

國立政治大學應用數學系

碩士學位論文

Semi-parametric Bayesian analysis
on von Mises-Fisher distribution
data

von Mises-Fisher 分配資料的半母數貝
氏分析法

碩士班學生：林其緯 撰

指導教授：姜志銘 博士

中華民國九十九年六月二十二日

目錄

Abstract	1
摘要	2
1 簡介	3
2 von Mises-Fisher 分配	4
3 Dirichlet 過程	5
4 vMF_3 分配使用 Dirichlet 過程	7
5 模擬樣本之估計和預測	11
6 兩組樣本之檢定	14
7 模擬樣本之檢定	16
8 結論	18
參考書目	20
A 附錄	22

Abstract

The information collected from many fields of science is a directional data on the unit sphere. The most important and most commonly used in the distributions of the directional data on the unit sphere is von Mises-Fisher distribution. Many scholars and experts have analyzed the data with three-dimensional von Mises-Fisher distribution in the past, and Nunez-AntonioGutierrez-Pena (2005) have used a full Bayesian method to analyze three-dimensional von Mises-Fisher distribution data. This thesis gives the first attempt in using semi-parametric Bayesian method to analyze the data of three-dimensional von Mises-Fisher distribution. Besides providing the parameter estimation and giving the prediction probability density function of the future data, this thesis also tests whether the mean directions of the sample sets, which are from three-dimensional von Mises-Fisher distributions, are the same. We also provide suggestions on how to give the prior distribution and its parameter values.

摘要

在許多科學領域裡所蒐集到的資料是具有方向性且落在單位球上，而在具有方向性且在單位球上的資料分配中，最重要也是最常使用的分配是3維的 von Mises-Fisher 分配。在過去有許多學者專家曾分析過具有3維 von Mises-Fisher 分配的資料，其中 Nunez-Antonio 和 Gutierrez-Pena (2005) 也曾利用全貝氏法來分析此種資料。本文首次嘗試利用半母數貝氏法來分析具有3維 von Mises-Fisher 分配的資料。除了介紹如何估計參數以及預測未來資料的機率密度函數外，本文也將檢定兩組分別服從不同3維 von Mises-Fisher 分配的資料其平均方向是否相同，並且提供選取先驗分配與其參數之建議。



1 簡介

分析有方向性且在單位球面上的資料在許多科學上是很需要的，例如在氣象學中所觀察到風的方向資料；或在天體物理學中宇宙射線所到達地球的方向資料；或在古地磁學中岩石所剩餘磁力的方向資料等等，都需要我們對此具有方向性且在單位球面上的資料作分析。而在這種具有方向性且在單位球面上的資料有很多種分配，其中最重要也最常被使用的分配就是 von Mises-Fisher 分配在三維的情形，也被稱作是球面上的常態分配。過去有許多的學者專家曾分析過具有 von Mises-Fisher 分配在三維的資料，例如 Fisher et al. (1987)，Mardia (1972)，Mardia 和 Jupp (2000) 以及 Jammalamadaka 和 SenGupta (2001)；也有學者利用貝氏統計的概念來分析具有 von Mises-Fisher 分配在三維的資料，Nunez-Antonio 和 Gutierrez-Pena (2005) 就是利用全貝氏法來分析，在全貝氏法的分析過程中參數先驗分配的選擇有很大的限制，但是還尚未有學者利用半母數貝氏法來分析具有 von Mises-Fisher 分配在三維的資料，因此本論文將利用半母數貝氏法來分析具有 von Mises-Fisher 分配在三維的資料，即是給參數的先驗分配來自一個 Dirichlet 過程。

本論文在第二節先介紹 von Mises-Fisher 分配的基本性質，在下一節介紹半母數貝氏法的關鍵，亦即 Dirichlet 過程及其應用，在第四節我們將推導如何把具有 von Mises-Fisher 分配在 3 維下的資料使用半母數貝氏法來做估計，並且利用這些資料來做預測；接著在第五節一組模擬的資料來示範如何做參數估計以及資料預測，也另外分析一筆紅床岩層(2 億 4 千 5 百萬年前-5 億 4 千 5 百萬年前)剩餘磁力方向的抽樣資料，第六節將介紹如何檢定兩組具有 von Mises-Fisher 分配在 3 維下的資料平均方向是否相同，在第七節我們將模擬得到的資料來檢定它們的平均方向是否相同，在最後第八節給一些結論。

2 von Mises-Fisher 分配

在多維度具有方向性的單峰對稱分配中 von Mises-Fisher 分配是個重要且基本的分配，我們說一個隨機單位向量具有 von Mises-Fisher 分配 $vMF_p(\lambda, \kappa)$ ，如果它的機率密度函數為

$$vMF_p(Y; \lambda, \kappa) = \left(\frac{\kappa}{2}\right)^{\left(\frac{p}{2}-1\right)} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{2}\right)I_{\left(\frac{p}{2}-1\right)}(\kappa)} \exp\{\kappa\lambda^T Y\}$$

其中 $\|Y\| = 1$ 且 $\Gamma(\cdot)$ 為 Gamma 函數， I_ρ 為第一種 ρ 階 (first kind and order ρ) 的 modified Bessel 函數，定義如下

$$I_\rho(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos\rho\mu e^{\kappa\cos\mu} d\mu$$

另外 $\|\lambda\| = 1$ 且 λ 是該分配的平均方向， $\kappa \geq 0$ 為該分配的集中參數。

在 3 維即 $p = 3$ 特別的情形下，von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\lambda, \kappa)$ 就是我們常用的在球表面上的分配，其機率密度函數為

$$vMF_3(Y; \lambda, \kappa) = \frac{\kappa}{2\sinh\kappa} \exp\{\kappa\lambda^T Y\}$$

如果我們把 Y 和 λ 轉換成球座標系統可以表示成

$$Y = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \quad \lambda = (\sin\alpha\cos\beta, \sin\alpha\sin\beta, \cos\alpha)$$

此時 (θ, ϕ) 的機率密度函數為

$$vMF_3((\theta, \phi); (\alpha, \beta), \kappa) = \frac{\kappa\sin\theta}{4\pi\sinh\kappa} \exp\{\kappa[\cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\alpha\cos(\phi-\beta)]\}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

假設 Y_1, Y_2, \dots, Y_n 獨立且服從 $vMF_3(\lambda, \kappa)$ 分配且 $Y_i = (Y_{i1}, Y_{i2}, Y_{i3})$ ，則 λ 的 MLE 為

$$\hat{\lambda} = \left(\frac{\sum_{i=1}^n Y_{i1}}{R}, \frac{\sum_{i=1}^n Y_{i2}}{R}, \frac{\sum_{i=1}^n Y_{i3}}{R} \right)$$

其中 $R^2 = (\sum_{i=1}^n Y_{i1})^2 + (\sum_{i=1}^n Y_{i2})^2 + (\sum_{i=1}^n Y_{i3})^2$ ；另外集中度 κ 的 MLE 為 $\coth(\kappa) - 1/\kappa = R/n$ 之解，可利用查表 (Fisher et al. (1987); Appendix A10) 得到，此 MLE 的解會接近 $1/(1 - R/n)$ ，其中 R/n 為樣本平均向量的長度。

3 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-Dirichlet 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 表示和 G 最接近的分配型式，則 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 是所有骰子和代表骰子的差異度。

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 (其中 α_0 為一值， G_0 為一分配)，Polya urn 從 G 抽出樣本 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的方法為

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\sim G_0, \\ \lambda_2 \mid \lambda_1 &\begin{cases} \sim G_0, & \text{機率為 } \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + 1}, \\ \lambda_1, & \text{機率為 } \frac{1}{\alpha_0 + 1}, \end{cases} \\ &\vdots \\ \lambda_n \mid \lambda_1, \dots, \lambda_{n-1} &\begin{cases} \sim G_0, & \text{機率為 } \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n - 1}, \\ \lambda_j, & \text{機率為 } \frac{1}{\alpha_0 + n - 1}, \quad j = 1, \dots, n - 1. \end{cases} \end{aligned} \tag{3.1}$$

