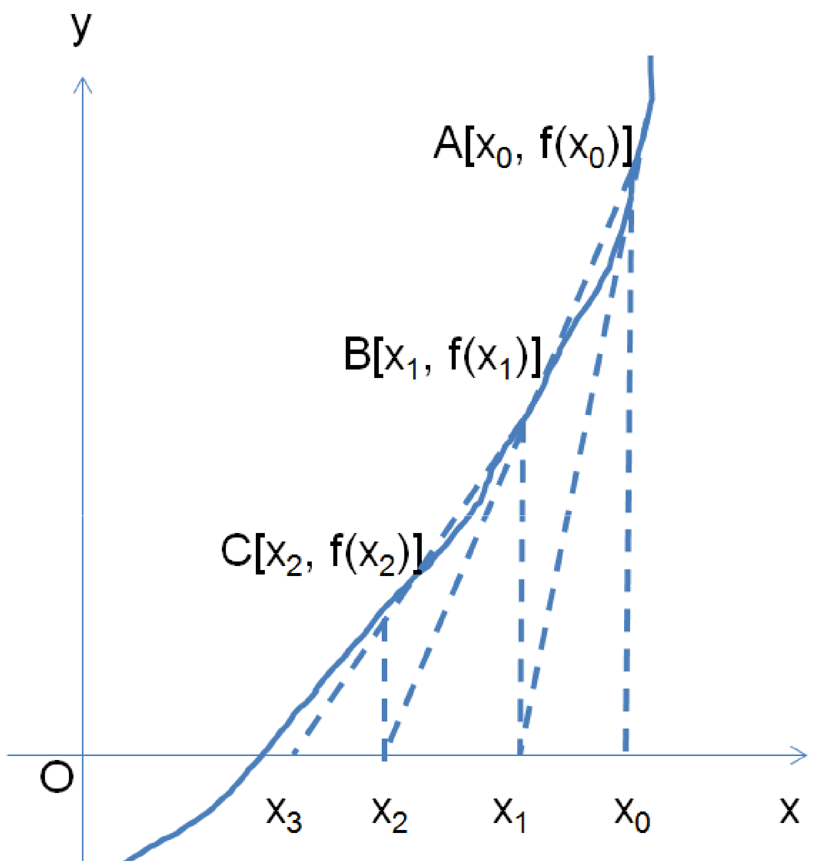


$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)},\ n = 0, 1, \ldots$$

- 缺点：每次迭代都需要计算二阶导数，比较耗时

拟牛顿法 (Quasi-Newton methods)

- 割线法
  - 从初始点x_0开始，利用切线法先找到x_1
  - 利用两点之间的割线逼近解x^*
  - 割线方程：[Y – f(x1)]/(X-x1) = [f(x1) – f(x0)]/(x1-x0)



- 迭代公式：$x_1 = x_0 - \dfrac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f'(x_n) - f'(x_{n-1})} f'(x_n), n = 1, 2, \ldots$$

- 仅计算二阶导数一次

牛顿法在多维空间的推广

- 在多维空间中，二阶导数对应海森矩阵:

$$H(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

- 在多维空间中，一阶导数对应梯度: $g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix}$
- 迭代公式: $x_{n+1} = x_n - [H(x_n)]^{-1} g(x_n)$，

  n = 0,1,…

拟牛顿法在多维空间的推广

- **Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS)** 算法
- 可视为割线法在多维空间的推广，广泛应用于求解无约束的最优化问题
- 在极大似然估计过程中，海森矩阵通常仅计算两次（在开始和结束时各计算一次）

一阶和二阶导数的数值法逼近

- 很多计算机软件（如**Matlab**，**R**，**Gauss**等）可以根据用户提供的似然函数，给出极大似然估计值
- 利用数值法逼近一阶和二阶导数
- $f'(x) \approx [f(x + h) - f(x - h)]/(2h)$
- $f''(x) \approx [f(x-h) + f(x+h) - 2f(x)]/(h*h)$
- 由于计算机存储空间有限，**h**并不是越小越好
- 需要做多次尝试，获得最精确的逼近值
- 提供导数的解析表达式可以减少计算时耗

