3 Fortran程式

3.1 迴圈單一化

在處理貝氏法的程式過程中，我們當然希望此程式能處理不同的n值(即觀察值個數)，而不是只能處理特定的觀察值個數，如：$n = 3$或$n = 6$的情況。既然n是可變動的，就會造成我們的程式碼無法固定下來，因爲當$n = 2$時，程式爲以下形式

```
do k2=1,I
do k1=1,I
⋮
end do
end do
```

當$n = 3$時，則程式將有以下的形式

```
do k3=1,I
do k2=1,I
do k1=1,I
⋮
end do
end do
end do
```

這使我們無法固定程式所需給定的迴圈組數。
試考慮下列兩迴圈：
A迴圈：

$$\sum_{K_n=1}^{I} \cdots \sum_{K_2=1}^{I} \sum_{K_1=1}^{I}$$

B迴圈：

$$\sum_{K=1}^{I^n}$$

此兩個迴圈皆跑了I^n次，我們若能建構一1-1且映成函數$T : N \to N^n$，能由迴圈B的K值計算出$K_1, K_2, \ldots, K_n$的值，則A，B二迴圈就可以相互轉換。假設在迴圈A中$K_1 = k_1, K_2 = k_2, \ldots, K_n = k_n$，其相當於在迴圈B中執行了$k$次，則

$$\begin{aligned} k &= k_1 + (k_2 - 1) \times I + (k_3 - 1) \times I^2 \ldots + (k_n - 1) \times I^{n-1} \\ &= k_1 + k_2 \times I + k_3 \times I^2 + \ldots + k_n \times I^{n-1} - (1 + I + I^2 + I^3 + \ldots + I^{n-1}) + 1 \\ &= k_1 + k_2 \times I + k_3 \times I^2 + \ldots + k_n \times I^{n-1} + 1 - \frac{I^n - 1}{I - 1} \end{aligned} \tag{3.1}$$

移項得

$$k - 1 + \frac{I^n - 1}{I - 1} = k_1 + k_2 \times I + k_3 \times I^2 + \ldots + k_n \times I^{n-1}$$

令

$$L = k - 1 + \frac{I^n - 1}{I - 1}$$

則

$$\begin{aligned} L \div I &= h_1 \text{餘} k_1 \\ h_1 \div I &= h_2 \text{餘} k_2 \\ h_2 \div I &= h_3 \text{餘} k_3 \\ \vdots &= \vdots \\ h_{n-2} \div I &= h_{n-1} \text{餘} k_{n-1} \\ h_{n-1} \div I &= 0 \text{餘} k_n \end{aligned} \tag{3.2}$$

依照(3.1)與(3.2)式，我們可以建構出T函數，T可在k與$(k_1, k_2, \ldots, k_n)$間做轉換。

不過在Fortran程式裡，通常我們把index設定爲從1開始，依照上述的方法會遇到一些問題，比如說：當我們設定$I = 3$且$n = 4$時，此時$k = 3$代表的是這一組index$(3, 1, 1, 1)$，但若用上述的方法

$$L = 3 - 1 + \frac{3^4 - 1}{3 - 1} = 42$$

$$
\begin{aligned}
42 \div 3 &= 14 \ldots 0 \\
14 \div 3 &= 4 \ldots 2 \\
4 \div 3 &= 1 \ldots 1 \\
1 \div 3 &= 0 \ldots 1
\end{aligned}
$$

最後我們得到的index會是$(0, 2, 1, 1)$，這並非我們所預期的。所以我將上述的方法再做一下限制，限制當k_j爲0時，此時將k_j記做I，且相對應的h_j需經過減一的步驟之後才繼續以下的步驟，以之前的例子來說明：

$$L = 3 - 1 + \frac{3^4 - 1}{3 - 1} = 42$$

$$42 \div 3 = 14 \ldots 0$$

此時將$14 - 1 = 13$且0記爲3，則

$$
\begin{aligned}
13 \div 3 &= 4 \ldots 1 \\
4 \div 3 &= 1 \ldots 1 \\
1 \div 3 &= 0 \ldots 1
\end{aligned}
$$

所以最後我們得到的就會是index$(3, 1, 1, 1)$。

在處理迴圈層數無法固定的問題時，我們一律將之化簡爲單一迴圈，只要在進入迴圈後立即依照T函數與其限制條件將k轉換到$(k_1, k_2, \ldots, k_n)$，我們依舊可以將此單一迴圈模擬成n層迴圈。

3.2 溢位 (overflow)