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，令 $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ 的聯合機率函數便可寫成

$$dF[(\lambda_1, \dots, \lambda_n | (\alpha_0, G_0))] = \prod_{i=1}^n \frac{\alpha_0 \cdot dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta(\lambda_i, \lambda_j)}{\alpha_0 + i - 1}, \quad (3.2)$$

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，(3.1) 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) 證明若樣本 $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ 中每個 Y_i 在給定參數 λ_i 下皆獨立且分配相同，那我們使用 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，在給定樣本 \mathbf{Y} ，對應之參數 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的後驗分配可表示成

$$dF[\lambda_1, \dots, \lambda_n | \mathbf{Y}, (\alpha_0, G_0)] \propto \prod_{i=1}^n l(\lambda_i | Y_i) \frac{\alpha_0 \cdot dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta(\lambda_i, \lambda_j)}{\alpha_0 + i - 1}, \quad (3.3)$$

其中 $l(\lambda_i | Y_i)$ 為 λ_i 的概似函數。

若我們想利用 (3.3) 式估計某一個 λ_i ，必須對其餘 λ 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 (1994) 證明了另一型式的條件分配

$$dF[\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \mathbf{Y}, (\alpha_0, G_0)] \propto l(\lambda_i | Y_i) \alpha_0 dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1, j \neq i}^n l(\lambda_j | Y_i) \delta(\lambda_i, \lambda_j), \quad (3.4)$$

其中 $\boldsymbol{\lambda}_{-i} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{i-1}, \lambda_{i+1}, \dots, \lambda_n)$ 。如此，在給定 \mathbf{Y} 和 $\boldsymbol{\lambda}_{-i}$ 下， λ_i 條件分配不像 (3.3) 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 (3.4) 改寫成以下的型式：

$$\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \mathbf{Y} \begin{cases} \sim h(\lambda_i | Y_i), & \text{機率正比於 } \alpha_0 \cdot m(Y_i), \\ = \lambda_j, & \text{機率正比於 } l(\lambda_j | Y_i), \quad j \neq i, \end{cases} \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.5)$$

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； $m(Y_i) = \int l(\lambda_i|Y_i)dG_0(\lambda_i)d\lambda_i$ 為 $h(\lambda_i|Y_i)$ 的標準化常數。此外，提醒讀者，(3.5) 式中 λ_i 的條件分配僅和 \mathbf{Y} 中的 Y_i 有關，分配 $\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \mathbf{Y}$ 又可寫成 $\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, Y_i$ 。

4 vMF_3 分配使用 Dirichlet 過程

本文重點是使用 Dirichlet 過程當先驗分配來分析探討具有 von Mises-Fisher 分配在 $p = 3$ 下之樣本，模型如下：

$$\begin{aligned} Y_i | \lambda_i, \kappa &\sim vMF_3(\lambda_i, \kappa), & i = 1, \dots, n, \\ \lambda_i &\sim G, & i = 1, \dots, n, \\ G &\sim DP(\alpha_0 G_0), \\ G_0 &= vMF_3(\xi, \nu), \end{aligned} \quad (4.1)$$

其中 Y_1, \dots, Y_n 是觀察值，在給定 λ_i 和 κ 下的 Y_i 彼此互相獨立，且 $Y_i | \lambda_i, \kappa$ 服從 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\lambda_i, \kappa)$ ， κ 是已知， λ_i 彼此亦獨立地服從 G ，而 G 是一個 Dirichlet 過程，其中 G_0 也是一個 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\xi, \nu)$ 。

上述模型在給定樣本 $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ ，對應之參數 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 的後驗分配可表示成

$$dF[\lambda_1, \dots, \lambda_n | \mathbf{Y}, \kappa, (\alpha_0, G_0)] \propto \prod_{i=1}^n vMF(\lambda_i | Y_i, \kappa) \frac{\alpha_0 \cdot dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \delta(\lambda_i, \lambda_j)}{\alpha_0 + i - 1}, \quad (4.2)$$

透過 (3.4) 可以得到

$$dF[\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \mathbf{Y}, \kappa, (\alpha_0, G_0)] \propto vMF_3(\lambda_i | Y_i, \kappa) \alpha_0 dG_0(\lambda_i) + \sum_{j=1, j \neq i}^n vMF_3(\lambda_j | Y_j, \kappa) \delta(\lambda_i, \lambda_j), \quad (4.3)$$

再將(4.3)改寫成

$$\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \kappa, \mathbf{Y} \begin{cases} \sim h(\lambda_i | \kappa, Y_i), & \text{機率正比於 } \alpha_0 \cdot m(Y_i), \\ = \lambda_j, & \text{機率正比於 } vMF_3(Y_i, |\lambda_j, \kappa), \quad j \neq i, \end{cases} \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.4)$$

其中 $h(\lambda_i | \kappa, Y_i) \propto vMF(Y_i | \lambda_i, \kappa) dG_0(\lambda_i)$ 為 G_0 當先驗分配時 λ_i 的後驗分配，而(4.4)中的 $m(Y_i) = \int vMF(Y_i | \lambda_i, \kappa) dG_0(\lambda_i)$ 為 $h(\lambda_i | \kappa, Y_i)$ 的標準化常數，由於 G_0 為 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\xi, \nu)$ ，且 $Y_i = (\sin\theta_i \cos\phi_i, \sin\theta_i \sin\phi_i, \cos\theta_i)$ ，

$\lambda_i = (\sin\alpha_i \cos\beta_i, \sin\alpha_i \sin\beta_i, \cos\alpha_i)$ 和 $\xi = (\sin a \cos b, \sin a \sin b, \cos a)$ ，

$$\begin{aligned} h(\lambda_i | \kappa, Y_i) &\propto vMF_3((\theta_i, \phi_i) | \lambda_i, \kappa) \cdot vMF_3((\alpha_i, \beta_i) | \xi, \nu) \\ &= \frac{\kappa \sin\theta_i}{4\pi \sinh\kappa} \exp\{\kappa[\cos\theta_i \cos\alpha_i + \sin\theta_i \sin\alpha_i \cos(\phi_i - \beta_i)]\} \cdot \\ &\quad \frac{\nu \sin\alpha_i}{4\pi \sinh\nu} \exp\{\nu[\cos\alpha_i \cos a + \sin\alpha_i \sin a \cos(\beta_i - b)]\} \\ &\propto \sin\alpha_i \exp\{\nu^*[\cos\alpha_i \cos a^* + \sin\alpha_i \sin a^* \cos(\beta_i - b^*)]\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

所以後驗分配 $h(\lambda_i | \kappa, Y_i)$ 也是一個 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\xi^*, \nu^*)$ ，其中 $\xi^* = (\sin a^* \cos b^*, \sin a^* \sin b^*, \cos b^*)$ 和 ν^* 從(4.5)式利用餘弦的和角公式可得

$$\begin{aligned} &\exp\{\kappa[\cos\theta_i \cos\alpha_i + \sin\theta_i \sin\alpha_i \cos(\phi_i - \beta_i)]\} \cdot \\ &\exp\{\nu[\cos\alpha_i \cos a + \sin\alpha_i \sin a \cos(\beta_i - b)]\} \\ &= \exp\{\cos\alpha_i(\kappa \cos\theta_i + \nu \cos a) + \sin\alpha_i[\kappa \sin\theta_i \cos(\phi_i - \beta_i) + \nu \sin a \cos(\beta_i - b)]\} \\ &= \exp\{\cos\alpha_i(\kappa \cos\theta_i + \nu \cos a) + \sin\alpha_i[\kappa \sin\theta_i \cos\phi_i \cos\beta_i + \kappa \sin\theta_i \sin\phi_i \sin\beta_i + \\ &\quad \nu \sin a \cos\beta_i \cos b + \nu \sin a \sin\beta_i \sin b]\} \\ &= \exp\{\cos\alpha_i(\kappa \cos\theta_i + \nu \cos a) + \sin\alpha_i \cos\beta_i(\kappa \sin\theta_i \cos\phi_i + \nu \sin a \cos b) + \\ &\quad \sin\alpha_i \sin\beta_i(\kappa \sin\theta_i \sin\phi_i + \nu \sin a \sin b)\} \\ &= \exp\{\nu^* \cos\alpha_i \cos a^* + \nu^* \sin\alpha_i \sin a^* \cos\beta_i \cos b^* + \nu^* \sin\alpha_i \sin a^* \sin\beta_i \sin b^*\} \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \nu^* \cos a^* &= \kappa \cos\theta_i + \nu \cos a \\ \nu^* \sin a^* \sin b^* &= \kappa \sin\theta_i \sin\phi_i + \nu \sin a \sin b \\ \nu^* \sin a^* \cos b^* &= \kappa \sin\theta_i \cos\phi_i + \nu \sin a \cos b \end{aligned} \quad (4.6)$$

