

Des multiprocesseurs pour des réponses multipolaires

Pour la première fois, un calcul complètement microscopique a permis de prédire les réponses multipolaires de l'uranium 238, noyau lourd et déformé. Cette étude effectuée avec l'approche QRPA en symétrie axiale illustre les progrès de la structure nucléaire théorique grâce à l'utilisation optimale des nouveaux moyens de calcul. Elle ouvre la voie vers des études systématiques attendues dans les domaines tels que l'astrophysique nucléaire.

S. Péru • G. Gosselin • M. Martini • M. Dupuis • S. Hilaire CEA – DAM Île-de-France

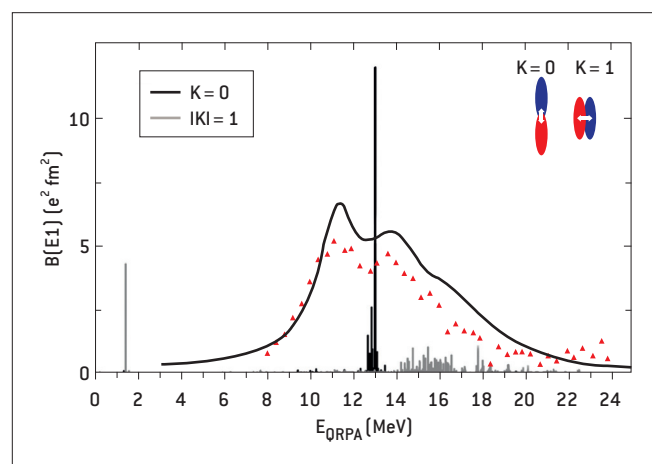
Le noyau est un fluide quantique composé de N nucléons dont on peut décrire les propriétés grâce à des approches plus ou moins universelles. À ce jour, l'approximation du champ moyen – qui consiste à traiter le problème à N corps en considérant chaque nucléon comme une particule indépendante soumise à un potentiel moyen généré par tous les autres nucléons du noyau – est l'approche traditionnellement utilisée au CEA/DAM puisqu'elle permet de décrire tous les noyaux de la nature dans leur état fondamental à partir d'une interaction effective unique : la force de Gogny. Le traitement des états excités, en particulier collectifs (pour lesquels une grande partie des nucléons contribue), nécessite d'étendre cette approche. Une extension naturelle, la *Random Phase Approximation* (RPA), permet de décrire les excitations collectives du noyau comme des états cohérents d'excitations particule-trou. États excités de haute et de basse énergie, collectifs aussi bien qu'individuels, sont alors décrits par le même formalisme avec la même précision. À la DAM, un code de calcul RPA a été développé dans les années soixante-dix ; il était toutefois limité à la symétrie sphérique sans prise en compte de l'appariement en raison des capacités informatiques limitées de l'époque, et ne pouvait donc s'appliquer qu'aux noyaux doublement magiques.

Avec le développement considérable qu'ont connu les moyens de calcul ces dernières années, l'extension de cette approche à la symétrie axiale est devenue réalisable ainsi que l'extension du formalisme pour les noyaux avec appariement. Cette dernière se nomme QRPA, pour Quasiparticule-RPA, où la quasiparticule est l'objet mathématique à la fois particule et trou particulièrement bien adapté au traitement des corrélations de paires. Un code de calcul QRPA séquentiel, en symétrie axiale, a donc été développé et a permis une étude théorique des résonances géantes dans les isotopes

du magnésium et du silicium [1]. Celle-ci a montré l'importance de la déformation intrinsèque du noyau tout en validant l'outil numérique, qui toutefois ne pouvait être utilisé pour des noyaux plus lourds car le temps de calcul et la mémoire disponible demeuraient des facteurs limitatifs. Le code de calcul QRPA axiale a donc été étendu pour exploiter pleinement les possibilités offertes par les ordinateurs parallèles. Le challenge était de pouvoir remplir, dans un délai raisonnable, une super matrice non symétrique, dont la taille croît exponentiellement avec le nombre de nucléons du noyau considéré, et dont le temps de calcul de chaque élément augmente dans les mêmes proportions. Le bon côté de cette homothétie du temps de calcul avec la taille du noyau est une modularité quasi infinie du problème. Une stratégie a donc été mise en place pour calculer en parallèle plusieurs éléments de matrice :

Figure 1.

Réponse dipolaire $J = 1$ théorique [noir et gris] et expérimentale [rouge] de ^{238}U . La courbe pleine est une convolution de la réponse théorique décalée de 2 MeV vers les basses énergies.



