

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Иркутский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Физический факультет

Кафедра теоретической физики
И.о. заведующий кафедрой, доцент,
к.ф.-м.н.,
Ловцов С.В. _____

Отчёт по научно-исследовательской работе
Использование разложения Магнуса для численного решения уравнения
осцилляций нейтрино в среде

Руководитель практики:
_____ к.ф.-м.н. Ломов В.П.

Студент гр. 01411-ДБ
_____ Шайдурова А.В.

Работа защищена с оценкой

Нормоконтролёр:

Иркутск 2018

Реферат

Отчёт состоит из введения и шести глав. Во введении кратко описываются нейтринные осцилляции, рассказывается об осцилляции в вакууме и в среде. В первой главе ставится конкретная задача на практику. Во второй главе даётся краткое описание разложения Магнуса, его свойств и особенностей, включая особенности конечного числа членов разложении, которое используется в численных расчётах. В третьей главе описываются две модели, которые используются для отладки алгоритма. Обсуждается их значимость для исследований и для разработки алгоритма. В четвёртой главе обсуждается вопрос выбора шага для численного расчёта, зависимости результата от него и чувствительность результата счёта от выбранной «чувствительности» алгоритма. В пятой главе приводятся несколько фрагментов кода, в которых возможны потеря численной точности и поясняется методика для уменьшения таких потерь. В шестой главе приводятся краткие итоги и обсуждаются полученные результаты.

Содержание

Введение	4
1 Постановка задачи	8
2 Разложение Магнуса	8
2.1 Теория	8
2.2 Численная реализация	11
2.2.1 Нейтринные осцилляции в среде	12
2.2.2 Методы	13
3 Модели	14
3.1 Солнце	14
3.2 Сверхновая	15
4 Изменение шага	15
5 Код	17
6 Обсуждение	19
Список литературы	28

Введение

Краткий экскурс в основные понятия осцилляций нейтрино.

Нейтринные осцилляции

В Стандартной Модели физики частиц нейтрино безмассовые. Однако эксперименты показывают, что нейтрино не только имеют массу, но и находятся в состоянии суперпозиции из собственных векторов, отвечающих за аромат (флэйвор) ν_α , $\alpha \in \{e, \mu, \tau\}$. Флэйворные состояния не идентичны массовым состояниям ν_k , $k \in \{1, 2, 3\}$.

Эта суперпозиция осуществляется с помощью унитарной матрицы смешивания¹ U

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_k U_{\alpha k}^* |\nu_k\rangle, \quad (1)$$

соответственно, массовые состояния могут быть выражены через суперпозицию состояний аромата

$$|\nu_k\rangle = \sum_\alpha U_{\alpha k} |\nu_\alpha\rangle, \quad (2)$$

и базис флэйворных состояний является ортонормированным, так же, как и базис массовых состояний:

$$\langle \nu_\alpha | \nu_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad \langle \nu_k | \nu_j \rangle = \delta_{kj} \quad (3)$$

В качестве доказательства смешивания было обнаружено, что нейтрино изменяются от одного аромата к другому во время их распространения — явление, называемое нейтринными осцилляциями, которое было предложено Понтекорво в 1957 году по аналогии с осцилляциями К-мезонов.

Матричное уравнение (1) также записывают в следующем виде

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{e1} & U_{e2} & U_{e3} \\ U_{\mu1} & U_{\mu2} & U_{\mu3} \\ U_{\tau1} & U_{\tau2} & U_{\tau3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

¹Матрица смешивания U в случае с 3 нейтрино является PMNS-матрицей (Понтекорво-Маки-Накагава-Саката).

а явный вид матрицы смешивания зависит от угловых параметров

$$U_{\text{PMNS}} = \begin{pmatrix} c_{12}c_{13} & s_{12}s_{13} & s_{13}e^{-i\delta_{\text{CP}}} \\ -s_{12}c_{23} - c_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta_{\text{CP}}} & c_{12}c_{23} - s_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta_{\text{CP}}} & c_{13}s_{23} \\ s_{12}s_{23} - c_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta_{\text{CP}}} & -c_{12}s_{23} - s_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta_{\text{CP}}} & c_{13}c_{23} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где $s_{ij} = \sin \theta_{ij}$ и $c_{ij} = \cos \theta_{ij}$, θ_{ij} — угол смешивания, а δ_{CP} обозначает фазу нарушения CP-инвариантности.

Таким образом описываются осцилляции нейтрино в вакууме, больше о них можно прочитать в [2]. Если же нейтрино проходит сквозь вещество, то осцилляции меняют своё поведение.

Нейтринные осцилляции в среде

При прохождении нейтрино через вещество оно может когерентно рассеиваться на частицах среды посредством реакций нейтрального и заряженного токов, что приводит к существенным отличиям от случая осцилляций в вакууме.

Влияние среды можно описать в терминах потенциалов, в которых распространяются нейтрино, зависящим от состава среды, электрической нейтральности, намагниченности (ориентации спинов), скоростей частиц среды.

При распространении через обычное вещество (среда электронейтральная, немагнитная, нерелятивистская) когерентное рассеяние ν_e на электронах и нуклонах отличается от рассеяния ν_μ и ν_τ . В случае реакции $\nu_e \rightarrow \nu_e$ в такой среде используется эффективный потенциал $v(r) = \sqrt{2}G_F n_e(r)$, G_F — константа Ферми и $n_e(r)$ — концентрация электронов на пути распространения нейтрино.

Как следствие, вероятности осцилляций модифицируются нетривиальным образом по механизму Михеева–Смирнова–Вольфенштейна (MSW) [3]. Эффекты материи особенно значимы на Солнце и других астрофизических объектах и событиях, в частности, в коллапсах ядра сверхновых.

Рассмотрим нейтрино ν_α , возникающее в среде в момент времени t_0 . Состояние системы $|\psi(t)\rangle$ во время $t \geq t_0$ может быть выражено как $|\psi(t)\rangle = \sum_\beta \psi_\beta(t) |\nu_\beta\rangle$ с условием $\psi_\beta(t_0) = \delta_{\alpha\beta}$. Во внесистемных единицах ($\hbar = c = 1$)

и $t = r$ вероятность перехода нейтрино от состояния α в состояние β

$$P_{\alpha\beta}(r) = |\psi_\beta(r)|^2. \quad (6)$$

Как только нейтрино покидают среду, амплитуды эволюционируют в соответствии с уравнением, определяющим осцилляции в вакууме, решение которого проще, если записать их через массовые состояния. Согласно формуле (1), обозначая через $\mathcal{A}_j = \phi_j(r_*)$ амплитуду вероятности обнаружения состояния аромата частицы ν_j на краю среды, для $r \geq r_*$ мы можем записать

$$\psi_\beta(r) = \sum_{j=1}^3 U_{\beta j} \mathcal{A}_j e^{-iE_j L}, \quad (7)$$

где $E_j = \sqrt{|\mathbf{p}|^2 + m_j^2}$ и $L = r - r_*$ — расстояние, которое нейтрино преодолело в вакууме. Подставляя (7) в (6) получаем

$$P_{\alpha\beta} = \sum_j |U_{\beta j}|^2 |\mathcal{A}_j|^2 + 2 \sum_{i>j} \text{Re} [U_{\beta i} U_{\beta j}^* \mathcal{A}_i \mathcal{A}_j^* e(-i\Delta_{ij}L)], \quad (8)$$

с величинами $\Delta_{ij} = \Delta m_{ij}^2 / (2E)$, где $E = |\mathbf{p}|$ и $\Delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2$.

Проблема вычисления $P_{\alpha\beta}$ сводится к проблеме определения величины \mathcal{A}_j , то есть к определению амплитуд вероятности массовых состояний $\phi_j(r)$ в среде, с начальным условием $\phi_j(r_0) = U_{\alpha j}^*$. Для релятивистских нейтрино, распространяющихся в нормальном веществе, после вычитания глобальной фазы, эволюционное уравнение для этих амплитуд имеет вид

$$i \frac{d}{dr} \Phi(r) = [H_0 + v(r)U^\dagger V U] \Phi(r), \quad (9)$$

с $\Phi^T(r) = (\phi_1(r), \phi_2(r), \phi_3(r))$, $V = \text{diag}(1, 0, 0)$. H_0 обозначает гамильтониан для эволюции в вакууме, в то время как второй член учитывает эффекты вещества из-за когерентного взаимодействия нейтрино с фоновыми частицами.

