

Laird (1978) 提出的無母數最大概似 (nonparametric maximum likelihood, 以下簡稱 NPML) 便屬於 NPEB 法則。

除了上述估計方法外，本文根據 Escobar (1994) 估計常態均數的方法，引進 Dirichlet 過程當 G 的先驗分配，提供一個新的 NPEB 估計法 (DP)。由模擬研究得知，當均數 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的分配 G 符合伽碼分配的型式，利用 PEB 估計的 \hat{G} 當先驗分配估計 λ_i 有很好的效果。然而當真正 G 的型式為少數幾個值的離散分配，NPML 的 λ_i 估計效果顯著優於 PEB。而採用 DP 估計 λ_i 的好處是，不論 G 為何種型態，其效果總是介於 NPML 及 PEB 之間，並趨向其中較好的估計法。

本文第二節，介紹使用 Dirichlet 過程當成 G 先驗分配的觀念，討論在固定 Dirichlet 過程參數 (α_0, G_0) 之下，結合觀察值 Y_1, \dots, Y_n ，估計卜瓦松均數的理論和演算法；第三節進一步討論 Dirichlet 過程參數 (α_0, G_0) 所代表的意義以及對估計的影響，並給此二參數先驗分配，改進第二節的演算法；第四節介紹三個以往估計卜瓦松均數的方法：(1) Robbins，(2) NPML，(3) PEB；第五節將 DP 估計法和第四節提到的三種方法作模擬比較並對 Archibald (1948) 提供的海石花 (*Armeria maritima*) 樣區資料作分配估計；第六節做結論。

以下將本文所使用的特殊符號作一說明， $\lambda \sim G$ 代表 λ 服從 G 的分配，即 G 為 λ 的分配函數 (distribution function)， $dG(\lambda) = g(\lambda)$ 表示 G 的密度函數 (density function)；粗體 $\boldsymbol{\lambda}$ 及 \mathbf{Y} 分別表示向量 $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ 和 (Y_1, \dots, Y_n) ， $\boldsymbol{\lambda}^{-i}$ 則表示將 $\boldsymbol{\lambda}$ 的第 i 個元素移除。

2 Dirichlet 過程

Dirichlet 過程 (Dirichlet Process) 是一個在 (機率) 分配函數空間上的分配，若我們將分配函數空間上的任一種分配視為一個「值」，針對所有「值」給定的離散分配，便稱為「Dirichlet 過程」，因此分配由 Ferguson (1973) 首先提出，又名 Ferguson

分配。

$G \sim DP(\alpha_0, G_0)$ 表示 G 服從參數為 α_0 和 G_0 的 Dirichlet Process 分配，可視為分配空間中各種分配的混和型，且混和的方式由一個測度來決定，其中， G_0 表示 G 最接近的分配型式； α_0 表示我們相信分配 G 就是 G_0 的程度。 G_0 和 α_0 的概念和期望值、變異數，有異曲同工之妙，想像在一個箱子裡，有著各式各樣不公正的骰子，每一種骰子視為一種分配。某些種多、某些種少，而 Dirichlet Process 就是在各類骰子上的個數分配， G_0 指最具代表性的骰子，而 α_0 所有骰子和代表骰子的差異度。

在實際估計 λ_i 時，我們利用 Blackwell 和 MacQueen (1973) 提出的 Polya urn 結構抽樣方法來表示服從 Dirichlet 過程 G 的機率函數。若 $G \sim DP(\alpha_0, G_0)$ ，在 (α_0, G_0) 給定之下（ G_0 為一可抽樣的分配），Polya urn 從 G 抽出樣本 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的方法為

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\sim G_0, \\ \lambda_2 \mid \lambda_1 &\begin{cases} \sim G_0, & \text{機率為 } \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + 1}, \\ \lambda_1, & \text{機率為 } \frac{1}{\alpha_0 + 1}, \end{cases} \\ &\vdots \\ \lambda_n \mid \lambda_1, \dots, \lambda_{n-1} &\begin{cases} \sim G_0, & \text{機率為 } \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n - 1}, \\ \lambda_j, & \text{機率為 } \frac{1}{\alpha_0 + n - 1}, \quad j = 1, \dots, n - 1. \end{cases} \end{aligned}$$

