

EXPLORACIÓN DEL ESPACIO LATENTE EN LA DESCARGA DE PARTÍCULAS MEDIANTE AUTOENCODERS ENTRENADOS CON SIMULACIONES DE MODELOS DE ELEMENTOS DISCRETOS

LATENT SPACE EXPLORATION OF PARTICLE DISCHARGE USING AUTOENCODERS TRAINED ON DISCRETE ELEMENT METHOD SIMULATIONS

Sergio E. Bertone, Gabriel D. Puccini, Carlos A. Bonetti, Jezabel D. Bianchotti y Melina Denardi

Laboratorio de Métodos y Simulaciones Computacionales, Facultad Regional Rafaela, Universidad Tecnológica Nacional, Acuña 49, Rafaela 2300, Argentina, gabriel.puccini@frra.utn.edu.ar (G.D.P)

Palabras clave: Autoencoder Variacional, Reducción Dimensional, Flujos Granulares, PCA, Representaciones Latentes

Resumen. En los últimos años los autoencoders variacionales (VAE) se han consolidado como una herramienta poderosa para aprender representaciones compactas y continuas de sistemas complejos. En el presente trabajo se aplica un VAE convolucional a la tarea de predecir la evolución temporal en un sistema de flujo granular simulado mediante el método de elementos discretos (DEM). Se entrena el modelo para recibir como entrada dos imágenes consecutivas de la simulación y generar como salida las imágenes de los pasos temporales siguientes. Posteriormente, se analiza el espacio latente resultante utilizando Análisis de Componentes Principales (PCA), con el objetivo de evaluar si las representaciones latentes capturan información relevante sobre el estado del sistema. Los resultados muestran que el modelo es capaz de organizar los datos en regiones diferenciadas y con continuidad temporal, lo que constituye una evidencia favorable de que el VAE ha aprendido variables de estado útiles para describir el sistema.

Keywords: Variational Autoencoder, Dimensionality Reduction, Granular Flows, PCA, Latent Representations

Abstract. In recent years, variational autoencoders (VAEs) have established themselves as a powerful tool for learning compact and continuous representations of complex systems. In this work, a convolutional VAE is applied to the task of predicting the temporal evolution in a granular flow system simulated by the discrete element method (DEM). The model is trained to take as input two consecutive images from the simulation and generate as output the images of the following time steps. Subsequently, the resulting latent space is analyzed using Principal Component Analysis (PCA), with the aim of evaluating whether the latent representations capture relevant information about the system's state. The results show that the model is capable of organizing the data into differentiated regions with temporal continuity, which constitutes favorable evidence that the VAE has learned useful state variables to describe the system.

1. INTRODUCCIÓN

Los flujos de materiales granulares son fenómenos complejos de gran interés en ingeniería y en aplicaciones industriales, tales como el transporte de sólidos, almacenamiento en silos y tolvas, y procesos de separación. La descripción matemática de estos sistemas suele abordarse mediante simulaciones de dinámica de partículas, conocidas como Método de Elementos Discretos (DEM), que resuelven de manera explícita las leyes de Newton para cada partícula (Cundall y Strack, 1979; Zhu et al., 2007, 2008). Si bien este enfoque es riguroso, su costo computacional puede ser elevado, especialmente cuando se requieren múltiples simulaciones para estudios paramétricos, optimización o control.

