第35卷，第3期 光谱学与光谱分析 Vol. 35，No. 3，pp587-590
2015年3月 Spectroscopy and Spectral Analysis March，2015

一种三维矩阵的奇异值分解算法

朱尔一，王小华，杭　纬

厦门大学化学化工学院，谱学分析与仪器教育部重点实验室，福建 厦门　361005

摘　要　提出了一种三维矩阵的奇异值分解算法，该法适合处理具有三维矩阵数据的模式识别和分类模型等领域实际问题，该算法与二维矩阵奇异值分解算法类似，通过求解约束条件极值问题获得，该算法与已有的三线性分解算法比较，相对简单，计算速度快，适合处理数据量大的实际问题，该算法也很容易推广到更高维阵列的光谱数据。

关键词　三线性分解；奇异值分解；主成分分析

中图分类号：O433.1　　**文献标识码**：A　　**DOI**：10.3964/j.issn.1000-0593(2015)03-0587-04

引　言

矩阵的奇异值分解在数据压缩，模式识别，分类模型等领域有着广泛的应用，而一般的奇异值分解算法是针对二维矩阵的，不能直接处理三维矩阵数据。而目前有许多实际问题(包括光谱应用)的数据具有三维矩阵数据，主要有两类，一类是普通的二维数据增加一个时间维，即不同时间下的二维数据，构成的三维数据，另一类是每一个样本为二维数据，这样多个样本构成的三维数据，而目前能产生二维数据仪器有很多[1-5]包括许多光谱仪器，如：激发发射荧光仪(EX-EM)，液相色谱与二极管阵列联用仪(HPLC-DAD)，气相色谱与质谱联用仪(GC-MS)，气相色谱与红外联用仪(GC-IR)，毛细管电泳与质谱仪(CE-MS)，多维核磁共振仪等。目前已有许多种处理三维数据的算法。常用的有平行因子算法 PARAFAC[2]，交替三线性分解算法 ATLD[6]，加权交替三线性分解算法 SWATLD[7]，惩罚交替三线性分解 APTLD[8]等。但找到一种高效快速三维矩阵奇异值分解算法，对处理具有三维矩阵数据的实际问题仍然很有意义。

本研究提出一种新的三维矩阵(three-way array)的奇异值分解算法，其思路是由二维矩阵的奇异值分解算法直接延伸而来。二维矩阵的奇异值分解算法可通过求解约束条件极值问题获得，三维矩阵的奇异值分解算法也可以通过同样的思路得到。

首先，用求约束条件下极值问题的方法，求二维矩阵奇异值分解迭代公式或算法，然后，将该方法推广到求三维矩阵奇异值分解迭代公式或算法。

1　二维矩阵 X 奇异值分解算法

二维矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的奇异值分解可用公式表示为

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{USV}^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，包含正交归一化矢量 $\boldsymbol{u}_1$，$\boldsymbol{u}_2$，…，和正交归一化矢量 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{v}_2$，…，而 $\boldsymbol{S}$ 为对角矩阵，其对角元素为奇异值 s_1，s_2，…。

为得到矩阵 $\boldsymbol{X}$ 奇异值分解中的矩阵 $\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 中的矢量 $\boldsymbol{u}_1$，$\boldsymbol{u}_2$，…，矢量 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{v}_2$，…，及奇异值 s_1，s_2，…，可看通过求解归一化约束条件极值问题获得，即求归一化约束条件

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i = 1,\ \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i = 1\ i = 1,\ 2,\ \cdots \tag{2}$$

函数

$$G = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i \quad i = 1,\ 2,\ \cdots \tag{3}$$

的极值问题。通过求解该约束条件极值问题，可得到二维矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的奇异值分解迭代计算公式，并得到算法。

求解在约束条件下的极值问题经典数学方法为拉格朗日乘子法[9]，该法构造一个目标函数(极值函数)G，并在函数 G 中利用拉格朗日乘子包括了约束条件，并对该函数 G 求导，令其为0，并从所得关系式中求出变换矢量 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 的迭代计算公式。即构造目标函数

$$G = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i + s_i(1-\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i)/2 + s'_i(1-\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i)/2 \tag{4}$$

其中方程(4)中的第二，三项为约束条件 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i=1$ 和 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i=1$，而 s_i 和 s'_i 为拉格朗日乘子，其中常数1/2是为了便于计算，为了使 G 取极大值，令 $\partial G/\partial \boldsymbol{u}_i=0$ 和 $\partial G/\partial \boldsymbol{v}_i=0$，即

$$\partial G/\partial \boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i - s_i\boldsymbol{u}_i = 0$$

$$\partial G/\partial \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i - s'_i\boldsymbol{v}_i = 0$$