當我們利用程式計算貝氏法的驗後均數時，最常碰到的就是溢位的問題，舉個例子來說：

假設觀察個數爲$1(k=1)$，類別項數(I)爲3且$r_1=1$時，令

$$\mathbf{a}=\begin{pmatrix}100\\200\\300\end{pmatrix}\text{ 且 }\mathbf{b}=\begin{pmatrix}50&50&100&100\\50&50&100&100\\50&50&100&100\end{pmatrix}$$

以(2.5)式可以看出我們θ_1的驗後均數爲

$$\begin{aligned}E\theta_1 &= \sum_{m=1}^{3}\frac{A_m}{A_+}\cdot\frac{a_1+\delta_1^m}{\sum_{i=1}^{3}a_i+\delta_i^m}\\ &= \frac{A_1}{A_+}\cdot\frac{a_1+1}{\sum_{i=1}^{3}a_i+1}+\sum_{m=2}^{3}\frac{A_m}{A_+}\cdot\frac{a_1+\delta_1^m}{\sum_{i=1}^{3}a_i+\delta_i^m}\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}A_1 &= B(\mathbf{a}+\delta^1)\cdot\prod_{i=1}^{I}B(\mathbf{b}_{i*}+\delta_{i*}^{11})\\ &= B\begin{pmatrix}101\\100\\100\end{pmatrix}\cdot B\begin{pmatrix}51\\50\\100\\100\end{pmatrix}\cdot B\begin{pmatrix}50\\50\\100\\100\end{pmatrix}\cdot B\begin{pmatrix}50\\50\\100\\100\end{pmatrix}\end{aligned}$$

毫無疑問的，當我們計算到$B(101,100,100)^T$時，溢位的問題就很容易在大多數電腦發生，因爲

$$B\begin{pmatrix}101\\100\\100\end{pmatrix}=\frac{\Gamma(101)\Gamma(100)\Gamma(100)}{\Gamma(301)}$$

在計算的過程中$\Gamma(301)=300!$，這個值會造成多數的電腦發生溢位的現象。

所以我們考慮另一種演算法來解決溢位的問題。

假設$I=3, J=4, k=1$，我們利用(2.5)可以得到

$$\begin{aligned}
E\theta_1 &= \sum_{m=1}^{3}\frac{A_m}{A_+}\cdot\frac{a_1+\delta_1^m}{a_++1} \\
&= \frac{A_1}{A_+}\cdot\frac{a_1+1}{a_++1}+\frac{A_2}{A_+}\cdot\frac{a_1}{a_++1}+\frac{A_3}{A_+}\cdot\frac{a_1}{a_++1} \\
&= \frac{a_1\cdot\sum_{i=1}^{3}A_i}{A_+(a_++1)}+\frac{A_1}{A_+(a_++1)} \\
&= \frac{1}{a_++1}(a_1+\frac{A_1}{A_+})
\end{aligned}$$

相同的，我們也可以得到

$$\begin{aligned}
E\theta_2 &= \sum_{m=1}^{3}\frac{A_m}{A_+}\cdot\frac{a_2+\delta_2^m}{a_++1} \\
&= \frac{A_1}{A_+}\cdot\frac{a_2}{a_++1}+\frac{A_2}{A_+}\cdot\frac{a_2+1}{a_++1}+\frac{A_3}{A_+}\cdot\frac{a_2}{a_++1} \\
&= \frac{a_2\cdot\sum_{i=1}^{3}A_i}{A_+(a_++1)}+\frac{A_2}{A_+(a_++1)} \\
&= \frac{1}{a_++1}(a_2+\frac{A_2}{A_+})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E\theta_3 &= \sum_{m=1}^{3}\frac{A_m}{A_+}\cdot\frac{a_3+\delta_3^m}{a_++1} \\
&= \frac{A_1}{A_+}\cdot\frac{a_3}{a_++1}+\frac{A_2}{A_+}\cdot\frac{a_3}{a_++1}+\frac{A_3}{A_+}\cdot\frac{a_3+1}{a_++1} \\
&= \frac{a_3\cdot\sum_{i=1}^{3}A_i}{A_+(a_++1)}+\frac{A_3}{A_+(a_++1)} \\
&= \frac{1}{a_++1}(a_3+\frac{A_3}{A_+})
\end{aligned}$$