Una alternativa consiste en construir modelos de orden reducido que describan la dinámica del sistema en términos de un número reducido de variables de estado. Tradicionalmente, la reducción de dimensionalidad se ha llevado a cabo mediante técnicas como el Análisis de Componentes Principales (PCA), que transforma datos de alta dimensionalidad en un subespacio lineal de menor dimensión (Pearson, 1901; Holmes et al., 2012). De igual forma, la Descomposición en Valores Singulares (SVD) ofrece un método sistemático para aproximar datos de alta dimensión a través de una descomposición ortogonal conocida como Descomposición en Modos Propios (POD) (Berkooz et al., 1993; Taira et al., 2017). Aunque la SVD fue desarrollada originalmente para sistemas dinámicos basados en observaciones, no está diseñada para procesar directamente secuencias de imágenes ni para identificar variables de estado sin información adicional, lo que resulta fundamental para comprender la física subyacente en fenómenos complejos (Chen et al., 2021). Estas metodologías han sido ampliamente utilizadas para simplificar conjuntos de datos y facilitar la interpretación de modelos, aunque su carácter lineal limita su efectividad frente a la complejidad propia de flujos granulares. Por estas razones, se ha recurrido a extensiones no lineales del PCA mediante arquitecturas de redes neuronales conocidas como autoencoders (Baldi y Hornik, 1989; Goodfellow et al., 2016). En este escenario, los autoencoders se han consolidado como herramientas eficaces para descubrir representaciones latentes que capturan la esencia dinámica de sistemas complejos. A diferencia de las técnicas tradicionales lineales como PCA o POD (Pearson, 1901; Holmes et al., 2012), los autoencoders permiten modelar relaciones no lineales y descomponer los sistemas en componentes con mayor interpretabilidad física.

Aunque numerosas técnicas de aprendizaje automático han demostrado su eficacia para modelar la dinámica de sistemas físicos, muchas de ellas requieren que las mediciones específicas de las variables de estado sean conocidas. Por ejemplo, Brunton et al. (Brunton et al., 2016) emplearon coordenadas espaciales y sus derivadas para modelar el sistema de Lorenz, mientras que Champion et al. (Champion et al., 2019) utilizaron funciones base predefinidas para guiar el entrenamiento de un autoencoder en la reconstrucción de observaciones. Adicionalmente, otros autores han combinado redes neuronales con propiedades físicas conocidas para resolver ecuaciones partiendo de variables de estado previamente definidas (Udrescu y Tegmark, 2020). Estos enfoques muestran una dependencia significativa de datos explícitos, lo que limita la aplicabilidad de dichos métodos en escenarios donde tales datos son difíciles de obtener o directamente no están disponibles.

Los Autoencoders Variacionales (VAE) constituyen una extensión probabilística de los autoencoders clásicos, en la que las variables latentes se modelan como distribuciones, típicamente gaussianas, en lugar de puntos determinísticos (Kingma et al., 2014). Esta formulación permite no sólo la reconstrucción de las entradas, sino también la generación de nuevas muestras y la obtención de espacios latentes continuos y regularizados. En series temporales, los VAEs han

demostrado ser capaces de aprender representaciones significativas de datos de alta dimensión, que capturan de manera implícita factores como posición, movimiento y dinámica de los objetos (Gregor et al., 2015; Goroshin et al., 2015). Una de las ventajas principales de los VAEs es su capacidad de compresión: las imágenes o secuencias de alta resolución se proyectan en espacios latentes de dimensionalidad mucho menor, lo que permite representar el estado del sistema con un número reducido de variables sin perder información relevante (Walker et al., 2021). Estas representaciones compactas son útiles no sólo para almacenamiento eficiente, sino también como base para modelos de orden reducido o para simulaciones aceleradas. La elección de la dimensionalidad del espacio latente constituye un aspecto crítico ya que debe balancear la capacidad de representación y la interpretabilidad. Métodos recientes permiten estimar la dimensionalidad intrínseca de los datos a partir de propiedades estadísticas de los vectores latentes, lo que abre nuevas posibilidades de análisis y optimización arquitectónica (Bonheme y Grzes, 2022).

En trabajos previos se exploró la reducción de dimensionalidad en sistemas de partículas en movimiento mediante autoencoders convolucionales, estableciendo una primera aproximación a la representación comprimida de su dinámica (Bertone et al., 2024).

