Gépi tanulási módszerek a fotometrikus vöröseltolódás-becslésben

Fizika BSc szakdolgozat

Horváth Bendegúz

az ELTE TTK Fizika BSc hallgatója

Témavezető: Dr. Csabai István egyetemi tanár, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Kivonat

Ide kell megírnom a kivonatot.

Tartalomjegyzék

1.	Beve	zetés	3				
2.	Vöröseltolódás-becslés és gépi tanulás						
	2.1.	Fotometrikus vöröseltolódás-becslés	5				
	2.2.	A gépi tanulási módszerek	7				
3.	. Adatok						
	3.1.	Sloan Digital Sky Survey	11				
4.	A ku	itatás	13				
	4.1.	Tanulóhalmaz	13				
	4.2.	Módszerek	13				
	4.3.	Modellek	13				
Iro	dalor	njegyzék	15				

Tartalomjegyzék 2

Bevezetés

Az Univerum nagy skálás szerkezetének megértéséhez szükséges, hogy térképet tudjunk készíteni a galaxisok elhelyezkedéséről. Két koordinátát, a galaktikusszélességet és galaktikushosszúságot könnyen megkaphatjuk, viszont a távolság meghatározása már nehezebb feladat. A trigonometrikus parallaxis módszer a legjobb technikákkal is csak galaxison belül működik, a jó *seeing* érdekében pedig űrtávcső kell. A standard gyertya módszerek pontos távolságértéket adnak, de csak néhány százmillió fényév távolságon belül alkalmazhatóak, ezért kell egy olyan módszer, amivel távolabb is mérhetünk, pontosan.

A XX. század elején Edwin Hubble és Vesto Slipher a galaxisok színképének tanulmányozása során észrevették, hogy a színképek eltolódnak a nagyobb hullámhosszak, a vörös színtartomány felé a laboratóriumban mért vonalszerkezethez képest, a galaxis vöröseltolódást szenved. Hubble méréseket készített a galaxisok távolságáról és vöröseltolódásáról, és lineáris összefüggést tapasztalt, amit a később róla elnevezett törvény ír le:

$$v = H \cdot d, \tag{1.1}$$

az arányossági tényező a Hubble-állandó, értéke $H=73.45\pm1.66$ km/Mpc. Ez az összefüggés lehetőséget ad a pontos távolságmérésre, ha a galaxisok vöröseltolódását meg tudjuk mérni.

Vöröseltolódás mérésre a legpontosabb módszer felvenni az objektum spektroszkópiai képét, és megnézni, hogy a vonalak mennyire csúsztak el. A megfelelő minőségű spektrum

felvételéhez akár egy órányi távcsőidő szükséges, ezért sokáig nem is készült égbolttérkép. Az 1986-ban Margaret Geller és munkatársai által készítet égtérkép csupán egy vékony szeletet fedett le az égből, de már azon is kirajzolódott, hogy a galaxiseloszlás nem egyenletes azon a skálán. Gellerék térképén a legtávolabbi galaxisok körülbelül 200 Mpc távolságnyira voltak tőlünk, ezért volt motiváció elkészíteni egy még távolabb látó térképet. A BEKS égfelmérés szűkebb, 1×1 négyzetfokos tartományban, ceruzaszerűen¹ nézett 1000-1000 Mpctávolságba mindkét irányba, és ezen a skálán is kirajzolódótt struktúra az anyageloszlásban, és a sűrűség ingadozás periodikusnak mutatkozott. Nagy távolságokra csökkent az észlelt galaxisszám, ez a halványabb galaxisok nehezebb észlelhetősége miatt volt. A technikai fejlődésnek köszönhetően elkészülhettek olyan kisérleti berendezések, amelyek lehetővé tették valódi háromdimenzióban a galaxisok pontos helyzetének felmérését. A Sloan Digital Sky Survey első fázisában 1 millió objektum spektrumát vette fel négy év alatt[1]. Ez a sebeség nem kielégítő, ezért felmerült az igény, hogy a vöröseltolódásokat fotometriai úton mérjék. A fotometriával mért vöröseltolódások kicsit pontatlanabbak, de mrérésük gyorsabb mint spekroszkópiával, ezenkívűl halványabb objektumokat is lehet vele mérni, magasabban van a magnitúdó korlát. Ezen tulajdonságok vonzóvá teszi a vöröseltolódás becslését fotometriai módszerekkel.