Уравнение (9) можно переписать в более простой форме

$$i \frac{d}{dr} \Psi(r) = H(r) \Psi(r), \quad H(r) = H_0 + v(r)W, \quad (10)$$

если сделать преобразования $\Psi(r) = \Gamma^\dagger \Phi(r)$, $\Gamma = \text{diag}(1, 1, e^{i\delta_{CP}})$. Явный вид

матрицы W :

$$W = \begin{pmatrix} c_{13}^2 c_{12}^2 & c_{12} s_{12} c_{13}^2 & c_{12} c_{13} s_{13} \\ c_{12} s_{12} c_{13}^2 & s_{12}^2 c_{13}^2 & s_{12} c_{13} s_{13} \\ c_{12} s_{13} c_{13} & s_{12} c_{13} s_{13} & s_{13}^2 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Уравнение (10) аналитически (в общем виде) не разрешимо, в отличие уравнения на волновую функцию нейтрино в вакууме. В случае обычного вещества путь от собранных данных до достоверного определения значений параметров требует массивных численных интегрирований линейной однородной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с коэффициентами, зависящими от расстояния, которое нейтрино проходят вдоль среды. Для такой задачи необходимы эффективные методы численного интегрирования, один из которых рассматривается в следующей главе.

1 Постановка задачи

Требуется реализовать алгоритм вычисления волновой функции при распространении нейтрино в среде, используя разложение Магнуса. Требуется проверить точность счёта, его «аккуратность».

2 Разложение Магнуса

Разложение Магнуса имеет важное значение, так как обеспечивает унитарность приближенных решений уравнения Шредингера. Оно представляет собой систематический способ построения аппроксимаций решения нестационарного уравнения Шредингера таким образом, чтобы в любом порядке оператор эволюции был унитарным [4].

2.1 Теория

Рассмотрим оператор эволюции $U(t, t_0)$, который переводит квантовомеханическое состояние (волновую функцию) Ψ от времени t_0 ко времени t

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0), \quad (12)$$

откуда следует очевидное условие $U(t_0, t_0) = I$, где I — единичный оператор.

С течением времени волновая функция Ψ не должна менять свою норму — это константное значение, обеспечивающее сохранение вероятности. Математически это означает, что оператор $U(t, t_0)$ является унитарным

$$U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = I \quad (13)$$

и удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \lambda H(t)U(t, t_0), \quad (14)$$

где $H(t)$ — гамильтониан системы, который в общем случае зависит от времени, а λ — промежуточный параметр, который в конце полагается $\lambda = 1$.

Если бы мы не рассматривали пространство матриц, то решение (14) легко

можно было бы найти с помощью итераций

$$U(t, t_0) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n P_n(t, t_0), \quad P_n(t, t_0) = 0. \quad (15)$$

Подставляя (15) в уравнение (14) и приравнявая слагаемые при одинаковых степенях λ , возникает система уравнений на P_n

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P_1(t, t_0) = H(t), \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P_n(t, t_0) = H(t) P_{n-1}(t, t_0) \quad (n > 1). \quad (16)$$

интегрируем, получаем P_n

$$P_n(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1 H_2 \dots H_n, \quad H_i \equiv H(t_i). \quad (17)$$

Если гамильтониан системы не зависит от времени, то P_n приобретает компактный вид и ряд (15) сводится к экспоненте

$$P_n = \frac{1}{n!} \left(-i(t - t_0)H/\hbar\right)^n \rightarrow U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar}. \quad (18)$$

Так как мы ищем решение матричного уравнения, то (17) будет верным лишь в том случае, если $[H(t_1), H(t_2)] = 0, \forall t_1, t_2$. В общем случае это не так для $H = H(t)$.

Для удобства сделаем переопределение: $A(t) \equiv -iH(t)/\hbar$, оператор $A(t)$ является антиэрмитовым. Перепишем матричное уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \lambda A(t) U(t, t_0). \quad (19)$$

Учтём, что работаем с матрицами и будем искать решение в виде ряда:

$$U(t, t_0) = e^{\Omega(t, t_0)} = I + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \Omega^n(t, t_0), \quad \Omega(t_0, t_0) = 0, \quad (20)$$

если $A \neq A(t)$, то $\Omega(t, t_0) = \lambda(t - t_0)A(t)$.

Так как обычным дифференциальным правилам (для функций) матричные экспоненты не подчиняются, то встаёт вопрос, как получить дифференциальное уравнение на $\Omega(t, t_0)$. Чтобы его составить, нужно воспользоваться

1) групповым свойством оператора эволюции

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0);$$

2) формулой Бейкера–Кемпбелла–Хаусдорфа для матричных экспонент

$$\ln(e^X e^Y) = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] + \frac{1}{12}[Y, [Y, X]] + \dots,$$

а точнее, его приближением

$$\ln(e^X e^Y) \simeq X + Y + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{B_k}{k!} \underbrace{[Y, [\dots [Y, X]] \dots]}_{k \text{ раз}} + O(X^2),$$

где B_n — числа Бернулли, а квадратные скобки обозначают коммутатор $[X, Y] = XY - YX$ для матриц одинаковых размерностей.

Используя 1), где $t_2 = t + \delta t$, $t_1 = t$ и предполагая, что $A(t) \simeq A(t + \delta t)$, получаем уравнение

$$e^{\Omega(t+\delta t, t_0)} \simeq e^{\lambda A(t) \delta t} \cdot e^{\Omega(t, t_0)}, \quad (21)$$

и, применяя к нему 2) в пределе $\delta t \rightarrow 0$, можно получить дифференциальное уравнение на $\Omega(t, t_0)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Omega(t, t_0) = \lambda A(t) + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{B_n}{n!} \underbrace{[\Omega(t, t_0), [\dots [\Omega(t, t_0), A(t)]] \dots]}_{n \text{ раз}}. \quad (22)$$

Выигрыш с экспоненциальным представлением оператора эволюции появляется, когда Ω выражается в виде ряда по степеням λ , который называется рядом Магнуса $\Omega = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \Omega_k$. Подставляем его в (22), приравниваем слагаемые при одинаковых степенях λ и, после некоторых вычислений, первые три члена ряда Магнуса:

$$\Omega_1(t, t_0) = \int_{t_0}^t dt_1 A_1, \quad (23)$$

$$\Omega_2(t, t_0) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 [A_1, A_2], \quad (24)$$

$$\Omega_3(t, t_0) = \frac{1}{6} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 ([A_1, [A_2, A_3]] + [[A_1, A_2], A_3]), \quad (25)$$

где, как и прежде, использовано обозначение $A_i \equiv A(t_i)$.

Важным моментом является то, что при любом порядке по λ усечённая сумма ряда Магнуса всегда антиэрмитова, так как $A(t)$ — антиэрмитовый оператор и коммутатор антиэрмитовых операторов так же антиэрмитов. Следовательно, экспонента такого ряда будет всегда давать унитарное приближение для $U(t, t_0)$.

Таким образом решение нестационарного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = H(t) \Psi(t), \quad (26)$$

или, в терминах оператора $A(t)$

$$\frac{d}{dt} \Psi(t) = A(t) \Psi(t), \quad A \in \mathbb{C}^{n \times n}, \quad \Psi \in \mathbb{C}^n, \quad (27)$$

даётся следующей формулой

$$\Psi(t) = e^{\Omega(t, t_0)} \Psi(t_0), \quad \Omega(t, t_0) \in \mathbb{C}^{n \times n}, \quad \Omega(t_0, t_0) = 0, \quad (28)$$

где $\Omega(t, t_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n(t, t_0)$ с начальным условием $\Omega_n(t_0, t_0) = 0$, и три первых члена этого ряда (23)–(25).

2.2 Численная реализация

Существуют некоторые естественные ограничения на численный счёт, например, посчитать точно бесконечные ряды не представляется возможным, из-за чего возникает проблема счёта матричной экспоненты. Необходимо прибегать к наиболее оптимальным вариантам приближенных вычислений.

В целях использования разложения Магнуса в качестве числового интегратора, который даёт решение $\Psi(t)$, начиная с $\Psi(t_0)$, вопрос сосредоточен на том, как эффективно обрабатывать один шаг интегрирования.

Отдельные точки, в которых вычисляется решение на интервале $[t_0, t_f]$, $t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_f$ связаны с приращением времени на величину $h_n = t_{n+1} - t_n$, где $0 \leq n \leq N - 1$. Определим решение в точке t_{n+1}

$$\Psi(t_{n+1}) = e^{\Omega(t_n + h_n, t_n)} \Psi(t_n). \quad (29)$$

После всех итераций, решение в конечной точке интервала даёт

$$\Psi(t_f) = \prod_{n=0}^{N-1} e^{\Omega(t_n; h_n)} \Psi(t_0), \quad (30)$$

с сокращённым обозначением $\Omega(t_n; h_n) \equiv \Omega(t_n + h_n, t_n)$.