极大似然估计值的统计特性

- 一致性 （**Consistency**）
  - 当样本量n → +∞, $\hat{\beta} \to \beta$
- 有效性（**Efficiency**）
  - 在所有的无偏估计中具有最小的方差
- 渐近正态性（**Asymptotic Normality**）
  - $\hat{\beta} \sim N[\beta, V]$
  - $V \approx -\left[H(\hat{\beta})\right]^{-1} = -\left[\frac{\partial^2 LL(\hat{\beta})}{\partial \hat{\beta}^2}\right]^{-1}$

极大似然法估计模型的统计推断

- t检验推断单个估计值是否等于某常数c
  - $\text{t-test} = |\hat{\beta} - c|/std(\hat{\beta})$，符合t分布
  - 当样本量n足够大(即自由度足够大时), t分布接 近于正态分布
  - p-值 (显著性水平) = 2×[1 – Φ(t-test)]
- 似然比检验两个嵌套模型
  - $2\times(LL_U - LL_R) \sim Chi^2(DF)$
  - LL_U: 不受约束模型收敛时的对数极大似然值
  - LL_R: 受约束模型收敛时的对数极大似然值
  - DF: 两个模型之间的参数数量差

模型拟合度指标

- 似然比指数（**Likelihood ratio index**）

$$\rho^2(0)=1-\frac{LL(\hat{\beta})}{LL(0)} \qquad \rho^2(\mathrm{c})=1-\frac{LL(\hat{\beta})}{LL(c)}$$

- 调节似然比指数（**Adjusted likelihood ratio index**）

$$adj.\rho^2(0)=1-\frac{LL(\hat{\beta})-K}{LL(0)} \qquad adj.\rho^2(\mathrm{c})=1-\frac{LL(\hat{\beta})-K}{LL(c)}$$

- **LL(0):** 模型无参数时的对数极大似然值
- **LL(c):** 模型仅有常数参数时的对数极大似然值
- $LL(\hat{\beta})$**:** 模型收敛时的对数极大似然值
- **K:** 两个模型之间的参数数量差

二元logit模型的MLE

- 如果从人群中抽取一个随机样本，记录每个人的解释变量X_i和选择变量y_i (i = 1, 2, … n)
- 根据二元logit模型：

$$P(y_i=1)=\frac{\exp(X_i\beta)}{1+\exp(X_i\beta)} \qquad P(y_i=0)=\frac{1}{1+\exp(X_i\beta)}$$

- 似然函数：

$$L(\beta)=\prod_{i=1}^{n}\left\{\left[\frac{\exp(X_i\beta)}{1+\exp(X_i\beta)}\right]^{y_i}\cdot\left[\frac{1}{1+\exp(X_i\beta)}\right]^{1-y_i}\right\}$$

- 对数似然函数：

$$LL(\beta)=\sum_{i=1}^{n}\left\{y_i\ln\left[\frac{\exp(X_i\beta)}{1+\exp(X_i\beta)}\right]+(1-y_i)\ln\left[\frac{1}{1+\exp(X_i\beta)}\right]\right\} \quad , \quad \hat{\beta}=\operatorname{argmax}[LL(\beta)]$$

二元logit模型的MLE例子

样本数据如下：

Observation Number	Auto Time	Transit Time	Chosen Alternative	Numeric Code
1	52.9	4.4	Transit	1
2	4.1	28.5	Transit	1
3	4.1	86.9	Auto	0
4	56.2	31.6	Transit	1
5	51.8	20.2	Transit	1
6	0.2	91.2	Auto	0
7	27.6	79.7	Auto	0
8	89.9	2.2	Transit	1
9	41.5	24.5	Transit	1
10	95.0	43.5	Transit	1
11	99.1	8.4	Transit	1
12	18.5	84.0	Auto	0
13	82.0	38.0	Auto	0
14	8.6	1.6	Transit	1
15	22.5	74.1	Auto	0
16	51.4	83.8	Auto	0
17	81.0	19.2	Transit	1
18	51.0	85.0	Auto	0
19	62.2	90.1	Auto	0
20	95.1	22.2	Transit	1
21	41.6	91.5	Auto	0

使用SPSS估计二元logit模型 [1]