從(4.6)將三個方程式平方相加可以得到

$$\begin{aligned}
 \nu^* &= \{\kappa^2 + \nu^2 + 2\kappa\nu[\cos\theta_i \cos a + \sin\theta_i \sin a \cos(\phi_i - b)]\}^{1/2} \\
 a^* &= \cos^{-1}\left(\frac{\kappa}{\nu^*} \cos\theta_i + \frac{\nu}{\nu^*} \cos a\right) \\
 b^* &= \sin^{-1}\left(\frac{\kappa}{\nu^*} \sin\theta_i \sin\phi_i + \frac{\nu}{\nu^*} \sin a \sin b\right) \\
 &= \cos^{-1}\left(\frac{\kappa}{\nu^*} \sin\theta_i \cos\phi_i + \frac{\nu}{\nu^*} \sin a \cos b\right)
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

有了分配(4.4)，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，它可避免掉直接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 $\theta_3^{(m)}$ 。

但在上述的模擬過程中會遇到一個難題，也就是要如何從 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\lambda, \kappa)$ 中取樣呢？我們把一個具有 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\lambda, \kappa)$ 的三維單位向

量 Y 做 tangent-normal 分解，

$$Y = t \cdot \lambda + (1 - t^2)^{\frac{1}{2}} \cdot \tau$$

其中 τ 是落在 Y 和 λ 所形成平面上的單位向量且與 λ 垂直的隨機變數，另外 t 也是一個介於 -1 與 1 之間的隨機變數，亦即 $t \cdot \lambda$ 為 Y 在 λ 上的投影，且 $(1 - t^2)^{\frac{1}{2}} \cdot \tau$ 為 $t \cdot \lambda$ 到 Y 的向量。此外 t 不隨單位向量 τ 的變動而改變，所以 τ 和 t 是獨立的，同時在 Mardia and Jupp (2000) 中證得在 $p = 3$ 的情形下 τ 是在圓周上的均勻分配， t 的分配正比於 $e^{\kappa t}$ ，所以我們可藉由隨機抽樣出 t 和 τ 來得到 Y 。

此外利用上述理論和計算，我們可以推導出在給定 $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ 之下， Y_{n+1} 的預測機率密度函數

$$f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \kappa) = \int f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\lambda}, \kappa) p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa) d\boldsymbol{\lambda} \quad (4.8)$$

其中 $p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa)$ 是給定觀察植 \mathbf{Y} 和 κ 之下 $\boldsymbol{\lambda}$ 的後驗聯合分配。

當 G_0 為 von Mises-Fisher 分配 $vMF_3(\xi, \nu)$ ， $\xi = (\sin a \cos b, \sin a \sin b, \cos a)$ ，且 $Y_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)$ 和 $\lambda_i = (\sin \alpha_i \cos \beta_i, \sin \alpha_i \sin \beta_i, \cos \alpha_i)$ 則

$$\begin{aligned} & f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\lambda}, \kappa) \\ &= \int f(Y_{n+1}|\lambda_{n+1}, \mathbf{Y}, \boldsymbol{\lambda}, \kappa) dp(\lambda_{n+1}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\lambda}, \kappa) \\ &= \int f(Y_{n+1}|\lambda_{n+1}, \kappa) dp(\lambda_{n+1}|\boldsymbol{\lambda}) \\ &= \int \frac{\kappa \sin \theta_{n+1}}{4\pi \sinh \kappa} \exp\{\kappa[\cos \theta_{n+1} \cos \alpha_{n+1} + \sin \theta_{n+1} \sin \alpha_{n+1} \cos(\phi_{n+1} - \beta_{n+1})]\} \\ & \quad \cdot \left\{ \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n} dG_0(\lambda_{n+1}) + \frac{1}{\alpha_0 + n} \sum_{j=1}^n \delta(d\lambda_{n+1}, \lambda_j) \right\} \\ &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n} \int \frac{\kappa \sin \theta_{n+1}}{4\pi \sinh \kappa} \exp\{\kappa[\cos \theta_{n+1} \cos \alpha_{n+1} + \sin \theta_{n+1} \sin \alpha_{n+1} \cos(\phi_{n+1} - \beta_{n+1})]\} \\ & \quad \cdot \frac{\nu \sin \alpha_{n+1}}{4\pi \sinh \nu} \exp\{\nu[\cos \alpha_{n+1} \cos a + \sin \alpha_{n+1} \sin a \cos(\beta_{n+1} - b)]\} d\alpha_{n+1} d\beta_{n+1} \\ & \quad + \frac{1}{\alpha_0 + n} \sum_{j=1}^n \frac{\kappa \sin \theta_{n+1}}{4\pi \sinh \kappa} \exp\{\kappa[\cos \theta_{n+1} \cos \alpha_j + \sin \theta_{n+1} \sin \alpha_j \cos(\phi_{n+1} - \beta_j)]\} \\ &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n} \frac{\kappa \sin \theta_{n+1}}{4\pi \sinh \kappa} \cdot \frac{\nu}{4\pi \sinh \nu} \cdot \frac{4\pi \sinh \nu'}{\nu'} \\ & \quad + \frac{1}{\alpha_0 + n} \sum_{j=1}^n vMF_3(Y_{n+1}|\lambda_j, \kappa) \\ &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n} \cdot \frac{\nu \kappa \sin \theta_{n+1} \sinh \nu'}{4\pi \nu' \sinh \kappa \sinh \nu} + \frac{1}{\alpha_0 + n} \sum_{j=1}^n vMF_3(Y_{n+1}|\lambda_j, \kappa) \end{aligned} \quad (4.9)$$

其中 $\xi' = (\sin a' \cos b', \sin a' \sin b', \cos b')$ 和 ν' 滿足

$$\begin{aligned}\nu' \cos a' &= \kappa \cos \theta_{n+1} + \nu \cos a \\ \nu' \sin a' \sin b' &= \kappa \sin \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1} + \nu \sin a \sin b \\ \nu' \sin a' \cos b' &= \kappa \sin \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1} + \nu \sin a \cos b\end{aligned}\tag{4.10}$$

上式(4.10)可以模仿(4.6)得到解。將(4.9)代入(4.8)

$$\begin{aligned}f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \kappa) &= \int f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\lambda}, \kappa) p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa) d\boldsymbol{\lambda} \\ &= \int \left\{ \frac{\alpha_0}{\alpha_0+n} \cdot \frac{\nu \kappa \sin \theta_{n+1} \sinh \nu'}{4\pi \nu' \sinh \kappa \sinh \nu} + \frac{1}{\alpha_0+n} \sum_{j=1}^n v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_j, \kappa) \right\} p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa) d\boldsymbol{\lambda} \\ &= \int \left\{ \frac{\alpha_0}{\alpha_0+n} q(Y_{n+1}) + \frac{1}{\alpha_0+n} \sum_{j=1}^n v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_j, \kappa) \right\} p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa) d\boldsymbol{\lambda} \\ &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0+n} q(Y_{n+1}) + \frac{1}{\alpha_0+n} \int \sum_{j=1}^n v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_j, \kappa) p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa) d\boldsymbol{\lambda}\end{aligned}\tag{4.11}$$

