

**INSTITUTUL NATIONAL DE C&D  
PENTRU FIZICA SI INGINERIE NUCLEARA  
"HORIA HULUBEI"  
IFIN-HH Bucuresti**

Str. Atomistilor 407, Com.Magurele, jud.Ilfov, C.P. MG-6, cod 077125.  
Tel.(021)404.23.00,fax(021)457.44.40,(021)457.44.32

Avizat

DIRECTOR GENERAL AL IFIN-HH

Dr. Nicolae Victor Zamfir

**R A P O R T D E C E R C E T A R E**

**Denumirea proiectului:** Fizica interacțiilor nucleare și a fazelor materiei hadronice: noi rezultate, activități de cercetare-dezvoltare, aplicații - acronim NIHAM

**Denumirea etapei:** *Coduri de calcul de mare anvergura și aplicații*

- a. *Implementarea și dezvoltarea de coduri de calcul moderne pentru studii de interacții nucleare și materie hadronica, bazate pe calcule de mare anvergura.*
- b. *Evaluarea principalelor date neutronice corespunzătoare reacțiilor  $n+^{233}\text{Pa}$  și  $n+^{231}\text{Pa}$ .*

**Perioada acoperită:** 16.12.2005 - 30.04.2006

**Obiectivele specifice etapei raportate în corelație cu obiectivul general al proiectului:**

Scopul prezentului proiect este de a obține noi rezultate experimentale și teoretice privind structura nucleară și fazele materiei nucleare și aplicații în alte domenii de activitate, respectiv obținerea de date necesare cercetărilor actuale în domeniul reactorilor hibridi. Obiectivele etapei sunt:

- a. Coduri necesare pentru simulări complexe și calcule teoretice vor fi implementate și testate în rețeaua noastră de calcul distribuit-componenta a ALICE GRID.
- b. Sunt determinați parametrii de model corespunzatori lanțului principal al nucleelor de Pa și ai lanțurilor secundare de nuclee obținute prin emisia de protoni, deuteroni și particule alfa (lanțurile nucleelor de Th și Ac). Noul model care ține cont de emisia de particule încărcate este aplicat pentru calcule de multiplicități și spectre de neutroni prompti de fisiune.

## Activitățile efectuate și rezultatele obținute:

### Instalarea pachetelor software ROOT, GEANT3, GEANT4, AliRoot și PROOF pe structura de calcul distribuit NIHAM, componenta a ALICE GRID

În cadrul Centrului nostru de Excelență "Interacții Nucleare și Materie Hadronică" - NIHAM ( **N**uclear **I**nteractions and **H**Adronic **M**atter) a fost parcursă etapa de C&D pentru detectorul de radiație de tranziție TRD (**T**ransition **R**adiation **D**etector) și etapa de C&D și proiectare ASIC a electronicii front-end aferente - PASA (**P**re **A**mplifier, **S**haper and **A**mplifier) pentru aranjamentul experimental - ALICE (**A** **L**arge **I**on **C**ollider **E**xperiment) și ne aflăm la ora actuală în plină fază de realizare a 20 % din subdetectorul **TRD** (108 module în suprafața totală de  $147 \text{ m}^2$ ) și dezvoltare a unei structuri performante de calcul distribuit de nivel **Tier 2**, componenta a **ALICE GRID**, folosită intens în campaniile de simulări Monte Carlo care au stat la baza analizei performanțelor aranjamentului experimental ALICE precum și a pregătirii pachetelor software pentru calibrare, tracking și analiza a datelor experimentale.

Toate aceste eforturi și contribuții deosebite, bine cunoscute și apreciate în cadrul Colaborării ALICE, ne dau acces la informația experimentală ce va fi livrată de aranjamentul experimental ALICE, odată cu intrarea în funcțiune a complexului de accelerare LHC (**L**arge **H**adron **C**ollider) de la CERN ceea ce constituie de fapt și motivația principală a eforturilor depuse în segmentele de activitate anterioare, menționate mai sus.

Această activitate de procesare și analiză a informației experimentale este strict condiționată de:

- Existența unei structuri de calcul distribuit performante, parte a GRID-ului ALICE.
- Implementarea pe structura de calcul locală a pachetelor software corespunzătoare și actualizarea acestora funcție de dezvoltările care au loc în cadrul Colaborării ALICE sau la nivel de LCG.

