

ALLALANY

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 88 за 2021 г.</u>

> ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Е.М. Урвачев

Применение алгоритма машинного обучения для определения параметров моделей сверхновых по их кривым блеска

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Урвачев Е.М. Применение алгоритма машинного обучения для определения параметров моделей сверхновых по их кривым блеска // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 88. 11 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2021-88</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-88</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.КЕЛДЫША Российской академии наук

Е.М. Урвачев

Применение алгоритма машинного обучения для определения параметров моделей сверхновых по их кривым блеска

Урвачев Е.М.

Применение алгоритма машинного обучения для определения параметров моделей сверхновых по их кривым блеска

В работе рассматривается применение библиотеки машинного обучения CatBoost для определения масс радиоактивных изотопов по кривой блеска сверхновой на поздних временах. Используемая для демонстрации модель расчета синтетических кривых блеска основана на вкладе пяти основных цепочек радиоактивного распада, начинающихся с изотопов ⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni, ⁴⁴Ti, ²²Na, ⁶⁰Co. Отдельно рассматривались наборы случайных кривых блеска, вычисленных при различных массах изотопов как трех доминирующих цепочек (⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni, ⁴⁴Ti), так и всех пяти. Показано, что массы доминирующих изотопов определяются с приемлемой точностью в обоих случаях даже при стандартных настройках алгоритма машинного обучения. Во втором случае точность определения масс двух других изотопов (²²Na, ⁶⁰Co) оказывается неудовлетворительной, вероятно, из-за их слабого вклада в полную кривую блеска.

Ключевые слова: машинное обучение, сверхновые, кривые блеска

Egor Urvachev

The determination of the supernovae parameters from their light curves using the machine learning

The paper discusses the application of the machine learning library, CatBoost, to determine the masses of radioactive isotopes from the supernova light curve at a later epochs. The synthetic light curve model used for the demonstration is based on the contribution of the five major radioactive decay chains starting with ⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni, ⁴⁴Ti, ²²Na, ⁶⁰Co. Separately, we considered sets of random light curves calculated for different isotope masses of both the three dominant chains (⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni, ⁴⁴Ti) and all five. It is shown that the masses of dominant isotopes are determined with acceptable accuracy in both cases, even with the standard settings of the machine learning algorithm. In the second case, the accuracy of determining the masses of the other two isotopes (²²Na, ⁶⁰Co) turns out to be unsatisfactory, probably due to their weak contribution to the total light curve.

Key words: machine learning, supernovae, light curves

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект №21-11-00362.

Введение

Астрофизические события, в частности взрывы сверхновых, являются своеобразными уникальными природными экспериментами для исследования различных фундаментальных физических вопросов. Для таких исследований строятся разнообразные физические модели, параметры которых, в отличие от земных лабораторных экспериментов, заранее неизвестны. Ограничения на некоторые параметры могут быть определены из физических соображений. Тем не менее, диапазоны параметров могут оказаться достаточно широкими, и для их определения часто требуется решать в общем случае весьма нетривиальную обратную задачу — по наблюдаемым данным определять параметры модели, описывающей данный процесс. Характерным примером описанной ситуации являются модели сверхновых и их кривые блеска. Согласно общепринятым моделям, одним из механизмов свечения на поздних стадиях кривой блеска является распад радиоактивных элементов. Значения масс отдельных изотопов могут пролить свет на некоторые вопросы теории звездной эволюции и нуклеосинтеза, поэтому их определение является крайне важной задачей. В работе [1] исследовался вклад изотопов ⁴⁴Ti, ⁵⁵Fe, ⁵⁶Co, ⁵⁷Co и ⁶⁰Co в кривую блеска сверхновой SN1987А на поздних временах. Для нахождения кривой светимости использовалась модель, основанная на вкладе от пяти наиболее важных цепочек распадов. Затем с помощью инструмента фитирования кривых из SciPy, основанного на методе наименьших квадратов, находились значения масс изотопов, которые дают наилучшее совпадение с наблюдаемыми данными.