Dolgozatom célja az általam készített, gépi tanuláson alapuló fotometrikus vöröseltolódás-becslő módszerek bemutatása, amelyek a galaxisok képeit használjaák fel fotometriaia adatként.

¹ pencil-beam survey

Vöröseltolódás-becslés és gépi tanulás

2.1. Fotometrikus vöröseltolódás-becslés

A vöröseltolódás fotometriával történő becslésének kétféle megközelítése van, empirikus és spektrumokon alapuló. Egy spektrumon alapuló módszert előszőr 1962-ban írt le Baum[2], fotoelektromos fotométert használt kilenc sáváteresztő filterrel, amik 3730 Å és 9875 Å közötti hullámhosszú fényt engedtek át. Ezzel a rendszerrel 6 fényes elliptikus galaxis spektrális energia-eloszlását (spectral energy distribution, SED) mérte meg a Virgo halmazból, majd még háromnak egy másik halmazból. A SED-ek átlagát ábrázolta a hullámhossz logaritmusának függvényében, és képes volt észrevenni az eltolódást a két energia sűrűségeloszlás között, így a második klaszternek a vöröseltolódását is megkapta. Mérése pontos volt, de a módszer arra támaszkodott, hogy a spektrumoknak 4000 Å-nél levágása van, melyet a csillag-atmoszférák fémtartalma okoz, ez az elliptikus galaxisoknál jól látható, de például az aktív csillagkeletkezést mutató irreguláris galaxisokban ez a levágás nem figyelhető meg, ezért ez a módszer csak elliptikus galaxisoknál volt használható[3].

David C. Koo egy másik módszert, a szín-szín diagrammok módszerét vezette be 1985-ös cikkében[4]. Négy sáváteresztő szűrőt használt, melyeken mért magnitúdók különbségével létrehozott színtereken ábrázolva az azonos típusú, különböző vöröseltolódású galaxisokat jól definiált görbét kapott. Szín-szín diagrammokat bármilyen kombinációjából lehet készíte-

ni három vagy több színnek, az optimális választás a várt vöröseltolódás-eloszlástól függhet, a gyakorlati választás a rendelkezésünkre álló szűröktől[4]. Ez a megközelítés a fotometriai vöröseltolódás-meghatározás fontos eleme lett, ugyanis az egyes galaxisok típusának és színszűrőkön mért fényességének ismeretében meghatározható, hogy milyen vöröseltolódást szenved a galaxis.

Egy harmadik, gyakran használt módszer a *template fitting* (sablon illesztés), ez a módszer is a spektrális energiasűrűség-eloszlásra támaszkodik, az ismert vöröseltolódású és SED-ű galaxisok SED-jéből felépül egy könyvtár, és az ismeretlen vöröseltolódású galaxisok SED-jét hozzá lehet párosítani hasonlóság alapján a könyvtárban lévőkhöz. A *template* módszerek nagyon hasznosak lehetnek új égboltfelmérésnél, ha nem áll rendelkezésre megfelelő mennyiségű spektroszkópiai adat. A módszer használatával, különösen ha elméleti sablonokat használnak[5], a vöröseltolódáson kívűl egyéb fizikai tulajdonságát is is ki lehet nyerni a galaxisnak. Megfelelő használatához a sablonkönyvtárnak teljesnek kell lennie, hogy össze lehessen kötni mindegyik mérni kívánt galaxis SED-jét egy sablonnal, különben szisztematikus hiba jelenik meg a mérésben, viszont a túl sok sablon degenerációhoz vezethet. A sablonillesztő és spektrumokon alapuló módszerek egyébb változatait és eredményeik összevetését jól leírják Hildebrandt és társai[6].