- 打开SPSS，键入数据
- SPSS提供logistics回归模型的估计功能
- 二元logit模型:

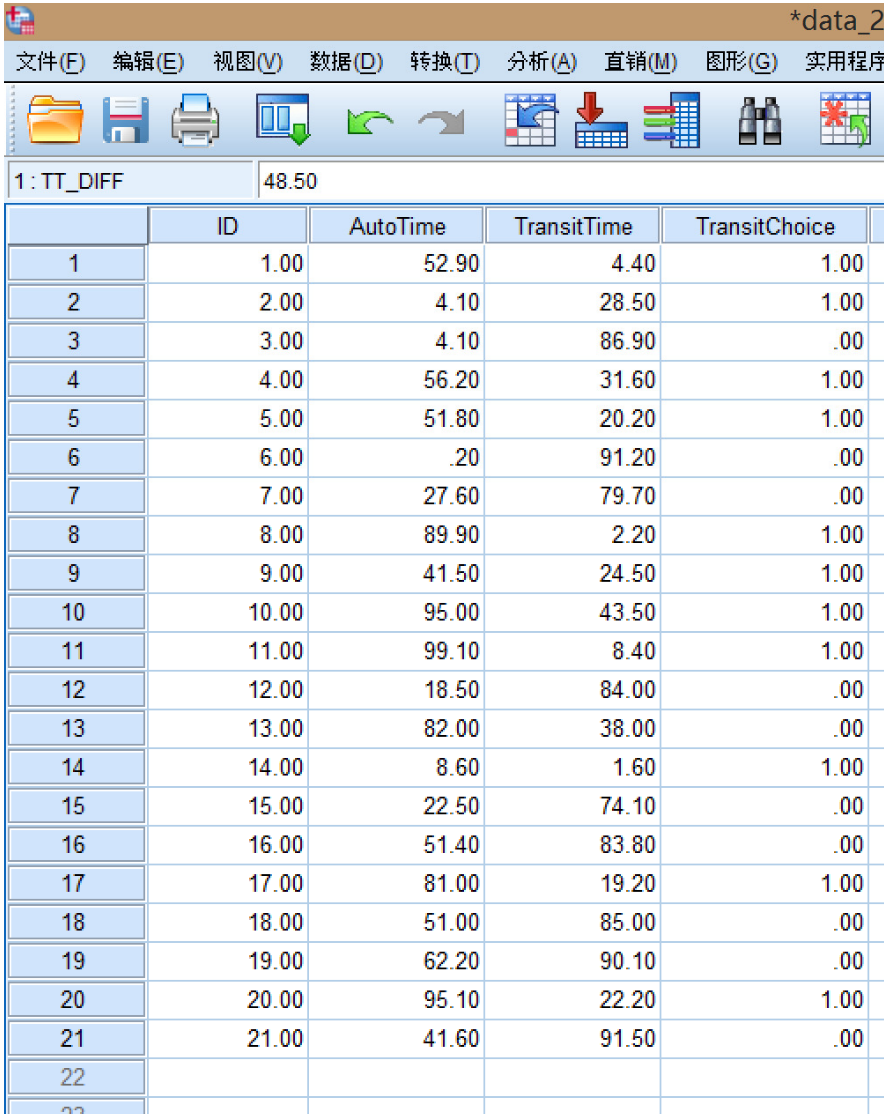
$$V_{auto} = \beta_{auto} + \beta * Time_{auto}$$