В рассмотренном примере физическая модель является достаточно простой, и итеративный алгоритм фитирования кривых справился с задачей достаточно хорошо. Недостатком такого подхода является необходимость его применения к каждому новому событию заново, независимо от предыдущих. Это затруднит его использование при ситуациях, когда требуется обрабатывать большой поток информации и быстро принимать решения, например, при наблюдениях на современных высокочастотных телескопах [2]. Более того, в реальности связь параметров модели с полученным результатом может быть крайне нетривиальной, что может привести к снижению точности стандартного метода фитирования, а также увеличению числа требуемых итераций. На помощь могут прийти инструменты машинного обучения, которые позволяют находить нетривиальные связи, а также отделить процесс обучения, который обычно занимает большую долю времени, от непосредственного предсказания. Машинное обучение активно применяется в астрофизике, например, для обнаружения аномалий при наблюдениях транзиентов [3], поиска экзопланет [4] и т.д.

В данной работе представлены первые шаги по применению библиотеки машинного обучения CatBoost [5], свободно распространяемой компанией Яндекс, для предсказания параметров моделей сверхновых по их кривым блеска. Этот метод уже успешно применялся в физике, например в эксперименте LHCb [6]. Для демонстрации возможностей метода и его валидации рассматривается уже описанная выше задача об определении масс радиоактивных изотопов по полученной синтетической кривой блеска.

Определение масс радиоактивных изотопов по кривой блеска

Для работы любого алгоритма машинного обучения нужна исходная выборка данных. Для задачи определения масс радиоактивных изотопов в данной работе используется набор синтетических кривых блеска на поздних временах после взрыва сверхновой, вычисленных с помощью свободно распространяемого кода Ф.Х. Тиммеса [7], использованного в работах [1, 8]. В основе кода лежит модель радиоактивного распада с учетом пяти цепочек, начинающихся с ⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni, ⁴⁴Ti, ²²Na, ⁶⁰Co, массы которых и являются параметрами этой модели.

На рисунке 1 представлена кривая блеска, вычисленная при заложенных автором стандартных значениях масс изотопов для SN1987A: $m_0(^{56}\text{Ni}) = 6.9 \times 10^{-2} M_{\odot}, m_0(^{57}\text{Ni}) = 3.3 \times 10^{-3} M_{\odot}, m_0(^{44}\text{Ti}) = 10^{-4} M_{\odot}, m_0(^{22}\text{Na}) = 2 \times 10^{-6} M_{\odot}, m_0(^{60}\text{Co}) = 2 \times 10^{-5} M_{\odot}$ [9, 10].



Рис. 1. Кривая блеска, вычисленная на основе модели, учитывающей пять наиболее важных цепочек радиоактивного распада, при стандартных значениях масс изотопов. Также изображен вклад отдельных цепочек, начинающихся с указанного изотопа.

Видно, что основной вклад в кривую блеска дают цепочки распадов, начинающиеся с 56 Ni, 57 Ni и 44 Ti. Поэтому на первом этапе исследования для демонстрации работоспособности алгоритма можно построить набор синтетических кривых блеска при различных массах указанных изотопов. В текущей работе в качестве минимально и максимально возможных значений масс использовались значения $0.1m_0$ и $10m_0$ соответственно, где m_0 — стандартная масса для каждого изотопа. Таким образом, перепад значений является достаточно высоким и составляет два порядка. Далее вычисляется N кривых блеска со случайными значениями масс изотопов ⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni и ⁴⁴Ti, равномерно распределенными по интервалу от $0.1m_0$ до $10m_0$ в логарифмическом масштабе. Массы изотопов ²²Na и ⁶⁰Co фиксируются равными m_0 . Поскольку каждая кривая блеска может быть вычислена независимо от других, то для ускорения времени набора базы данных вычисления были распараллелены с использованием библиотеки multiprocessing для языка Python. Затем набор кривых блеска был случайным образом разделен на 2 части в пропорции 3 к 1, из которых первая использовалась для обучения модели, а вторая — для тестирования.