收稿日期：2014-10-11，**修订日期**：2014-12-30

基金项目：中央高校基本科研业务项目(20720140539)资助

作者简介：朱尔一，1957年生，厦门大学谱学分析与仪器教育部重点实验室副教授　　e-mail：ryzhu@xmu.edu.cn

可得

$$s_i \boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i \tag{5}$$

$$s'_i \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i \tag{6}$$

可证明 $s_i = s'_i$。用 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ 分别左乘以上两式，并注意约束条件 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i=1$ 和 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_i=1$ 可知，$s_i=\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i=\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i=s'_i$。$s_i$ 即为所要求的极值问题的极值，也是奇异值。实际上，式(5)和式(6)可直接作为矢量 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 的迭代计算公式，即

$$\boldsymbol{u}_i = 1/s_i\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i \tag{7}$$

$$\boldsymbol{v}_i = 1/s_i\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i \tag{8}$$

在迭代计算中可选择 s_i 使 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 为单位矢量或满足约束条件(2)，迭代收敛即可得到矢量 $\boldsymbol{u}_i$，$\boldsymbol{v}_i$ 和 s_i。

得到矢量 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 和 s_i 后，再更新矩阵 $\boldsymbol{X}$，从矩阵 $\boldsymbol{X}$ 减去 $s_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$，即

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}-s_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

再利用上面的式(7)和式(8)计算，可得到下一组矢量 $\boldsymbol{u}_{i+1}$ 和 $\boldsymbol{v}_{i+1}$ 和 s_{i+1}。

根据式(7)，式(8)和式(9)，可得到矩阵奇异值分解迭代算法，见表1。

三维矩阵的奇异值分解算法，也通过求解归一化约束条件极值问题获得。

Table 1 Iteration algorithm of singular value decomposition for matrix

1	Initial the vector	$\boldsymbol{v}_i$
2	Iteration calculate	$\boldsymbol{u}_i=1/s_i\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_i$
		Normalizing vector $\boldsymbol{u}_i$ by choosing s_i
		$\boldsymbol{v}_i=1/s_i\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i$
		Normalizing vector $\boldsymbol{v}_i$ by choosing s_i
		$s_i-s_{i(\mathrm{old})}<10^{-6}$ Stop iteration calculate
3	Deflate $\boldsymbol{X}$	$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}-s_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$
4	Steps 1~4 are repeated from $i=1$ to I until it is needed	

2 三维矩阵奇异值分解原理

三维矩阵 $\underline{\boldsymbol{X}}(I\times J\times K)$ 的奇异值分解模型采用三线性分解模型，三维矩阵 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 可分解成三个二维矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$，用张量公式表示为

$$x_{ijk} = s_1 a_{i1} b_{j1} c_{k1} + s_2 a_{i2} b_{j2} c_{k2} + \cdots + s_F a_{iF} b_{jF} c_{kF} + e_{ijk}$$
$$I=1,\ 2,\ \cdots,\ I,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ J,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ K \tag{10}$$

其中，x_{ijk} 为三维矩阵 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 的元素，a_{if}，b_{jf}，c_{kf} 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$ 的元素，e_{ijk} 为三维误差矩阵 $\underline{\boldsymbol{E}}$ 的元素，矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 包含归一化矢量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，…，$\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，…，和 $\boldsymbol{c}_1$，$\boldsymbol{c}_2$，…，s_1，s_2，…，为奇异值。

研究中的模型见图1。

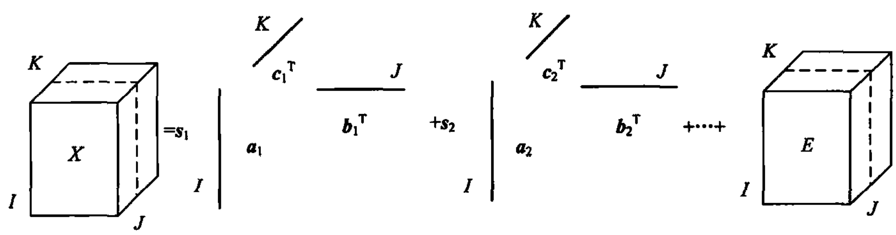

Fig. 1 Model of singular value decomposition for three-way array

与二维的情形相同，用求约束条件下极值问题的方法，来求解三维矩阵 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 奇异值分解问题，即求解奇异值分解中的矢量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，…，$\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，…，和 $\boldsymbol{c}_1$，$\boldsymbol{c}_2$，…，及奇异值 s_1，s_2，…，的计算公式，可看作一个求解，在归一化约束条件

$$\boldsymbol{a}_f^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_f=1,\ \boldsymbol{b}_f^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_f=1,\ \boldsymbol{c}_f^{\mathrm{T}}\boldsymbol{c}_f=1,\ f=1,\ 2,\ \cdots,\ F \tag{11}$$