En este trabajo se propone un Autoencoder Variacional para modelar el flujo granular durante la descarga de una tolva. A diferencia de un autoencoder determinista, el VAE impone una distribución probabilística sobre el espacio latente, favoreciendo la continuidad y regularidad de la representación, y permitiendo la generación de nuevos estados plausibles mediante muestreo. El objetivo de este trabajo es doble. Por un lado, se busca verificar la capacidad del VAE para predecir correctamente la evolución de la dinámica de partículas a corto plazo y, por otro lado, analizar la estructura de su espacio latente para identificar si contiene información interpretable sobre el estado del sistema.

2. METODOLOGÍA

2.1. Generación de datos

El conjunto de datos empleado fue generado computacionalmente mediante simulaciones DEM de la descarga de una tolva bidimensional (Bertone et al., 2018, 2023) usando el software de simulación LIGGGHTS (Kloss et al., 2012). Durante el transcurso de la simulación las partículas interactúan entre sí y con los bordes del dominio, modificando sus trayectorias y velocidades. De este modo se simula la filmación de un sistema dinámico, donde cada imagen generada corresponde a un cuadro en una secuencia temporal. Cada simulación produce 90 imágenes en escala de grises (128×128 px), representando la posición de partículas circulares en diferentes instantes de tiempo, con un intervalo de 0.01 s. En total se generaron 492 secuencias independientes.

Para cada secuencia, las imágenes se agruparon en secuencias de cuatro cuadros consecutivos. Los dos primeros cuadros se utilizaron como datos de entrada del modelo y los dos siguientes se utilizaron como objetivo a predecir. Se construyeron así más de 40.000 ejemplos de entrenamiento. Se dividió el dataset en conjuntos de entrenamiento (80 %), validación (10 %) y prueba (10 %), cuidando de que las secuencias completas pertenecieran a un único conjunto para evitar fuga de información.

2.2. Arquitectura del autoencoder

La arquitectura del modelo, cuyo esquema se muestra en la Figura 1, consiste en un VAE con un encoder convolucional de cinco bloques, cada uno compuesto por capas Conv2D seguidas

de Batch Normalization, activación ReLU y MaxPooling, que reduce la resolución de la imagen hasta obtener un mapa de características de tamaño 8×4 con 512 canales. Esta representación se aplana en un vector de 16.384 características, a partir del cual se calculan la media y la varianza logarítmica de un espacio latente de 128 dimensiones. La reparametrización se realiza como:

$$z = \mu + \exp\left(\frac{1}{2} \log \sigma^2\right) \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, I)$$

El decoder invierte el proceso aplicando una capa densa, reshape, y cinco bloques de convoluciones transpuestas hasta reconstruir la imagen de salida de 256×128 px (correspondiente a los dos cuadros objetivo concatenados).

De este modo, el flujo del modelo involucra la transformación de los cuadros de entrada a una representación latente comprimida que captura las dinámicas del sistema, y luego reconstruye los cuadros futuros a partir de esta representación. El proceso de concatenación de las imágenes permite que los modelos procesen secuencias temporales de manera efectiva, facilitando la predicción de los estados futuros del sistema.

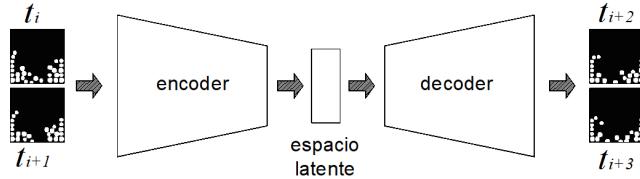


Figura 1: Esquema del autoencoder.

2.3. Entrenamiento de la red y análisis del espacio latente

Para entrenar el modelo se utilizó el optimizador Adam y se estableció una tasa de aprendizaje inicial de 10^{-4} y un tamaño de lote (batch) de 32. La función de pérdida combinó dos términos: la pérdida de entropía cruzada binaria (BCE), que evalúa la calidad de la reconstrucción de las imágenes, y la divergencia de Kullback-Leibler (KL) ponderada por $\beta = 2,0$, que regulariza el espacio latente para que siga una distribución gaussiana estándar. Durante el entrenamiento se monitoreó la pérdida de validación para evitar sobreajuste y se guardó el modelo con el mejor desempeño.

