

奇異值分解法之介紹與應用

張振瑋¹ 余嘉裕²

中國文化大學地學研究所¹

中國文化大學大氣科學系²

摘要

奇異值分解 (singular value decomposition) 是透過計算兩變數之「交互協方差矩陣」(cross-covariance Matrix)，求取變數在時間上較大之「平方協方差平方」(square covariance)水平分布型態，進而得到變數間最常出現之「耦合模」(coupled mode)。本文透過奇異值分解計算長時間 NCEP/NCAR 再分析資料之近地面風場、最佳化內差月平均海平面溫度資料，介紹此方法對於氣候研究上之應用。在實例介紹中，透過幾個奇異向量之重建，SVD 可作為濾波之工具。此外，將濾波之風場資料驅動海洋環流模式，可探討海洋對大氣之反應。

關鍵詞：奇異值分解、年代震盪

一、前言

最近幾年由於高品質、長時段的大氣格點資料（如 NCAR/NCEP 與 ECMWF 再分析資料）陸續出現，其資料長度往往超過 4、50 年，因此更有利於長期氣候變遷之研究。大部分學者透過統計方式於長時間的氣候變化中，歸納出主要變異之特徵，進而詳加討論之。而主要之統計方法包括，經驗正交函數 (empirical orthogonal function, EOF)、奇異值分解 (singular value decomposition, SVD)、波譜分析 (spectral analysis) 與小波分析 (wavelets analysis)

等等。

大部份統計方式是探討單一物理量之空間或時間上主要之變異特徵，而奇異值分解可探討兩個或兩個以上物理量之耦合時空分佈特徵 (Bretherton et al, 1992)。奇異值分解最主要是透過計算兩變數之交叉協方差矩陣 (cross-covariance matrix)，求取變數在時間上較大之協方差平方 (square covariance) 水平分布型態，進而得到變數間最常出現之耦合模 (coupled mode)。

許多研究利用奇異值分解 (Bretherton et al 1992, 張和余 2003)，

清楚分析出海洋大氣交界處重要之耦合時空分佈特徵，並有許多研究利用此分解法結果，推導出統計型經驗模式 (Fedorov et al 2003; Latif 1998) 並與 GCM 耦合，成為具有短期氣候預報能力之耦合模式 (Syu and Neelin 1995)。統計預報模式通常具有合理程度之預報能力，特別在強邊界條件主宰情況下時，如：聖嬰—南方震盪 (ENSO)。在強外力邊界主導 (海溫變化為主) 下之氣候現象，有時動力模式較統計模式預報還遜色 (Anderson 1999; Brankovic and Palmer 2000)，原因之一為動力模式難以掌握季節內變化與年際變化間之複雜交互作用。因此奇異值分解除可用在探討長時間氣候變異特徵外，亦可應用於統計動力模式中，改善氣候模擬結果。在本文中將針對奇異值分解之數學原理詳加介紹，並探討奇異值分解對於氣候研究上之應用。本文第二章節介紹研究使用之資料與奇異值分解之數學原理，第三節介紹奇異值分解之實例應用，第四章節為結論。

二、資料來源與研究方法

2.1 資料及處理方法

本文採用資料包括 NCEP/NCAR (National Center for Environmental Prediction/National Center for Atmospheric Research) 再分析資料之月平均 1000hpa 風場和降水，其空間解析度為 $2.5^\circ \times 2.5^\circ$ 經緯度，時間由 1949~2000 年，共有 52 年。海平面溫度採用最佳化內差海溫重建資料，其空間解析度為 $2^\circ \times 2^\circ$ 經緯度，時間同為 1949~

2000 年。深層海洋溫度資料採用聯合環境資料分析中心 (Joint Environmental Data Analysis Center, 簡稱 JEDAC) 提供之再分析海溫資料，水平空間解析度為 $5^\circ \times 2^\circ$ ，垂直上有海表面溫度、海面下 20 公尺、40 公尺、60 公尺、80 公尺、120 公尺、160 公尺、200 公尺、240 公尺、300 公尺及 400 公尺，資料起迄時間從 1955~2003 年。

