

*PhD – 2. félévi beszámoló*

Kozmológiai nagyskálás szerkezet vizsgálata szimulációkkal és gépi tanulással támogatott adatfeldolgozással

**Pál Balázs\***

ELTE, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék,  
Csillagászat és Űrfizika doktori program

**Témavezető:** Dr. Csabai István

2022. június 17.

## 1. Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

Ebben a félévben az előzőnél aktívabban tudtam folytatni a már megkezdett kutatómunkát. Egyik fő eredmény, hogy rövidebb távra sikerült véglegesíteni, milyen haladási irányt fogunk követni a PhD kutatásaim során.

Ebben a félévben jobban utánaajártam azoknak az elérhető módszereknek, amik segítségével lehetséges a tisztán relativisztikus kozmológiai szimulációk futtatása. Ehhez meg felelő numerikus módszereket és azok esetleges implementációt volt szükséges felkutatnom. A probléma legfőbb forrása, hogy az Einstein-egyenletek erősen nem-linearis, csatolt differenciálegyenletek, amiknek a numerikus megoldása direktben nagyon költséges műveletek igényel és így a ma rendelkezésre álló erőforrások mellett nem megvalósítható, de legalábbis közel sem célravezető. Olyan módszerek léteznek, amik az Einstein-egyenleteket közelítő stratégiák során próbálják numerikusan megoldani, azonban ezek a módszerek súlyos limitációkkal küzdenek. A kutatócsoport munkájához viszont mindenképp olyan módszerre volt szükségem, ami ténylegesen az Einstein-egyenleteket, nem pedig csak azok közelítő leírását képes megoldani.

Az irodalomkutatás során azt találtam, hogy az Einstein-egyenleteknek egyetlen olyan formalizmusa (ADM–BSSN formalizmus) ismert, mely alkalmas a fent említett feladatra és teljesíti az elvárásainkat. Ennek létező implementációinak listája pedig sajnos hasonlóan véges. Kiderült, hogy az előző félévben talált `gevolution` nevű szoftver pont, hogy csak közelítő módszerek segítségével dolgozik, így az nem alkalmas a kutatásaink számára. Szintén kiderült, hogy a BSSN formalizmusnak összesen két darab szoftveres implementációja létezik, az `EinsteinToolkit`<sup>1</sup> nevű szimulációs keretrendszer részeként, valamint a `CosmoGRaPH`<sup>2</sup> nevű szoftver formájában.

A félév során végül az `EinsteinToolkit` (Zlochower és tsai., 2022) segítségével és a hozzá készült `FLRWSolver`<sup>3</sup> (Macpherson, Price és Lasky, 2019) segítségével sikerült tisztán relativisztikus kozmológiai szimulációkat szimulálnom. Ezek felbontása – a szükséges álló számítási

---

\*[pal.balazs@ttk.elte.hu](mailto:pal.balazs@ttk.elte.hu)

<sup>1</sup><https://einsteintoolkit.org/>

<sup>2</sup><https://github.com/cwru-pat/cosmograph>

<sup>3</sup>[https://github.com/hayleyjm/FLRWSolver\\_public](https://github.com/hayleyjm/FLRWSolver_public)

kapacitás hiánya miatt – egyelőre még alacsony, azonban már így is roppant érdekes eredményekkel szolgált a kutatócsoportunk számára és teljesen új típusú betekintéssel szolgált az ELTÉ-n folyó asztrofizikai-kozmológiai témájú kutatások számára.

A félév elején bekapcsolódtam egy genetikai témájú kutatásba, melynek célja a SARS-CoV-2 vírus tüskefehérjét érintő mutánsok térszerkezetének vizsgálata volt gépi tanulási módszerekkel. A kutatásban  $\approx 3800$  SARS-CoV-2 mutáns térszerkezetét állítottuk elő azok génszekvenciájából a Deepmind Alphafold2 nevű, a fehérjekutatásban úttörőnek számító szoftverének segítségével. A félév során én elsősorban Geller Ákossal, az Állatorvos Tudományi Kutatóintézet, Molekuláris és összehasonlító virológia csoportjának kutatójával tartottam a folyamatos kapcsolatot és segítettem neki a kutatás technikai lebonyolításában.

A projekthez szükséges erőforrásokat a Wigner Fizikai Kutatóközpont szolgáltatta, melynek új, nagyteljesítményű GPU szerverét próbálhattuk ki a projekthez szükséges gépi tanulási feladatok futtatásával.

## 2. Elismerések

Az idei félévben kihirdetésre kerültek a 2021-es Kooperatív Doktori Program nyertesei, mely szerencsések között én is ott lehetek. Ez a munkám szempontjából több mindennel jár. Az ösztöndíjszerződés keretében munkaszerződést kötöttem a Wigner Fizikai Kutatóközponttal, ahol tudományos segédmunkatársként kezdtem el dolgozni 2022 májusától.

Habár még sok idő nem telt a kezdés óta, a Wignerben eltöltött munkámban a PhD kutatásaim során megszerzett tudást fogom hasznosítani és ennek segítségével támogatni az ott folyó kutatási projekteket, Barnaföldi Gergely Gábor, a Wigner FK, Nehézion-fizikai kutatócsoport csoportvezetőjének útmutatásai alapján. A szükséges számítástechnikai erőforrásokat szintén a Wigner FK fogja használatra bocsájtani számomra.