其中 $q(Y_{n+1}) = \frac{\nu \kappa \sin \theta_{n+1} \sinh \nu'}{4\pi \nu' \sinh \kappa \sinh \nu}$ 為一 Y_{n+1} 與 $\boldsymbol{\lambda}$ 無關的機率密度函數，由於(4.11)積分不容易計算出 $f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \kappa)$ 的機率密度函數，因此我們將用模擬的方式來模擬抽樣 $f(Y_{n+1}|\mathbf{Y}, \kappa)$ ，方法為先從 $p(\boldsymbol{\lambda}|\mathbf{Y}, \kappa)$ 後驗分配隨機抽樣得到一組 $\boldsymbol{\lambda}^{(1)} = (\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_n^{(1)})$ ，然後有 $\frac{\alpha_0}{\alpha_0+n}$ 的機會從 $q(Y_{n+1})$ 抽樣，有 $\frac{1}{\alpha_0+n}$ 的機會從 $v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_1^{(1)}, \kappa)$ 分配中抽樣，有 $\frac{1}{\alpha_0+n}$ 的機會從 $v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_2^{(1)}, \kappa)$ 分配中抽樣， \dots ，有 $\frac{1}{\alpha_0+n}$ 的機會從 $v M F_3(Y_{n+1}|\lambda_n^{(1)}, \kappa)$ 分配中抽樣，則得到一組 $Y_{n+1}^{(1)}$ ，形成一組序對 $(\boldsymbol{\lambda}^{(1)}, \mathbf{Y}_{n+1}^{(1)})$ ，重複上述流程 N 次得到， $(\boldsymbol{\lambda}^{(1)}, \mathbf{Y}_{n+1}^{(1)})$ ， $(\boldsymbol{\lambda}^{(2)}, \mathbf{Y}_{n+1}^{(2)})$ ， \dots ， $(\boldsymbol{\lambda}^{(N)}, \mathbf{Y}_{n+1}^{(N)})$ ，此時 $\mathbf{Y}_{n+1}^{(1)}$ ， $\mathbf{Y}_{n+1}^{(2)}$ ， \dots ， $\mathbf{Y}_{n+1}^{(N)}$ 即為 $f(\mathbf{Y}_{n+1}|\mathbf{Y}, \kappa)$ 的邊際模擬點，則可以計算我們所要預測函數之統計量。而上述流程中對 $q(Y_{n+1})$ 並不容易模擬抽樣，我們採 Metropolis-Hastings 方法來模擬，可以參考 Press (2003)。

5 模擬樣本之估計和預測

我們透過模擬的方式取得 15 筆資料，而這 15 筆資料中 1 至 5 筆是來自 $v M F_3((0, \sqrt{1/2}, \sqrt{1/2}), 5)$ ，6 至 10 筆是來自 $v M F_3((\sqrt{1/4}, \sqrt{1/4}, \sqrt{1/2}), 5)$ ，11 至 15 筆是來自 $v M F_3((\sqrt{4/5}, 0, \sqrt{1/5}), 5)$ ，如附錄表格 1。

透過模型 (4.1)，將這 15 筆資料視為從不同平均方向 λ_i ，但相同參數 $\kappa (= 5)$ 之 vMF_3 分配取得，因此我們可以估計每個資料相對應之平均方向 $\lambda_i (i = 1, \dots, 15)$ ，並且利用 (4.11) 式，也可以預測第 16 筆資料。利用吉氏取樣的過程來估計 λ_i ，其中 $[\lambda_i | \boldsymbol{\lambda}_{-i}, \mathbf{Y}]$ 每次序列燒入 (burn in) 30 個，再選取下 1 個，並且重複選取 50 次，再將這 50 筆取其平均當做 $\lambda_i | \mathbf{Y}$ 的後驗分配估計值；而在先驗分配 G_0 有 4 種選擇，分別是 $G_0^1 = vMF_3((0.5321, 0.4607, 0.7104), 5)$ ，其平均方向為三個母體分配平均方向之平均； $G_0^2 = vMF_3((0.5634, 0.5596, 0.6077), 5)$ ，其平均方向為資料中各個分量之最大值； $G_0^3 = vMF_3((0.2885, -0.9322, -0.2187), 5)$ ，其平均方向為資料中各個分量之最小值； $G_0^4 = vMF_3((0.6467, 0.3955, 0.6522), 5)$ ，其平均方向為資料的樣本平均值；搭配 4 種 $\alpha_0 = (15^{-1}, 1, 15, 15^2)$ ，則我們利用估計出來的 $\lambda_i (i = 1, \dots, 15)$ 和原本母體的平均方向取歐氏距離 (d_1) 在附錄表格 2。

由附錄表格 2 可以發現在這 16 種組合中，以 G_0^1 搭配 $\alpha_0 = 1$ 所得到的歐氏距離 (d_1) 為最小，而 G_0^3 搭配任何 α_0 所得到的歐氏距離 (d_1) 都顯得比其他組合大得多，所以 G_0^3 似乎不適合來當作先驗分配，是由於從資料中可以判斷每個分量為正的居多，因此在 G_0 的選取上其平均方向也為正的方向在估計上會比較準確。

在 α_0 的選取方面，可利用以下關係

$$P^* = \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + n} \quad \text{或} \quad \alpha_0 = \frac{P^*}{1 - P^*}$$

其中 n 是樣本數， P^* 是我們有多相信 G_0 是在 G 中真正的先驗分配的比例，例如我們有 50% 相信先驗分配為 G_0 ，則建議 $\alpha_0 = n$ 。另外在 Escobar (1994) 建議我們從資料中判斷資料分成幾群，如果資料很可能來自同一種母體則選 $\alpha_0 = 1/n$ ，反之如果資料可能皆來自不同種母體，則選 $\alpha_0 = n^2$ ，如果資料可能來自多於 $2n/3$ 種母體則選 $\alpha_0 = n$ ，若資料可能來自少於 $2n/3$ 種但不只一種母體則選 $\alpha_0 = 1$ ，因此在這筆資料上選擇 $\alpha_0 = 1$ 應該是比較恰當的。

除了估計參數外，我們也有興趣的是預測第 16 筆資料，透過 (4.11) 式，搭配 4 種 G_0 和 4 種 α_0 ，可得到 16 組預測機率密度函數之平均，如何來比較哪一組先驗分配與

α_0 預測比較好？我們分別從三個母體個別模擬出 100 個共 300 個樣本點，讓每一組預測機率密度函數之平均與這 300 個樣本點取歐氏距離 (d_2) 如附錄表格 3。

由附錄表格 3 可以知道在同一 α_0 下由 G_0^1 當先驗分配所得到預測機率密度函數之平均的歐氏距離 (d_2) 為最小，由 G_0^3 當先驗分配所得到預測機率密度函數之平均的歐氏距離 (d_2) 為最大，由於 G_0^3 其平均方向為資料中各分量之最小值，而其方向多為負的，因此背離原始的三個母體平均方向，所以取之來預測效果不佳；在這四種 α_0 下因為我們有很強的信心相信 G_0^1 是在 Dirichlet 過程 G 中真正的先驗分配，所以所有的組合中以 G_0^1 當先驗分配在 $\alpha_0 = 225$ 下所得到的預測機率密度函數平均值的歐氏距離 d_2 為最小。如果在不知道真實母體的情形下，根據上述以及我們的模擬資料來判斷，我們選取 $\alpha_0 = 1$ 是最恰當的，而從附錄表格 3 中發現在 $\alpha_0 = 1$ 中以 G_0^4 為先驗分配所得到的預測機率密度函數平均的歐氏距離 (d_2) 為最小，因此我們建議在實務上做預測時，可以取經驗上類似樣本平均來當作先驗分配的平均方向。

對於預測機率密度函數我們從 (4.11) 式知道預測機率密度函數與 α_0 有很大的關係，如果在 α_0 很大的情形下，則預測機率密度函數會趨近於 $q(Y_{n+1})$ 。附錄圖 1 是以 G_0^1 為先驗分配與不同的 α_0 所得到預測機率密度函數的第一維度分量的估計邊際機率密度函數，其中函數 1 為 $\alpha_0 = 1/15$ ，函數 2 為 $\alpha_0 = 1$ ，函數 3 為 $\alpha_0 = 15$ ，函數 4 為 $\alpha_0 = 225$ ，函數 5 為 $\alpha_0 = 1000$ ，函數 6 為 $q(Y_{n+1})$ 的第一維度分量的邊際機率密度函數圖形，我們可以發現圖形會隨著 α_0 變大而趨近於函數 6。