2.2 奇異值分解

本研究所介紹之奇異值分解透過求解兩變數 (或多變數) 空間與時間資料之交互協方差矩陣，獲得兩變數 (或多變數) 間最高相關係數下之時空分佈特徵 (奇異向量)，亦即呈現此兩變數 (或多變數) 間之主要耦合型態。奇異值分解和經驗正交函數是目前氣候研究的重要分析工具，兩者採用的數學原理相近，因此前者可視為後者之廣義應用。有關奇異值分解法之數學原理說明如下：

假設 a 、 b 兩個物理量 (觀測場) 分別由 l 和 m 個網格點 (測站) 所組成，我們可將其距平值 (減去氣候平均) 表示成下列矩陣形式：

$$A = \begin{bmatrix} a_1(t_1) & a_1(t_2) & \dots & a_1(t_n) \\ a_2(t_1) & a_2(t_2) & \dots & a_2(t_n) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_l(t_1) & a_l(t_2) & \dots & a_l(t_n) \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1(t_1) & b_1(t_2) & \dots & b_1(t_n) \\ b_2(t_1) & b_2(t_2) & \dots & b_2(t_n) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_m(t_1) & b_m(t_2) & \dots & b_m(t_n) \end{bmatrix} \quad (1)$$

其中 t_1, t_2, \dots, t_n 代表共有 n 個時間觀測值。為瞭解 A 和 B 間的整體關連性，可藉由奇異值分解法計算 A 和 B 之交互協方差矩陣的「奇異值」(singular value) 和「奇異向量」(singular vector)，求取兩物理量間的耦合型態。

A 和 B 交互協方差矩陣 C 可表示為

$$C = AB^T = \begin{bmatrix} \sum_{t=1}^n a_1(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^n a_1(t)b_2(t) & \dots & \sum_{t=1}^n a_1(t)b_m(t) \\ \sum_{t=1}^n a_2(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^n a_2(t)b_2(t) & \dots & \sum_{t=1}^n a_2(t)b_m(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{t=1}^n a_n(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^n a_n(t)b_2(t) & \dots & \sum_{t=1}^n a_n(t)b_m(t) \end{bmatrix} \quad (2)$$

上式中 B^T 為 B 之轉置 (transport), C 為 $l \times m$ 矩陣。在氣候研究上我們通常採用距平值來計算交互協方差矩陣 (2), 其主要目的為聚焦在氣候變異特徵。

奇異值分解法第一個步驟為分解交互協方差矩陣 C 成為

$$C = U W V^T \quad (3)$$

其中 U 為 $l \times m$ 矩陣, V^T 為 $m \times m$ 矩陣, 且 U 和 V 必須滿足下列正交特性:

$$U^T U = V^T V = 1 \quad (4)$$

方程式 (3) 中之 W 為「斜對角矩陣」(diagonal matrix):

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_m \end{bmatrix} \quad (5)$$

其中斜對角係數即為奇異值, 代表每一個奇異向量所佔變異量, 具有 $w_1 > w_2 > \dots > w_m \geq 0$ 之排列特徵。

奇異值分析法之最後步驟為利用下列二式以求取奇異向量:

$$F = A^T U = \begin{bmatrix} a_1^T u_1 & a_1^T u_2 & \dots & a_1^T u_l \\ a_2^T u_1 & a_2^T u_2 & \dots & a_2^T u_l \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^T u_1 & a_n^T u_2 & \dots & a_n^T u_l \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$G = B^T U = \begin{bmatrix} b_1^T v_1 & b_1^T v_2 & \dots & b_1^T v_m \\ b_2^T v_1 & b_2^T v_2 & \dots & b_2^T v_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_n^T v_1 & b_n^T v_2 & \dots & b_n^T v_m \end{bmatrix} \quad (7)$$

(6) 和 (7) 之「欄」(columns) 分別代表 A 和 B 時間序列在空間之「投影」(projections), 其中第一欄代表最顯著之空間投影, 即所謂的「第一奇異向量」(1st singular vector), 第二欄代表「第二奇異向量」, ..., 依此類推。

每個奇異向量所解釋「平方協方差百分比」(percentage of the square covariance fraction, 簡稱 SCF 百分比) 為

$$SCF_k = (w_k^2 / \sum_{k=1}^m w_k^2) \times 100\% \quad (8)$$

每個奇異向量之「主分量」(Principle Component, 簡稱 PC) 可由奇異向量與對應之觀測場距平乘積獲得:

$$PC(t) = \sum_{i=1}^m S_i(t) \times O_i(t) \quad (9)$$

其中 $PC(t)$ 為主分量時間序列, S 為奇異向量 (亦即 F 和 G 矩陣之列), O 為觀測場距平 (亦即 a 和 b 減去氣候平均), nn 為網格點 (測站) 數。另外, 我們可透過求取兩主分量時間序列之相關係數獲知兩奇異向量間之耦合程度。