Este evident că saltul în energie la LHC față de RHIC (**R**elativistic **H**eavy **I**on **C**ollider), aflat în funcțiune la Brookhaven, fiind de un factor de  $\sim 30$  face greu de imaginat în detaliu toate fenomenele noi cu care vom fi confrunțați odată cu realizarea primelor experimente folosind aranjamentul experimental ALICE. Cu toate acestea, bazat pe experiența acumulată în activitatea noastră anterioară precum și pe rezultatele obținute la RHIC, ne propunem să abordăm în cadrul Centrului nostru de Excelență următoarele aspecte de fizică:

- Studiul producției diverselor specii de particule precum și a distribuțiilor de impuls a acestora:
  - la valori joase ale impulsului transvers, din care se pot extrage informații cu privire la condițiile de "freze-out" termic și chimic
  - la valori intermediare și mari ale impulsului transvers, din care se pot extrage informații cu privire la fenomenul de expansiune colectivă, procese de recombinație a quarcilor și interacții tari
- Studiul fenomenelor colective de tip "flow"

- de tip radial - izotropic
- de tip azimutal - anizotropic, implicând studiul contribuțiilor non-flow absolut necesar pentru interpretarea cantitativă corectă a rezultatelor

Aceste studii vor permite obținerea de informații asupra:

- ecuației de stare (valori mici ale impulsului transvers)
- mișcării colective în faza deconfinată (valori intermediare ale impulsului transvers)
- pierderea de energie la nivel partonic (valori mari ale impulsului transvers)
- Fluctuații de la eveniment la eveniment a diverselor observabile ce pot fi măsurate cu suficientă precizie folosind informația dintr-un singur eveniment, cum ar fi:
  - multiplicitatea
  - temperatura
  - valoarea medie a impulsului transvers

Pentru extragerea de informație din acest tip de studii, este necesar să fie studiat efectul producerii de jerbe și mini-gerbe asupra fluctuațiilor precum și cel al corelațiilor dinamice.

Obiectivul structurii software pentru activitățile ”offline”, adică segmentul de simulare și după etapa de achiziție a datelor experimentale, este acela de a reconstrui și analiza informația de fizică livrată prin simulări Monte Carlo și respectiv de aranjamentul experimental din experimente reale. Bineînțeles că optimizarea aranjamentului experimental și dezvoltarea infrastructurii de software ”offline” se bazează pe un întreg pachet de software dedicat simulărilor Monte Carlo. Acest pachet software a fost implementat pe structura de calcul distribuit NIHAM în perioada anterioară.

Activitatea de dezvoltare a structurii software pentru activitățile ”offline” a fost demarată în cadrul Colaborării ALICE în 1998. S-a realizat din start nivelul de complexitate la care trebuie să facă față structurile software dedicate experimentelor LHC, astfel încât chiar din 1990 a fost evident că noua generație de software se va baza pe tehnici de programare orientate pe obiecte - OO (**O**bject **O**riented).

A fost perioada când au fost demarate proiectele de înlocuire a librăriilor CERN bazate pe FORTRAN, inclusiv PAW și GEANT3, cu versiunile lor bazate pe tehnici OO. În acea perioadă, când Colaborarea ALICE a decis să treacă la folosirea C++, elementele de bază amintite mai sus nu erau suficient dezvoltate încât să fie direct utilizate. Astfel s-a luat decizia să fie adoptat cadrul general ROOT pe baza căruia să se dezvolte structura software ”offline” a ALICE - AliRoot. Decizia trecerii la OO s-a dovedit a fi de succes ducând la dezvoltarea unei structuri software scrisă complet în C++, cu câteva excepții ale unor programe externe elaborate în FORTRAN.

## ROOT

Un cadru software este constituit din pachete software care permit procesarea de date. PAW a fost primul exemplu de integrare coerentă a unor pachete software pentru analiza de date experimentale. ROOT, noua generație a PAW, este un cadru bazat pe OO pentru aplicații de manipulare a unor volume imense de date experimentale. Cadrul ROOT este prezentat schematic în Fig.1. El livrează un mediu pentru dezvoltarea de pachete software pentru generarea de evenimente, simularea răspunsului detectorului, reconstrucția de

evenimente, achizitia informatiei livrate de aranjamentul experimental si cadrul complet de analiza a datelor, simulate sau experimentale, incluzand toate caracteristicile PAW-ului.

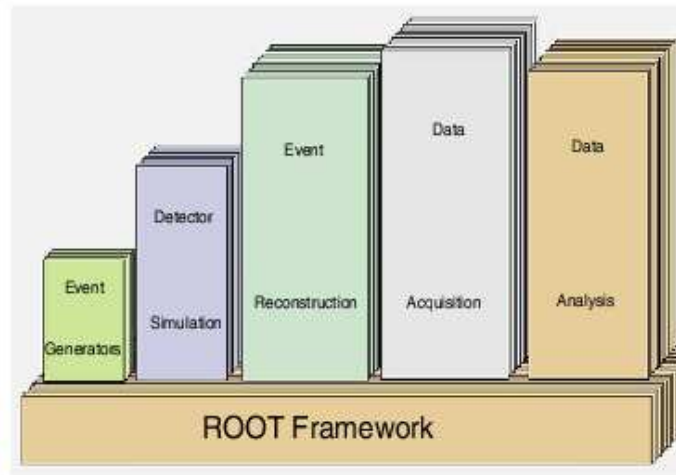


Figura 1:

ROOT este scris in C++, utilizatorul interactionând cu el prin interfata grafica, linii de comanda sau fisiere script.