## 3. Konferenciák az aktuális félévben

Az idei félév végén június 20-21. között újra megrendezésre kerül a Wigner Fizikai Kutatóközpont szervezésében a GPU konferencia, melyen idén is részt veszek. Ezen – habár én magam nem előadóként – a már említett SARS-CoV-2 témájú projekt eredményeit fogjuk ismertetni a közönséggel az egyik előadás keretében.

## 4. Elvégzett tárgyak

A félév során négy tárgyat végeztem el, melyek az alábbiak voltak:

- Adatbányászat a csillagászatban (FIZ/5/006): A tárgy során egy nagyobb, féléves projektet kellett elkészítenünk, amiben valamilyen tetszőlegesen választott csillagászati adatsort kellett feldolgozzunk. Én a CAMELS elnevezésű (Villaescusa-Navarro és tsai., 2022), standard kozmológiai szimulációkat tartalmazó adatsort választottam a projektem témájául. A projektem célja az volt, hogy az adatsorban található szimulációkat deep learning módszerek segítségével elemezzem. A munkámban megmutattam, hogy ilyen megközelítéssel mind az  $\Omega_m$ , mind a  $\sigma_8$  kozmológiai paraméterek nagy pontossággal kinyerhetők a szimulációkból, miközben egyúttal a rendszerbe – az  $\Omega_m$  és  $\sigma_8$  számítása kontextusában – zajként megjelenő asztrofizikai hatások is sikeresen kiküszöbölhetők. A projektem tulajdonképpen Villaescusa-Navarro és tsai., 2021 teljes reprodukciója volt.

- Kompakt csillagok szerkezete (FIZ/5/025): A tárgy során az általános relativitáselmélet alapjaival, valamint a kompakt csillagászati objektumok (pl. neutroncsillagok, fekete lyukak) termodinamikájával és leírásával ismerkedhettünk meg. A félév végén 2-2, általunk tartott és általunk választott témájú előadásban kellett ismertetnünk az órán tanultakat. Én a forgó neutroncsillagok leírásáról, valamint azok forgását korlátozó fizikai hatásokról beszéltem a két prezentációmban.
- Haladó informatika a csillagászatban II. (FIZ/5/008): A tárgyon differenciálegyenletek numerikus megoldási módszereit tekintettük át, az alapoktól kiindulva. Követelményként egy nagyobb beadandót kellett megírunk a félév végére, ahol a Burgers-egyenlet egy numerikus megoldását kellett implementáljuk. A beadandómban én mind az 1D, mint a 2D Burgers-egyenlet megoldását implementáltam, valamint extra feladatként egy összefoglalót is írtam a parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásairól.
- Napfizika (FIZ/5/057): A tárgy mind MSc csillagász szakos, mind pedig a Fizika Doktori Iskola hallgatóinak meg van hirdetve. Habár az előkövetelményekhez hozzátartoznak a csillagászat MSc-s tárgyak is, azok hiányában sem jelentett gondot az anyag megértése, megtanulása, majd a félév végén írt írásbeli vizsga teljesítése.

## 5. Oktatási tevékenység az aktuális félévben

A félév során egy tárgy (*Korszerű számítástechnikai módszerek a fizikában I.*, továbbiakban „Korszám I.”, lebonyolításában és megtartásában vettem részt.

A tárgy már régebb óta része a kötelező tananyagnak a *számítógépes fizikus* szakirányon tanuló hallgatók számára. Az órán oktatott tananyag azonban az évek során – a tárgyat aktuálisan oktatók személyétől függően – folyamatosan változott. A cél azonban mindig is az volt, hogy alapvető áttekintést nyújtson a legfontosabb eszközökről és módszerekről, melyeket minden olyan kutató/szakember napi szinten felhasznál, akinek a tudományos programozás fontos eleme a kutatásának/munkájának.

Az órán elhangzott pár önálló téma, mint pl. a *git* és a *GitHub*, vagy éppen a C/C++ fordítók működése és használata. A tananyag nagyobb részét azonban a C++ programozásból és az adattudományból válogatott fejezetek töltötték ki. Én ezek közül a *git*-ről/*GitHub*-ról, valamint az adattudományról és gépi tanulásról szóló órákat tartottam meg.

---

## Hivatkozások

- [1] Yosef Zlochower és tsai. *The Einstein Toolkit*. The "Berhard Riemann" release, ET\_2022\_05 verzió. To find out more, visit <http://einsteintoolkit.org>. 2022. máj. DOI: [10.5281/zenodo.6588641](https://doi.org/10.5281/zenodo.6588641). URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.6588641>.
- [2] Hayley J. Macpherson, Daniel J. Price és Paul D. Lasky. “Einstein’s Universe: Cosmological structure formation in numerical relativity”. *Physical Review D* 99.6, 063522 (2019. márc.), 63522. old. DOI: [10.1103/PhysRevD.99.063522](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.99.063522). arXiv: [1807.01711](https://arxiv.org/abs/1807.01711) [[astro-ph.CO](https://arxiv.org/abs/1807.01711)].
- [3] Francisco Villaescusa-Navarro és tsai. “The CAMELS project: public data release”. *arXiv e-prints*, arXiv:2201.01300 (2022. jan.), arXiv:2201.01300. arXiv: [2201.01300](https://arxiv.org/abs/2201.01300) [[astro-ph.CO](https://arxiv.org/abs/2201.01300)].
- [4] Francisco Villaescusa-Navarro és tsai. “Multifield Cosmology with Artificial Intelligence”. *arXiv e-prints*, arXiv:2109.09747 (2021. szept.), arXiv:2109.09747. arXiv: [2109.09747](https://arxiv.org/abs/2109.09747) [[astro-ph.CO](https://arxiv.org/abs/2109.09747)].