三、奇異值分解法之應用實例

3.1 耦合特徵

為介紹奇異值分解之應用, 本節使用海面溫度與近地面 (1000hPa) 風場月平均資料做奇異值分解, 同時為了聚

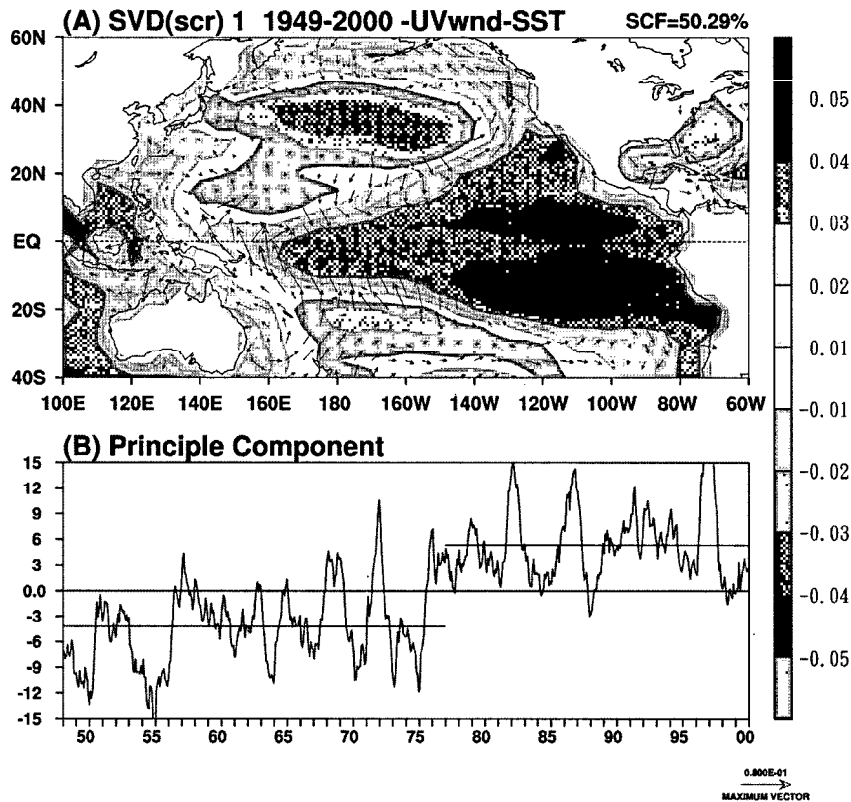


圖 1：濾除季節效應後 1949 年到 2000 年海面溫度與 1000hPa 風場之第一個奇異值分解分佈，可解釋變異量佔總變異量之 50.29%，兩變異量相關 81.31%。1949 年到 1978 年主分量平均值為 -4.82，1979 年到 2000 年之主分量平均值為 5.27。

焦在較長週期（一年以上）氣候變異特徵，季節訊號已被先行濾除。圖 1 為海平面溫度與近地面風場第一個奇異值分解（SVD1）特徵向量空間分佈（上圖）和伴隨主分量時間序列（下圖），其中 SVD1 佔全體變異之 50.29%，海溫和風場間相關達 81.31%。由主分量時間序列發現，1949 年到 1978 年間海溫相對較冷（主分量平均值為 -4.82），1979 年到 2000 年間海溫則相對較暖（主分量平均值為 5.27），由於冷、暖期有顯著之海溫轉變且持續時間超過 10 年（a decade），因此稱 SVD1 為「年代模」（decadal mode），代表年代震盪時空分佈特徵。

年代震盪空間分佈顯示太平洋海溫主要變異中心為北半球中太平洋、熱

帶東太平洋，其中前者海溫變異和後者呈反相位關係，亦即在暖年代當熱帶東太平洋海溫偏暖時，北半球中太平洋海溫卻偏冷。海溫年代震盪對應之風場顯示，暖年代時在赤道西北太平洋、以及東太平洋等海溫主要正區出現輻合氣流，換日線以西的太平洋地區出現跨赤道南風，換日線以東的太平洋地區則出現跨赤道北風。由於海氣交互作用在熱帶正壓地區最為直接，由圖中亦可見熱帶地區風場與海溫皆有較明顯之變異特徵。