$$V_{transit} = \beta * Time_{transit}$$

- 对应的logistic回归模型：

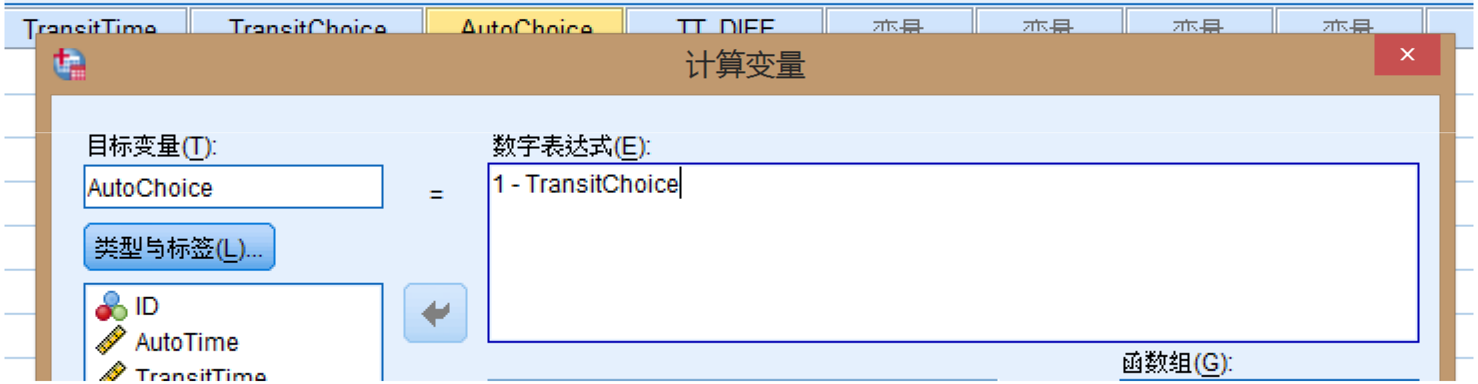
$$V_{auto} = \beta_{auto} + \beta * (Time_{auto} – Time_{transit})$$

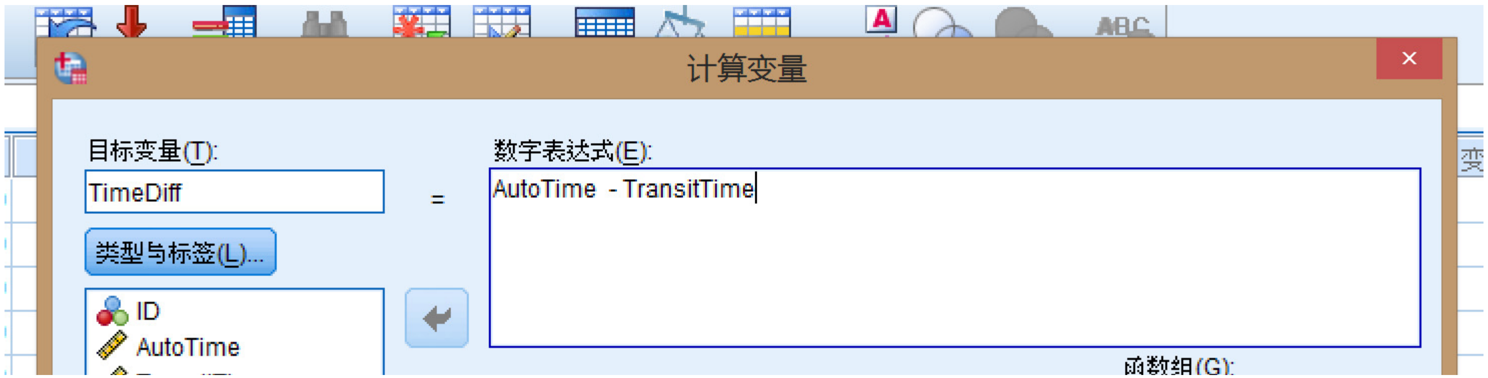
- 需要计算“驾驶”选择变量“AutoChoice”和时间差“TimeDiff”