下的极值问题，其中极值函数为

$$G=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K}x_{ijk}a_{if}b_{jf}c_{kf}\quad f=1,\ 2,\ \cdots,\ F \tag{12}$$

以上极值函数与二维的极值函数(3)类似。

用拉格朗日乘子法求上述极值问题，构造一个目标函数(极值函数)G，并在函数 G 中利用拉格朗日乘子包括了约束条件，并对该函数 G 求导，令其为0，并从所得关系式中求出矢量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，…，矢量 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，…，和矢量 $\boldsymbol{c}_1$，$\boldsymbol{c}_2$，…的迭代计算公式。即构造目标函数

$$G=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K}x_{ijk}a_{if}b_{jf}c_{kf}+s_f\Big(1-\sum_{i=1}^{I}a_{if}^2\Big)/2+ s'_f\Big(1-\sum_{j=1}^{J}b_{jf}^2\Big)/2+s''_f\Big(1-\sum_{k=1}^{K}c_{kf}^2\Big)/2 \tag{13}$$

其中方程(13)中的第二、三和四项为约束条件

$$\sum_{i=1}^{I}a_{if}^2=1,\ \sum_{j=1}^{J}b_{jf}^2=1,\ \sum_{k=1}^{K}c_{kf}^2=1$$

而 s_f，s'_f 和 s''_f 为 Laguange 乘子，式中常数1/2是为了便于计算。为了使 G 取极值，令 $\partial G/\partial a_{if}=0(i=1,\ 2,\ \cdots,\ I)$，$\partial G/\partial b_{jf}=0(j=1,\ 2,\ \cdots,\ J)$，$\partial G/\partial c_{kf}=0(k=1,\ 2,\ \cdots,\ K)$，可得

$$s_f a_{if}=\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K}x_{ijk}b_{jf}c_{kf}\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ I$$
$$s'_f b_{jf}=\sum_{i=1}^{I}\sum_{k=1}^{K}x_{ijk}a_{if}c_{kf}\quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ J \tag{14}$$
$$s''_f c_{kf}=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}x_{ijk}a_{if}b_{jf}\quad k=1,\ 2,\ \cdots,\ K$$

类似二维矩阵情形，由式(14)和式(11)的约束条件可知，

$$s_f=s'_f=s''_f=\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K}x_{ijk}a_{if}b_{jf}c_{kf}$$

s_f 即为所要求极值问题的极值，也是三维矩阵的奇异

值。式(14)可写成矩阵的形式

$$\begin{aligned} s_f a_{if} &= \boldsymbol{c}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{i..} \boldsymbol{b} f \quad i=1,2,\cdots,I \\ s_f b_{jf} &= \boldsymbol{a}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{.j.} \boldsymbol{c} f \quad j=1,2,\cdots,J \\ s_f c_{kf} &= \boldsymbol{a}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{..k} \boldsymbol{b} f \quad k=1,2,\cdots,K \end{aligned} \tag{15}$$

其中 $\boldsymbol{X}_{i..}$，$\boldsymbol{X}_{.j.}$ 和 $\boldsymbol{X}_{..k}$ 分别为立方阵 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 的第 i 个水平面矩阵($K\times J$)、第 j 个侧面矩阵($I\times K$)和第 k 个正面矩阵($I\times J$)。

3 三维矩阵奇异值分解的算法

利用式(15)作为矢量 $\boldsymbol{a}_f$，$\boldsymbol{b}_f$ 和 $\boldsymbol{c}_f$ 的迭代计算公式，在迭代计算中可选择 s_f 使矢量 $\boldsymbol{a}_f$，$\boldsymbol{b}_f$ 和 $\boldsymbol{c}_f$ 为单位矢量，迭代收敛即可得到矢量 $\boldsymbol{a}_f$，$\boldsymbol{b}_f$ 和 $\boldsymbol{c}_f$ 及 s_f。