在本節的最後我們將分析一組資料 (Fisher et al. (1987); Appendix B2) 如附錄表格 4，這是從紅床岩層所測量到的 26 筆剩餘磁力資料，其中 Dec. 和 Inc. 為古地磁學中所使用的座標角度，將這兩個角度轉成度度量為 ($\rho = \frac{180}{\pi}\theta = Inc. + 90^\circ$, $\sigma = \frac{180}{\pi}\phi = 360^\circ - Dec.$)，在 Fisher et al. (1987) 書中使用圖形或是理論的分析判斷，合理的認為這筆資料服從 3 維的 von Mises Fisher 分配，並且使用最大概似估計法 (MLE) 而得到 $(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) = (147.195, 215.805)$ 且 $\hat{\kappa} = 113$ ，其方法為假設這 26 筆資料 Y_1, Y_2, \dots, Y_{26} 皆來自同一 3 維 von Mises Fisher 分配且 $Y_i = (Y_{i1}, Y_{i2}, Y_{i3})$ ，則平均方向

的MLE爲 $(\sum_{i=1}^{26} Y_{i1}/R, \sum_{i=1}^{26} Y_{i2}/R, \sum_{i=1}^{26} Y_{i3}/R)$ ，其中 $R^2 = (\sum_{i=1}^{26} Y_{i1})^2 + (\sum_{i=1}^{26} Y_{i2})^2 + (\sum_{i=1}^{26} Y_{i3})^2$ ，另外集中度 κ 的MLE爲 $\text{coth}(\kappa) - 1/\kappa = R/26$ 之解，可利用查表(Fisher et al. (1987); Appendix A10)得到；Nunez-Antonio和Gutierrez-Pena (2005)也曾利用全貝氏法來分析此筆資料，透過10次的SIR (Sampling-Importance-Resampling)方法得到平均值爲 $(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) = (147.1866, 215.7904)$ 且 $\hat{\kappa} = 112.9713$ ；我們利用(4.1)模型來分析這筆資料，由於需要給定在(4.1)式中的 κ ，在此將最大概似估計法所得到的 $\hat{\kappa} = 113$ 帶入估計 λ_i ，且 G_0 平均方向選取爲樣本平均方向，透過(4.4)式吉氏取樣每次燒入(burn in)30個，再選取下一個，重複選取50次可得到 $\hat{\lambda}_i (i = 1, 2, \dots, 26)$ ，再取其平均得到 $(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) = (146.4864, 234.3856)$ 。上述無論是使用最大概似估計法或是使用全貝氏法都必須假設這26筆資料是來自同一3維的von Mises Fisher分配，而本文所使用的模型假設可允許每一筆資料皆來自不同的3維von Mises Fisher分配，因此如果遇到資料無足夠證據假設均來自同一3維von Mises Fisher分配或是確實來自不同的3維von Mises Fisher分配時，則只能使用本文之方法。

6 兩組樣本之檢定

假設我們有兩組分別來自於兩個 vMF_3 分配的資料，而我們想檢定這兩組資料的原始 vMF_3 分配之平均方向參數是否相同，我們將採半母數貝氏法來分析。令 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 和 $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_m)$ 爲兩組資料，且

$$\begin{aligned} X_i &| \lambda_1, \kappa \sim vMF_3(\lambda_1, \kappa_1), & i = 1, \dots, n, \\ Y_j &| \lambda_2, \kappa \sim vMF_3(\lambda_2, \kappa_2), & j = 1, \dots, m, \\ \lambda_1, \lambda_2 &\sim G, \\ G &\sim DP(\alpha_0 G_0), \\ G_0 &= vMF_3(\xi, \nu) \end{aligned}$$

其中兩個 vMF 分配之參數 κ_1 和 κ_2 已知，且 λ_1 和 λ_2 服從 G ，而 G 是一個Dirichlet過程，其中 $G_0 = vMF_3(\xi, \nu)$ 也是一個von Mises-Fisher分配。

透過轉換成球座標 $\lambda_1 = (\sin\alpha_1\cos\beta_1, \sin\alpha_1\sin\beta_1, \cos\alpha_1)$ 且 $\lambda_2 = (\sin\alpha_2\cos\beta_2, \sin\alpha_2\sin\beta_2, \cos\alpha_2)$ ，所以我們將 λ_1 和 λ_2 簡單表示為 $\lambda_1 = (\alpha_1, \beta_1)$ 和 $\lambda_2 = (\alpha_2, \beta_2)$ 。假設

$$\Omega = \{\omega = (\lambda_1, \lambda_2) : \lambda_1 = (\alpha_1, \beta_1), \lambda_2 = (\alpha_2, \beta_2), 0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq \pi, 0 \leq \beta_1, \beta_2 \leq 2\pi\} \quad ,$$

$$\Omega_0 = \{\omega \in \Omega : \lambda_1 = \lambda_2\} \text{ 且 } \Omega_1 = \{\omega \in \Omega : \lambda_1 \neq \lambda_2\} \quad ,$$

我們要檢定虛無假設 $H_0 : \omega \in \Omega_0$ 對上對立假設 $H_1 : \omega \in \Omega_1$ 。令 $p_i = P(H_i)$ 是 H_i 為真的先驗機率 ($i = 0, 1$)，且 $\omega|H_i \sim g_i(\cdot)$ ，其中 $g_i(\cdot)$ 是當 H_i 為真的情形下 ω 的分配 ($i = 0, 1$)，而 ω 的概似函數 $L(\omega|\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ 為

$$L(\omega|\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \left\{ \prod_{i=1}^n vMF_3(X_i|\lambda_1, \kappa) \right\} \left\{ \prod_{j=1}^m vMF_3(Y_j|\lambda_2, \kappa) \right\}$$

根據 Bayes 定理

$$\begin{aligned} P(H_i|\mathbf{X}, \mathbf{Y}) &= \frac{P(H_i)P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}|H_i)}{\sum_{k=0}^1 P(H_k)P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}|H_k)} \\ &= \frac{P(H_i) \int P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \omega|H_i)d\omega}{\sum_{k=0}^1 P(H_k) \int P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \omega|H_k)d\omega} \\ &= \frac{P(H_i) \int P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}|H_i, \omega)P(\omega|H_i)d\omega}{\sum_{k=0}^1 P(H_k) \int P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}|H_k, \omega)P(\omega|H_k)d\omega} \\ &= \frac{p_i \int L(\omega|\mathbf{X}, \mathbf{Y})g_i(\omega)d\omega}{\sum_{k=0}^1 p_k \int L(\omega|\mathbf{X}, \mathbf{Y})g_k(\omega)d\omega} \end{aligned} \quad (6.1)$$

為虛無假設 ($i = 0$) 和對立假設 ($i = 1$) 的後驗機率。

根據 (6.1) 式，我們發現相當困難去計算其值，因此我們採用模擬的方式來計算後驗機率。我們先從給定資料 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 下 (λ_1, λ_2) 的後驗分配 $[\lambda_1, \lambda_2|\mathbf{X}, \mathbf{Y}]$ 中抽出夠多的 N 個樣本，則

$$P(H_i|\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \frac{1}{N} (\text{在 } N \text{ 個樣本中 } H_i \text{ 所發生的次數}) \quad (6.2)$$

那後驗分配 $[\lambda_1, \lambda_2|\mathbf{X}, \mathbf{Y}]$ 要如何來抽樣呢？根據 (3.1) 式可得

$$\begin{aligned} dG(\lambda_1|\lambda_2) &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0+2-1} dG_0(\lambda_1) + \frac{1}{\alpha_0+2-1} \delta_{\lambda_2}(d\lambda_1) \\ dG(\lambda_2|\lambda_1) &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0+2-1} dG_0(\lambda_2) + \frac{1}{\alpha_0+2-1} \delta_{\lambda_1}(d\lambda_2) \end{aligned} \quad (6.3)$$

再利用(3.4)可得

$$\begin{aligned} dG(\lambda_1|\lambda_2, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) &\propto \alpha_0 \prod_{i=1}^n vMF_3(X_i|\lambda_1, \kappa) dG_0(\lambda_1) + \prod_{i=1}^n vMF_3(X_i|\lambda_2, \kappa) \delta_{\lambda_2}(\lambda_1) \\ dG(\lambda_2|\lambda_1, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) &\propto \alpha_0 \prod_{j=1}^m vMF_3(Y_j|\lambda_2, \kappa) dG_0(\lambda_2) + \prod_{j=1}^m vMF_3(Y_j|\lambda_1, \kappa) \delta_{\lambda_1}(\lambda_2) \end{aligned} \quad (6.4)$$