De remarcat câteva din elementele importante oferite de ROOT si care sunt folosite in ALiRoot:

- un cadru complet pentru analiza de date incluzând toate caracteristicile PAW
- o interfata grafica completa pentru utilizator
- un set larg de functii de folosinta, incluzand functii matematice de larga folosire, generatori de numere aleatoare, potriviri multi parametrice si proceduri de minimizare
- un set complet de containere de obiecte
- C++ ca limbaj scriptic
- instrumente de documentare

Sistemul ROOT este interfatat cu middleare-ul GRID, in particular cu sistemul dezvoltat in cadrul Colaborarii ALICE - AliEn. Impreuna cu sistemul PROOF, care extinde structura ROOT pe sisteme de calcul paralel si clustere de calculatoare, se va realiza o platforma de calcul paralela distribuita pentru activitati de productie si analiza de anvergura.

### AliRoot

In Fig.2 poate fi urmarit rolul unui asemenea cadru software. Datele generate prin simulari ( generatori de evenimente Monte Carlo si pachete de simulare a raspunsului detectorului) sunt transformate in informatie similara cu cea livrata de detectori producându-se astfel datele primare din evanimentele simulate. Algoritmii de reconstructie reconstruiesc intreaga informatie cu privire la traiectoria particulelor si masa acestora plecând de la puncte si segmente de traiectorii in cazul detectorilor de traiectorii ("tracking"). Verificarea pachetelor de software si a performantelor detectorului, evenimentele simulate sunt procesate

urmând intreg lantul si rezultatul este comparat cu cel obtinut din generatorii de evenimente. Fizicianul poate interveni in acest ciclu, implementând analiza lui proprie sau sa inlocuiasca orice parte din el cu coduri personale. Vizualizarea, instrumentele de analiza si in general toate procedurile considerate de interes general sunt parte a acestui cadru general. Intreg sistemul este in permanenta dezvoltare, astfel incât sa tina cont de cerintele comunitatii de fizicieni. Reutilizarea si modularitatea sunt principiile de baza care au stat la baza dezvoltarii AliRoot.

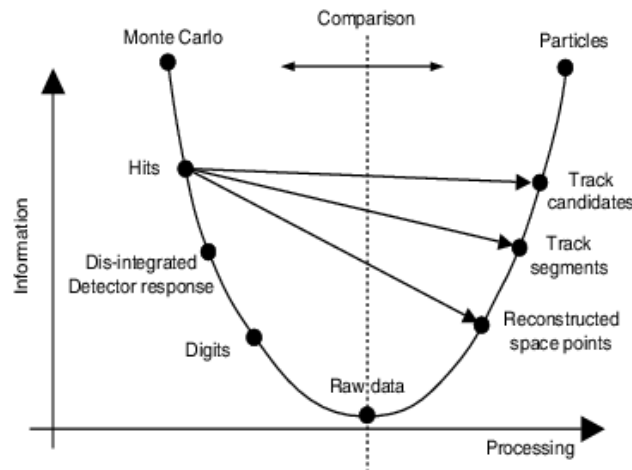


Figura 2:

### *Modularitatea*

Modularitatea permite inlocuirea diferitelor parti ale sistemului cu un impact minim sau fara impact asupra restului.

### *Reutilizarea*

Reutilizarea se refera la protejarea efortului facut de programatorii din cadrul Colaborarii ALICE. Codurile contin informatii stiintifice de o deosebita valoare si experienta, reprezentând astfel adevarate valori. Aceasta investitie este protejata prin dezvoltarea unui sistem modular care sa-si mentina compatibilitatea desi intreg cadrul se dezvolta permanent.

Cadrul AliRoot este prezentat schematic in Fig. 3.

## **Data Analysis**

Analiza datelor experimentale este pasul final in activitatea de procesare a unui eveniment si se efectueaza ori de câte ori este nevoie. Aceasta activitate este foarte diversa, aranjamentul experimental ALICE livrand o informatie aproape completa asupra interactiilor nucleu-nucleu (A-A), proton-nucleu (p-A) sau proton-proton (p-p). Aspectele de fizica ce urmeaza a fi studiate cu aranjamentul experimental ALICE pot fi grupate in patru mari capitole:

- **caracterizarea globala a evenimentului:** multiplitatea de particule, centralitatea interactiei, densitatea de energie depusa in urma ciocnirii, puterea de stopare a partenerilor care interactioneaza.
- **fenomene legate de interactii multiple:** compozitia chimica (producerea de particule si rezonante, spectre de particule si rapoarte ale probabilitatilor de producere,

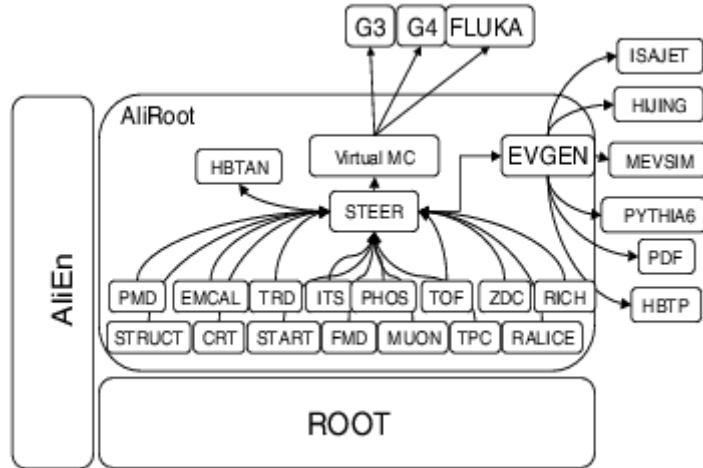


Figura 3:

intensificarea producerii particulelor care contin quarci stranii), dinamici de reactie (curgerea transversa si eliptica, corelatii de particule, fluctuatii dinamice de la eveniment la eveniment).