我們將 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 想成 n 位客人參加餐宴，依續就坐餐桌的情形，且某 i 位客人坐定後，我們將 λ_i 的值想成等同於此餐桌之桌號。第 1 位客人任意挑選一餐桌就坐 ($\lambda_1 \sim G_0$)；第 2 位客人可選擇另一新的桌子入座 ($\lambda_2 \sim G_0$) 或和第 1 位客人坐同桌 ($\lambda_2 = \lambda_1$)，其機率分別為 $\alpha_0/(\alpha_0 + 1)$ 及 $1/(\alpha_0 + 1)$ ；以此類推，第 n 位客人有機率 $\alpha_0/(\alpha_0 + n - 1)$ 選擇坐新桌 ($\lambda_n \sim G_0$)，有機率 $1/(\alpha_0 + n - 1)$ 和前面的某一位客人做同一桌 ($\lambda_n = \lambda_j, j = 1, \dots, n - 1$)。將同一桌的人視為同一群，直到 n 位客人都入座後，可將這 n 位客人 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 分成 k 群 ($k \leq n$)，每一群的 λ 值都相同。

在此抽樣結構下， $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的聯合機率函數便可寫成

$$dF[\lambda_1, \dots, \lambda_n | (\alpha_0, G_0)] = \prod_{i=1}^n \frac{\alpha_0 \cdot dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta(\lambda_i, \lambda_j)}{\alpha_0 + i - 1}, \quad (2.1)$$

其中，當 $\lambda_i = \lambda_j$ ， $\delta(\lambda_i, \lambda_j) = 1$ ；當 $\lambda_i \neq \lambda_j$ ， $\delta(\lambda_i, \lambda_j) = 0$ 。

根據 Blackwell 和 MacQueen (1973) 的證明，(2.1) 式即為 $G \sim DP(\alpha_0, G_0)$ 之下， $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的聯合先驗分配。

Antoniak (1974) 證明若我們使用 Dirichlet 過程當成 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的先驗分配 ($G \sim DP(\alpha_0, G_0)$)，則其後驗分配為混合 Dirichlet 過程的型式。根據 Polya urn 的結構， $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的後驗分配可表示成

$$dF[\lambda_1, \dots, \lambda_n | \mathbf{Y}, (\alpha_0, G_0)] \propto \prod_{i=1}^n l(\lambda_i | Y_i) \frac{\alpha_0 \cdot dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta(\lambda_i, \lambda_j)}{\alpha_0 + i - 1}, \quad (2.2)$$

其中 $l(\lambda_i | Y_i)$ 為 λ_i 的概似函數。

若我們想利用 (2.2) 式估計某一個 λ_i ，必須對其餘 λ (即 λ^{-i}) 積分，以得到 λ_i 的後驗分配。然而在這 n 個混合分配相乘的型式下，積分是相當困難的。為了使估計的工作能繼續進行，Escobar (1988) 證明了另一型式的條件分配

$$dF[\lambda_i | \lambda^{-i}, \mathbf{Y}, (\alpha_0, G_0)] \propto l(\lambda_i | Y_i) \alpha_0 dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1, j \neq i}^n l(\lambda_j | Y_i) \delta(\lambda_i, \lambda_j), \quad (2.3)$$

如此，在給定 \mathbf{Y} 和 λ^{-i} 下， λ_i 條件分配不像 (2.2) 相乘的複雜型式，取而代之的是 1 個連續分配及 $n - 1$ 個退化點分配的混合型。為了抽樣方便，我們將 (2.3) 改寫成以下的型式：

$$\lambda_i | \lambda^{-i}, \mathbf{Y} \begin{cases} \sim h(\lambda_i | Y_i), & \text{機率正比於 } \alpha_0 \cdot m(Y_i), \\ = \lambda_j, & \text{機率正比於 } l(\lambda_j | Y_i), \quad j \neq i, \end{cases} \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.4)$$