圖 2 為海平面溫度與近地面風場第二個奇異值分解（SVD2）特徵向量空間分佈（上圖）和主分量時間序列（下圖）。SVD2 佔全體變異量 18.98%，海溫和風場相關達 75.96%。SVD2 海溫空

間分佈顯示，主要正區由南美洲秘魯與厄瓜多爾外海往西延伸到換日線附近，涵蓋整個赤道東太平洋地區。另外一方面，在西太平洋地區與副熱帶太平洋地

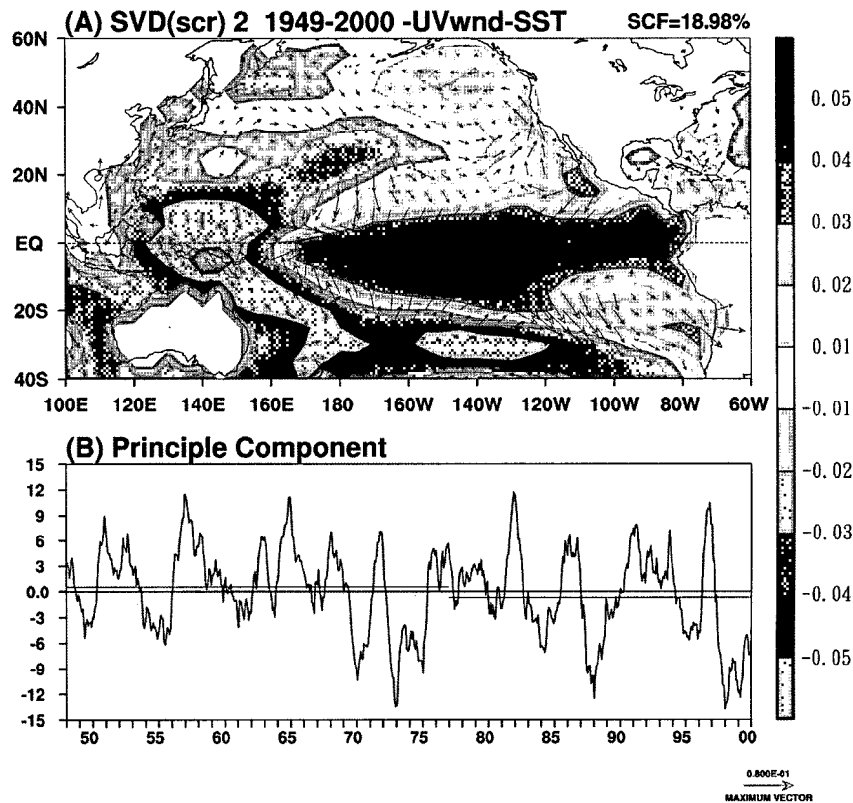


圖 2：同圖 1，但為第二個奇異直分解分佈，可解釋變異量佔總變異量之 18.98%，兩變異量相關 75.96%。

區形成馬蹄形 (horse-shoe-like) 海溫負區，但以南太平洋之負區較為明顯。在 SVD2 風場方面，對應於赤道東太平洋海溫正區，赤道中太平洋地區有明顯西風反應，同時在換日線到 120°W 間之海溫正區產生低層風場輻合，SVD2 海溫和風場分佈型態與 ENSO 成熟時期極為相似。進一步參考主分量時間序列可知，SVD2 最強之主分量發生時間為聖嬰成熟時之 12 月～隔年 1、2 月間 (如 1957/58、1965/66、1972/73、1982/83、1986/88、1997/92、1994/95、1997/98 等)，因此本文稱 SVD2 為「年際模」(interannual mode) 代表聖嬰/南方震盪模 (El Nino/Southern Oscillation mode，簡稱 ENSO) 時空分佈特徵。由