Empirikus módszerek alkalmazásához szükség van nagy mennyiségű spektroszkópiával mért vöröseltolódás-adatra és hozzájuk valamilyen, fotometriával mért adatokra. Az egyik legegyszerűbb módszer, hogy a színszűrőkön mért magnitúdóértékekere többváltozós lineáris vagy kvadratikus függvényt illesztenek[7]. Ezeket az adatokat felhasználva a függvényillesztés helyett lehet gépi tanuló eljárásokat is alkalmazni, például *nearest neighbour*[8], *random forest*[9] vagy neurális hálókat[10]. Ezeknek a módszereknek előnye, hogy használatuk viszonylag egyszerű, hatalmas adathalmazokon is működhetnek, illetve nincs szükség a SED-re se, de nagy mennyiségű és jó minőségű tanulóhalmaz kell az előkészületekhez.

2.2. A gépi tanulási módszerek

A gépi tanuló módszerek már a XX. század közepén megjelentek, de a számítástechnika és a rendelkezésre álló adatok mennyisége még nem állt olyan szinten, hogy töretlenül fejlődhessen. Az akkori megközelítés szorosan összefüggött a mesterséges intelligencia kutatásával, de az 1990-es években az irány eltolódott a gyakorlati jellegű problémák megoldása felé. Ma már egyre több használható adat és fejlett grafikus processzorok mellett sokféle gépi tanuló algoritmus lett implementálva, így a nehézségek a megfelelő módszer megtalálása és alkalmazása az adatokra, illetve az adatok használható formába hozása. A gépi tanulás célja, hogy a gép *megértse* az adatok szerkezetét, felismerjen egy szabályt és ez alapján jóslatokat tegyen.

Három nagyobb kategóriába sorolhatjuk a módszereket a rendelkezésre álló adatok és problémák alapján. Az egyik csoport a felügyelt tanulás, ilyenkor rendelkezésünkre álló adatok jelöltek, van egy *ground truth*, amit a modell jóslatainak meg kell közelítenie. A felügyelt tanulási módszereket osztályozás és regressziós problémák megoldásához használják, napjainkban az egyre nagyobb felcímkézett adathalmzoknak köszönhetően egyre több problémára tudják alkalmazni. A felügyelet nélküli tanulási módszerek felcímkézetlen adatokkal dolgoznak, feladatuk, hogy felfedjék a az adtokban rejtett struktúrákat. Az *ground truth* hiánya miatt nem lehet jellemezni a tanulás minőségét számértékkel. A fotometrikus vöröseltolódásbecslésben a várt végeredmény jól meghatározott, ezért felügyelt tanulási módszereket alkalmaznak [10], [12]. Ezeknek a módszerek megértéséhez fontosnak tartom bemutatni a munkám során használt eljárások általános a működési elvét, és alkalmazhatóságának határait.

Felügyelt tanulásnál rendelkezésünkre áll egy $(x_1,y_1),(x_2,y_2),...(x_N,y_N)$ adathalmaz, ahol x_i egy mintát jelöl és a tulajdonságok(features) számával megegyező dimenziójú vektor, y_i jelöli az osztálycímkét vagy a minta értékét regressziós problámákban, dimenziója az osztályok számával megegyező. A feladat, hogy a gép megtalálja azt a leképzést, ami a lehető legkisebb hibával képez x_i -ből y_i -be még nem látott minták esetén is. A hiba mérését az adatokhoz és a feladathoz illő metrikával kell végezni. A kutatáshoz kétféle módszert használtam, x_i -nadom forest regressort és neurális hálókat.