В качестве алгоритма машинного обучения используется CatBoostRegressor. По своему типу он относится к так называемым алгоритмам градиентного бустинга. Общей идеей таких алгоритмов является объединение довольно простых алгоритмов (в CatBoost ими являются деревья решений) в ансамбль. При этом ансамбль строится последовательно, т.е. каждое предыдущее дерево решений используется для улучшения следующего. В итоге, финальное предсказание такого набора простых моделей оказывается гораздо более точным, чем при использовании одного отдельного алгоритма, даже более сложного. Для предсказания масс каждого из изотопов строилась отдельная модель.

Результаты применения алгоритма с использованием стандартных глобальных параметров для предсказания масс трех изотопов на основе начальной базы данных, включающей в себя $N_1 = 1000$ кривых блеска, представлены на рисунке 2.

На графиках изображаются зависимости предсказанных масс изотопов на основе синтетических кривых блеска от масс, использованных для вычисления этих кривых блеска. Попадание на отмеченную на графиках диагональную линию указывает на хорошую точность предсказания в данной области значений параметра. Поскольку используемый алгоритм машинного обучения основан на минимизации средней квадратичной ошибки, то в качестве количественной оценки (в процентах) ошибки σ определения масс изотопов можно использовать следующее соотношение:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \frac{(m_i - \widetilde{m_i})^2}{m_i^2}} \times 100\%,$$
(1)

где $\widetilde{m_i}$ — масса изотопа, которая была предсказана на основе кривой блеска, вычисленной при реальном значении массы m_i , а N_t — число кривых блеска



Рис. 2. Сравнение предсказанных с помощью инструментов CatBoost на основе модели с тремя изменяемыми параметрами и реальных масс различных изотопов. Начальная база данных, включающая в себя $N_1 = 1000$ случайных кривых блеска.

в тестовой выборке. Для массы ⁴⁴Ti предсказания оказываются достаточно хорошими на всем интервале рассмотренных параметров. Для ⁵⁶Ni результаты также являются удовлетворительными. Оценка процентной ошибки при этом составляет: σ (⁴⁴Ti) = 2.8% и σ (⁵⁶Ni) = 8.0%. Стоит отметить, что такая довольно неплохая точность достигнута при достаточно малой первоначальной базе данных. Например, при построении типовой сетки моделей, включающей в себя одинаковое число различных значений для каждого из параметров, то при общем числе различных кривых блеска $N_1 = 1000$ мы имели бы лишь по 10 различных масс каждого из трех изотопов. Факт достижения хорошей точности при малых обучающих выборках является одним из преимуществ библиотеки машинного обучения СаtВооst. Предсказания массы ⁵⁷Ni являются приемлемыми лишь в области высоких значений масс, в области же самых маленьких значений наблюдается достаточно сильная переоценка в несколько раз, что приводит к

большой усредненной ошибке: σ (⁵⁷Ni) = 34.8%.

Анализируя поведение суммарной кривой блеска, а также вклады отдельных цепочек радиоактивных распадов, можно сделать вывод, что на начальном отрезке рассматриваемой кривой блеска, доминирует цепочка, начинающаяся с 56 Ni, а на конечном — с 44 Ti. По сравнению с этими цепочками распада, роль 57 Ni является не столь очевидной, поэтому низкая точность его определения может быть следствием недостатка данных в обучающей выборке. Для проверки этого факта была построена более подробная начальная база из $N_2 = 10000$ кривых блеска. Также было увеличено число итераций самого алгоритма. Результаты предсказания на расширенной базе данных представлены на рисунке 3.



Рис. 3. Сравнение предсказанных с помощью инструментов CatBoost на основе модели с тремя изменяемыми параметрами и реальных масс различных изотопов. Начальная база данных, включающая в себя $N_2 = 10000$ случайных кривых блеска.

Хорошо заметно, что при большей по размеру базе данных точность предсказания стала выше, что подтверждается и значениями ошибок: σ (⁴⁴Ti) = 0.7%, σ (⁵⁶Ni) = 1.3%, σ (⁵⁷Ni) = 6.4%. Тем не менее, все равно для самых маленьких из рассмотренного интервала значений массы изотопа ⁵⁷Ni наблюдается некая переоценка. Однако, важно подчеркнуть, что интервал масс для всех изотопов был искусственно выбран достаточно широким. Из физических принципов же можно получить различные ограничения на массы изотопов, что внесет корректировки на используемые интервалы.