其中， $h(\lambda_i | Y_i) \propto l(\lambda_i | Y_i) dG_0(\lambda_i)$ ，為 G_0 當先驗分配時 λ_i 的後驗分配； $m(Y_i) = \int h(\lambda_i | Y_i) d\lambda_i$ ，為 $h(\lambda_i | Y_i)$ 的標準化常數。此外，提醒讀者，(2.4) 式中 λ_i 的條件分配僅和 \mathbf{Y} 中的 Y_i 有關，分配 $\lambda_i | \lambda^{-i}, \mathbf{Y}$ 又可寫成 $\lambda_i | \lambda^{-i}, Y_i$ 。

有了分配(2.4)，給定其餘 λ^{-i} 之下 λ_i 的後驗條件分配，我們利用吉氏取樣(Gibbs sampler)的過程，幫助我們間接的得到後驗邊際分配 $\lambda_i|\mathbf{Y}$ 。

吉氏取樣是一種利用條件分配間接得到邊際分配的方法，它可避免掉算邊際分配時所遇到的複雜積分問題。以三個變數 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 的後驗分配為例，假定條件分配 $f(\theta_1 | \theta_2, \theta_3, \mathbf{Y})$ 、 $f(\theta_2 | \theta_1, \theta_3, \mathbf{Y})$ 和 $f(\theta_3 | \theta_1, \theta_2, \mathbf{Y})$ 為已知可抽樣的分配， $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, Y_3)$ 為已知觀察值，吉氏取樣交替地從這三個分配抽樣，形成一個由隨機變數所組成的「吉氏數列(Gibbs sequence)」，

$$\theta_2^{(0)}, \theta_3^{(0)}, \theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \theta_3^{(1)}, \theta_1^{(2)}, \theta_2^{(2)}, \theta_3^{(2)}, \dots, \theta_1^{(m)}, \theta_2^{(m)}, \theta_3^{(m)},$$

其中除了 $\theta_2^{(0)}, \theta_3^{(0)}$ 是隨意給定的初始值外，其餘皆以下列規則產生

$$\begin{aligned}\theta_1^{(j+1)} &\sim f(\theta_1 | \theta_2^{(j)}, \theta_3^{(j)}, \mathbf{Y}), \\ \theta_2^{(j+1)} &\sim f(\theta_2 | \theta_3^{(j)}, \theta_1^{(j+1)}, \mathbf{Y}), \\ \theta_3^{(j+1)} &\sim f(\theta_3 | \theta_1^{(j+1)}, \theta_2^{(j+1)}, \mathbf{Y}).\end{aligned}$$

Geman and Geman (1984) 指出，在適當的條件下，當 $m \rightarrow \infty$ ， $\theta_1^{(m)}$ 的分配會收斂到 θ_1 真正的後驗邊際分配 $f(\theta_1 | \mathbf{Y})$ 。也就是說在 m 夠大的情況下，吉氏取樣法可以生成一個服從 $f(\theta_1 | \mathbf{Y})$ 分配的樣本 $\theta_1^{(m)}$ ，當然，我們也同時得到服從 $f(\theta_2 | \mathbf{Y})$ 和 $f(\theta_3 | \mathbf{Y})$ 分配的樣本 $\theta_2^{(m)}$ 及 $\theta_3^{(m)}$ 。

重複吉氏取樣 L 次後，可以得到 L 組的 $(\theta_1^{(m)}, \theta_2^{(m)}, \theta_3^{(m)})$ ，記為 $\boldsymbol{\theta}_{(l)} = (\theta_{1(l)}, \theta_{2(l)}, \theta_{3(l)})$ ， $l = 1, \dots, L$ 。Gelfand和Smith (1990)進一步利用這 L 組 $\boldsymbol{\theta}_{(l)}$ 和已知的後驗條件分配，來估計 θ_1 的後驗邊際分配 $f(\theta_1 | \mathbf{Y})$ ，他們稱此法為Rao-Blackwellization，即

$$\hat{f}(\theta_1 | \mathbf{Y}) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L f(\theta_1 | \theta_{2(l)}, \theta_{3(l)}, \mathbf{Y}),$$