SVD1 與 SVD2 之模態特徵可知，透過奇異值分解可計算出兩物理量在空間與時間尺度中最明顯之耦合特徵。

3.2 濾波

由上一小節分析可知，奇異值分解可計算出兩個或兩個以上物理量間之耦合模時空分布特徵，將任一模態之特徵向量乘上該模態之主分量時間序列，即可表示出觀測資料中較純之特徵，並由此達到濾波效果。此外，本實驗為了聚焦在較長週期 (一年以上) 氣候變異特徵，季節訊號在計算前被先行濾除，在重建 SVD 模態時，需再加回季節平均值，故重建結果保有氣候平均場之基本特徵。圖 3 為觀測 (上圖) 與

透過 SVD1 重建(下圖)之氣候平均值。由平均值比較可見，透過 SVD1 重建後，海溫與風場平均值主要分布特徵皆與觀測相同。例如，西太平洋暖池與東太平洋冷舌之分布特徵與熱帶海溫較高並向兩極遞減之基本特徵皆與觀測

相同。在風場方面，南、北太平洋地區之副熱帶高壓分佈與赤道地區貿易風分佈之基本氣候特徵皆與觀測相同。由此可證實，透過 SVD 重建資料除可濾掉較小尺度現象外，並不影響主要的氣候特徵。

