

Tensor methods for reactive flows

Isacco Faglioni

November 19, 2025

1 Introduzione

I metodi di analisi lineare su tensori rappresentano un ambito di ricerca relativamente recente [1]. Per questa ragione, il loro utilizzo in campo combustivo è ancora limitato. Tuttavia, i dati sperimentali e numerici provenienti da simulazioni sono frequentemente disponibili in forma tensoriale, rendendo lo studio di questi metodi particolarmente promettente per l'analisi di flussi reattivi.

Queste note presentano una discussione intuitiva del significato fisico delle componenti di tali metodi quando applicati a dati combustivi. La trattazione matematica rigorosa è disponibile principalmente in [1] e [2].

Esistono diverse strategie per decomporre un tensore, ciascuna con caratteristiche e applicazioni specifiche. La scelta del metodo dipende dalle proprietà dei dati e dagli obiettivi dell'analisi.

1.1 Rango tensoriale e metodologie di decomposizione

Il concetto di rango per un tensore è più complesso rispetto al caso matriciale. Per un tensore di ordine N , si possono definire diversi tipi di rango:

- **Rango CP (CANDECOMP/PARAFAC)**: il numero minimo di tensori di rango 1 la cui somma ricostruisce il tensore originale
- **Rango Tucker**: una generalizzazione del rango matriciale, definito per ciascuna modalità del tensore
- **Rango multilineare**: legato alla dimensione del tensore core nella decomposizione di Tucker

Il main focus per ora è HOSVD perché è quello che si collega meglio a i metodi già presenti nel campo.

2 Basi di HOSVD per flussi reattivi

Un dataset spaziotemporale di combustione è rappresentato come tensore di quinto ordine $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I_x \times I_y \times I_z \times I_{\text{chem}} \times I_t}$, dove I_x , I_y e I_z denotano le tre dimensioni spaziali (x , y e z), I_{chem} rappresenta il numero di variabili termodinamiche, e I_t corrisponde agli istanti

temporali. L'HOSVD decompone questo tensore in un core tensor e matrici fattoriali ortogonali lungo ciascun modo:

$$\mathcal{X} = \mathcal{G} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \mathbf{U}^{(3)} \times_4 \mathbf{U}^{(4)} \times_5 \mathbf{U}^{(5)} \quad (1)$$

dove $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{I_x \times I_y \times I_z \times I_{\text{chem}} \times I_t}$ è il core tensor contenente i coefficienti di interazione tra i modi, $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times I_n}$ sono le matrici fattoriali ortogonali per il modo n , e \times_n denota l'operazione di prodotto lungo il modo n . Nello specifico, $\mathbf{U}^{(1)}$, $\mathbf{U}^{(2)}$ e $\mathbf{U}^{(3)}$ catturano le strutture spaziali nelle direzioni x , y e z , $\mathbf{U}^{(4)}$ identifica le correlazioni termochimiche, e $\mathbf{U}^{(5)}$ rappresenta l'evoluzione temporale.

Per comprendere davvero come funziona questo algoritmo e' necessario capire bene le nozioni di unfolding, prodotto n e cosa rappresentino le matrici \mathbf{U} . Tutte queste nozioni sono spiegate in maniera precisa in [1]

2.1 Unfolding

La definizione di unfolding lungo il modo n è abbastanza contorta dal punto di vista matematico, ma fortunatamente è abbastanza facile da visualizzare algoritmicamente. L'unfolding di un tensore \mathcal{T} lungo il modo n si ottiene fissando l'indice I_n come righe della matrice risultante e facendo variare una a una le matrici che si ottengono fissando in ordine gli altri indici. Per capire questa operazione nel caso tridimensionale semplice basta guardare la figura 1.

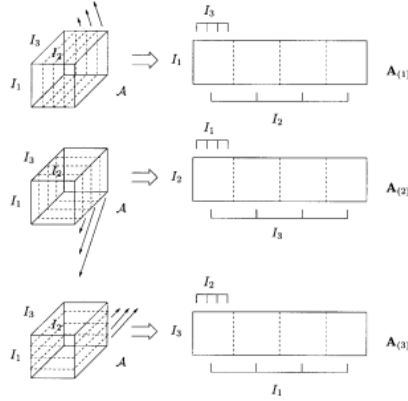


Figure 1: Visualizzazione dell'operazione di unfolding per un tensore tridimensionale lungo i tre modi possibili.