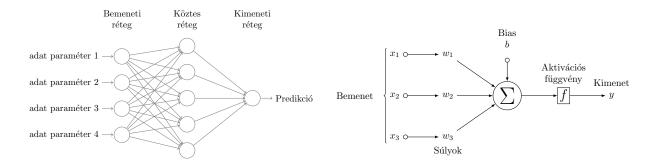
A random forest algoritmus egyik jó tulajdonsága, hogy alkalmazható klasszifikációs és regressziós problémákra is, alapját a döntési fák sokasága képezi, amiket összefűzve pontosabb becslést tud adni. A döntési fák felépülése a gyökér csomópontnál kezdődik, ami tartalmazza a tulajdonságokat és a célértéket. A csomópontnál meglévő jellemzőket felosztják az így létrejövő utódpontok között, igyekezve a hibát minimalizálni. A folyamatot tovább iterálva létrejön egy rétege a csomópontoknak, amelyek így egy fát alkotnak. A fa kialakulását szabályozni lehet, paraméterek lehetnek, hogy hány hány rétegű, milyen mély legyen a fa, minimum hány elem kerüljön egy levélbe¹, minimum hány felé legyen osztva a minta egy csomópontnál, vagy milyen módon mérje a szétválasztás minőségét. Véletlenség az erdőbe úgy kerül, ha az egyes fáknál a szétválasztás a csomópontoknál nem a lehető legjobb split szerint történik, hanem véletlenszerűen kiválasztott részét kapják meg a tulajdonságoknak. Erre azért van szükség, mert a fontosabb tulajdonságok dominálnának mindegyik fa döntésében, így az egyes fák predikciói korreláltak lennének [13]. Az erdőbe több fát adva az algoritmus nem tanul túl, becslései jobban konvergálnak a kívánt végeredményhez, de határértéke van a hibának [14]. Előnye még, hogy felfedi a prediktálás szempontjából fontos tulajdonságokat, sok attribútummal rendelkező adathalmazoknál ez segíthet az összefüggések megértésében. A fő korlátai, hogy a túl sok fa lassú prediktálást eredményez, illetve regressziós problámáknál a modell nem tud extrapolálni, csak a tanulóhalmaz értékkészletein belüli eredményeket ad. Komplexebb vagy zajosabb adatoknál érdemes máshogy próbálkozni, ezen esetekben például mesterséges neurális hálókkal jobb ereményt lehet elérni.

A mesterséges neurális háló egy leegyszerűsített modellje a biológiai neurális hálónak, megtartva annak jó tulajdonságait és a tanulás mechanizmusát. Alap építőkövei a neuronok és a súlyok², a neuronok a súlyokon keresztül vannak összekötve egymással és ezek adják meg, hogy az egyik neurontól a másik milyen súllyal kapja meg az értékét. A neuronok rétegekbe vannak rendezve: bemeneti réteg, köztes réteg és kimeneti réteg³, a köztes réteg több rétegből is állhat. Az egyazon rétegben lévő neuronok nincsenek összekötve egymással, ér-

¹ levél a döntési fának az a része, amiből nem nő ki több ág

² biológiai analógiája az axonok

³ input layer, hidden layer és output layer



2.1. ábra. Egy nerális háló vázlatos modellje és egy neuron aktivációjának a folyamata.

téküket az alattuk lévő neuronoktól kapják a súlyokkal számolva. Matematikai formában az értékátadás:

$$z_i = w_{i1}x_1 + w_{i2}x_2 + \dots + w_{in}x_n + b_i, (2.1)$$

az egyenletben z_i a rétegben az i-edik neuron, w_{ij} az x_j előző rétegbeli neuron és z_i neuront összekötő súly értéke, b_i pedig a bias vektor i-edik eleme.

Ez átírható egy egész rétegre:

$$\underline{z} = \mathbf{W}\underline{x} + \underline{b} \tag{2.2}$$

A W a w_{ij} súlyokból képzett súlymátrixot jelöli. Ahhoz, hogy a háló bonyolultabb problémákat is meg tudjon oldani, szükséges nemlinearitást vinni a rendszerbe. Ehhez aktivációs függvényt alkalmazunk, ami eldönti, hogy a neuron aktivizált legyen vagy sem. Gyakran alkalmazott aktivációs függvény a sigmoid:

$$S(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \tag{2.3}$$

Illetve a *rectified linear unit*(ReLU):

$$R(z) = \max(0, z) \tag{2.4}$$

A ReLU előnye, hogy a súlyok optimalizálásánál történő deriválásoknál az eltünő gradiens problémája nem áll fenn, így gyorsabb tanulást eredményez és a sigmoidhoz képest nem olyan szűk intervallumon ad vissza értékeket. A bemenő adatok ilyen transzformációkon

mennek keresztül, míg kimenő adatként össze lehet hasonlítani a várt kimenettel. Az összehasonlítás a hibafügvénnyel történik, ami kiszámolja a két érték közötti távolságot valamilyen metrikával. Legtöbbször a hibafüggvényt több különböző adat becslése után értékeltetjük ki, a háló *batch*-okban kapja meg az adatot. Regressziós problémákban kedvelt hibafüggvény a *mean sqared error*:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n} (y_i - p(x_i))^2$$
 (2.5)