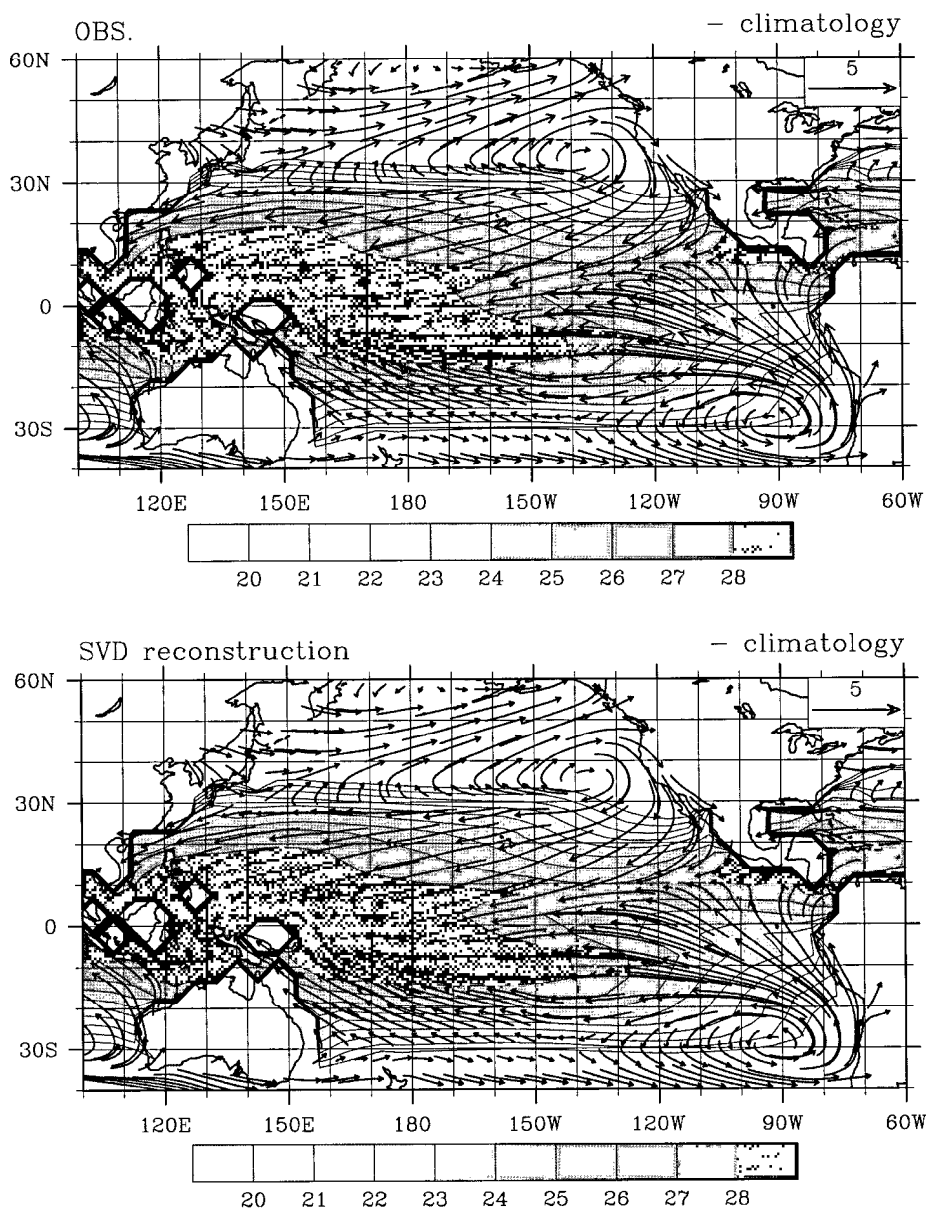


圖 3：1949~2000 年海平面溫度與 1000Hpa 風場之氣候平均值，上圖為觀測資料氣候平均值，下圖為透過 SVD1 重建資料氣候平均值。

在氣候變異特徵方面，由於SVD1為年代變化之訊號，故本研究以觀測之暖年代(1976~2000)氣候平均值減去冷年代(1949~1975)氣候平均值，以顯示出年代

變異特徵，並與SVD1重建之年代變異特徵比較。圖4中上圖為觀測資料之年代變化特徵，下圖為透過SVD1重建之年代差異。

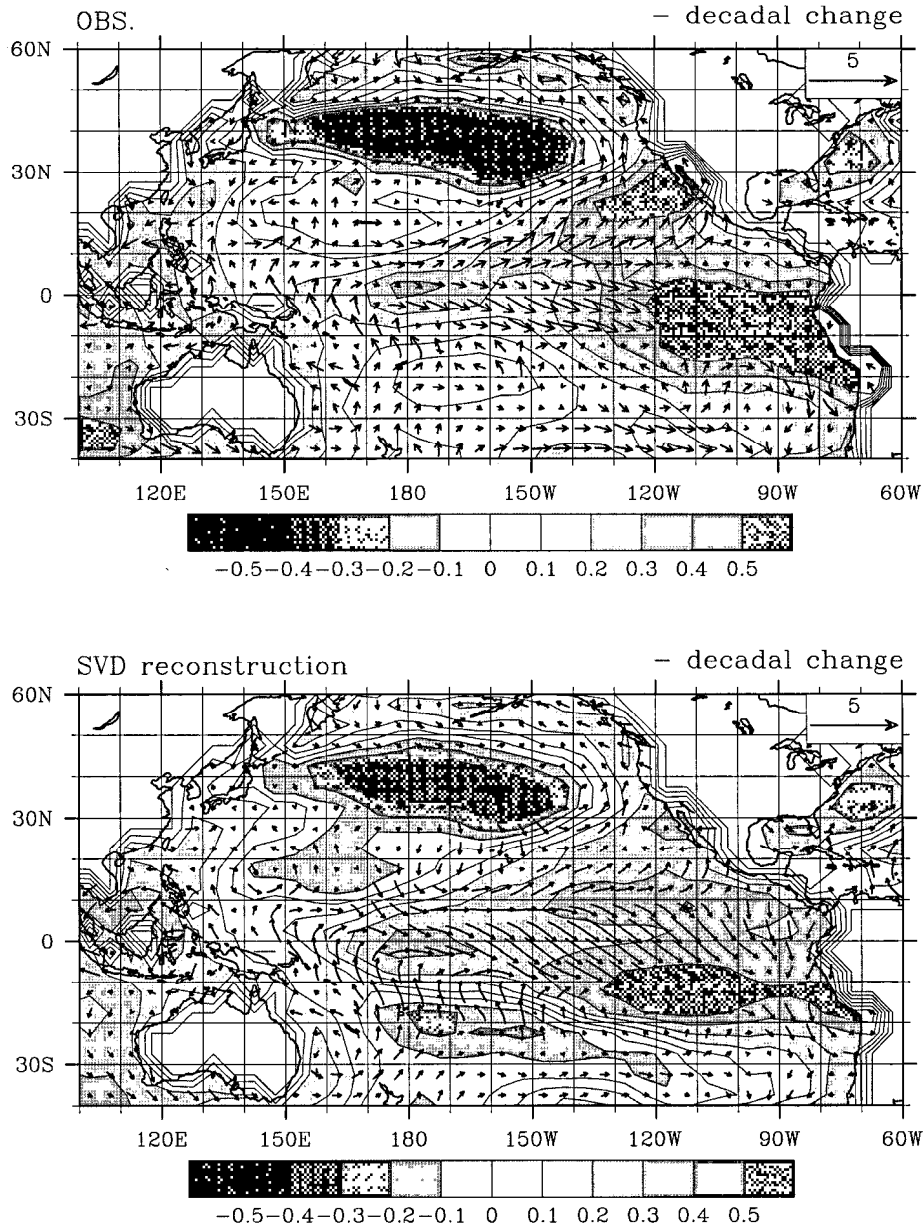


圖4：同圖3，但為年代差異值。

由觀測場相較於SVD重建之年代差異可見，其年代變異量由於包含其他時間尺度之氣候特徵，故其變異量較大。尤其在熱帶東太平洋地區，因為觀測資料中包含了近似年際尺度之變異特徵，故

海溫增溫區由原本位於東太平洋南緯15°，北移至接近赤道地區。由以上比較可知，透過奇異值分解可計算出長時間兩物理量之耦合特徵，並可藉此探討其空間與時間之分佈型態。