2.2.1 Нейтринные осцилляции в среде

Дифференциальная система, управляющая эволюцией состояний в трёхнейтринном случае осцилляций в среде является одним из типов уравнений (27), где $n = 3$, $t = r$, и $A \equiv -iH$

$$i \frac{d}{dr} \Psi(r) = H(r) \Psi(r), \quad (31)$$

где $H(r) = H_0 + v(r)W$, а явный вид матрицы W в (11).

Мы будем решать на примере, где начальное состояние соответствовало электронному нейтрино

$$\Psi(r_0) = \begin{pmatrix} c_{12} & c_{13} \\ s_{12} & c_{13} \\ & s_{13} \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Мы предполагаем нормальную иерархию масс и принимаем наиболее подходящими значения параметров осцилляции в трёхнейтринном случае, полученные из текущих данных по нейтрино [5], [6]: $\Delta m_{21}^2 = 7,54 \times 10^{-5} \text{ эВ}^2$, $\Delta m_{31}^2 = 2,47 \times 10^{-3} \text{ эВ}^2$, $\sin^2 \theta_{12} = 0,308$, $\sin^2 \theta_{23} = 0,437$ и $\sin^2 \theta_{13} = 0,0234$.

Переходим к безразмерным переменным $\xi \equiv r/R_\odot$, выражая расстояние в единицах солнечного радиуса $R_\odot = 6,96 \times 10^5 \text{ км}$, и используем матрицу H_0 в виде

$$H_0 = \frac{a}{\mathcal{E}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (33)$$

здесь \mathcal{E} это численное значение энергии нейтрино в МэВ и $a = 4,35196 \times 10^6$ и $b = 0,030554$ безразмерные параметры.

Обозначим за r порядок точности решения по степеням h_n . Другими словами, мы будем находить решение в точке $\Psi(\xi_n + h_n)$ с точностью до $O(h_n^{r+1})$. За этот порядок отвечает то, каким численным методом мы будем находить

Ω_k и каким конечным значением k в ряде Магнуса мы ограничимся. Приближение к усечённому ряду Магнуса порядка r : $\Omega(\xi_n; h_n) \simeq \Omega^{[r]}(\xi_n; h_n)$.

Таким образом, решение порядка точности r по h_n будет реализовано следующей формулой

$$\Psi(\xi_{n+1}) = e^{\Omega^{[r]}(\xi_n; h_n)} \Psi(\xi_n). \quad (34)$$

2.2.2 Методы

Рассмотрим два метода реализации, где $r = 2, 4$, названные соответственно М2 и М4.

М2

Метод приближения второго порядка является самым простым, так как из ряда Магнуса остаётся только первое слагаемое $\Omega^{[2]} = \Omega_1$

$$\Omega_1(\xi_n; h_n) = -i \int_{\xi_n}^{\xi_n + h_n} dt H(t), \quad (35)$$

и для достижения заданной точности достаточно одной точки, чтобы оценить значение интеграла (35).

Таким образом, второй порядок точности реализуется формулой

$$\Omega^{[2]}(\xi_n; h_n) = -i H(\bar{\xi}) h_n = -i(H_0 + \bar{v} W) h_n, \quad (36)$$

где взята средняя точка интервала интегрирования $\bar{\xi} \equiv \xi_n + h_n/2$. Величина $\bar{v} \equiv v(\bar{\xi})$ пересчитывается на каждом шаге.

М4

Для достижения $r = 4$ необходимо считать первые два члена разложения $\Omega^{[4]} = \Omega_1 + \Omega_2$, а аппроксимировать интегралы двухточечными квадратурами Гаусса-Лежандра.

Точки вычисления квадратур

$$\xi_{\pm} = \xi_n + \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{h_n}{2}, \quad (37)$$

в которых введём величины $H_{\pm} = H(\xi_{\pm})$.

Конечная формула такого метода сводится к следующему выражению

$$\Omega^{[4]}(\xi_n; h_n) = -i (H_+ + H_-) \frac{h_n}{2} + \frac{\sqrt{3}}{12} [H_-, H_+] h_n^2. \quad (38)$$

В качестве альтернативы квадратуры Симпсона также дают эквивалентное приближение четвёртого порядка.

Данный метод мы и будем реализовывать.

3 Модели

Эффекты материи играют важную роль на Солнце и в коллапсах сверхновых, первым делом необходимо рассмотреть именно эти модели и обратить внимание на проблемы их численной реализации при использовании разложения Магнуса. Непосредственно модель задаётся функцией $v(\xi)$.

3.1 Солнце

Очень важно рассмотреть модель Солнца, так как оно является источником большого количества нейтрино, приходящих на Землю. Полный поток солнечных нейтрино оценивается величиной $N_\nu \simeq 1,8 \times 10^{38} \frac{\text{нейтрино}}{\text{сек}}$.

В Солнце электронная плотность хорошо аппроксимируется экспоненциальным профилем

$$v(\xi) = \gamma e^{-\eta \xi}, \quad (39)$$

с $\gamma = 6,5956 \times 10^4$ и $\eta = 10,54$. Интервал интегрирования в единицах солнечного радиуса был $\xi \in [0, 1; 1]$.

Если в (38) раскрыть коммутатор, подставляя в явном виде $H(\xi_\pm) = H_0 + v(\xi_\pm)W$, то там возникает разность $(v_+ - v_-)$, $v_\pm \equiv v(\xi_\pm)$. В этом месте может происходить потеря точности, так как при вычитании близких чисел значимые разряды могут потеряться, что может в разы увеличить относительную погрешность.

Экспоненциальная функция с отрицательным показателем быстро падает, а при достаточно малом шаге (расчёты показывают, что оптимальный вариант для $h_n \sim 10^{-5} - 10^{-6}$) это может сильно сказаться на результате.

Мы используем числа формата `double`, мантисса способна хранить 15 старших десятичных значащих цифр. Когда вычитаются близкие по модулю

числа, старшие биты мантиссы обнуляются, что компенсируется её сдвигом и изменением экспоненты. При этом ненулевые младшие биты мантиссы становятся старшими, а новые младшие биты неизвестны (так как для их хранения в исходных числах не хватило места) и будут заполнены случайными значениями, которые не имеют смысла. И если потом результат подобного вычитания умножить на очень большое число, то те неизвестные младшие биты сдвинутся в сторону старших, приобретая случайные «шумовые» значения.

3.2 Сверхновая

Взрыв сверхновой является также важным источником нейтрино. Во время взрыва 99% энергии гравитационной связи звезды (порядка $3 \cdot 10^{53}$ эрг) высвобождается в виде нейтрино и антинейтрино всех ароматов.

В случае сверхновой была использована

$$v(\xi) = \gamma/\xi^3, \quad (40)$$

с $\gamma = 52,934$. Интегрирование велось в интервале $[0,02; 20]$.

Она падает не так быстро, как в случае с солнечной моделью, поэтому разность $(v_+ - v_-)$ не приведёт к нарушению заданной точности счета. В этом смысле, модель сверхновой считается несколько точнее, чем модель Солнца (если рассматривать одинаковый промежуток интегрирования).

4 Изменение шага

Самый простой способ реализовать рассмотренные методы интегрирования — использовать постоянное значение шага, то есть разбить интервал интегрирования на равные промежутки $h_n = h = (\xi_f - \xi_0)/N$ и после установить приращение $\xi_n = \xi_0 + nh$. Эта реализация не является эффективной, так как решение $\Psi(\xi)$ может испытывать быстрые изменения вдоль эволюции на некоторых промежутках и медленно развиваться в других, что может заметно отразиться на конечном решении. Наиболее оптимально использовать шаг, который регулируется автоматически в процессе счета наиболее подходящим образом. Один из возможных способов реализации — ввести условие, чтобы локальная ошибка была ниже установленного значения `tol` (чувствительности счета), если это не так — следует уменьшить шаг.