Una vez entrenado el modelo, se extrajeron los vectores de medias z_μ correspondientes a 1008 ejemplos del conjunto de prueba. Para visualizar la distribución y estructura de estos datos en el espacio latente, se aplicó un Análisis de Componentes Principales (PCA) que redujo la dimensionalidad al subespacio definido por las dos primeras componentes principales.

3. RESULTADOS

3.1. Rendimiento predictivo

Para evaluar la capacidad de predicción del modelo se compararon dos tipos de relaciones: los cuadros de entrada con los cuadros objetivo que se querían predecir (baseline), y los cuadros de salida generados por el modelo con los cuadros de salida reales.

Como métrica se utilizó el índice de similitud estructural (SSIM), una medida perceptual que cuantifica la similitud entre dos imágenes considerando luminancia, contraste y estructura, con valores en el rango de 0 (sin similitud) a 1 (idénticas).

El baseline, correspondiente a la comparación entre los cuadros de entrada y los cuadros objetivo, arrojó un SSIM de 0.72. Por su parte, el SSIM entre los cuadros de salida reales y los generados por el modelo alcanzó un valor de 0.76 (aproximadamente un 5.5 % superior). Esta mejora, junto con la reducción del error cuadrático medio (MSE = 0.05), indica que el VAE predice de manera efectiva la dinámica futura del flujo granular, y no simplemente reproduce los cuadros de entrada.

La Figura 2 muestra cualitativamente el desempeño predictivo del modelo en un ejemplo del conjunto de prueba, presentando en paralelo la concatenación de los cuadros de entrada (A), los cuadros objetivo reales (B) y los cuadros generados por el modelo (C). Se observa que el modelo reproduce de manera consistente la dinámica esencial del sistema, conservando con precisión la geometría estática de los bordes de la tolva y la posición de la interfaz granular. No obstante, en las regiones centrales de mayor flujo —donde la dinámica de partículas es más compleja y de comportamiento caótico— las predicciones presentan un efecto de suavizado. Este comportamiento no debe interpretarse únicamente como pérdida de nitidez, sino como una manifestación del carácter probabilístico del VAE, que refleja la incertidumbre propia de las colisiones y del movimiento caótico en las zonas de alta actividad

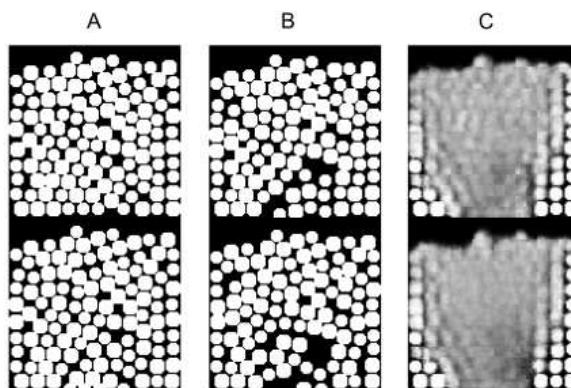


Figura 2: Comparación de las predicciones del modelo VAE. (A) Cuadros de entrada concatenados. (B) Cuadros de salida concatenados. (C) Predicción generada por el modelo.

3.2. Estructura y evolución temporal del espacio latente

La Figura 3 muestra dos gráficos que permiten apreciar diferentes aspectos del espacio latente.

En el gráfico A se muestra la proyección PCA coloreada según el índice temporal de cada cuadro dentro de su secuencia correspondiente. Esta visualización permite observar cómo los estados latentes evolucionan a lo largo del tiempo. Aunque no se aprecia un gradiente cromático completamente suave, se identifican patrones consistentes: cuadros de color similar (instantes temporales cercanos) tienden a agruparse, y se pueden intuir trayectorias semi-ordenadas que reflejan parcialmente la evolución temporal del sistema.