3.3 耦合模式

在奇異值分解法應用方面，除了透過 SVD 模態重建出較純之氣候變異特徵之濾波應用外，亦可將此重建資料驅動海洋模式，進行耦合實驗。例如，在觀測中海洋資料較為缺乏，若欲討論深層海洋之年代變化特徵，則可透過重建

SVD1 之風場驅動海洋模式，進而得到較純之年代海洋變化特徵。本文使用 Parallel Ocean Program (POP) 海洋模式模擬海洋之內部架構，並透過使用 SVD1 之年代特徵風場驅動海洋模式，以得到較純之海洋年代回應。圖 5 左為 JEDAC 海溫資料於赤道 160°E~90°W

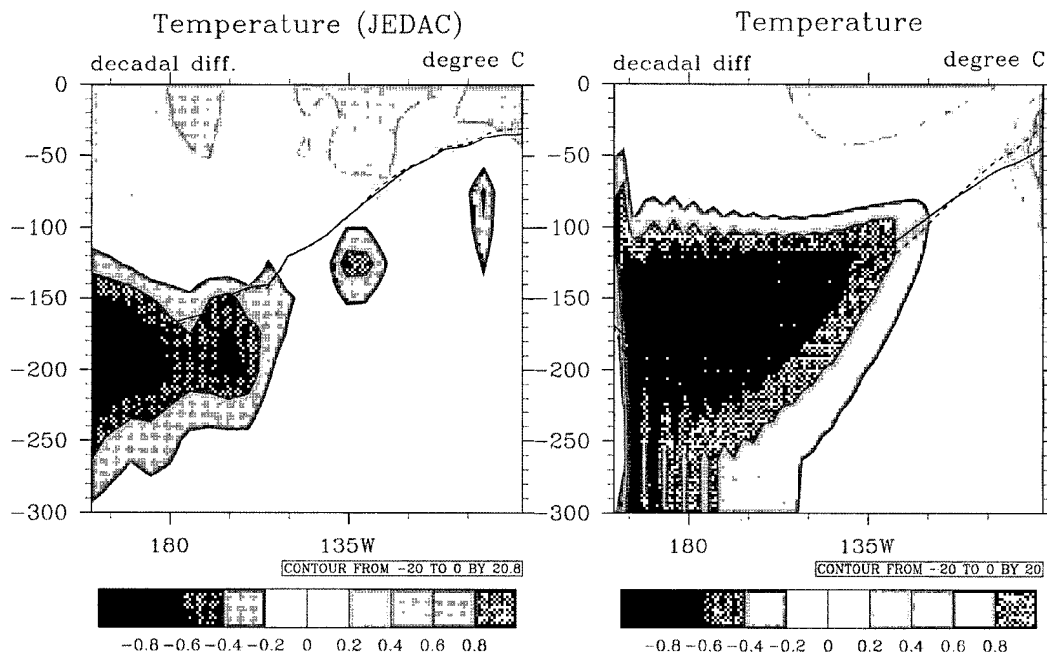


圖 5：左圖為 JEDAC 觀測資料於赤道地區 160°E~90°W 之年代變化垂直剖面距平圖，垂直分佈為海面至海面下 400 公尺。圖右為 SVD1 重建之年代風場驅動海洋模式之年代海溫平均差異垂直剖面圖，虛線為冷年代之斜溫層深度，實線為暖年代之斜溫層深度。