Для оценки локальной ошибки E_r в точке ξ_{n+1} понадобятся значения обоих рассмотренных методов

$$\hat{\Psi}_{n+1} = e^{\Omega^{[2]}(\xi_n, h_n)} \Psi_n, \quad \Psi_{n+1} = e^{\Omega^{[4]}(\xi_n, h_n)} \Psi_n, \quad (41)$$

М2 и М4 соответственно. Тогда локальную ошибку метода М2 можно выразить следующим образом

$$E_r = \|\hat{\Psi}_{n+1} - \Psi_{n+1}\|, \quad (42)$$

где мы использовали эвклидовскую норму вектора $\|X\| = \sqrt{\sum_i x_i^2}$.

Таким образом, если в данной точке $E_r > \text{tol}$, то интегратор возвращается на шаг назад и считает заново в этой точке с новым меньшим шагом h_{new}

$$h_{\text{new}} = sh_c \left(\frac{\text{tol}}{E_r} \right)^{1/3}, \quad (43)$$

где h_c означает текущее значение шага и s (safety factor) обеспечивает уменьшение вероятности того, что при следующем шаге опять сработает условие $E_r > \text{tol}$. В данной работе использовано значение $s = 0,8$.

Так как самая затратная по времени часть работы программы заключена в вычислении матричных экспонент, то прямая оценка E_r как (42) может значительно увеличить общее время вычислительной работы алгоритма. Чтобы избежать этого, мы можем выразить

$$\hat{\Psi}_{n+1} - \Psi_{n+1} = (e^{\Omega^{[2]} - \Omega^{[4]}}) \Psi_n = (e^Z - I) \Psi_{n+1}, \quad (44)$$

где

$$Z = \ln(e^{\Omega^{[2]}} e^{-\Omega^{[4]}}) = \Omega^{[2]} - \Omega^{[4]} - \frac{1}{2}[\Omega^{[2]}, \Omega^{[4]}] + \dots. \quad (45)$$

Используя это, можно посчитать локальную ошибку приближённо и менее времязатратно следующим образом

$$E_r \simeq \|(h_n^2 S_1 + h_n^3 S_2 + \frac{1}{2} h_n^4 S_1^2) \Psi_{n+1}\| + O(h_n^5), \quad (46)$$

где введены обозначения

$$S_1 = -\frac{\sqrt{3}}{12}(v_+ - v_-)[H_0, W], \quad (47)$$

$$S_2 = i \frac{\sqrt{3}}{24}(v_+ - v_-) \left([H_0, [H_0, W]] + \frac{1}{2}(v_+ + v_-)[W, [H_0, W]] \right) \quad (48)$$

5 Код

Для того, чтобы в некоторых местах не терять точность и сделать код наиболее эффективным, необходимо было учитывать особенности численной реализации формул.

Во-первых, при вычислении матричной экспоненты нужны собственные значения обесшпуренной матрицы. Поскольку определитель матрицы для солнечной и сверхновой моделей велик, то велики и собственные значения. Чтобы снизить потерю точности при работе с собственными значениями

```
double arg,u;
arg=acos((3.*q*sqrt(3.))/(2.*p*sqrt(p)))/3.;

L[0]=cos(arg);
L[1]=cos(arg-2.*M_PI/3.);

if(L[1]<L[0])
{
    u=L[0];
    L[0]=L[1];
    L[1]=u;
}

L[2]=cos(arg-4.*M_PI/3.);

if(L[2]<L[0])
{
    u=L[0];
    L[0]=L[2];
    L[2]=u;

    u=L[1];
    L[1]=L[2];
    L[2]=u;
```

```

}
else
    if(L[2]<L[1])
    {
        u=L[1];
        L[1]=L[2];
        L[2]=u;
    }
L[3]=L[1]-L[0]; //a
L[4]=L[2]-L[0]; //b

```

Конец кода

мы выделяем множитель F и явно подставляем его в формулах, где потери в меньшей степени затрагивают результат

Начало кода

```

F=2.*sqrt(p/3.);

r0=-(1.-cexp(I*L[3]*F*h))/L[3]; // r0/F
r1=-(-r0-(1.-cexp(I*L[4]*F*h))/L[4])/(L[3]-L[4]); // r1/F^2

for(int j1=0;j1<FLAVS;j1++)
    for(int j2=0;j2<FLAVS;j2++)
    {
        Eom4[j1][j2]=cexp(I*h*z)*cexp(I*L[0]*F*h)*
        ((1.-L[0]*(r0-L[1]*r1))*One[j1][j2]+
        (r0+L[2]*r1)*A[j1][j2]/F+
        r1*(A[j1][0]*A[0][j2]+A[j1][1]*A[1][j2]+A[j1][2]*A[2][j2])/(F*F));
    }

```

Конец кода

Так как в рассматриваемых моделях гамильтониан допускает разделение на постоянные части (см. (10)), то имеет смысл отдельно вычислить коммутаторы и непосредственно использовать полученные значения в счетном алгоритме. Для этого необходима специальная структура данных

Начало кода

```

typedef struct
{
    double d0,d1,tol;
    double (*dens)(double);
    double (*HO)[FLAVS],(*W)[FLAVS],(*cHOW)[FLAVS],(*cHONOW)[FLAVS],(*cWHOW)[FLAVS];
} wf_ctx;

```

Конец кода

Такая структура является универсальной, так как не учитывает явный вид профильной функции: позволяет использовать произвольный профиль

Начало кода

```
xi_m=x+(1.-1./sqrt(3.))*h/2.;
xi_p=x+(1.+1./sqrt(3.))*h/2.;
f_m=ctx->dens(xi_m);
f_p=ctx->dens(xi_p);
x+=h;

z=0.;

for(int j1=0;j1<FLAVS;j1++)
  for(int j2=0;j2<FLAVS;j2++)
  {
    S1[j1][j2]=-sqrt(3.)*(f_p-f_m)*ctx->CHOW[j1][j2]/12.;
    S2[j1][j2]=I*sqrt(3.)*(f_p-f_m)*(ctx->CHONOW[j1][j2]+
      (f_p+f_m)*ctx->CWHOW[j1][j2]/2.)/24.;
  }
for(int j1=0;j1<FLAVS;j1++)
{
  for(int j2=0;j2<FLAVS;j2++)
  {
    A[j1][j2]=-ctx->H0[j1][j2]-(f_p+f_m)*ctx->W[j1][j2]/2.+
      I*S1[j1][j2]*h;
  }
  z+=A[j1][j1]/3.;
}
```

Конец кода

и задать алгоритму начальные параметры.

6 Обсуждение

Результаты работы программы для двух рассматриваемых моделей с одной стороны говорят о преимуществах данного алгоритма, но в то же время указывают на его недостатки.

Референсные данные

В работе [1] были приведены данные по работе алгоритма метода М4 при его реализации на **Fortran**. Ниже мы приводим результаты работы нашего алгоритма в сравнении с референсными данными.

Модель сверхновой

На графике приведена вероятность «выживания» P_{ee} для электронного нейтрино.