得到矢量 $\boldsymbol{a}_f$，$\boldsymbol{b}_f$ 和 $\boldsymbol{c}_f$ 及 s_f 后，更新阵列 $\underline{\boldsymbol{X}}$，即按式(16)更新 $\underline{\boldsymbol{X}}$

$$x_{ijk} = x_{ijk} - s_f a_{if} b_{jf} c_{kf}$$
$$(i=1,\cdots,I;\ j=1,\cdots,J;\ k=1,\cdots,K) \tag{16}$$

再利用式(15)计算，计算下一个矢量 $\boldsymbol{a}_{f+1}$，$\boldsymbol{b}_{f+1}$ 和 $\boldsymbol{c}_{f+1}$ 及 s_{f+1}。

根据式(15)和式(16)，可得到三维矩阵奇异值分解迭代算法，见表2。

Table 2 Iteration algorithm of singular value decomposition for three-way array

1	Initial the vector	$\boldsymbol{b}_f$, $\boldsymbol{c}_f$
2	Iteration Calculate	$a_{if}=1/s_f \boldsymbol{b}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{i..} \boldsymbol{c}_f (i=1,\cdots,I)$
		Normalizing vector $\boldsymbol{a}_f$ by choosing s_f
		$b_{jf}=1/s_f \boldsymbol{a}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{.j.} \boldsymbol{c}_f (j=1,\cdots,J)$
		Normalizing vector $\boldsymbol{b}_f$ by choosing s_f
		$c_{kf}=1/s_f \boldsymbol{a}_f^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{..k} \boldsymbol{b}_f (k=1,\cdots,K)$
		Normalizing vector $\boldsymbol{c}_f$ by choosing s_f
		$s_f - s_{f(\mathrm{old})} < 10^{-6}$ Stop Iteration Calculate
3	Deflate $\underline{\boldsymbol{X}}$	$x_{ijk}=x_{ijk}-s_f a_{if} b_{jf} c_{kf} (i=1,\cdots,I;\ j=1,\cdots,J;\ k=1,\cdots,K)$
4	Steps 1~3 are repeated from $f=1$ to F	

经过表2中的算法计算，可得到模型中的矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$，及对应每一维的奇异值。

4 结果与讨论

先定义一个三线性分解模型拟合质量指标 EV

$$EV = (1 - \|\boldsymbol{E}\|^2 / \|\boldsymbol{X}\|^2) \times 100\%$$

其中 $\|\boldsymbol{X}\|^2 = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K} x_{ijk}^2$，$\|\boldsymbol{E}\|^2 = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K} e_{ijk}^2$，$EV$ 为三线性模型的可解释的方差。当 $\|\boldsymbol{E}\|^2=0$ 或 $EV=100\%$ 为完全拟合。

以下是一个简单的实例，$\underline{\boldsymbol{X}}$ 为 $2\times2\times2$ 三维阵，即，

$$\boldsymbol{X}_{..1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{X}_{..2} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

上述阵为很特殊的三维阵，由于该三维阵的特殊对称性，得到的三个矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 是相等的。应用表2中的算法对 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 处理得到

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}=\begin{pmatrix} 0.5257 & -0.8507 \\ 0.8507 & 0.5257 \end{pmatrix}$$
$$s_1 = 3.0777 \quad s_2 = 0.7265$$

并求得的 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 为完全拟合，即 $EV=100\%$。通过许多实例计算可知，不是任何一个三维数据矩阵都能完全三线性分解，即 $EV=100\%$，但对于任何一个三维数据矩阵都可以应用本方法处理，将具有三线性结构的数据提取出来。

5 结 语

提出的三维数据矩阵奇异值分解算法特点如下：

(1)算法是二维矩阵奇异值分解的延伸，当三维数据矩阵中其中一维分量数为1时，该算法完全变为二维矩阵奇异值分解算法。

(2)算法是为一种序列提取算法，其中函数 G(式12)取极值等效于取 $\|\boldsymbol{E}\|^2 = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K} e_{ijk}^2$ 极小值，每次循环计算，得到一组矢量 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$，更新阵列 $\underline{\boldsymbol{X}}$ 后，再计算下一组矢量，并使总误差 $\|\boldsymbol{E}\|^2$ 不断减小，最终得到所需要维数矢量。该方法排在最前面得到矢量 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ 对应奇异值最大，对 $\|\boldsymbol{E}\|^2$ 减小贡献最大，并依次减小，因此排在前面的矢量含信息量大，这与二维矩阵奇异值分解算法或主成分分析法相同，因此该方法比较适合处理模式识别分类问题。