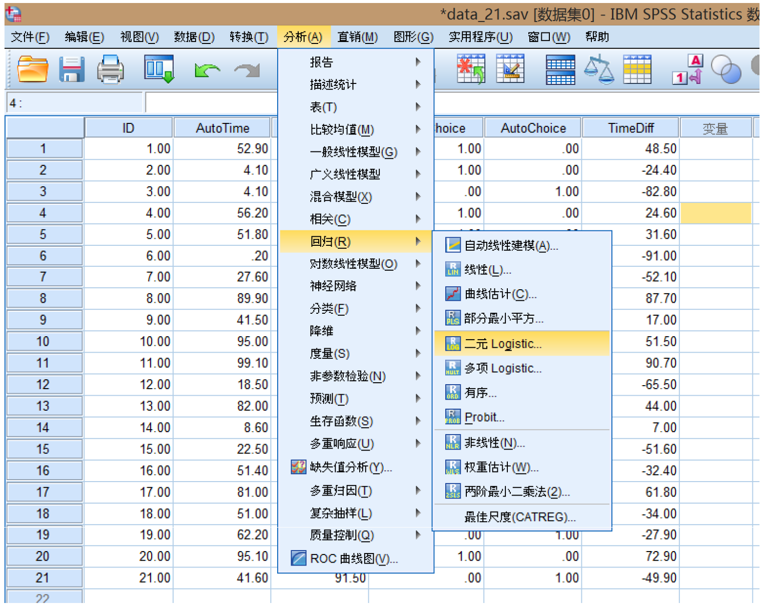
	ID	AutoTime	TransitTime	TransitChoice
1	1.00	52.90	4.40	1.00
2	2.00	4.10	28.50	1.00
3	3.00	4.10	86.90	.00
4	4.00	56.20	31.60	1.00
5	5.00	51.80	20.20	1.00
6	6.00	.20	91.20	.00
7	7.00	27.60	79.70	.00
8	8.00	89.90	2.20	1.00
9	9.00	41.50	24.50	1.00
10	10.00	95.00	43.50	1.00
11	11.00	99.10	8.40	1.00
12	12.00	18.50	84.00	.00
13	13.00	82.00	38.00	.00
14	14.00	8.60	1.60	1.00
15	15.00	22.50	74.10	.00
16	16.00	51.40	83.80	.00
17	17.00	81.00	19.20	1.00
18	18.00	51.00	85.00	.00
19	19.00	62.20	90.10	.00
20	20.00	95.10	22.20	1.00
21	21.00	41.60	91.50	.00
22				

使用SPSS估计二元logit模型 [2]