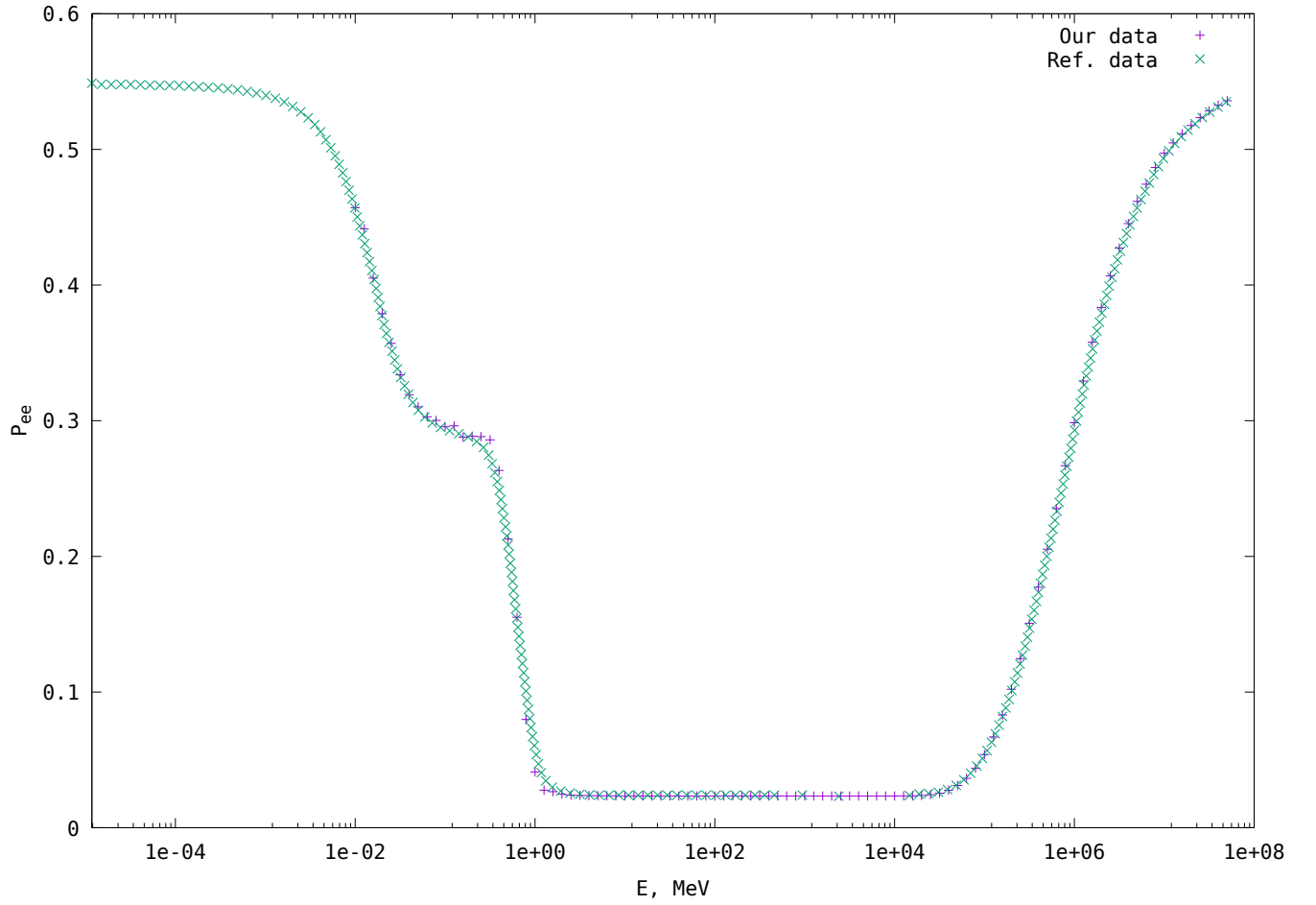


Рис. 1: Сравнение с референсными данными для модели сверхновой.

Как видно на рис. 1 наши данные хорошо согласуются с референсными данными. Малое количество точек при малых значениях энергии связано с тем, что при уменьшении энергии значительно увеличивается время счёта.

Для проверки численной точности мы провели расчёт вероятности выживания и модулей компонент Φ при разных значениях параметра `tol`.

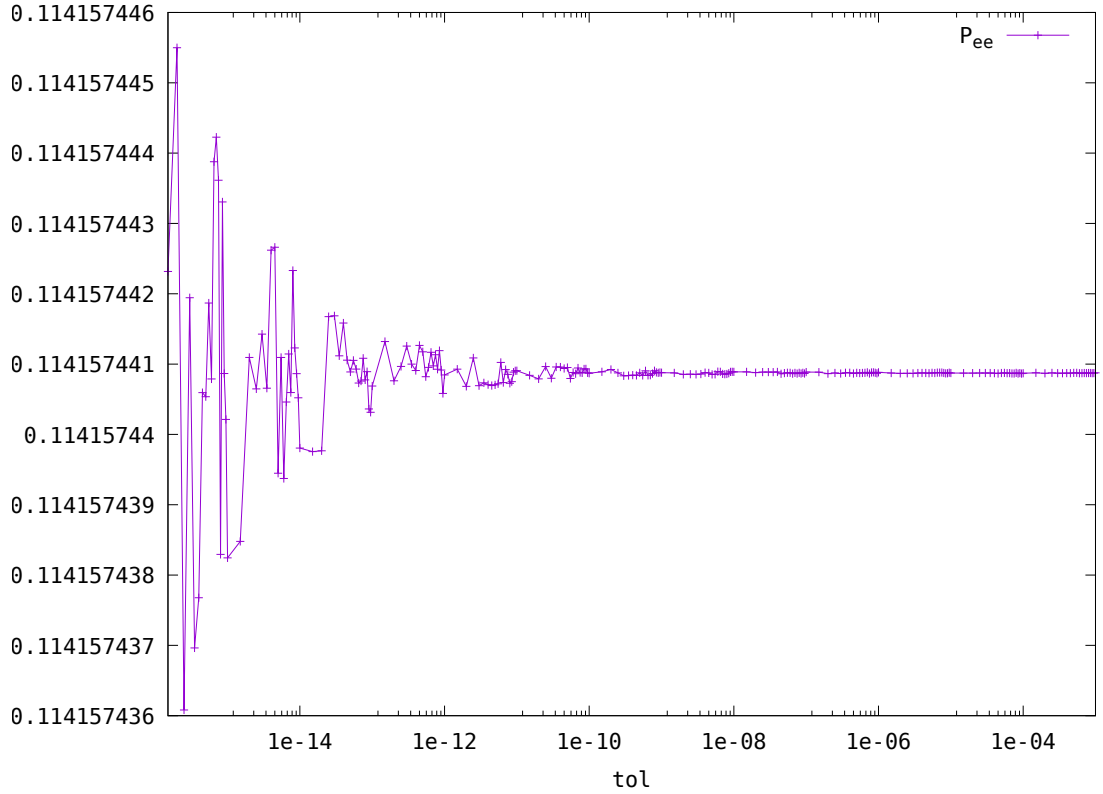


Рис. 2: Вероятность выживания при разных tol .

Так как время счета увеличивается также при уменьшении параметра tol , для более детальной зависимости крайняя точка интегрирования на рис. 2 и на рис. 7 была выбрана меньше раннее заданной: $b=0.21$. При энергии $E=100$ МэВ, как и в последующих графиках с tol . Из этого графика хорошо видно, как теряются значимые цифры при очень маленьких значениях параметра чувствительности $\lg(\text{tol}) \in [-15, -10]$, в конкретном случае это происходит лишь на седьмом знаке после запятой.

Чтобы проанализировать рис. 1, для компонент были выбраны стандартные пределы интегрирования модели сверхновой $[0, 2; 20]$ в единицах радиуса Солнца.

Диапазон по вертикали у каждого графика был выбран свой, чтобы отметить переходные моменты от стабильности до неустойчивости. В местах, где точки выстраиваются в ровную линию, соответствующие значения по оси ординат совпадает с точностью до восьмого знака после запятой. Что верно и для следующей модели — солнечной.

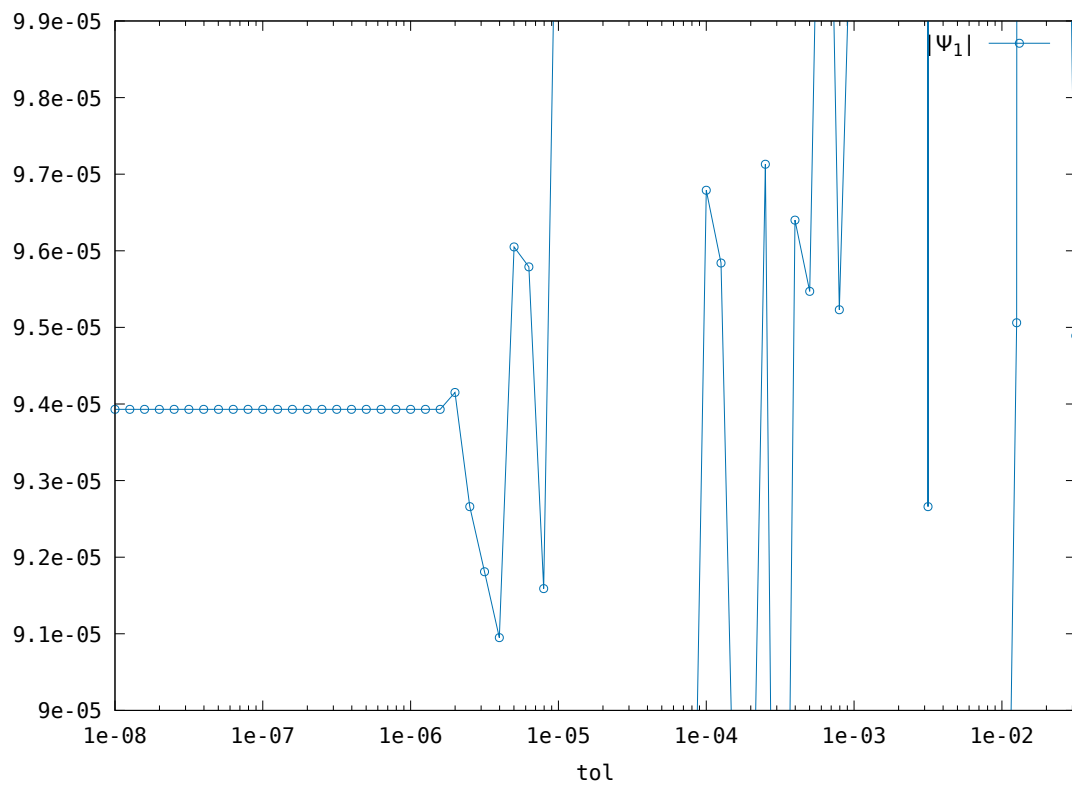


Рис. 3: Первая компоненты Ψ_1 при разных tol .