- **observabile legate de interactii tari:** jerbe de particule, emisia directa de fotoni.
- **studiul particulelor care contin quarci grei:** producerea de  $J/\Psi$ ,  $\Upsilon$ , B, D, etc.

Studiul interactiilor p-p si p-A pe de o parte vor constitui referinta pentru intelegerea fenomenelor noi ce apar la interactia A-A iar pe de alta, ALICE va avea program dedicat pentru studiul fenomenelor ce apar la interactia p-p. Cum LHC va livra mai intai fascicul de p, este evident ca inca din primele zile de operare a acceleratorului LHC se vor obtine informatii in premiera privind caracteristicile globale ale interactiei p-p folosindu-se performanta aranjamentului experimental ALICE de identificare a particulelor la valori mici ale impulsului.

Conform modelului de calcul al ALICE, analiza incepe de la nivelul datelor calibrate si reconstruite numite ESD (**E**vent **S**ummary **D**ata). Dimensiunea informatiei continute in ESD este de aproximativ un ordin de marime mai mica comparativ cu cea a datelor primare - raw data. Activitatile de analiza produc AOD (**A**nalysis **O**bject **D**ata) specifice diverselor subiecte de fizica.

**Analizele programate** folosesc intreaga informatie experimentală care exista la un moment dat si stocheaza si inregistreaza rezultatele folosind facilitatile software dezvoltate pentru Grid. Fisierile AOD, generate in perioada de analiza programata pot fi folosite pentru diversele analize ulterioare sau de o clasa de obiective de fizica. Codurile de analiza sunt testate si puse la dispozitie inainte de inceperea procesarii de date. Lista de evenimente a fiecarui set AOD se va inregistra si accesul la fisierele AOD va fi garantat colaboratorilor ALICE. Fisierile AOD vor fi generate folosind instrumentele Grid in diferitele centre de calcul distribuit si vor fi stocate pe medii de stocare corespunzatoare.

**Analizele "haotice"** sunt focalizate pe un singur subiect de fizica selectand anumite evenimente dintr-o analiza programata. Oricare fizician din cadrul colaborarii ALICE poate de asemenea accesa in mod direct parti importante din ESD in vederea cautarii unor procese sau evenimente rare. Dezvoltarea de pachete macro si software si testarea lor se poate face

utilizând seturi de date locale sau distribuite folosind instrumentele Grid. Versiunile finale de analiza pot fi ulterior folosite pe Grid accesând porțiuni mai mari ale ESD-urilor sau chiar toata informația.

## Instrumente pentru analiza distribuita

### *gShell*

Middleware-ul real este ascuns printr-o interfață la Grid și anume gShell, care pune la dispoziție un shell de lucru unic. Pachetul software gShell conține toate comenzile necesare unui utilizator.

### *PROOF - versiunea de ROOT paralel*

PROOF - facilitatea de a utiliza ROOT pentru aplicații de tip paralel, a fost proiectat și dezvoltat pentru a permite analiza și căutarea de seturi de date de mare dimensiune, minimizând timpul de răspuns. PROOF folosește paralelismul specific evenimentelor și implementează o arhitectură care optimizează utilizarea de I/O și CPU într-o structură eterogenă de tip cluster cu resurse distribuite de stocare. PROOF fiind o extindere a ROOT, mostenește toate facilitățile acestuia. Caracteristicile cele mai importante ale PROOF-ului sunt:

- **transparenta** - nu există nici o diferență între o sesiune ROOT locală și o sesiune paralelă PROOF în afară.
- **scalabilitatea** - nu este nici o limitare impusă de numărul de calculatoare folosite în paralel.
- **adaptibilitatea** - sistemul este capabil să se adapteze la variații în infrastructura din afară.