Поскольку алгоритм показал свою работоспособность на модели с произвольными массами трех изотопов, то можно теперь его применить и для модели с произвольными массами всех изотопов. Для этого при генерации новой базы кривых блеска массы изотопов ²²Na и ⁶⁰Co были также равномерно случайно распределены по интервалу от $0.1m_0$ до $10m_0$ в логарифмическом масштабе. Результаты применения алгоритма с для предсказания пяти масс изотопов на основе начальной базы данных, включающей в себя $N_2 = 10000$ кривых блеска, представлены на рисунке 4.

Как было отмечено выше, на начальном этапе рассматриваемой кривой блеска вклад других цепочек распада, кроме начинающейся с ⁵⁶Ni, пренебрежимо мал. Именно поэтому использование модели уже со всеми пятью массами изотопов не приводит к сколько бы то ни было заметному ухудшению предсказания массы ⁵⁶Ni, σ (⁵⁶Ni) = 1.3%. На поздних же временах вклад других цепочек сильнее и уже может быть сравним друг с другом. Поэтому трудно отличить низкие значения масс изотопов из доминирующих цепочек от высоких значений масс других изотопов. Точность предсказания для масс ⁴⁴Ti и ⁵⁷Ni несколько ухудшилась, по сравнению с моделью с тремя параметрами. Ошибки при этом составляют σ (⁴⁴Ti) = 6.8% и σ (⁵⁶Ni) = 20.2%. Причем, как и ожидалось, основной вклад в ошибку дают самые низкие значения из рассматриваемых интервалов масс. Предсказания для ⁶⁰Со являются удовлетворительными лишь для самых больших масс из рассмотренного интервала, а для ²²Na вовсе неудовлетворительны на всем интервале. Такое поведение, вероятнее всего, связано с крайне малым вкладом этих цепочек в суммарную кривую блеска из-за их очень низкой массы. В работе [1], использующей другой алгоритм фитирования, также приводится лишь верхний предел массы для изотопа ⁶⁰Со. Таким образом, если необходимо определять точную массу этих изотопов, то лишь на основании кривой блеска, скорее всего, это будет сделать трудно.

Заключение

В работе рассматривается применение открытой библиотеки машинного обучения CatBoost для определения параметров моделей сверхновых по их кривым блеска. Для демонстрации возможностей алгоритма была выбрана модель для поздних стадий кривых блеска сверхновых, когда основным источником энергии является распад радиоактивных элементов. В рассмотренной модели учитываются пять наиболее энергичных цепочек распадов, начинающихся с 56 Ni,



Рис. 4. Сравнение предсказанных с помощью инструментов CatBoost на основе модели с пятью изменяемыми параметрами и реальных масс различных изотопов. Начальная база данных, включающая в себя $N_2 = 10000$ случайных кривых блеска.

 57 Ni, 44 Ti, 22 Na, 60 Co, при этом доминируют вклады от 56 Ni, 57 Ni, 44 Ti. Сначала было проведено исследование по определению масс изотопов по полученным синтетическим кривым блеска, вычисленным при различных массах трех до-

минирующих изотопов. При этом перепад значений был довольно сильным и составлял два порядка. Массы ²²Na, ⁶⁰Со при этом были фиксированы. Показано, что алгоритм с использованием даже стандартных настроек неплохо предсказывается массы изотопов даже при малой базе из $N_1 = 1000$ кривых блеска. При увеличении числа кривых блеска в базе данных до $N_2 = 10000$ точность определения масс значительно повышается. Также алгоритм был применен и в случае, когда кривые блеска вычислялись при различных массах всех пяти используемых в модели изотопов. В этом случае точность определения масс ⁵⁶Ni, ⁵⁷Ni и ⁴⁴Ті несколько ухудшилась, но все равно осталась на приемлемом уровне. В то же время, предсказания для масс ⁶⁰Co и ²²Na в целом оказались неудовлетворительными, вероятнее всего, из-за их слабого вклада в общую кривую блеска. Тем не менее, подбор глобальных параметров алгоритма машинного обучения может изменить результат. Подробный анализ будет являться предметом следующих исследований. Также планируется исследование возможности применения алгоритмов машинного обучения для определения параметров сверхновых как на основе кривых блеска, вычисленных с помощью как других аналитических моделей, например [11, 12, 13], так и более самосогласованных подходов, например [14, 15].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №21-11-00362. Автор благодарен С.И. Глазырину, С.И. Блинникову и И.А. Круглову за ценные советы и обсуждения.