其中，如果 G_0 選擇 vMF_3 分配，則 $\prod_{i=1}^n vMF_3(X_i|\lambda_1, \kappa) dG_0(\lambda_1)$ 也為一 vMF_3 分配；我們將(6.4)式利用吉氏取樣(Gibbs sampler)的過程就可以幫助我們得到 $[\lambda_1, \lambda_2|\mathbf{X}, \mathbf{Y}]$ 的樣本點。

有了虛無假設和對立假設的後驗機率後，我們使用後驗勝算比POR(posterior odds ratio)來檢定是否接受虛無假設，其中

$$POR = \frac{P(H_0|\mathbf{X}, \mathbf{Y})}{P(H_1|\mathbf{X}, \mathbf{Y})}$$

為在給定資料 X 和 Y 下虛無假設的後驗機率除以在給定資料 X 和 Y 下對立無假設的後驗機率，若大於1則接受虛無假設，否則接受對立假設。

7 模擬樣本之檢定

我們透過模擬分別由母體a，即 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 0.5)$ ，得到10筆樣本，令為A資料(見附錄表格5)，由母體b，即 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 2)$ ，得到10筆樣本，令為B資料(見附錄表格6)，由母體c，即 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 4)$ ，得到10筆樣本，令為C資料(見附錄表格7)，由母體d，即 $vMF_3((\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8}), 2)$ ，得到10筆樣本，令為D資料(見附錄表格8)，由母體e，即 $vMF_3((\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8}), 4)$ ，得到10筆樣本，令為E資料(見附錄表格9)，這五個母體的平均方向和集中度整理如附錄表格10。

我們想檢定B資料來源母體b和D資料來源母體d的平均方向是否相同，利用前一節(6.2)式、(6.4)式和吉氏取樣(Gibbs sampler)可得到在給定兩組樣本下 H_0 的後驗

機率，我們以 $G_0 = vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 5)$ 為先驗分配，利用 (6.4) 式吉氏取樣時燒入 (burn in) 50 個後，再取 10000 個點，機會勝算比 POR 為滿足 H_0 虛無假設情形的比例 $P(H_0|\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ 除以滿足 H_1 對立假設情形的比例 $P(H_1|\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ ，則不同 α_0 的值和 POR 的值關係如附錄表格 11；另外檢定 B 資料來源母體 b 和 E 資料來源母體 e 的平均方向是否相同之不同 α_0 的值和 POR 的值關係如附錄表格 12；檢定 B 資料來源母體 b 和 A 資料來源母體 a 的平均方向是否相同不同 α_0 的值和 POR 的值關係如附錄表格 13；檢定檢定 B 資料來源母體 b 和 C 資料來源母體 c 的平均方向是否相同之不同 α_0 的值和 POR 的值關係如附錄表格 14。

從附錄表格 11、表格 12、表格 13 和表格 14 中，我們發現 α_0 對 POR 的影響很大，原因可以由 (6.4) 式中可以看到，當 α_0 大時，模擬 λ_1 值時就不容易等於 λ_2 ，相同地在模擬 λ_2 值時也不容易等於 λ_1 ，因此 $\lambda_1 = \lambda_2$ 的機會就少，而得到的 $P(H_0|\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ 值就小，所以 POR 值就小；針對 B 資料來源母體 b 和 D 資料來源母體 d 平均方向的檢定，雖然我們已經知道平均方向不同，但是如果選取的 α_0 過小也會使得檢定結果偏向兩組資料平均方向相等，例如當 $\alpha_0 \leq 0.05$ 時，POR 值有超過 1 的比例支持 H_0 為真，也就是支持兩組資料來源母體平均方向相等。再從 B 資料來源母體 b 和 E 資料來源母體 e 平均方向的檢定來看，相對於 B 資料來源母體 b 和 E、D 資料來源母體 e、d 平均方向的檢定只有 D 資料來源母體 d 和 E 資料來源母體 e 的集中度不同 (分別為 2 和 4)，從附錄表格 11 和表格 12 我們發現 POR 值在同一 α_0 下表格 12 明顯有比表格 11 來得小，因此若兩組資料分別來自兩個不同平均方向的母體，且其中一個母體的集中度固定，另一個母體的集中度變大時，則 POR 值會變小；另外再拿 B 資料來源母體 b 分別對 A 資料來源母體 a 和 C 資料來源母體 c 平均方向的檢定，此時 B 資料、A 資料和 C 資料來源母體 b、a 和 c 的平均方向相等，且 C 資料來源母體 c 的集中度比 A 資料來源母體 a 的集中度大，從附錄表格 13 和表格 14 中可以發現 B 資料來源母體 b 與 C 資料來源母體 c 平均方向檢定之 POR 值在同一 α_0 下均比 B 資料來源母體 b 與 A 資料來源母體 a 平均方向檢定之 POR 值來得大，因此若兩組資料分別來自相同平均方向的母體，且其中一個母體的集中度固定，另一個母體的集中度變大時，

則POR值會變大。

另外針對和 $(\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3})$ 這個方向的夾角由小至大分別為 $(\sqrt{2/5}, \sqrt{2/5}, \sqrt{1/5})$ ， $(\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8})$ ， $(\sqrt{1/10}, \sqrt{2/10}, \sqrt{7/10})$ ， $(\sqrt{1/20}, \sqrt{2/20}, \sqrt{17/20})$ ，若以上述之方向為平均方向分別模擬出10筆 vMF_3 分配且集中度為2的資料，再各別與B資料來源母體檢定平均方向是否相同，其 α_0 和POR值的關係與每個平均方向的關係如表格15。從附錄表格15可以發現隨著與 $(\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3})$ 的角度越大則POR值則越小，因此若兩組資料分別來自兩個不同平均方向的母體且當這兩個母體的集中度固定時，這兩個母體的平均方向的夾角角度變大時，則POR會變小。

8 結論

我們在本論文提供了半母數貝氏分析法來分析具有3維 von Mises-Fisher 分配的資料，利用吉氏取樣 (Gibbs sampler) 可以估計這些資料所對應分配平均方向的後驗分配，並且建議挑選 α_0 時可藉由資料樣本的群數來給定，資料很可能來自同一種母體則選 $\alpha_0 = 1/n$ ，反之如果資料可能皆來自不同種母體，則選 $\alpha_0 = n^2$ ，如果資料可能來自多於 $2n/3$ 種母體則選 $\alpha_0 = n$ ，若資料可能來自少於 $2n/3$ 種但不只一種母體則選 $\alpha_0 = 1$ ；對於要預測下一筆資料也提供預測機率密度函數的模擬和估計，也給了當 α_0 趨近於無窮大時，預測機率密度函數為 $q(Y_{n+1})$ 。我們也分析一筆紅床岩層剩餘磁力的抽樣資料，透過半母數貝氏法我們估計出 $(\hat{\rho}, \hat{\sigma})$ ；另外針對兩組具有3維 von Mises-Fisher 分配的資料，要檢定這兩個分配的平均方向是否相同，利用半母數貝氏分析法來檢定，透過吉氏取樣 (Gibbs sampler) 我們可以得到在給定兩組樣本下 H_0 的後驗機率，也藉由模擬的資料發現若兩組資料分別來自兩個不同平均方向的母體，且其中一個母體的集中度固定，另一個母體的集中度變大時，則POR值會變小；反之若兩組資料分別來自相同平均方向的母體，且其中一個母體的集中度固定，另一個母體的集中度變大時，則POR值會變大；同時若兩組資料分別來自兩個不同平均