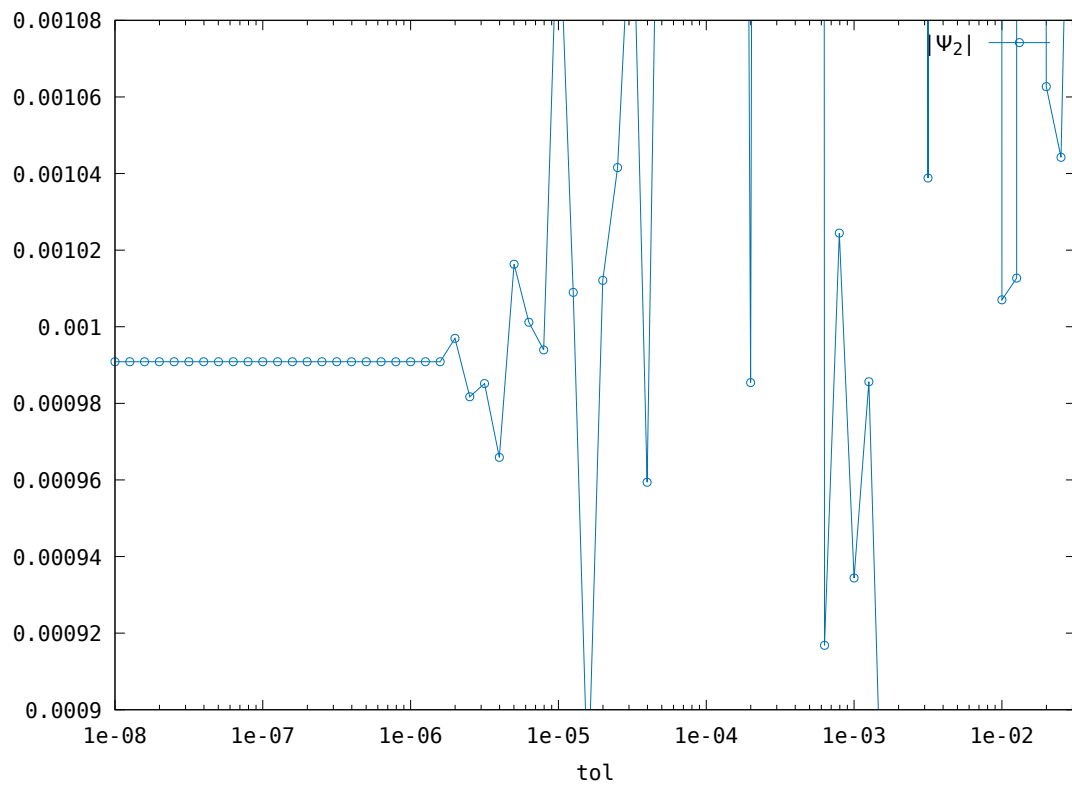


Рис. 4: Вторая компоненты Ψ_2 при разных tol .

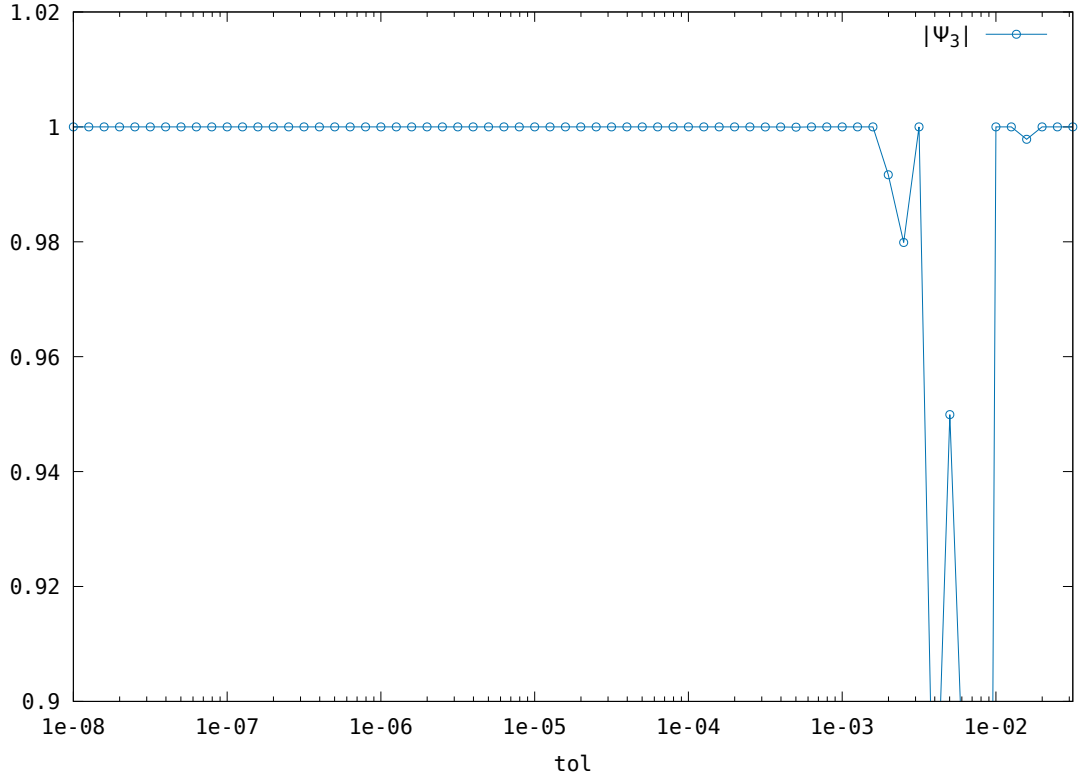


Рис. 5: Третья компоненты Ψ_3 при разных tol .

Небольшое отклонение от референсных данных в области $E \sim 1$ МэВ можно объяснить тем фактом, что данные были получены при значении $\text{tol}=1\text{e-}4$. Такое значение достаточно для точного счёта третьей компоненты (см. рис. 5), но для первой компоненты (см. рис. 3) может вызвать отклонения более, чем в пятом знаке после запятой, а для второй компоненты (см. рис. 2) — чем в четвертом.

Оптимальным значением для модели сверхновой можно принять $\text{tol}=1\text{e-}6$.

Солнечная модель

На рис.6 приведена вероятность выживания P_{ee} для электронного нейтрино. Стандартные пределы интегрирования для этой модели $[0.1; 1]$ в единицах радиуса Солнца.