以相同的方式，我們也可以估算出 $\hat{f}(\theta_2 | \mathbf{Y})$ 和 $\hat{f}(\theta_3 | \mathbf{Y})$ 。

瞭解了吉氏取樣法後，以下把利用後驗條件分配(2.4)估計 λ_i 後驗邊際分配的步驟，做一整理。

步驟1. 設定初始值 $\boldsymbol{\lambda}^{(0)} = (\lambda_1^{(0)}, \dots, \lambda_n^{(0)})$ 為 (Y_1, \dots, Y_n) 。

步驟2. 將初始值帶入 (2.4) 式的條件期望值取樣。

從分配 $\lambda_1 \mid \lambda_2 = \lambda_2^{(0)}, \lambda_3 = \lambda_3^{(0)}, \dots, \lambda_n = \lambda_n^{(0)}, \mathbf{Y}$ 抽取 $\lambda_1^{(1)}$,

從分配 $\lambda_2 \mid \lambda_1 = \lambda_1^{(1)}, \lambda_3 = \lambda_3^{(0)}, \dots, \lambda_n = \lambda_n^{(0)}, \mathbf{Y}$ 抽取 $\lambda_2^{(1)}$,

從分配 $\lambda_3 \mid \lambda_1 = \lambda_1^{(1)}, \lambda_2 = \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_n = \lambda_n^{(0)}, \mathbf{Y}$ 抽取 $\lambda_3^{(1)}$,

⋮

從分配 $\lambda_n \mid \lambda_1 = \lambda_1^{(1)}, \lambda_2 = \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_{n-1} = \lambda_{n-1}^{(1)}, \mathbf{Y}$ 抽取 $\lambda_n^{(1)}$ 。

經過了這 n 步抽樣，我們稱完成一次疊代，得到 $\boldsymbol{\lambda}^{(1)} = (\lambda_1^{(1)}, \dots, \lambda_n^{(1)})$ ，再將其入 (2.4) 式取樣，可得 $\boldsymbol{\lambda}^{(2)} = (\lambda_1^{(2)}, \dots, \lambda_n^{(2)})$ 。一直重複此疊代動作 m 次後，我們得到 $\boldsymbol{\lambda}^{(m)} = (\lambda_1^{(m)}, \dots, \lambda_n^{(m)})$ 。

步驟3. 步驟2重複 L 次，我們得到 L 組 $\boldsymbol{\lambda}^{(m)} = (\lambda_1^{(m)}, \dots, \lambda_n^{(m)})$ ，記為

$$\boldsymbol{\lambda}^{(l)} = (\lambda_{1(l)}, \dots, \lambda_{n(l)}), \quad l = 1, \dots, L.$$

於是 λ_i 的後驗分配估計如下：

$$\hat{f}(\lambda_i \mid \mathbf{Y}) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L f(\lambda_i \mid \boldsymbol{\lambda}_{(l)}^{-i}, \mathbf{Y}), \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.5)$$

因為 (2.4) 式的 λ_i 後驗條件分配僅和 \mathbf{Y} 中的 Y_i 有關，我們可將 (2.5) 式改寫成

$$\hat{f}(\lambda_i \mid Y_i) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L f(\lambda_i \mid \boldsymbol{\lambda}_{(l)}^{-i}, Y_i), \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.6)$$

在貝氏損失函數 $L(\hat{\lambda}_i, \lambda_i) = (\hat{\lambda}_i - \lambda_i)^2$ 之下，貝氏估計量為後驗分配的期望值，因此分配 (2.6) 的期望值，為使用 Dirichlet 過程當先驗分配， λ_i 的估計量，即

$$\hat{\lambda}_i = \hat{E}[\lambda_i \mid Y_i] = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L E[\lambda_i \mid \boldsymbol{\lambda}_{(l)}^{-i}, Y_i], \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.7)$$

其中， $E[\lambda_{i(l)} \mid \boldsymbol{\lambda}_{(l)}^{-i}, Y_i]$ 為條件分配 (2.4) 的期望值。