方向的母體且當這兩個母體的集中度固定時，這兩個母體的平均方向的夾角角度變大時，則POR會變小。



參考書目

- [1] Antoniak, C. E. (1974). Mixtures of Dirichlet Processes with Applications to Bayesian Nonparametric Problems, *The Annals of Statistics*, **2**, 1152-1174.
- [2] Blackwell, D., and MacQueen, J.B. (1973). Ferguson Distribution via Polya Urn Schemes, *The Annals of Statistics*, **1**, 353-355.
- [3] Escobar, M. D. (1994). Estimating Normal Means with a Dirichlet Process Prior, *Journal of the American Statistical Association*, **89**, 268-277.
- [4] Escobar, M. D. (1995). Nonparametric Bayesian Methods in Hierarchical Models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **43**, 97-106.
- [5] Ferguson, T. S. (1973). A Bayesian Analysis of Some Nonparametric Problems, *The Annals of Statistics*, **1**, 209-230.
- [6] Fisher, N.I., Lewis, T., and Embleton, B.J.J. (1987). Statistical Analysis of Spherical Data, Cambridge: University Press.
- [7] Gelfand, A. E., and Smith, A. F. M. (1990). Sampling-Based Approaches to Calculating Marginal Densities, *Journal of the American Statistical Association*, **85**, 398-409.
- [8] Ghosh, K., Jammalamadaka, S. R., and Tiwari, R. C. (2003). Semiparametric Bayesian Techniques for Problems in Circular Data, *Journal of Applied Statistics*, **30**, 145-161.
- [9] Jammalamadaka, S. R., and SenGupta, A. (2001). Topics in Circular Statistics, Singapore: World Scientific.
- [10] Mardia, K. V. (1972) Statistics of Directional Data, London: Academic Press.
- [11] Mardia, K. V. and Jupp, P. E. (2000) Directional Statistics, Chichester: John Wiley and Sons, Ltd.

- [12] Nunez-Antonio, G. and Gutierrez-Pena, E. (2005). A Bayesian Analysis of Directional Data Using the von Mises-Fisher Distribution, *Communications in Statistics-Simulation and Computation*, **34**, 989-999.
- [13] Press, S. J. (2003) Subjective and Objective Bayesian Statistics: Principles, Models, and Applications, John Wiley and Sons, New Jersey.



A 附錄

表格 1: 模擬資料樣本

1	(0.762224026, 0.510966491, 0.397401282)
2	(0.584075366, 0.787907363, 0.195084479)
3	(0.545186257, 0.346005839, 0.763578355)
4	(0.371913831, 0.503273207, 0.779997552)
5	(0.557679841, -0.15551163, 0.815358405)
6	(0.150056663, 0.382469007, 0.911701956)
7	(0.369238511, 0.461796234, 0.806478245)
8	(0.598896436, 0.183259103, 0.77957627)
9	(0.845281166, 0.47637276, 0.242009801)
10	(0.844465489, 0.368708407, 0.388499868)
11	(0.449927074, 0.761035188, 0.467323304)
12	(0.8736035, -0.27048592, 0.404542076)
13	(0.531184512, 0.839587267, -0.113737572)
14	(0.236785871, 0.371894214, 0.897567348)
15	(0.589738345, -0.484817344, 0.645879887)

表格 2: λ_i 後驗分配估計值的歐氏距離 (d_1)

	$\alpha_0 = 1/15$	$\alpha_0 = 1$	$\alpha_0 = 15$	$\alpha_0 = 225$
G_0^1	$d_1 = 0.49146$	$d_1 = 0.48772$	$d_1 = 0.49676$	$d_1 = 0.50047$
G_0^2	$d_1 = 0.49148$	$d_1 = 0.48804$	$d_1 = 0.49203$	$d_1 = 0.49845$
G_0^3	$d_1 = 1.09716$	$d_1 = 1.09186$	$d_1 = 1.07608$	$d_1 = 1.08501$
G_0^4	$d_1 = 0.48932$	$d_1 = 0.49137$	$d_1 = 0.49434$	$d_1 = 0.48734$

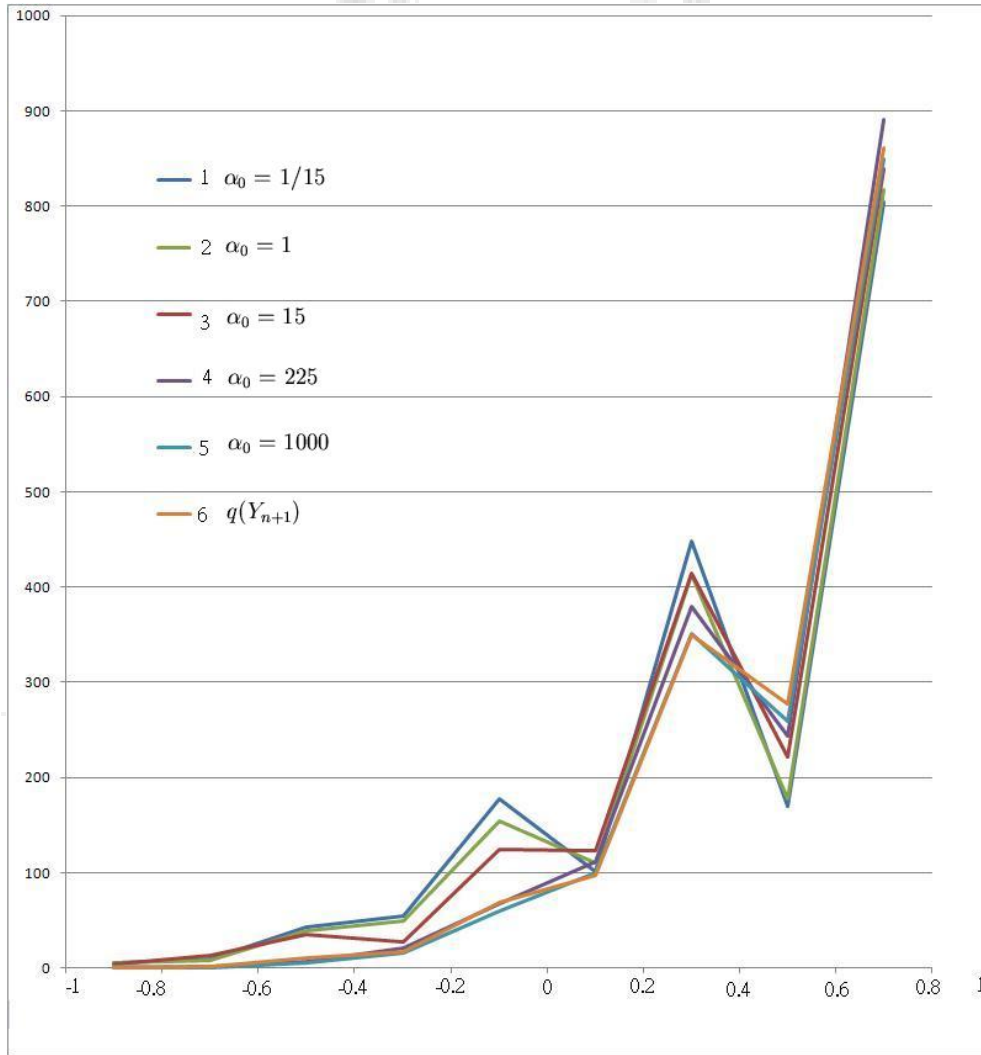


圖 1: 以 G_0^1 為先驗分配下預測機率密度函數第一維度分量的估計邊際機率密度函數

表格 3: 預測函數之平均與歐氏距離 (d_2)

	$\alpha_0 = 1/15$	$\alpha_0 = 1$
G_0^1	(0.591166111, 0.42276286, 0.686872764) $d_2=0.6604$	(0.600142725, 0.426235699, 0.676869144) $d_2=0.66123$
G_0^2	(0.635193799, 0.471726413, 0.61155787) $d_2=0.6686$	(0.584922624, 0.499738514, 0.638848136) $d_2=0.66333$
G_0^3	(0.801806793, -0.496649562, 0.332332782) $d_2=1.0866$	(0.780534917, -0.548349761, 0.300129608) $d_2=1.1256$
G_0^4	(0.65374033, 0.408761646, 0.63681826) $d_2=0.66881$	(0.633446886, 0.403049527, 0.660527155) $d_2=0.6653$
	$\alpha_0 = 15$	$\alpha_0 = 225$
G_0^1	(0.553579535, 0.441363842, 0.706220686) $d_2=0.65815$	(0.543792693, 0.451596874, 0.707354064) $d_2=0.65794$
G_0^2	(0.611963494, 0.511400286, 0.603299618) $d_2=0.66888$	(0.585257382, 0.539413022, 0.605398537) $d_2=0.66892$
G_0^3	(0.604483529, -0.796581231, 0.007616073) $d_2=1.3782$	(0.411827086, -0.886507718, -0.2109562) $d_2=1.5382$
G_0^4	(0.670222858, 0.383101363, 0.635637213) $d_2=0.67191$	(0.653763623, 0.393047597, 0.646611716) $d_2=0.6687$