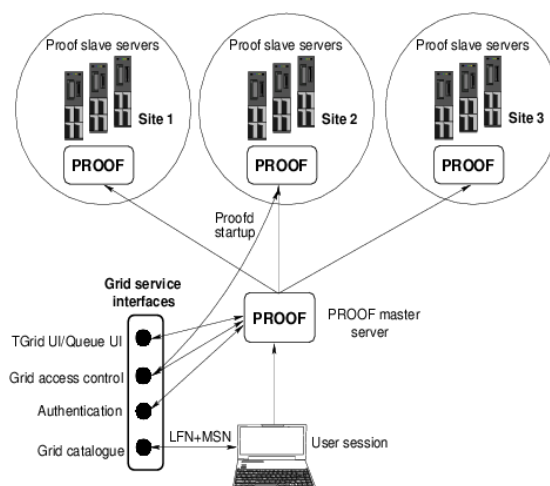


Figura 4:

PROOF este bazat pe o structură multistrat. PROOF poate fi operat fie în mod interactiv, cu utilizatorul conectat și rezultatul analizei să fie returnat sesiunii ROOT a utilizatorului

pentru analiza ulterioara sau in mod batch, caz in care utilizatorul se poate deconecta. La reconectare la serverul master, utilizatorul poate colecta rezultatele acelei analize. Acest ultim mod este indicat pentru analize indelungate sau analize multiple. Ambele moduri vor fi folosite in analiza de date la ALICE. Fig. 4 prezinta diagrama structurii si interactiei cu middleware-ul Grid a unei sesiuni PROOF a utilizatorului distribuita in mai multe centre de calcul ale ALICE Grid.

Un exemplu de cum este structurata informatia precum si structura unui eveniment, poate fi urmarit in Fig. 5.

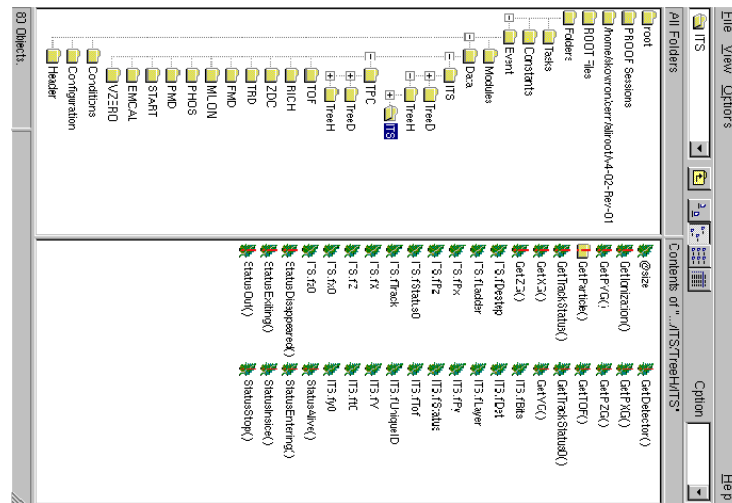


Figura 5:

Intreaga infrastructura software, prezentata pe scurt mai sus, a fost implementata pe structura de calcul distribuit a NIHAM si este mentinuta la zi luând în considerare toate imbunatatirile care se aduc permanent de catre grupul off-line software al colaborarii ALICE. Fizicieni din cadrul NIHAM au inceput sa foloseasca aceasta infrastructura in activitatea de analiza in directia aspectelor de fizic a mentionate in prima parte a materialului. De subliniat ca in aceste zile a fost demarata campania a 6-a de generare de evenimente, structura de calcul distribuit NIHAM devenind activa concomitent cu cele de la CERN. Aceasta activitate poate fi monitorata prin: <http://pcalimon.cern.ch:8889>.

## Bibliografie

1. CERN/LHCC 2003-049, ALICE Physics Performance Report, Vol.1 (7 November 2003); ALICE Collaboration, J.Phys.G:Nucl.Part.Phys. 30(2004)1517-1763
2. CERN/LHCC 2005-030,ALICE Physics Performance Report, Vol.2 (5 December 2005); ALICE Collaboration
3. C.Schiaua, M. Petrovici - Spre un Tier2 romanesc al ALICE-GRID, in curs de publicare la Revista nationala de Informatica
4. C. Aiftimiei, C. Schiaua, M. Petrovici - NIHAM - LCG Grid member, internal note, will be published



## Calcul de structura nucleara de mare anvergura utilizand forte realiste (MONSTER si VAMPIR)

Studiul teoretic al multor probleme de structura nucleara necesita utilizarea unor sisteme de baza uniparticula, care sunt prea mari pentru a permite diagonalizarea completa a unui Hamiltonian efectiv de mai multe corpuri corespunzator ales, asa cum se procedeaza in aproximatia de Model in paturi cu amestec de configuratii (SCM). De aceea trebuie sa se trunchieze dezvoltarea completa de tip SCM a functiilor de unda la un numar de configuratii de A-nucleoni abordabil numeric, fara a pierde gradele de libertate esentiale relevante pentru starile particulare luate in considerare. O trunchiere simpla a spatiului SCM in conformitate cu energiile neperturbate ale configuratiilor este destul de inoportun. Chestiunea luarii in considerare a maximului de corelatii in sistemul considerat printr-un numar minim de configuratii de A-nucleoni fara a pierde gradele de libertate esentiale reprezinta problema centrala a tuturor modelelor microscopice de structura nucleara in spatii mari de model.

