

Maskiner lærer at forske – Kunstig intelligens som værktøj til at forstå universet

Andreas Nygaard, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet

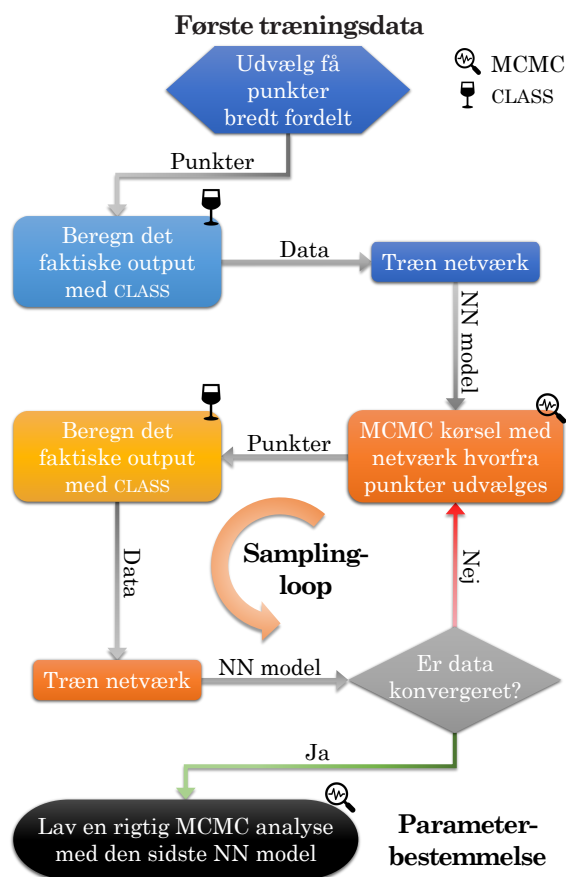
Observationer og modeller

Universet er enormt. Afstande til fjerne galakser er helt ubeskriveligt store, men alligevel kan vi beregne både universets alder og dets sammensætning. Dette er dog ikke noget vi kan gå ud og måle direkte med et teleskop, så i stedet må vi måle andre ting. Det kunne fx være den kosmiske mikrobølgebaggrund som er et levn fra det helt tidlige univers, hvor elektroner og protoner blev bundet til hinanden, således at lys ikke længere kunne spredes på frie ladede partikler. Denne baggrundsstråling kan derfor give os rigtig meget information om det tidlige univers. Derudover kan vi måle de store afstande til fjerne galakser ved at udnytte den kendte lysstyrke af supernovaer type Ia, og dette kan give os en ide om universets nuværende udvidelsesrate, H_0 .

At måle disse ting er selv sagt ikke nok til at sige noget om hverken universets alder eller dets indhold. Hertil skal vi benytte os af vores teoretiske viden om de fysiske love, der beskriver universet (generel relativitetsteori, statistisk fysik, partikelfysik) til at konstruere modeller, der kan forudsige hvad vi burde observere i form af bl.a. baggrundsstråling og udvideshastigheden af universet. Vores teoretiske modeller har vist sig at være rigtig gode til at forudsige samme slags data som det vi kan observere, men den præcise konfiguration af parametre, såsom energitæthederne af stråling, mørkt stof, mørk energi, osv., kan være svær at bestemme. For at finde den teoretiske model, der producerer det data, som bedst passer med vores observationer, er vi nødt til at prøve os frem med mange hundredetusinder til flere millioner af forskellige konfigurationer af parametre. En meget brugt metode er den såkaldte Markov chain Monte Carlo (MCMC) metode [1], hvor punkter i parameterrummet indsamles baseret på deres *likelihood* – et mål for hvor godt data passer med modellen. Det besværlige i denne metode er netop, at det kræver et så højt antal af modelberegninger, eftersom en enkelt af disse kan tage flere sekunder. Når antallet af påkrævede modelberegninger er oppe på $\sim 10^5$ – 10^6 , så kan den fulde proces tage ugevis i CPU-tid.