不難看出驗後均數有一固定形式

$$E\theta_i=\frac{1}{a_++1}(a_i+\frac{A_i}{A_+}),\qquad i=1,2,3 \tag{3.3}$$

再進一步考慮$I=3, J=4, k=2$的情況，利用(2.6)式我們可以得到

$$\begin{aligned}
E\theta_1 &= \sum_{m_1=1}^{3}\sum_{m_2=1}^{3}\frac{A_{m_1m_2}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1+\delta_1^{m_1}+\delta_1^{m_2}}{\sum_{i=1}^{I}a_i+\delta_i^{m_1}+\delta_i^{m_2}} \\
&= \sum_{m_1=1}^{3}\sum_{m_2=1}^{3}\frac{A_{m_1m_2}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1+\delta_1^{m_1}+\delta_1^{m_2}}{a_++2} \\
&= \frac{A_{11}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1+2}{a_++2}+\frac{A_{12}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1+1}{a_++2}+\frac{A_{13}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1+1}{a_++2}+\ldots+\frac{A_{33}}{A_{++}}\cdot\frac{a_1}{a_++2} \\
&= \frac{1}{A_{++}(a_++2)}\left[A_1a_{11}+2A_{11}+A_{12}a_1+A_{12}+A_{13}+\ldots+A_{33}a_1\right] \\
&= \frac{(A_{11}+\ldots+A_{33})a_1}{A_{++}(a_++2)}+\frac{2A_{11}+A_{12}+A_{13}+A_{21}+A_{31}}{A_{++}(a_++2)} \\
&= \frac{1}{a_++2}\left[a_1+\frac{2A_{11}+A_{12}+A_{13}+A_{21}+A_{31}}{A_{++}}\right]
\end{aligned}$$

相同的，我們也可以得到

$$E\theta_2=\frac{1}{a_++2}\left[a_2+\frac{A_{12}+A_{21}+2A_{22}+A_{23}+A_{32}}{A_{++}}\right]$$

$$E\theta_3=\frac{1}{a_++2}\left[a_3+\frac{A_{13}+A_{23}+A_{31}+A_{32}+2A_{33}}{A_{++}}\right]$$

不難看出驗後均數有一固定形式

$$E\theta_i=\frac{1}{a_++2}\left[a_i+\frac{\sum_{m_1=1}^{I}\sum_{m_2=1}^{I}(I_i(m_1)+I_i(m_2))A_{m_1m_2}}{A_{++}}\right] \tag{3.4}$$

其中$I_m(x)=\begin{cases}1 & ,x=m\\ 0 & ,x\neq m\end{cases}$

比較(3.3)式與(3.4)式，將它推廣到$k=n$，其驗後均數爲以下形式

$$E\theta_i=\frac{1}{a_++n}\left[a_i+\frac{\sum_{m_1=1}^{I}\ldots\sum_{m_n=1}^{I}(I_i(m_1)+\ldots+I_i(m_n))A_{m_1\ldots m_n}}{A_{+\ldots+}}\right] \tag{3.5}$$

得到了驗後均數的通式之後，若能將係數A簡化或找到共同項，則可避免掉某些甚至是全部溢位的現象。

首先，考慮$I=3$，$J=4$，$k=1$，$r_1=1$

$$\begin{aligned}
A_1 &= B(\mathbf{a}+\delta^1)\cdot\sum_{i=1}^{3}B(\mathbf{b}_{i*}+\delta_{i*}^{11}) \\
&= \frac{\Gamma(a_1+1)\Gamma(a_2)\Gamma(a_3)}{\Gamma(a_++1)}\cdot\frac{\Gamma(b_{11}+1)\Gamma(b_{12})\Gamma(b_{13})\Gamma(b_{14})}{\Gamma(b_{1+}+1)}\cdot\frac{\Gamma(b_{21})\Gamma(b_{22})\Gamma(b_{23})\Gamma(b_{24})}{\Gamma(b_{2+})}\cdot \\
&\quad \frac{\Gamma(b_{31})\Gamma(b_{32})\Gamma(b_{33})\Gamma(b_{34})}{\Gamma(b_{3+})} \\
&= \frac{a_1\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++1)}\cdot\frac{b_{11}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{b_{1+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})}
\end{aligned}$$

同樣的，我們也可以得到

$$A_2=\frac{a_2\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++1)}\cdot\frac{b_{21}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{b_{2+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})}$$

$$A_3=\frac{a_3\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++1)}\cdot\frac{b_{31}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{b_{3+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})}$$

接著，考慮$I=3$，$J=4$，$k=2$，$r_1=1$，$r_2=1$

$$\begin{aligned}
A_{11} &= B(\mathbf{a}+\delta^{\mathbf{1}}+\delta^{\mathbf{1}})\cdot\prod_{i=1}^{3}B(\mathbf{b}_{i*}+\delta_{i*}^{11}+\delta_{i*}^{11}) \\
&= \frac{\Gamma(a_1+2)\Gamma(a_2)\Gamma(a_3)}{\Gamma(a_++2)}\cdot\frac{\Gamma(b_{11}+2)\Gamma(b_{12})\Gamma(b_{13})\Gamma(b_{14})}{\Gamma(b_{1+}+2)}\cdot\frac{\Gamma(b_{21})\Gamma(b_{22})\Gamma(b_{23})\Gamma(b_{24})}{\Gamma(b_{2+})}\cdot \\
&\quad \frac{\Gamma(b_{31})\Gamma(b_{32})\Gamma(b_{33})\Gamma(b_{34})}{\Gamma(b_{3+})} \\
&= \frac{(a_1+1)a_1\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++2)}\cdot\frac{(b_{11}+1)b_{11}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{(b_{1+}+1)b_{1+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})} \qquad (3.6)
\end{aligned}$$