a képletben a $p(x_i)$ az x_i adatokból prediktált érték, n pedig a batch méret. A hiba minimalizálása egy optimalizációs probléma, a p függvény a súlyoktól függ, amiket úgy kell megváltoztatni, hogy a hiba minimális legyen. A súlyok optimalizálása backpropagationnel történik, a hibafüggvényt deriválva a súlyok szerint a láncszabállyal, az utolsó rétegtől kezdve az elejéig, megkapjk a gradiensmátrixokat rétegenként, amit szorozva egy kis számmal($learning\ rate$), levonva a súlymátrixokból megkapjuk az új súlyokat. A súlyok frissítése batch-onként történik, így a batchmérettel és a $learning\ rate$ -tel is lehet a tanulást gyorsítani, majd pontosabbá tenni [16].

Eddigi eredmények és módszerek

Adatok

Az eredményes gépi tanuláshoz a nagy mennyiségű és jó minőségű adat majdnem annyira fontos, mint a jó modell megválasztása. Általában nem áll rendelkezésünkre egyből az algoritmusnak adható adat, a nyers adatokat előbb preprocesszállni kell, ki kell nyerni a fontos tulajdonságokat, melyek előztetes ismereteink alapján fontosak lehetnek, és össze kell állítani az adathalmazt, amelyet majd szétválasztunk tanuló- és teszthalmazra.

A kutatómunkámhoz sok, jó minőségű galaxis képére volt szükségem, és mindegyik galaxisnak a spektroszkópiával mért vöröseltolódására is, ezekhez az adatokhoz a Sloan Digital Sky Survey adatbázisában fértem hozzá.

3.1. Sloan Digital Sky Survey

A Sloan Digital Sky Survey az eddigi legrészletesebb égboltfelmérés, mély, több színsávos képekkel az ég egyharmadáról, 500 milló asztrofizikai objektumról, 3 millió felvett spektrumadattal. A felmérést 2000-ben kezdte, több ciklusban, 2014-ben kezdődőtt a negyedik fázis (SDSS-IV), és már elkezdődtek a megbeszélések az SDSS-V elindításáról[17]. A megfigyelési adatokat egy külön erre a célra megépített 2.5 m széles optikai teleszkóp szolgáltatja az Apache Point Obszervatóriumból, Új Mexikóban. Öt színsávaban mér, a látható fény és az infravörös tartománya között, u, g, r, i és z színszűrőkkel (ultraviolet, green, red,

12

near infrared és infrared), amik 3000 Å és 10000 Å közötti tartományt fedik le. A különböző szűrőkön keresztül a CCD chipek egymás után rögzítenek, 71.2 másodperc késéssel, r, i, u, z és g sorrendben, így a különböző színű képeken előfordulhat, hogy egy objektum kicsivel arrébb. Ennek volt előnye is, mozgó objektumokat könnyebben lehetett azonosítani, például létre tudtak hozni aszteroida katalógusokat. Az SDSS képek alapvető egysége a field, ami 10-szer 13 szögperces szeletet tartalmaz az égből, és 1489-szer 2048 pixelt tartalmaz és az egyes fieldeket három jelzőszám teszi egyedivé, a field number, a run, ami a szkennelés száma, a camera cloumn, ami a megmutatja melyik oszlop CCD kamera készítette a képet egy 1 és 6 közötti szám, mindegyik oszlop egy fieldet készít, ami 128 pixel szélességben fed át a szomszédossal. Az elkészült felvételek az SDSS képfeldolgozó pipelinejába kerülnek, ahol kalibrált FITS formátumú képet csinálnak, és a katalógushoz hozzá adják a képi paramétereket.

A megfigyeléseket folyamatosan végzik, az adatbázisokat viszont csak évente frissítik, ezeket a *data release*-nek (DR)hívják és tartalmazzák az előző megfigyelésekből származó adatokat is. Az SDSS virtuális oszervatórium keretrendszerben működik, adatai publikusak. Az objekumok és paramétereik relációs adatbázisba vannak rendezve, a SQL nyelvet használva lehet lekérdezéseket indítani.