Una din prescriptiile extreme pentru o asemenea trunchiere este teoria Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), ce ofera starea fundamentala HFB ca referinta pentru construirea unui spatiu de configuratii trunchiat de excitatii de cuaziparticula pentru diagonalizarea ulterioara a Hamiltonianului. Aceasta este filozofia urmata de noi, care porneste de la ideile teoriei de camp mediu HFB si incearca sa extraga gradele de libertate relevante direct din Hamiltonian prin procedee variationale. In acest mod selectia configuratiilor este lasata in intregime in seama dinamicii sistemului considerat, iar ambiguitatile schemelor de trunchiere traditionale sunt evitate.

Totusi, direct legat de abilitatea aproximatiilor de camp mediu de a lua in considerare o mare parte a dezvoltarii complete de tip SCM pentru starea fundamentala printr-o singura configuratie este neconservarea anumitor simetrii cerute de Hamiltonian, cum ar fi momentul unghiular, numarul de particule, paritatea, izospinul. Obtinerea unei solutii fizice se realizeaza cu ajutorul unor tehnici complicate de proiectie. Mai mult, pentru a obtine solutii optime pentru fiecare set de numere cuantice simultan conservate (moment unghiular, paritate, numar de protoni, numar de neutroni), restaurarea simetriilor violate se realizeaza nu inaintea amestecului de configuratii, ci chiar inainte de aplicarea variatiei pentru determinarea campului mediu.

Investigatiile noastre microscopice privind probleme de structura nucleara complexe sunt bazate pe diferite aproximatii ale asa-numitei familii de modele VAMPIR (**V**ariation **A**fter **M**ean-field **P**rojection **I**n **R**ealistic model spaces) in care se aplica diferite procedee variationale dupa proiectie pe simetrii in spatii de model realiste utilizand interactii efective realiste.

Aceste aproximatii opereaza cu determinanti de cuaziparticule HFB proiectati pe simetrii generali, ele diferind totusi prin gradul de sofisticare al procedeelelor variationale utilizate pentru a determina campurile medii de baza ca si amestecurile de configuratii. In final se atinge un nivel la care insasi selectia configuratiilor este in intregime lasata in seama dinamicii sistemului considerat, configuratiile fiind determinate printr-un lant de calculare variationale ce urmeaza diferite filozofii functie de tipul modelului aplicat. In acest mod se creeaza successiv o baza multinucleonica optima si se pot descrie schimbari de structura drastice arbitrare ale excitatiilor nucleare cu momentul unghiular, ca si cu energia de excitare.

Sunt permise: amestecul de paritate, amestecul neutron-proton, ca si transformari HFB *essential complexe*, ceea ce creeaza posibilitatea investigarii starilor de spin par si impar de ambele paritati in nuclee par-pare si impar-impare. Sunt inca impuse simetria axiala si in-

varianta la inversia temporală.

O aproximatie mai simplă, dar aplicabilă și pentru descrierea sistemelor impare este MONSTER (MOdel handling many Number and Spin projected Two quasiparticle Excitations with Realistic interactions). Spațiul de configurații neortogonale utilizat pentru diagonalizarea Hamiltonianului este compus din soluția VAMPIR pentru un set impus de simetrii, bazată pe o transformare HFB esențial complexă, și excitațiile de două cuaziparticule în raport cu această proiectare pe simetrii.

Din familia VAMPIR sunt utilizate aproximațiile: VAMPIR, pentru descrierea stării ȳrast cu o simetrie dată printr-un singur determinant HFB proiectat pe simetrii, EXCITED VAMPIR, pentru descrierea stărilor nonȳrast optimizând câte un singur câmp mediu pentru fiecare stare și în final diagonalizând interacția reziduală în cadrul bazei de A-nucleoni construită printr-un lanț de calcule variaționale independente, și EXCITED FED VAMPIR, ce creează o bază de mai mulți determinanți proiectați pe simetrii pentru fiecare stare investigată.

O problemă esențială, la fel de importantă ca și modelul însuși este interacția efectivă nucleon-nucleon utilizată. Aceasta este construită pentru fiecare zonă de masă și spațiu de model pornind de la matricea G pentru materia nucleară construită din potențialul One Boson Exchange Potential (OBEP) și aplicând procedee de renormare. Bază în care se lucrează este baza de oscilator armonic pentru stările uniparticulare.

Codurile de calcul asociate modelelor descrise, precum și cele implicate de obținerea interacției efective realiste, utilizând limbajul Fortran 77, au fost implementate pe structura de calcul distribuit de mare putere realizată în centrul de excelență NIHAM. Testarea s-a realizat pe exemple obținute utilizând puterea de calcul a Centrului de calcul al Universității Tübingen, în cadrul colaborării IFIN-HH cu Universitatea Tübingen, prin Deutsche Forschungsgemeinschaft, la proiectul ”Structura Nucleelor Exotice”. Este de subliniat că nivelul de performanță al centrului de calcul al NIHAM depășește în acest moment pe cel al Centrului Universitar Tübingen, la care avem acces nelimitat în cadrul colaborării menționate.