同樣的，我們也可以得到

$$\begin{aligned}
A_{12} &= B(\mathbf{a}+\delta^{\mathbf{1}}+\delta^{\mathbf{2}})\cdot\prod_{i=1}^{3}B(\mathbf{b}_{i*}+\delta_{i*}^{11}+\delta_{i*}^{21}) \\
&= \frac{a_1a_2\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++2)}\cdot\frac{b_{11}b_{21}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{b_{1+}b_{2+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})} \\
A_{13} &= B(\mathbf{a}+\delta^{\mathbf{1}}+\delta^{\mathbf{3}})\cdot\prod_{i=1}^{3}B(\mathbf{b}_{i*}+\delta_{i*}^{11}+\delta_{i*}^{31}) \\
&= \frac{a_1a_3\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_++2)}\cdot\frac{b_{11}b_{31}\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{b_{1+}b_{3+}\cdot\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})} \\
&\vdots
\end{aligned}$$

在推導A_{ij}的過程中可以發現，Gamma function 裡的值會有所改變與δ^i和$\delta_{i*}^{m_n r_n}$有關。利用一矩陣$\mathbf{D}$判斷A_{ij}的值。

當類別數爲I，報告種類爲J，觀察值$r=(r_1,r_2,\ldots,r_n)$，驗前分配$a=(a_1,a_2,\ldots,a_I)$，
$$b=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \ldots & b_{1J} \\ b_{21} & b_{22} & \ldots & b_{2J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{I1} & b_{I2} & \ldots & b_{IJ} \end{pmatrix}$$
，令

$$\mathcal{C}=\frac{\prod_{i=1}^{I}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_+ + n)}\cdot\frac{\prod_{i=1}^{I}\prod_{j=1}^{J}\Gamma(b_{ij})}{\prod_{i=1}^{I}\Gamma(b_{i+})}$$

，要計算$A_{m_1m_2\ldots m_n}$，$m_i=1,2,\ldots,I$時，考慮一$I\times J$矩陣$\mathbf{D}=[d_{ij}]$，$d_{ij}=\sum_{k=1}^{n}\delta_{ij}^{m_k r_k}$，定義一個函數$\phi_a:\mathcal{R}\to\mathcal{R}$，

$$\phi_a(x)=\begin{cases} 1 & ,x=0 \\ a(a+1)(a+2)\ldots(a+(x-1)) & ,x\neq 0 \end{cases} \qquad \text{where } a\in\mathcal{R}$$

則

$$A_{m_1m_2\ldots m_n}=\frac{\prod_{i=1}^{I}\phi_{a_i}(d_{i+})\cdot\prod_{i=1}^{I}\prod_{j=1}^{J}\phi_{b_{ij}}(d_{ij})}{\prod_{i=1}^{I}\phi_{b_{i+}}(d_{i+})}\cdot\mathcal{C} \tag{3.7}$$

以$I=3$，$J=4$，$k=1$，$r=(1,1)$，$a=(a_1,a_2,a_3)$，$b=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \end{pmatrix}$爲例，當計算$A_{11}$，此時

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

則

$$\begin{aligned} A_{11} &= \frac{\prod_{i=1}^{3}\phi_{a_i}(d_{i+})\cdot\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\phi_{b_{ij}}(d_{ij})}{\prod_{i=1}^{3}\phi_{b_{i+}}(d_{i+})}\cdot\mathcal{C} \\ &= \frac{a_1(a_1+1)\cdot b_{11}(b_{11}+1)}{b_{1+}(b_{1+}+1)}\cdot\mathcal{C} \end{aligned}$$

此時

$$\mathcal{C}=\frac{\prod_{i=1}^{3}\Gamma(a_i)}{\Gamma(a_+ + 2)}\cdot\frac{\prod_{i=1}^{3}\prod_{j=1}^{4}\Gamma(b_{ij})}{\prod_{i=1}^{3}\Gamma(b_{i+})}$$

與(3.6)式比較，兩者相同。

利用此矩陣$\mathbf{D}$我們可以簡單的計算出係數A，且因係數皆有共同項，則當我們在求驗後均數時，因共同項的消去，使得在計算上不需使用到Gamma function，因此不會出現溢位的問題。