Selvom vores nuværende forståelse for universet kan beskrive en meget stor del af observationerne, er der stadig nogle få ting som vores almindelige teorier ikke kan beskrive til fulde. Dette medfører at en stor del af forskningen i kosmologi drejer sig om at teste forskellige udvidelser af vores teorier om universet op mod forskellige sæt af observationsdata. I takt med at mere og mere præcist data bliver tilgængeligt fra nye eksperimenter, er vi derfor både nu og i fremtiden nødt til at benytte os af mange MCMC-processer med forskellige kosmologiske modeller og data. Den tunge

beregningstid af modellerne udgør derved et potentielt problem for hastigheden af fremskridt.

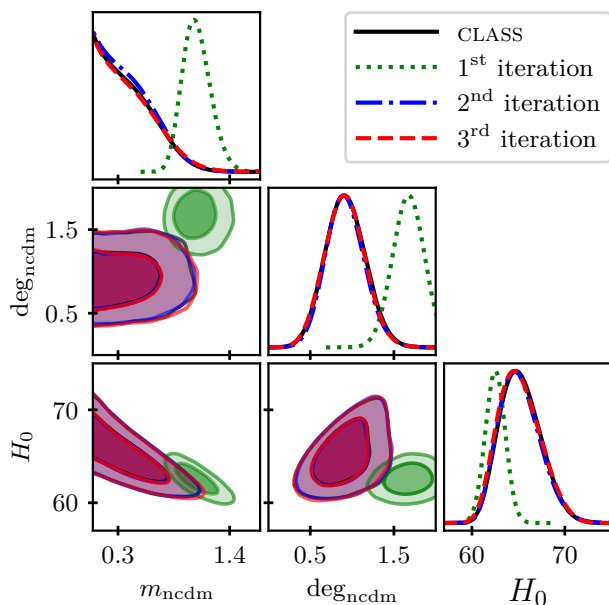


Figur 1. Et flowchart over den iterative proces. Forskellige neurale netværker (NN) trænes med data indsamlet i den foregående iteration ved en MCMC-proces. Det fortsætter indtil data indsamlet i to på hinanden følgende iterationer konvergerer. Det faktiske output regnes med koden CLASS [3].

Kunstig intelligens baner vejen

Vi kan komme dette problem til livs ved at bruge kunstig intelligens til at emulere modellerne, så de tunge beregninger begrænses. Først beregnes et mindre sæt af udvalgte faktiske modeller ($\sim 10^4$), hvilket bruges til at træne et kunstigt neuralt netværk til at efterligne opførslen af modelberegningerne. Det neurale netværk kan så interpolere (og til en vis grad ekstrapolere), for at estimere resultatet af modelberegningerne andre steder i parameterrummet, og en sådan emulering af modellerne er mere end 1000 gange hurtigere end den faktiske modelberegning. Ved at bruge det neurale netværk i stedet for de faktiske modelberegninger i MCMC-processen, kan den samlede tid således bringes ned til få minutter.

En stor del af min forskning har været udviklingen af koden `CONNECT` [2], der optimerer hvordan de få punkter til træning af emulatoren skal udvælges. Dette har ledt til en iterativ proces, hvor det neurale netværk optimeres gennem gentagne MCMC-processer, der bruger neurale netværker til at indsamle ny træningsdata til næste iterations neurale netværk. Denne proces sørger for at det indsamlede træningsdata repræsenterer parameterrummet præcis der, hvor der er stor likelihood og hvor den endelige MCMC-proces derfor vil samle punkter. Dette er opsummeret i et flowchart i figur 1.



Figur 2. Sandsynlighedsfordelinger for modelparametrene m_{ncdm} , deg_{ncdm} og H_0 fundet ved både at bruge faktiske modelberegninger i MCMC-processen (`CLASS`) og ved at bruge tre netværker fra forskellige iterationer af den iterative proces implementeret i koden `CONNECT`. Disse resultater er opnået ved sammenligning med kosmisk mikrobølgebaggrundsdata indsamlet af den Europæiske Rumorganisation ESA's Planck mission [4].