1. Variational calculation of the effect of isospin mixing on superallowed Fermi  $\beta$  decay in the  $A \simeq 70$  mass region,  
**A. Petrovici**, K.W. Schmid, **O. Radu**, A. Faessler,  
Nucl. Phys. A 747(2005) 44
2. Shape coexistence effects in  $^{78}\text{Kr}$ ,  
**A. Petrovici**, K.W. Schmid, **O. Radu**, A. Faessler,  
J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 32(2006) 583
3. Coulomb excitation of  $^{78}\text{Kr}$ ,  
F. Becker, **A. Petrovici**, J. Iwanicki, N. Amzal, W. Korten, K. Hauschild, A. Hurs-  
tel, Ch. Theisen, P.A. Butler, R.A. Cunningham, T. Czosnyka, G. de France, J.  
Gerl, P. Greenlees, K. Helariutta, R.-D. Herzberg, P. Jones, R. Julin, S. Juutinen, H.  
Kankaanpää, M. Muikku, P. Nieminen, **O. Radu**, P. Rahkila, Ch. Schlegel,  
Nucl. Phys. A 770(2006) 107
4. Variational approach to magnetic bands in  $^{82}\text{Rb}$ ,  
**A. Petrovici**, K.W. Schmid, **O. Radu**, A. Faessler,  
accepted for publication in European Physical Journal A

## Calcul de multifragmentare nucleara in cadrul Modelului Microcanonic de Multifragmentare (MMM)

Posibilitatea de a determina diagrama de faza si ecuatia de stare a materiei nucleare excitate a captat un mare interes teoretic si experimental asupra fenomenului de multifragmentare nucleara ca proces dominant de dezintegrare a sistemelor cu energie de excitare mai mare de 2 MeV/nucleon.

In peisajul foarte complex al modelelor teoretice de multifragmentare un loc aparte este ocupat de Modelul Microcanonic de Multifragmentare (MMM) dezvoltat in ultimii 8 ani la IFIN-HH Bucuresti [1]. Datorita tratarii riguroase a ansamblului statistic considerat la ora actuala ca fiind cel mai adecvat fenomenului fizic pe care il descrie si a caracterizarii realiste a fragmentelor de break-up, MMM se evidentiaza prin capacitatea sa de a reproduce fidel o cantitate impresionanta de date experimentale pe o plaja larga de masa si energie de excitare.

Stadiul de break-up al modelului trateaza explozia unui surse statistice echilibrate descrisa de masa ( $A$ ), sarcina ( $Z$ ), energia de excitare ( $E$ ) si volumul de freeze-out ( $V$ ). Presupunerea de baza a modelului este aceea de populare echiprobabila a tuturor starilor accesibile din punct de vedere energetic si geometric (nesuprapunere intre fragmente sau cu peretii recipientului care mimeaza volumul sursei)  $C : \{A_i, Z_i, \epsilon_i, r_i, p_i, i = 1, \dots, N\}$  cu respectarea legilor de conservare proprii ansamblului microcanonic ( $\sum_i A_i = A$ ,  $\sum_i Z_i = Z$ ,  $\sum_i p_i = P = 0$ ,  $E = \text{const.}$ ,  $\sum_i r_i \times p_i = L = \text{const.}$ ). Fragmentele sint considerate sfere rigide sau obiecte maleabile cu densitate nucleara normala iar pentru energia de legatura se folosesc valorile obtinute pentru nuclee in stare normala de densitate si temperatura zero. Excitarea interna a fragmentelor este considerata ca un grad de libertate individual. Mai precis, se considera o densitate de nivele de tip gas Fermi iar excitarea maxima permisa este data de energia de legatura.

Numarul de microstari compatibile cu o stare data a sursei echilibrate este dat de ecuatia

$$\int \prod_{i=1}^N dp_i \delta(H - E) \delta(\sum_i p_i - P) \delta(\sum_i r_i \times p_i - L) = \frac{2\pi}{\Gamma\left[\frac{3}{2}(N-2)\right]} \left(\frac{\prod_i m_i}{\sum_i m_i}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\det I}} \left[2\pi \left(K - \frac{P^2}{2M} - \frac{1}{2} L^T I^{-1} L\right)\right]^{(3/2)(N-2)-1}, \quad (1)$$

imposibil de calculat analitic si unde  $M = \sum_i m_i$ ,  $I$  este tensorul de inertie,  $H = \sum_i p_i^2/(2m_i) + \sum_{i<j} V_{ij} + \sum_i \epsilon_i - \sum_i B_i$  este Hamiltonianul sistemului iar  $K = E - \sum_{i<j} V_{ij} - \sum_i \epsilon_i + \sum_i B_i$  este energia cinetica termica.