En el gráfico B se observa la misma proyección PCA sin coloración temporal, mostrando únicamente la estructura del espacio latente. Se observan clusters densos separados por regiones de menor densidad, indicando que el modelo organiza internamente las representaciones de manera coherente, agrupando configuraciones visuales o estados dinámicos similares (por ejemplo, tolva llena, flujo en masa, formación de arcos), incluso sin supervisión explícita.

Estos gráficos permiten visualizar tanto la organización espacial del espacio latente como la dinámica temporal que se preserva en las representaciones internas del VAE.

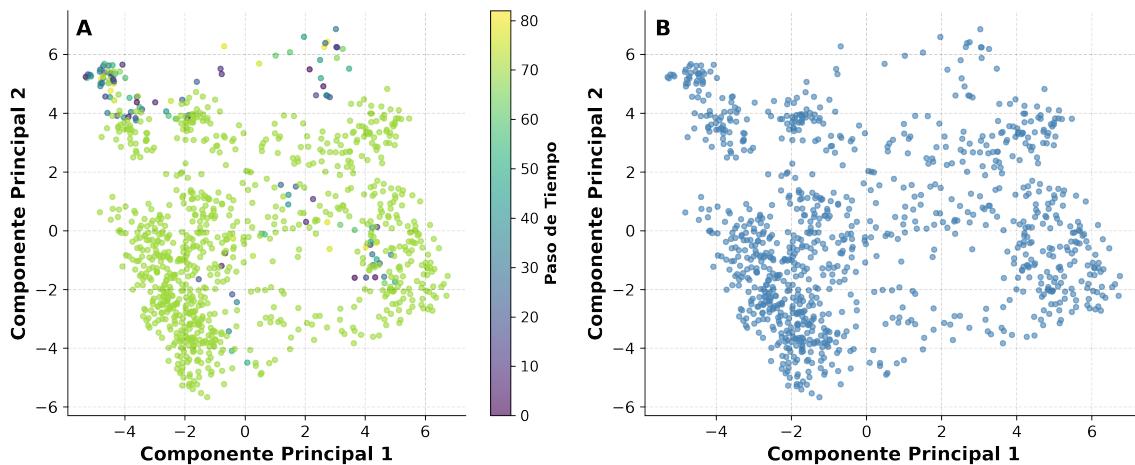


Figura 3: Análisis del espacio latente mediante PCA. (A) Proyección de las representaciones latentes coloreada según el paso de tiempo dentro de la secuencia. (B) Misma proyección, mostrando la estructura general de agrupamientos.

4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran que el VAE no solo reconstruye adecuadamente los cuadros futuros, sino que también genera un espacio latente estructurado que permite identificar regiones asociadas a diferentes configuraciones del sistema. Este resultado representa un primer paso hacia la identificación de variables de estado interpretables para modelos de orden reducido, facilitando el desarrollo de representaciones compactas y comprensibles del sistema. En trabajos futuros, se planea profundizar el análisis del espacio latente correlacionando sus dimensiones con magnitudes físicas como número de partículas, flujo másico y perfiles de velocidad, así como incorporar regularizadores que promuevan una mayor continuidad temporal en dicho espacio. Además, se contempla extender este enfoque a simulaciones tridimensionales y estudiar su integración en esquemas de simulación acelerada.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad Tecnológica Nacional por financiar esta investigación en el marco del proyecto con Código ASPPRA0010245.