(3)对于已有 PARAFAC，ATLD，SWATLD，APTLD 等交替最小二乘类三线性分解方法而言，本算法也是一种估计组分数的好方法，得到矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 可作为这些方法交替迭代计算的初始值。

(4)表2中算法相对简单，易于编程，并容易推广处理更高维阵列的数据，包括各种高阶光谱数据。

(5)本算法适合处理数据量大的光谱应用实际问题，因为算法比较简单，另外在使用中一般总组分数不会很大，只要总误差 $\|\boldsymbol{E}\|^2$ 减小幅度很小时，就可以停止计算，得到所需要的矩阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$。

(6)本方法为直接利用各种三维光谱数据作主成分分析，提供了新的工具，并适合用于处理各类具有三维光谱数据的模式识别，分类模型等问题。

References

[1] Kroonenberg P M., Applied Multiway Data Analysis, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2008.

[2] Smilde A, Bro R, Geladi P. Multi-Way Analysis: Applications in the Chemical Sciences, John Wiley & Sons, Ltd, England, 2004. 111.

[3] Wu Hailong, Li Yong, Yu Ruqin. Journal of Chemometrics, 2014, 28: 476.

[4] Olivieri A C. Analytical Methods 2012, 4: 1876.
[5] Wu Hailong, Nie Jinfang, Yu Ruqin et al. Analytica Chimica Acta, 2009, 650: 131.
[6] Wu H L, Shibukawa M, Oguma K. Journal of Chemometrics. 1998, 12: 1.
[7] Chen Z P, Wu H L, Yu R Q, et al. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2000, 52: 75.
[8] Xia A L, Wu H L, Yu R Q, et al. Journal of Chemometrics, 2005, 19: 65.
[9] ZHU Er-yi, YANG Peng-yuan (朱尔一，杨芃原). Chemometric Technology and Its Application(化学计量学技术及应用). Beijing: Science Press(北京：科学出版社), 2001. 100.

A Algorithm of the Singular Value Decomposition for Three-Way Array

ZHU Er-yi, WANG Xiao-hua, HANG Wei
College of Chemistry and Chemical Engineering Xiamen University and the Ministry of Education Key Lab of Spectrochemical Analysis & Instrumentation, Xiamen 361005, China

Abstract A algorithm of the singular value decomposition for three-way array is proposed in this paper. The algorithm is suitable to deal with the actual problems of pattern recognition and classification model with three-way array data. Similar to the algorithm of the singular value decomposition for matrix, the algorithm is obtained by saving the problem of extremum subject to constraint conditions. Comparing with the existent algorithms of trilinear decomposition the algorithm is simple and fast in calculation, suitable to deal with the actual bigger data problems. The algorithm is easy to expand into the situation for multi-way array spectral data.

Keywords Trilinear decomposition; Singular value decomposition; PCA

(Received Oct. 11, 2014; accepted Dec. 30, 2014)

《光谱学与光谱分析》对来稿英文摘要的要求

来稿英文摘要不符合下列要求者，本刊要求作者重写，这可能要推迟论文发表的时间。

1. 请用符合语法的英文，要求言简意明、确切地论述文章的主要内容，**突出创新之处**。

2. 应拥有与论文同等量的主要信息，包括四个要素，即研究目的、方法、结果、结论。其中后两个要素最重要。有时一个句子即可包含前两个要素，例如“用某种改进的 ICP-AES 测量了鱼池水样的痕量铅”。但有些情况下，英文摘要可包括研究工作的主要对象和范围，以及具有情报价值的其他重要信息。在结果部分最好有定量数据，如检测限、相对标准偏差等；结论部分最好指出方法或结果的优点和意义。

3. 句型力求简单，尽量采用被动式，通常应有 2500 个印刷字符，400 个英文单词为宜，不能太短；也不要太长。用 A4 复印纸单面打印。

4. 摘要不应有引言中出现的内容，换言之，摘要中必须写进的内容应尽量避免在引言中出现。摘要也不要对论文内容作解释和评论，不得简单重复题名中已有的信息；不用非公知公用的符号和术语；不用引文，除非该论文证实或否定了他人已发表的论文。缩略语、略称、代号，除相邻专业的读者也能清楚地理解外，在首次出现时必须加以说明，例如用括号写出全称。