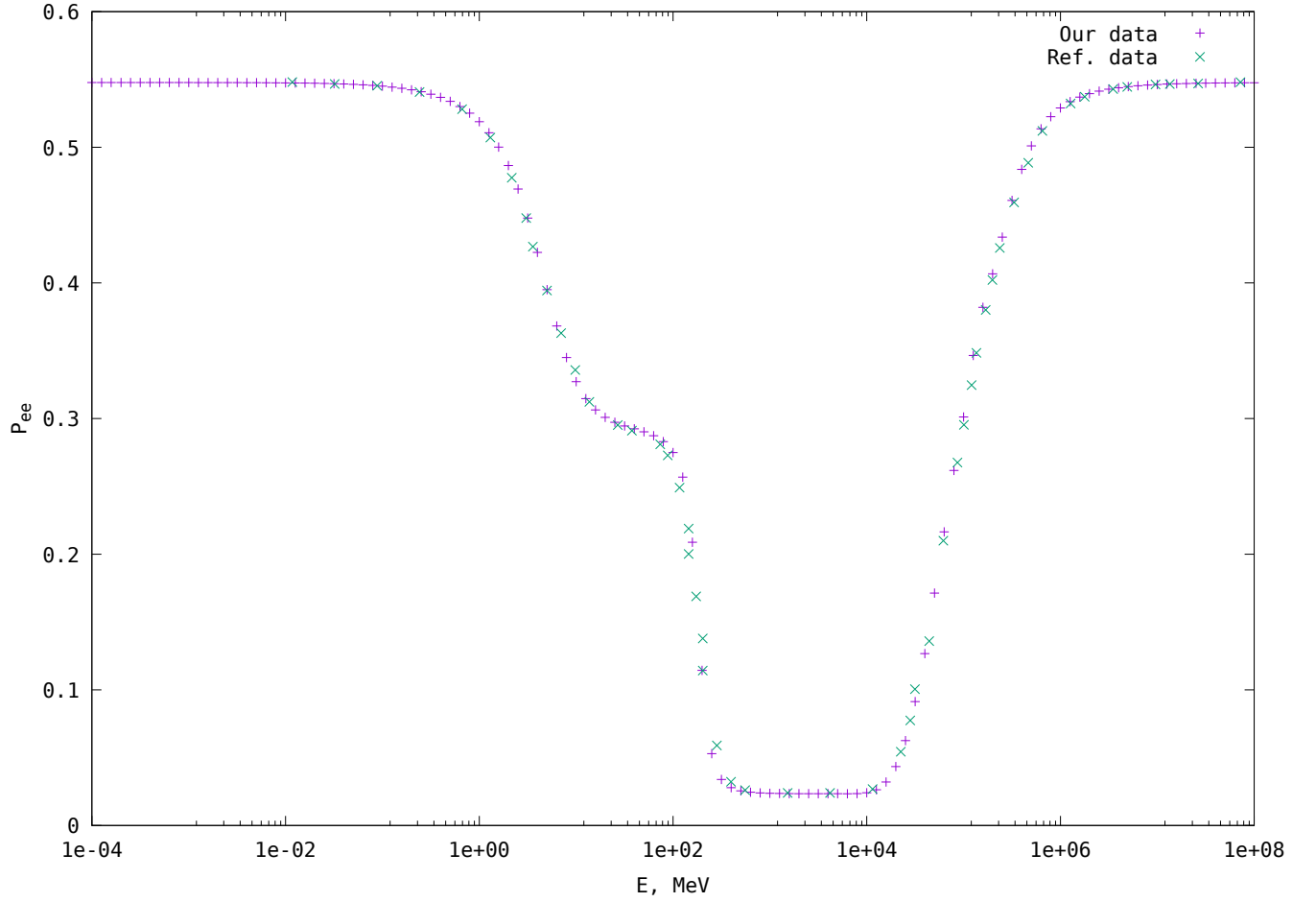


Рис. 6: Сравнение с референсными данными для солнечной модели.

Наших точек больше, чем референсных, и они очень хорошо согласуются друг с другом, хотя и заданная точность была такой же, как в модели сверхновой: $\text{tol}=1\text{e-}4$. Слабое различие так же может быть связано с недостаточно малым параметром tol .

Для проверки численной точности мы провели расчёт вероятности выживания и модулей компонент Φ при разных значениях параметра tol .

Из рис. 7 хорошо видно, как теряются значимые цифры при очень маленьких значениях параметра чувствительности $\lg(\text{tol}) \in [-15, -10]$, в конкретном случае это происходит лишь на седьмом знаке после запятой.

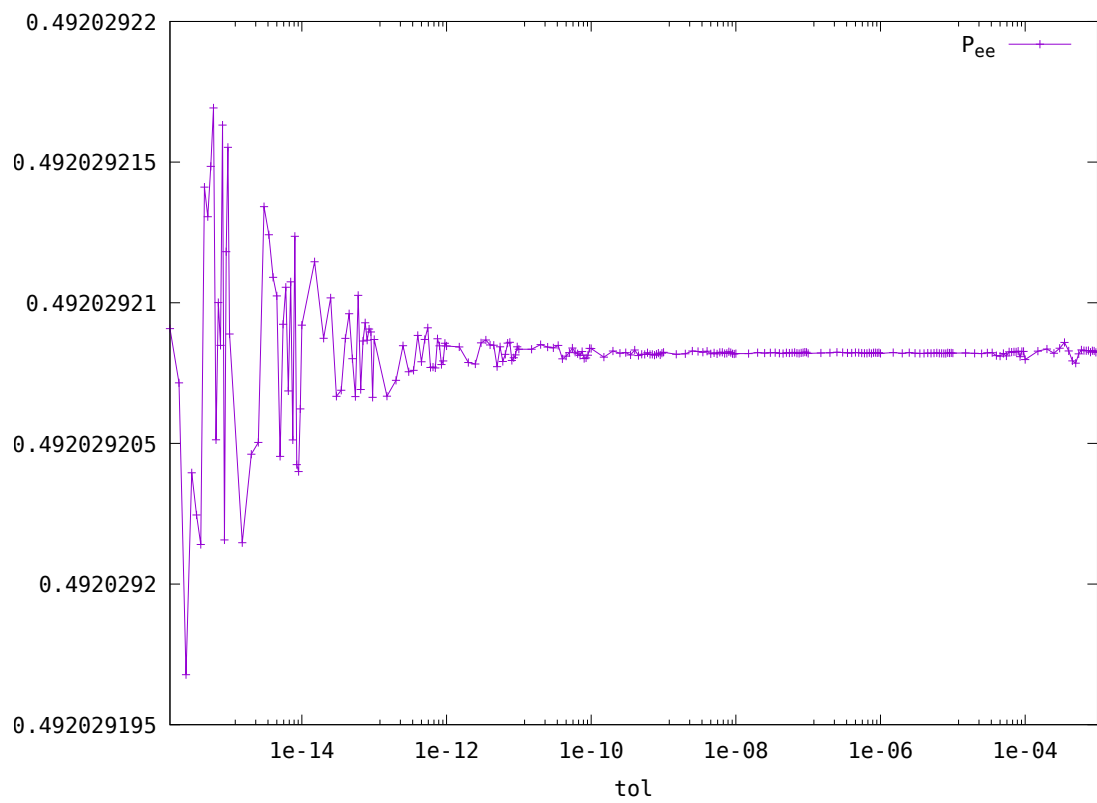


Рис. 7: Вероятность выживания при разных tol .

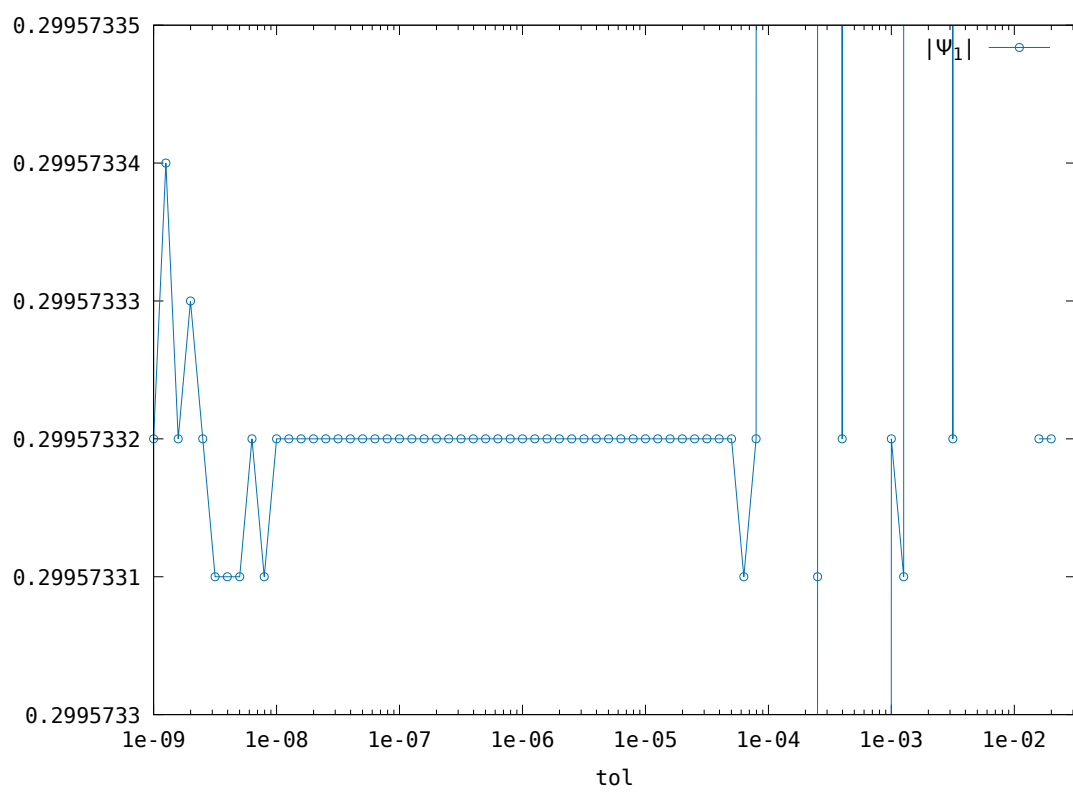


Рис. 8: Первая компоненты Ψ_1 при разных tol .