地區之年代變化垂直剖面距平圖，其東太平洋海表層溫度增溫約 0.5°C，而海溫增溫區約在海面至海面下 100 公尺深區域，西太平洋地區則有海溫降溫特徵，其降溫約 0.8°C，降溫幅度亦較年際變化弱，特徵範圍為海面至海面下 250 公尺。由於海溫變化較年際變化弱，故暖年代時期之斜溫層深度(實線)與冷年代時期之斜溫層深度(虛線)並無明顯差異。圖 5 右為透過年代風場驅

動模式之模擬海平面溫度年代變異差之赤道地區之年代海溫平均差異值之垂直剖面分佈，其年代差異分佈結果與觀測相同，在東太平洋約 150°W 之表層有海溫增溫之特徵，其增溫區約為海面下 75 公尺，增溫幅度約 0.8°C，在海面下 100 公尺至 250 公尺則為海溫降溫之年代特徵，其降溫約為 0.8°C。實線為暖年代斜溫層之平均深度，虛線為冷年代之斜溫層平均深度，暖年代時期東

太平洋因表層海溫上升，導致混合層加深，此結果與 JEDAC 之觀測分析相同，但其特徵更為明顯。

四、結論與討論

經驗正交函數、奇異值分解、波普分析、小波分析等皆為氣候研究中經常使用之高階統計方法，其中又以奇異值分解能計算出兩個或兩個以上物理

量之耦合時空分佈特徵，常用於探討海氣交互作用之物理過程。本文利用 NCEP/NCAR 再分析 1000hPa 風場和最佳化海面溫度資料，探討奇異值分解之實例，可歸納出下列幾個結論：

(1) 透過奇異值分解計算長時間兩個或兩個以上物理量，可得到兩物理量時空耦合特徵，此法常應用在熱帶大氣海洋交互作用研究上。

(2) 透過重建奇異值分解之部分特徵向量，可達到濾波之效果，以鎖定特定週期（或尺度）之耦合特徵，此法可應用於「聖嬰/南方震盪」或「熱帶年代震盪」研究上。

(3) 奇異值分解可發展出反應海溫變化之經驗大氣模式，常用於簡單之耦合大氣海洋模式中，有助於釐清海氣交互作用之物理過程。

參考文獻

- 張振璋，余嘉裕，2003：大氣海洋系統年際變異度之初步分析。華岡理科學報，**20**，209-228。
- Anderson, J., H. M. Van den Dool, A. Barnston, W. Chen, W. Stern, and J. Ploshay, 1999: present-Day Capabilities of Numerical and Statistical Models for Atmosphere Extratropical Seasonal Simulation and Prediction. *Bull. Ame. Meteor. Soc.*, **80**, 1349-1361.
- Brankovic, C., and T. N. Palmer, 2000: Seasonal skill and predictability of ECMWF ROVOST ensemble. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **126**, 2035-2067.
- Bretherton, C. S., C. Smith, and J. M. Wallace, 1992: An inter-comparison of methods for finding coupled patterns in climate data. *J. Climate*, **5**, 541-560.
- Fedrov, A. V., and S. G. Philander, 2000: Is El Nino changing? *Science*, **228**, 1997-2002.
- Latif, M., and T. P. Barnett, 1994: Causes of decadal climate variability over the North Pacific and North America. *Science*, **266**, 634-637.
- Syu, H.-H., and J. D. Neelin, 1995: Seasonal and interannual variability in a hybrid coupled GCM. *J. Climate*, **8**, 2121-2143

An introduction and the application of the singular value decomposition

Chen-Wei Chang¹ and Jia-Yuh Yu²

¹Institute of Geography, Chinese Culture University

²Department of Atmospheric Sciences, Chinese Culture University

Abstract

Singular value decomposition (SVD) is a matrix-manipulation technique by solving the cross-covariance matrix of two variables with space-time distributions. The square covariance derived from SVD represents the coupled pattern of the two variables. In this paper, NCEP/NCAR reanalysis surface winds and optimum interpolation sea surface temperature (OI SST) are employed to examine their coupled characteristics that can be applied to the climate research. In the application practices, through reconstruction of the first few singular vectors, the SVD can serve as a filter tool. Besides, the filtered modes are used to force an OGCM (oceanic general circulation model) to examine the ocean's response to atmospheric variability.

Key Words: Singular Value Decomposition, Decadal Oscillation