Per identificare i blocchi nella matrice unfolded, si procede fissando sequenzialmente tutti gli indici tranne quello del modo lungo cui si sta effettuando l'unfolding. Ad esempio, per un tensore di quinto ordine $\mathcal{T} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3 \times I_4 \times I_5}$, l'unfolding lungo il modo 3 produce una matrice $\mathbf{T}_{(3)} \in \mathbb{R}^{I_3 \times (I_1 \cdot I_2 \cdot I_4 \cdot I_5)}$ dove:

- Le righe corrispondono all'indice $i_3 = 1, \dots, I_3$
- Le colonne sono organizzate in blocchi ottenuti fissando sequenzialmente (i_1, i_2, i_4, i_5)
- Il primo blocco corrisponde a $(i_1 = 1, i_2 = 1, i_4 = 1, i_5 = 1)$, il secondo a $(i_1 = 2, i_2 = 1, i_4 = 1, i_5 = 1)$, e così via seguendo l'ordinamento lessicografico degli indici

Pertanto la matrice di unfolding lungo il modo n ha come righe le variazioni di tutto il tensore al fissarsi dell'indice n del tensore. Queste righe quindi contengono tutta la informazione riguardo a quanto variano i dati per un fissato parametro al loro interno. Le colonne di un unfolding non hanno nessun significato fisico visto che e' una brodaglia di tutto con tutto.

2.1.1 SVD degli unfolding

Le matrici fattoriali $\mathbf{U}^{(n)}$ dell'HOSVD si ottengono calcolando la Singular Value Decomposition (SVD) di ciascun unfolding $\mathbf{T}_{(n)}$:

$$\mathbf{T}_{(n)} = \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{\Sigma}^{(n)} (\mathbf{V}^{(n)})^T \quad (2)$$

dove:

- $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times I_n}$ è la matrice ortogonale dei vettori singolari sinistri, che costituisce la base per il modo n
- $\mathbf{\Sigma}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times (I_1 \cdots I_{n-1} I_{n+1} \cdots I_N)}$ contiene i valori singolari del modo n ordinati per magnitudine decrescente
- $\mathbf{V}^{(n)}$ è la matrice dei vettori singolari destri (che non viene utilizzata nella ricostruzione HOSVD)

I vettori singolari sinistri in $\mathbf{U}^{(n)}$ sono le direzioni principali di variazione lungo il modo n . Dato che le righe dell'unfolding catturano le variazioni del tensore al fissarsi dell'indice n , i vettori in $\mathbf{U}^{(n)}$ identificano i pattern dominanti ossia le direzioni nello spazio in cui vivono i vettori riga dell'unfolding che meglio catturano la loro varianza.

2.2 Prodotto lungo il modo n (n -product)

Il prodotto lungo il modo n (o n -product), denotato con \times_n , è la moltiplicazione di un tensore per una matrice lungo uno specifico modo.

Dato un tensore $\mathcal{T} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_N}$ e una matrice $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{J \times I_n}$, il prodotto $\mathcal{Y} = \mathcal{T} \times_n \mathbf{M}$ produce un nuovo tensore $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \cdots \times I_{n-1} \times J \times I_{n+1} \times \cdots \times I_N}$ dove:

$$\mathcal{Y} = \mathcal{T} \times_n \mathbf{M} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{Y}_{(n)} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{T}_{(n)} \quad (3)$$

Il prodotto lungo il modo n equivale a: effettuare l'unfolding del tensore lungo il modo $n \rightarrow$ moltiplicare la matrice \mathbf{M} per l'unfolding $\mathbf{T}_{(n)} \rightarrow$ riorganizzare il risultato nella forma tensoriale

2.3 Costruzione core tensor

Il core tensor e' costruito attraverso:

$$\mathcal{G} = \mathcal{X} \times_1 (\mathbf{U}^{(1)})^T \times_2 (\mathbf{U}^{(2)})^T \times_3 (\mathbf{U}^{(3)})^T \times_4 (\mathbf{U}^{(4)})^T \times_5 (\mathbf{U}^{(5)})^T \quad (4)$$

Questa operazione va pensata moltiplicazione per moltiplicazione per capire bene cosa significa. Moltiplicare il tensore unfoldato per la matrice $\mathbf{U}^{(n)}$ trasposta equivale a proiettare le sue righe nello spazio ortogonale che massimizza la varianza. Ricordiamo che le righe dell'unfolding lungo il modo n contengono tutta la variazione del tensore al fissarsi dell'indice n -esimo. Proiettare queste righe sulla base dei vettori singolari di $\mathbf{U}^{(n)}$ significa esprimere questa variazione nelle direzioni principali che catturano la massima varianza.

References

- [1] Lieven De Lathauwer, Bart De Moor, and Joos Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. *SIAM journal on Matrix Analysis and Applications*, 21(4):1253–1278, 2000.
- [2] Tamara G Kolda and Brett W Bader. Tensor decompositions and applications. *SIAM review*, 51(3):455–500, 2009.