REFERENCIAS

- Baldi P. y Hornik K. Neural networks and principal component analysis: Learning from examples without local minima. *Neural Networks*, 2(1):53–58, 1989.
- Berkooz G., Holmes P., y Lumley J.L. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25(1):539–575, 1993.
- Bertone S., Puccini G., Monier E., y Jappert S. Simulación de flujos de sólidos a granel en tolvas utilizando modelos de elementos discretos. *XII Congreso Argentino de Mecánica Computacional Mecom 2018*, páginas 1–10, 2018.
- Bertone S.E., Puccini G.D., Bonetti C., Denardi M., y Bianchotti J. Impacto de las vibraciones

- mecánicas en la descarga de sólidos a granel en una tolva bidimensional: un análisis basado en modelos de elementos discretos. *Mecánica Computacional*, 40(36):1285–1292, 2023.
- Bertone S.E., Puccini G.D., Bonetti C.A., Denardi M., y Bianchotti J.D. Reducción de la dimensionalidad de un sistema de partículas en movimiento utilizando redes neuronales convolucionales. *Mecánica Computacional*, 41(19):1023–1031, 2024.
- Bonheme L. y Grzes M. How do variational autoencoders learn? insights from representational similarity. *arXiv preprint arXiv:2205.08399*, 2022.
- Brunton S.L., Proctor J.L., y Kutz J.N. Proceedings of the national academy of sciences. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(14):3932–3939, 2016. doi: 10.1073/pnas.1517792113.
- Champion K., Lusch B., Kutz J.N., y Brunton S.L. Proceedings of the national academy of sciences. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(45):22445–22454, 2019. doi:10.1073/pnas.1911627116.
- Chen B., Huang K., Raghupathi S., Chandratreya I., Du Q., y Lipson H. Discovering state variables hidden in experimental data. 2021. doi:10.48550/arXiv.2112.10755.
- Cundall P. y Strack O. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1):47–65, 1979.
- Goodfellow I., Bengio Y., Courville A., y Bengio Y. *Deep Learning*, volumen 1. MIT Press, Cambridge, 2016.
- Goroshin R., Bruna J., Tompson J., Eigen D., y LeCun Y. Unsupervised learning of spatiotemporally coherent metrics. En *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision*, páginas 4086–4093. 2015.
- Gregor K., Danihelka I., Graves A., Rezende D., y Wierstra D. Draw: A recurrent neural network for image generation. En *International conference on machine learning*, páginas 1462–1471. PMLR, 2015.
- Holmes P.J., Lumley J.L., Berkooz G., y Rowley C.W. *Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry*. Cambridge Monographs in Mechanics. Cambridge University Press, Cambridge, England, 2nd edición, 2012.
- Kingma D.P., Rezende D.J., Mohamed S., y Welling M. Semi-supervised learning with deep generative models. *Advances in neural information processing systems*, 27, 2014.
- Kloss C., Goniva C., Hager A., Amberger S., y Pirker S. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. *Progress in Computational Fluid Dynamics, An Int. J.*, 12(2/3):140–152, 2012.
- Pearson K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine*, 2(7-12):559–572, 1901.
- Taira K., Brunton S.L., Dawson S.T.M., Rowley C.W., Colonius T., McKeon B.J., Schmidt O.T., Gordeyev S., Theofilis V., y Ukeiley L.S. Modal analysis of fluid flows: An overview. *AIAA Journal*, 55(12):4013–4041, 2017.
- Udrescu S.M. y Tegmark M. Science advances. *Science Advances*, 6(23):eaay2631, 2020. doi:10.1126/sciadv.aay2631.
- Walker J., Razavi A., y Oord A.v.d. Predicting video with vqvae. *arXiv preprint arXiv:2103.01950*, 2021.
- Zhu H., Zhou Z., Yang R., y Yu A. Discrete particle simulation of particulate systems: theoretical developments. *Chemical Engineering Science*, 62(13):3378–3396, 2007.
- Zhu H., Zhou Z., Yang R., y Yu A. Discrete particle simulation of particulate systems: a review of major applications and findings. *Chemical Engineering Science*, 63(23):5728–5770, 2008.