A kutatás

- 4.1. Tanulóhalmaz
- 4.2. Módszerek
- 4.3. Modellek

4.3. Modellek 14

Irodalomjegyzék

- [1] Z. Frei and A. Patkós, Inflációs Kozmológia: (Typotex, Budapest, 2005).
- [2] Baum, W. A.: 1962, Problems of Extra-Galactic Research, Proceedings from IAU Symposium no. 15. Edited by George Cunliffe McVittie. International Astronomical Union Symposium no. 15, Macmillan Press, New York, p.390
- [3] "Photometric Redshifts." NASA/IPAC Extragalactic Database NED, ned.ipac.caltech.edu/level5/Glossary/Essay_photredshifts.html.
- [4] Koo, D. C. "Optical Multicolors A Poor Person's Z Machine for Galaxies." The Astronomical Journal, vol. 90, 1985, p. 418., doi:10.1086/113748.
- [5] Bruzual, G., and S. Charlot. "Stellar Population Synthesis at the Resolution of 2003." Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 344, no. 4, 2003, pp. 1000–1028., doi:10.1046/j.1365-8711.2003.06897.x.
- [6] Hildebrandt, H., et al. "PHAT: PHoto-ZAccuracy Testing." Astronomy & Astrophysics, vol. 523, 2010, doi:10.1051/0004-6361/201014885.
- [7] Connolly, A. J., et al. "Slicing Through Multicolor Space: Galaxy Redshifts from Broadband Photometry." The Astronomical Journal, vol. 110, 1995, p. 2655., doi:10.1086/117720.
- [8] Csabai, I., et al. "The Application of Photometric Redshifts to the SDSS Early Data Release." The Astronomical Journal, vol. 125, no. 2, 2003, pp. 580–592., doi:10.1086/345883.

Irodalomjegyzék 16

[9] Carliles, S., et al. "Random Forests For Photometric Redshifts." The Astrophysical Journal, vol. 712, no. 1, 2010, pp. 511–515., doi:10.1088/0004-637x/712/1/511.

- [10] Collister, Adrian A., and Ofer Lahav. "ANNz: Estimating Photometric Redshifts Using Artificial Neural Networks." Publications of the Astronomical Society of the Pacific, vol. 116, no. 818, 2004, pp. 345–351., doi:10.1086/383254.
- [11] Csabai, I., et al. "Multidimensional Indexing Tools for the Virtual Observatory." Astronomische Nachrichten, vol. 328, no. 8, 2007, pp. 852–857., doi:10.1002/asna.200710817.
- [12] Collister, Adrian A., and Ofer Lahav. "ANNz: Estimating Photometric Redshifts Using Artificial Neural Networks." Publications of the Astronomical Society of the Pacific, vol. 116, no. 818, 2004, pp. 345–351., doi:10.1086/383254.
- [13] Ball, Nicholas M., and Robert J. Brunner. "Data Mining And Machine Learning In Astronomy." International Journal of Modern Physics D, vol. 19, no. 07, 2010, pp. 1049–1106., doi:10.1142/s0218271810017160.
- [14] "Random Forests Leo Breiman and Adele Cutler." Statistics at UC Berkeley, www.stat.berkeley.edu/ breiman/RandomForests/.
- [15] Sadeh, I., et al. "ANNz2: Photometric Redshift and Probability Distribution Function Estimation Using Machine Learning." Publications of the Astronomical Society of the Pacific, vol. 128, no. 968, 2016, p. 104502., doi:10.1088/1538-3873/128/968/104502.
- [16] L., Samuel, et al. "Don't Decay the Learning Rate, Increase the Batch Size." SAO/NASA ADS: ADS Home Page, 1 Nov. 2017, adsabs.harvard.edu/cgibin/bib query?arXiv%3A1711.00489.
- [17] Zasowski, Gail. Science Blog from the SDSS, blog.sdss.org/2018/02/21/sdss-v-is-underway/.

Nyilatkozat

Név: Horváth Bendegúz

ELTE Természettudományi Kar, szak: Fizika BSc

Neptun azonosító: ZNL3LK

Szakdolgozat címe: Fotometrikus vöröseltolódás becslés

A szakdolgozat szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest 2018. majus?.