Список литературы

- [1] Seitenzahl Ivo R, Timmes FX, Magkotsios Georgios. The light curve of SN 1987A revisited: Constraining production masses of radioactive nuclides // The Astrophysical Journal. 2014. Vol. 792, no. 1. P. 10.
- [2] Rapidly rising transients from the Subaru Hyper Suprime-Cam transient survey / Masaomi Tanaka, Nozomu Tominaga, Tomoki Morokuma et al. // *The Astrophysical Journal.* 2016. Vol. 819, no. 1. P. 5.
- [3] Anomaly detection in the Zwicky Transient Facility DR3 / KL Malanchev, MV Pruzhinskaya, VS Korolev et al. // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2021. — Vol. 502, no. 4. — Pp. 5147–5175.
- [4] Exominer: A Highly Accurate And Explainable Deep Learning Classifier That Validates 200+ New Exoplanets / H Valizadegan, M Martinho, L Wilkens et al. // American Astronomical Society Meeting Abstracts. — Vol. 53. — 2021. — Pp. 108–06.

- [5] Dorogush Anna Veronika, Ershov Vasily, Gulin Andrey. CatBoost: gradient boosting with categorical features support // arXiv preprint arXiv:1810.11363.
 2018.
- [6] Derkach Denis, Hushchyn Mikhail, Kazeev Nikita. Machine Learning based Global Particle Identification Algorithms at the LHCb Experiment // EPJ Web of Conferences / EDP Sciences. — Vol. 214. — 2019. — P. 06011.
- [7] *Timmes FX*. Cococubed, snlite: supernova light curves tool. 2021. URL: http://cococubed.asu.edu/code_pages/snlite.shtml.
- [8] The production of 44Ti and 60Co in supernovae / FX Timmes, SE Woosley, Dieter H Hartmann, RD Hoffman // *The Astrophysical Journal.* 1996.
- [9] *Woosley SE, Weaver Thomas A*. Tech. Rep.: : Lawrence Livermore National Lab., CA (United States), 1995.
- [10] *Fransson Claes, Kozma Cecilia*. Radioactivities and nucleosynthesis in SN 1987A // *New Astronomy Reviews*. 2002. Vol. 46, no. 8-10. Pp. 487–492.
- [11] Arnett W David. Type I supernovae. I-Analytic solutions for the early part of the light curve // The Astrophysical Journal. 1982. Vol. 253. Pp. 785–797.
- [12] Dado Shlomo, Dar Arnon. Analytical Expressions for Light Curves of Ordinary and Superluminous Type Ia Supernovae // The Astrophysical Journal. 2015.
 Vol. 809, no. 1. P. 32.
- [13] A semianalytical light curve model and its application to type IIP supernovae / Andrea P Nagy, Andras Ordasi, József Vinkó, J Craig Wheeler // Astronomy & Astrophysics. — 2014. — Vol. 571. — P. A77.
- [14] Theoretical light curves for deflagration models of type Ia supernova / SI Blinnikov, FK Röpke, EI Sorokina et al. // Astronomy & Astrophysics. — 2006. — Vol. 453, no. 1. — Pp. 229–240.
- [15] Lyutykh AV, Pruzhinskaya MV, Blinnikov SI. Light Curves of Type Ia Supernovae // Astronomy Letters. — 2021. — Vol. 47, no. 1. — Pp. 1–11.

Оглавление

Введение	3
Определение масс радиоактивных изотопов по кривой блеска	4
Заключение	8
Список литературы	10