表格 4: 紅床岩層剩餘磁力資料

	Dec.	Inc.	$\rho = \frac{180}{\pi}\theta$ = <i>Inc.</i> + 90°	$\sigma = \frac{180}{\pi}\phi$ = 360° - <i>Dec.</i>		Dec.	Inc.	$\rho = \frac{180}{\pi}\theta$ = <i>Inc.</i> + 90°	$\sigma = \frac{180}{\pi}\phi$ = 360° - <i>Dec.</i>
1	122.5	55.5	145.5	237.5	14	156	56.5	146.5	204
2	130.5	58	148	229.5	15	139.5	54	144	220.5
3	132.5	44	134	227.5	16	153.5	47.5	137.5	206.5
4	148.5	56	146	211.5	17	151.5	61	151	208.5
5	140	63	153	220	18	147.5	58.5	148.5	212.5
6	133	64.5	154.5	227	19	141	57	147	219
7	157.5	53	143	202.5	20	143.5	67.5	157.5	216.5
8	153	44.5	134.5	207	21	131.5	62.5	152.5	228.5
9	140	61.5	151.5	220	22	147.5	63.5	153.5	212.5
10	147.5	54.5	144.5	212.5	23	147	55.5	145.5	213
11	142	51	141	218	24	149	62	152	211
12	163.5	56	146	196.5	25	144	53.5	143.5	216
13	141	59.5	149.5	219	26	139.5	58	148	220.5

表格 5: 模擬 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 0.5)$ 之 A 資料

1	(0.70604951 , -0.111579473 , 0.699316889)
2	(0.775622817, 0.630414085, -0.031421776)
3	(0.238480258 ,0.627569506 ,0.74113675)
4	(0.387489128, 0.813955661 ,0.432814462)
5	(-0.749667004 , 0.227845915, -0.621357886)
6	(0.983488541, 0.165648807, -0.072874978)
7	(-0.096461962 , -0.474354312 , 0.875033186)
8	(-0.336913913 , 0.696157429, 0.633919434)
9	(0.76317397 ,0.039730905, -0.6449705)
10	(0.501756654, 0.575300687 ,0.645963916)

表格 6: 模擬 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 2)$ 之 B 資料

1	(-0.51678261 ,0.850126556 , -0.101096848)
2	(0.765426336 0.402268765 -0.502297089)
3	(0.481233981, 0.733890909 , -0.479393357)
4	(0.941306134 ,0.312060055 , -0.128690653)
5	(-0.709600604 , 0.615058537, 0.343758604)
6	(-0.6640711 , 0.673720901, 0.324206294)
7	(0.275737455, 0.847324596 , -0.453883119)
8	(0.538831874 , -0.332874767 , 0.773856964)
9	(0.522785624, -0.40703509, 0.7490111)
10	(0.933476942, -0.074957879 , 0.350716573)

表格 7: 模擬 $vMF_3((\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}), 4)$ 之 C 資料

1	(0.888467419, 0.263112418, 0.37602859)
2	(-0.29446245, 0.745589043, 0.597820078)
3	(0.505370234, 0.816032569, 0.280520539)
4 4	(0.822600661, 0.299306265, 0.483470695)
5	(0.535792449, 0.793088713, 0.289718391)
6	(0.410606128, 0.843843381, 0.345443131)
7	(0.638061957, 0.567563498, -0.520335099)
8	(0.57773628, 0.791788163, -0.198222843)
9	(0.125611203, 0.717939359, 0.684678685)
10	(0.930523546, 0.154992559, -0.331818078)

表格 8: 模擬 $vMF_3((\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8}), 2)$ 之 D 資料

1	(-0.005149362, 0.50909882, 0.860692672)
2	(-0.746858267, 0.445694665, -0.493516965)
3	(-0.781984996, 0.450953009, 0.430279967)
4	(0.353836182, -0.043670359, 0.934287352)
5	(0.292770627, 0.430320172, 0.85387933)
6	(0.868804414, 0.187609363, 0.458237512)
7	(0.678965869, -0.371489777, 0.633246156)
8	(0.889189999, 0.338416745, 0.307920854)
9	(0.758527662, 0.599738642, 0.254851619)
10	(0.343458244, -0.727339546, 0.594149492)

表格 9: 模擬 $vMF_3((\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8}), 4)$ 之 E 資料

1	(0.330837581, 0.245337287 ,0.911238778)
2	(0.58664181, 0.647293818, 0.486684805)
3	(0.820489707 ,0.206837623, 0.532930426)
4	(0.910805145 ,0.298728844, 0.284947479)
5	(0.040171565, -0.180391157 , 0.982774275)
6	(0.612367166 ,-0.300439985 , 0.73126074)
7	(0.80848674, 0.36582377, 0.461001258)
8	(0.546137596, 0.399943903, 0.736056113)
9	(0.449335959 ,-0.205676394 , 0.869364375)
10	(0.827504829, 0.383237359, 0.410322903)

表格 10: 五個母體平均方向和集中度

母體	平均方向	集中度
a母體	$(\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3})$	0.5
b母體	$(\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3})$	2
c母體	$(\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}, \sqrt{1/3})$	4
d母體	$(\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8})$	2
e母體	$(\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8})$	4

表格 11: B 資料來源母體 b 和 D 資料來源母體 d 平均方向之檢定

α_0	0.001	0.01	0.05	0.1	0.5	1	4
POR	49.2513	5.3331	1.0375	0.5256	0.0898	0.0365	0.0083
α_0	8	10	20	30	50	75	100
POR	0.0048	0.0027	0.0017	0.0014	0.0007	0.0005	0.0004

表格 12: B 資料來源母體 b 和 E 資料來源母體 e 平均方向之檢定

α_0	0.001	0.01	0.05	0.1	0.5	1	4
POR	0.9683	0.7852	0.4286	0.2795	0.0704	0.0353	0.0076
α_0	8	10	20	30	50	75	100
POR	0.0042	0.0028	0.0020	0.0014	0.0007	0.0004	0.0003

表格 13: B 資料來源母體 b 和 A 資料來源母體 a 平均方向之檢定

α_0	0.001	0.01	0.05	0.1	0.5	1	4
POR	10.2867	3.7015	1.1390	0.6900	0.1606	0.0810	0.0251
α_0	8	10	20	30	50	75	100
POR	0.0092	0.0078	0.0041	0.0024	0.0020	0.0019	0.0005

表格 14: B 資料來源母體 b 和 C 資料來源母體 c 平均方向之檢定

α_0	0.001	0.01	0.05	0.1	0.5	1	4
POR	207.3333	21.6757	4.5556	2.2342	0.4631	0.2381	0.0598
α_0	8	10	20	30	50	75	100
POR	0.0293	0.0220	0.0130	0.0078	0.0040	0.0039	0.0018

表格 15: 在集中度固定 (都為 2) 下, B 資料來源母體 b 和四個不同平均方向資料來源母體平均方向之檢定

母體的平均方向	$\alpha_0=0.05$	$\alpha_0=0.1$	$\alpha_0=0.5$
$(\sqrt{2/5}, \sqrt{2/5}, \sqrt{1/5})$	POR=0.9796	POR=0.6867	POR=0.3043
$(\sqrt{1/2}, \sqrt{1/8}, \sqrt{3/8})$	POR=1.0375	POR=0.5256	POR=0.0898
$(\sqrt{1/10}, \sqrt{2/10}, \sqrt{7/10})$	POR=0.034	POR=0.0144	POR=0.0024
$(\sqrt{1/20}, \sqrt{2/20}, \sqrt{17/20})$	POR=0.0268	POR=0.0102	POR=0.0015