Ved at indsamle træningsdata på denne automatiske måde (kendt under paraplybegrebet *active learning*), kan man klare sig med meget færre punkter til træning af de neurale netværker, og dette betyder færre af de faktiske modelberegninger. Med de færdigtrænede netværker kan man så køre en MCMC-proces for at undersøge den kosmologiske model som netværket emulerer beregningerne af. Herved kan man opnå sandsynlighedsfordelinger (*Bayesianske posterior-fordelinger*) af de forskellige parametre der beskriver modellen. Et eksempel på dette kan ses i figur 2, hvor en model med en variabel neutrino masse, m_{ncdm} , og udartethed, deg_{ncdm} , er blevet undersøgt med både de faktiske modelberegninger udført af koden `CLASS` [3] og med de neurale netværker fra forskellige iterationer af den iterative proces beskrevet ovenfor. Her ses det tydeligt hvordan netværkerne bliver gradvist bedre fra iteration til iteration indtil de matcher resultatet fra de faktiske beregninger.

Nye muligheder

Med introduktionen af disse hurtige emulatorer er det nu muligt at benytte metoder, der ikke før er blevet brugt til kosmologisk parameterbestemmelse. Dette

skyldes både at emulatorerne er mange størrelsesordener hurtigere, men også at de, på grund af deres simple opbygning, kan differentieres nærmest gratis. Dette låser op for gradient-baserede metoder der er langt mere effektive og konvergerer hurtigere. Ved at lade gradienterne af likelihood'en med hensyn til parametrene guide samplingen, så kan de mest optimale parameterkonfigurationer bestemmes meget nemmere.

En anden, lidt mere finurlig, anvendelse af de ultrahurtigere evalueringstider af emulatorerne er at de emulerede størrelser, hvilket typisk er observable, der direkte kan sammenlignes med data (fx power-spektret af den kosmiske mikrobølgebaggrund), kan visualiseres meget hurtigt, og de forskellige parametres indvirkning på de observable kan derved lynhurtigt undersøges. Til dette har jeg udviklet appen `CosmoSlider`, som både findes for iOS og som webbaseret app kompatibel med alle platforme. Appen fungerer ved at man justerer værdierne af parametre på de respektive slider hvorefter et neuralt netværk beregner og viser power-spektret for den kosmiske mikrobølgebaggrund i realtid. Dette ville slet ikke kunne lade sig gøre uden en emulator, da den mindste forskydning i en slider ville kræve en tung modelberegning, hvilket ville ophobe sig hvis slideren trækkes længere.

Der er stadig meget at udforske når det kommer til de mange muligheder i kunstig intelligens og kosmologi, og eftersom kunstig intelligens er et forskningsområde i sig selv, er der mange eksisterende metoder der er værd at prøve i kosmologisk sammenhæng. Analyser af store mængder af data fra næste generation af observationelle eksperimenter bliver hele tiden mere og mere effektive, og det er spændende hvordan kunstig intelligens forsat vil kunne hjælpe os på vores rejse til at forstå universet.

Litteratur

- [1] W. K. Hastings (1970) "Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications", *Biometrika*, bind 57, side 97–109.
- [2] A. Nygaard, E.B. Holm, S. Hannestad og T. Tram (2023) "CONNECT: a neural network based framework for emulating cosmological observables and cosmological parameter inference," *JCAP*, bind 05, side 025.
- [3] D. Blas, J. Lesgourgues og T. Tram (2011) "The Cosmic Linear Anisotropy Solving System (CLASS) II: Approximation schemes," *JCAP*, bind 07, side 035.
- [4] N. Aghanim m.fl.; Planck (2020) "Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters," *Astron. Astrophys.*, bind 641, side A6. [Erratum: *Astron. Astrophys.*, bind 652, side C4 (2021)].



Andreas Nygaard er ph.d. fra Aarhus Universitet og postdoc ved Zürich Universitet, hvor han arbejder med at emulere beregningstunge kosmologiske simuleringer for at analysere universets massefordeling og struktur.