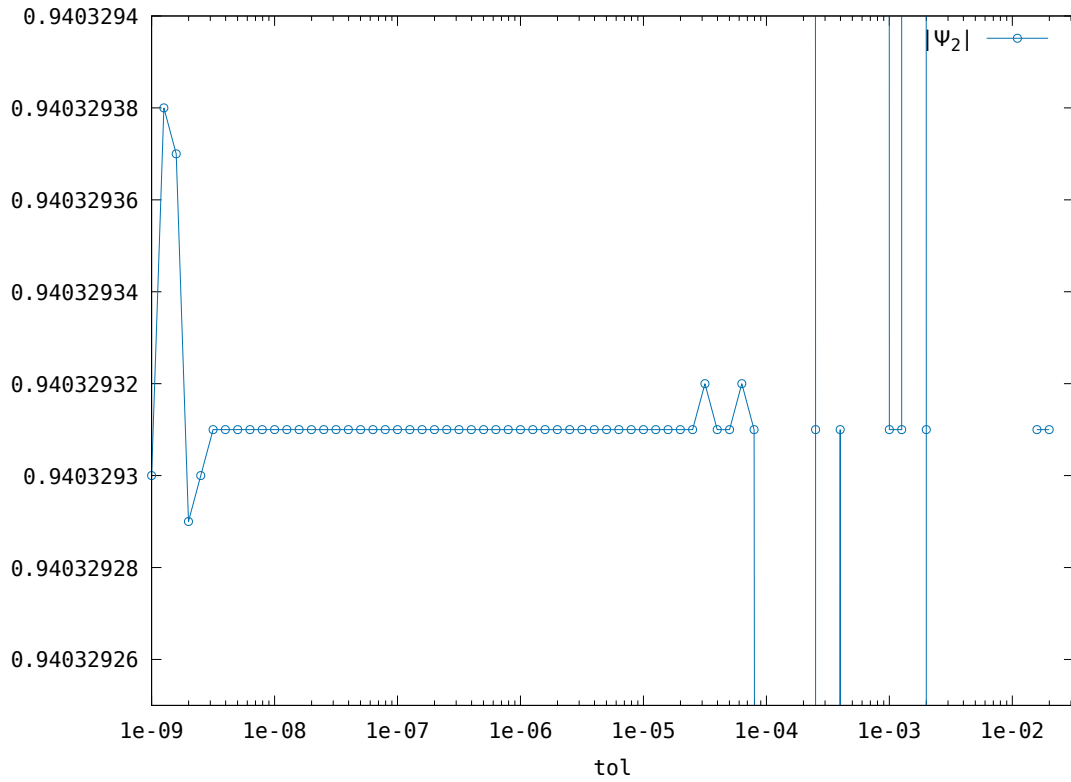


Рис. 9: Вторая компоненты Ψ_2 при разных tol .

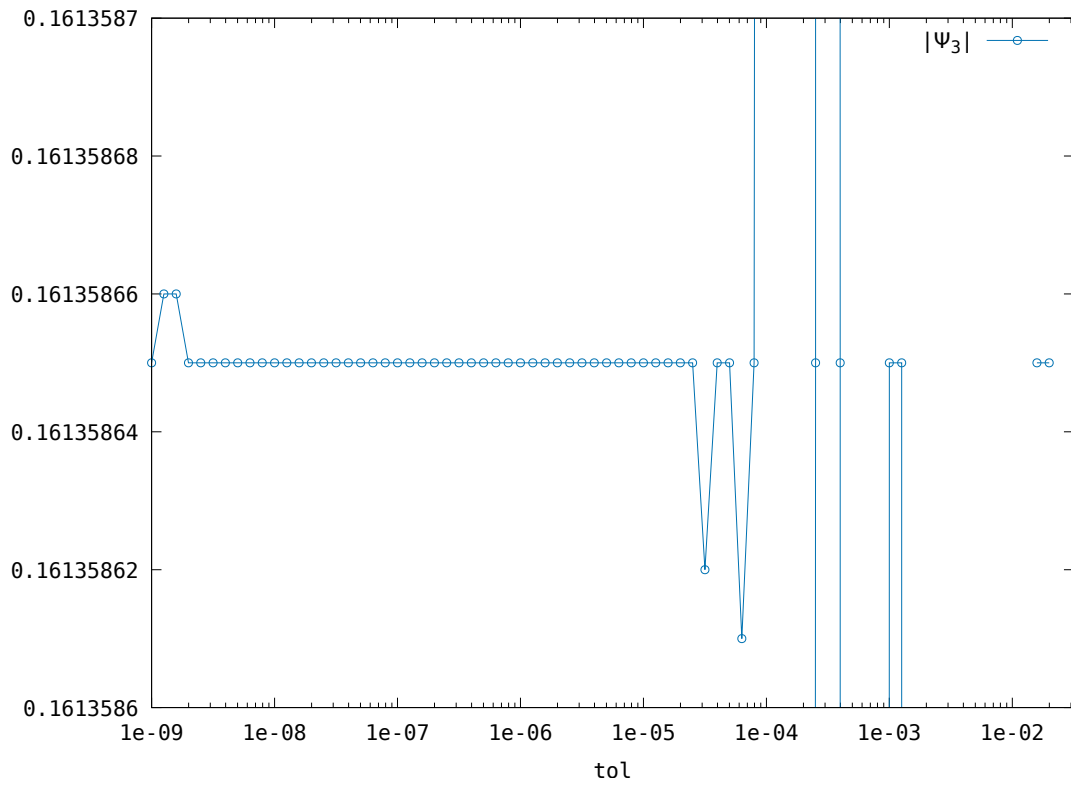


Рис. 10: Третья компоненты Ψ_3 при разных tol .

Как видно из рис. 8 - 10, подходящим для солнечной модели значением можно принять $\text{tol}=1\text{e-}5$.

Сравнение с референсными данными показывает, что наш алгоритм работает достаточно хорошо.

Анализ точности показал наиболее оптимальные значения параметра `tol` для данных моделей.

Из недостатков явно стоит выделить время счета при малых значениях энергии. На рис. 6 наше самое малое значение по энергии потребовало разбить интервал интегрирования $[0, 1; 1]$ на 166775 шагов, чтобы добиться заданной точности. Сильнее всего это заметно в случае модели сверхновой: на рис. 1 наше самое малое значение по энергии потребовало разбить интервал интегрирования $[0, 02; 20]$ уже на 53511420 шагов, чтобы добиться заданной точности. При еще более меньших значениях энергии, количество шагов этой модели может достигать девятизначного числа. Мы продолжим анализировать метод и делать его более эффективным и оптимальным для использования в различных физических моделях.

Список литературы

- [1] Casas F. Efficient numerical integration of neutrino oscillations in matter / F.Casas // Phys. Rev. D. / F.Casas, J.C. D’Olivo, J.A. Oteo, — 2016, — Vol. 94, — 113008.
- [2] Giunti C., Fundamentals of Neutrino Physics and Astrophysics / C. Giunti, C. W. Kim. — Oxford University Press — 2007.
- [3] Wolfenstein L., Neutrino Oscillations in Matter / L. Wolfenstein // Phys.Rev. D. / L. Wolfenstein, S. P. Mikheyev, A. Yu. Smirnov — 1978, — Vol. 17, — 2369-2374.
- [4] A pedagogical approach to the Magnus expansion / S. Blanes, et al. // Eur. J. Phys. / S. Blanes et al. — 2010, — Vol. 31, — 907–918.
- [5] Gonzalez-Garcia M. C., Global Analyses of Neutrino Oscillation Experiments / M. C. Gonzalez-Garcia // Nuclear Physics B / M. C. Gonzalez-Garcia, M. Maltoni, T. Schwetz — 2016, — Vol. 908, — 199-217.
- [6] Status of three-neutrino oscillation parameters, circa 2013 / F. Capozzi, et al. // Phys. Rev. D / F. Capozzi, et al. — 2014, — Vol. 89, — 093018.