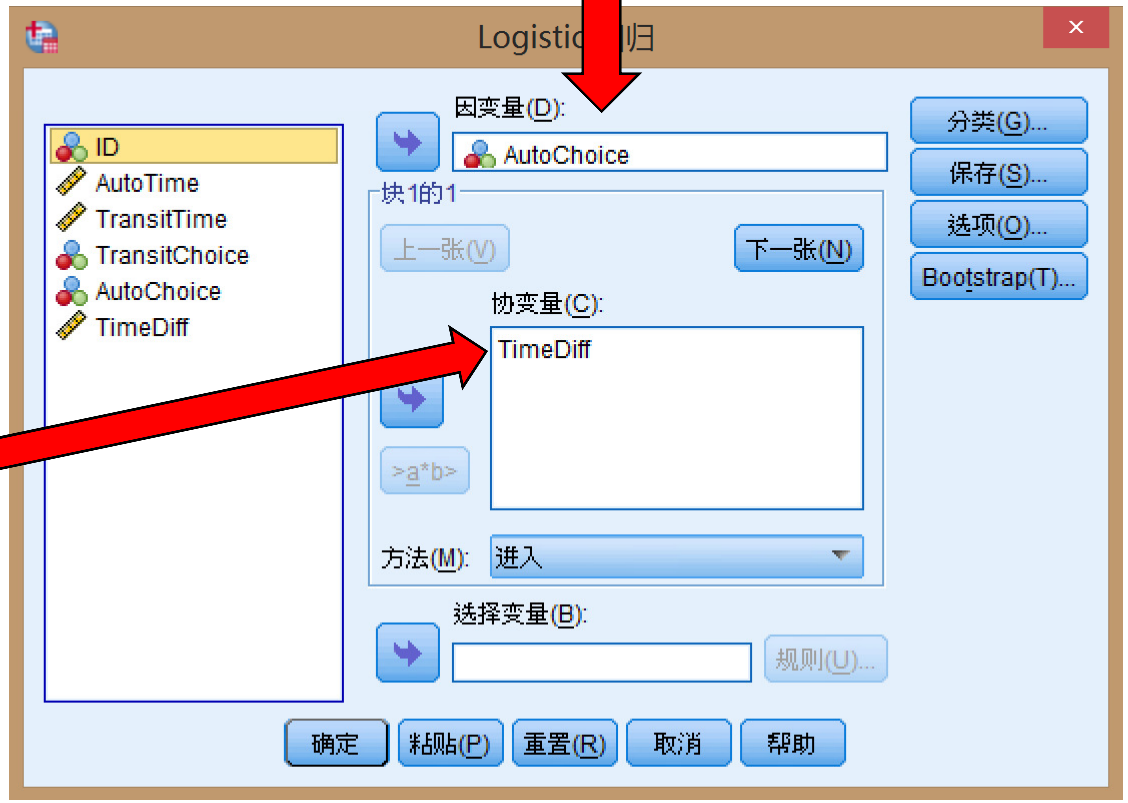




使用SPSS估计logistic回归模型 [3]



将选择变量“AutoChoice”置入为因变量



将解释变量“TimeDiff”置入为协变量

SPSS中logistic回归模型的输出结果

$$-2 \times LL(\hat{\beta})$$

模型汇总

步骤	-2 对数似然值	Cox & Snell R 方	Nagelkerke R 方
1	12.332[a]	.549	.733

a. 因为参数估计的更改范围小于 .001，所以估计在迭代次数 6 处终止。

MLE过程中的迭代次数

时间变量系数估计值

方程中的变量

		B	S.E,	Wals	df	Sig.	Exp (B)
步骤 1[a]	TimeDiff	-.053	.021	6.620	1	.010	.948
	常量	-.238	.750	.100	1	.752	.789

a. 在步骤 1 中输入的变量: TimeDiff.

常数项估计值

系数的显著性水平，一般小于0.05认为系数显著地不等于0

似然比检验对于模型的整体评价

- 似然比检验两个嵌套模型
  - $2 \times (LL_U - LL_R) \sim Chi^2(DF)$
  - LL_U: 不受约束模型收敛时的对数极大似然值
  - LL_R: 受约束模型收敛时的对数极大似然值
  - DF: 两个模型之间的参数数量差
- 在本例中：
  - $LL(\beta) = -12.332/2 = -6.166$
  - $LL(0) = 21*\ln(0.5) = -14.556$
  - $LL(c) = 10*\ln(0.4762) + 11*\ln(1-0.4762) = -14.532$
  - $DF(0) = 2$, $DF(c) = 1$
  - $Chi^2\text{-}Test(0) = 2*(-6.166 + 14.556) = 16.780 > 5.99$（模型显著）
  - $Chi^2\text{-}Test(c) = 2*(-6.166 + 14.532) = 16.732 > 3.84$ （模型显著）

模型拟合度指标计算

$$\rho^2(0)=1-\frac{LL(\hat{\beta})}{LL(0)} \qquad \rho^2(\mathrm{c})=1-\frac{LL(\hat{\beta})}{LL(c)}$$

$$adj.\rho^2(0)=1-\frac{LL(\hat{\beta})-K}{LL(0)} \qquad adj.\rho^2(\mathrm{c})=1-\frac{LL(\hat{\beta})-K}{LL(c)}$$

- 在本例中：

$$\rho^2(0)=1-\frac{-6.166}{-14.566}=0.576 \qquad \rho^2(c)=1-\frac{-6.166}{-14.532}=0.576$$

$$adj.\rho^2(0)=1-\frac{-6.166-2}{-14.566}=0.439 \qquad adj.\rho^2(c)=1-\frac{-6.166-1}{-14.532}=0.507$$

模型估计结果汇总

Variable	Variable Name	Coefficient Estimate	Asymptotic Std Error	t-statistic
1	Auto Constant	-0.2375	0.7505	-0.32
2	Travel Time	-0.0531	0.0206	-2.57

Summary Statistics

Number of Observations=21

Number of Cases=21

L(0)= -14.556

L(c)= -14.532

$L(\hat{\beta}) = -6.166$

$-2[L(0) - L(\hat{\beta})] = 16.780$

$-2[L(c) - L(\hat{\beta})] = 16.732$

ρ^2=0.576

$\hat{\rho}^2 = 0.439$

同济大学
TONGJI UNIVERSITY

谢谢大家！

同济大学交通运输工程学院
SCHOOL OF TRANSPORTATION ENGINEERING
TONGJI UNIVERSITY