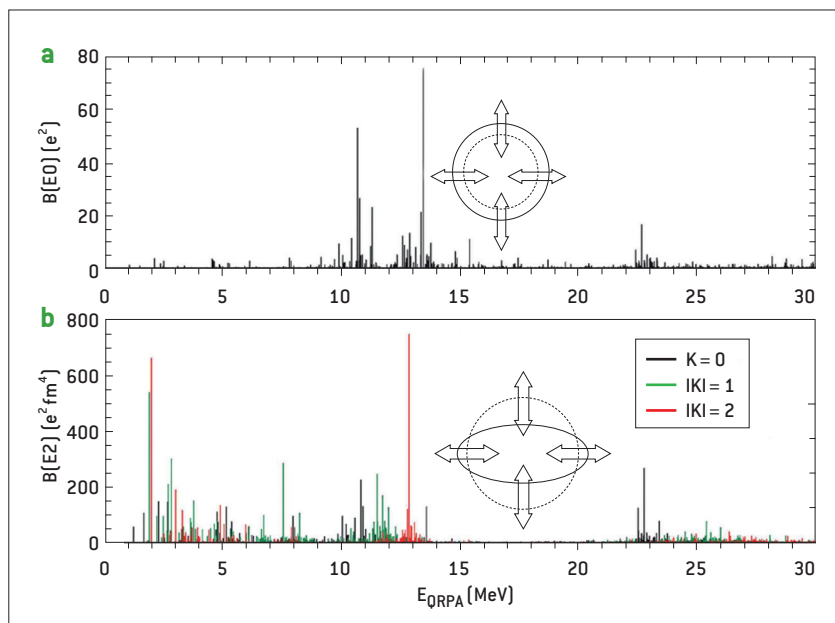


Figure 2. Réponses monopolaire $J = 0$ (a) et quadripolaire $J = 2$ (b) de ^{238}U calculées pour les différentes projections K du moment angulaire J .

une procédure maître-esclave permet de distribuer le calcul sur un nombre ajustable de processeurs. Le gain en temps de calcul s'est avéré rigoureusement proportionnel au nombre de processeurs actifs. La diagonalisation de la super matrice utilisant des procédures elles aussi parallèles fournit ensuite les fonctions d'ondes théoriques des états excités ainsi que les fonctions de réponse multipolaires du noyau.

Pour la première fois, les excitations multipolaires de ^{238}U ont ainsi pu être prédites de façon totalement microscopique et cohérente [2]. La réponse dipolaire (figure 1), oscillation cohérente des protons en opposition de phase avec les neutrons, se scinde en deux composantes, signature de la déformation intrinsèque du noyau. Le résultat théorique reproduit, à un décalage près, les données expérimentales issues de la photoabsorption. Pour la réponse monopolaire, associée aux modes de respiration (figure 2a), les énergies des états résonants sont en accord avec les valeurs expérimentales de diffusion de particules α et d'électrons. Le spectre d'excitation quadripolaire (figure 2b) de basse énergie se révèle lui aussi comparable à l'expérience. Enfin, la réponse octupolaire permet d'identifier la position du premier état $K^\pi = 3^-$, qui existe mais dont la probabilité de transition est trop faible pour être observée. Pour toutes les multipolarités, la hiérarchie en énergie des différentes projections du moment angulaire sur l'axe de symétrie [1] est vérifiée pour ce noyau.

Les réponses multipolaires ainsi obtenues pourront enrichir les calculs microscopiques de réactions nucléaires, comme l'ont montré les études de pré-équilibre à partir de solutions RPA [3]. En plus de permettre un traitement de qualité des noyaux lourds déformés, ce nouvel « outil parallèle », quasi unique (seulement deux autres approches, publiées depuis, peuvent prétendre lui faire concurrence) ouvre une nouvelle ère des études de structure : il autorise les physiciens à envisager des calculs systématiques permettant des analyses de phénomènes nucléaires ayant un impact en astrophysique.

RÉFÉRENCES

- [1] S. PÉRU, H. GOUTTE, "Role of deformation on giant resonances within the quasiparticle random-phase approximation and the Gogny force", *Phys. Rev. C*, **77**, 044313 (2008).
- [2] S. PÉRU, G. GOSSELIN, M. MARTINI, M. DUPUIS, S. HILAIRE, J.-C. DEVAUX, "Giant resonances in ^{238}U within the quasiparticle random-phase approximation with the Gogny force", *Phys. Rev. C*, **83**, 014314 (2011).
- [3] M. DUPUIS, T. KAWANO, J.-P. DELAROCHE, E. BAUGE, "Microscopic model approach to (n,xn) pre-equilibrium reactions for medium-energy neutrons", *Phys. Rev. C*, **83**, 014602 (2011).