Solutia adoptata pentru rezolvarea problemei se bazeaza pe parcurgerea ergodica a tuturor starilor permise conform principiului echilibrului detaliat si necesita in consecinta un volum considerabil de calcule. Marimea de baza este ponderea statistica a fiecarei configuratii posibile,

$$W_C \propto \frac{1}{N_C!} \prod_{n=1}^{N_C} \left( \Omega \frac{\rho_n(\epsilon_n)}{h^3} (mA_n)^{3/2} \right) \frac{2\pi}{\Gamma(3/2(N_C - 2))} \frac{1}{\sqrt{(\det I)}} \frac{(2\pi K)^{3/2 N_C - 4}}{(mA)^{3/2}}, \quad (2)$$

iar valoarea oricarei observabile se obtine mediind valorile proprii fiecarei microstari,

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_C W_C X_C}{\sum_C W_C} \quad (3)$$

Astfel, fiecarei stari calculate ale sursei echilibrate ii va corespunde din punct de vedere computational un proces a carui durata variaza in functie de dimensiunea spatiului de configuratii asociat. Pe masura ce cresc dimensiunea sursei sau energia de excitare, sint posibile din ce in ce mai multe microconfiguratii si, evident, un timp mai indelungat pentru a le scana in mod exhaustiv.

O situatie paradigmatica pentru complexitatea calculelor cerute de studiile de multi-fragmentare nucleara este oferita de necesitatea construirii diagramei de faza a sistemului studiat. Odata puse la punct procedeele de evidentiare ale unei tranzitii de faza in sistemul considerat, constructia unei diagrame de faza (care reprezinta caracterizarea termodinamica completa) necesita calcularea a citeva sute de stari ( $A, Z, E, V$ ) ale sursei considerate.

Avind ca obiectiv identificarea compozitiei chimice dominante a fragmentelor primare in diferite zone ale diagramei de faza a nucleelor atomice exitate [2], a fost necesara caracterizarea termodinamica completa a trei sisteme: (200, 82) cu si fara interactie coulombiana si (50, 23) cu interactie coulombiana.

Procesele asociate tuturor starilor echilibrate ale fiecarei sursei au fost lansate in paralel pe clusterul de calculatoare NIHAM. Numarul mare de procesoare si performantele acestora au facut ca rezultatele sa poata fi obtinute intr-un interval rezonabil de 2-3 saptamini. Prelucrarea fisierelor de evenimente astfel obtinute a fost facuta pe acelasi sistem de calcul.

Intorcindu-ne la motivatia fizica a obiectivului nostru, precizam ca in felul acesta au putut fi evidentiare comportari tipice ale distributiei medii de isospin al fragmentelor ca functie de sarcina acestora si, foarte interesant, faptul ca imbogatirea relativa cu neutroni a fragmentelor usoare in comparatie cu cele grele cunoscuta sub numele de fractionare de isospin nu este proprie zonei de co-existenta de faze, asa cum se credea pina de curind.

## Referințe

- [1] Al. H. Raduta and Ad. R. Raduta, Phys. Rev. C **55**, 1344 (1997); *ibid.*, Phys. Rev. C **65**, 054610 (2002).
- [2] Ad. R. Raduta, Phys. Rev. C **73**, 014606 (2006).

b. Ciclul de combustibil Th-U a fost subiectul unui interes reascut datorita dezvoltarii sistemelor pilotate de accelerator (ADS) pentru generarea de putere si transmutatia combustibilului nuclear, care se presupune ca vor furniza energie prin fisiune "curat" si aproape inepuizabil. Una dintre actinidele de interes particular in ciclul Th-U este  $^{233}\text{Pa}$ , asa-numitul "nucleu cheie" , care este intermediar intre materialul sursei  $^{232}\text{Th}$  si nucleul fisil de  $^{233}\text{U}$ . In ceea ce priveste acest nucleu, pana acum nu au fost disponibile date experimentale de incredere pentru reactiile induse de neutroni rapizi. Un alt izotop important in ciclul Th-U este  $^{231}\text{Pa}$ . Pentru acest nucleu exista mai multe seturi de date experimentale in ceea ce priveste sectiunea de fisiune, date care prezinta discrepante mari. Pe langa sectiunile neutronice, alte date neutronice de mare interes in aplicatiile nucleare, in special in ceea ce priveste ADS si managementul deseurilor, sunt multiplicatatile de neutroni prompti de fisiune (PFNM) si spectrul de neutroni prompti de fisiune (PFNS). Pentru toate actinidele, (insemnand nu numai pentru acelea implicate in ciclul Th dar si pentru actinidele "clasice" pentru ciclul U-Pu) aceste date sunt necesare pentru energii incidente ale neutronilor peste 20 MeV. In acest context evaluarea sectiunilor induse de neutroni ca si PFNM si PFNS pentru reactiile  $n + ^{231,233}\text{Pa}$  pana la limita superioara a energiei neutronului incident de 20 MeV si daca este posibil de asemenea pentru energii incidente peste 20 MeV este o necesitate prioritara si face obiectul prezentei lucrari. Evaluările sectiunilor  $n + ^{231,233}\text{Pa}$  in domeniul de energii incidente

0.01 - 30 MeV, prezentate in aceasta lucrare, sunt primele care se fac in mod "consistent" pe baza unor modele cu toti parametrii in acord cu datele experimentale si consideratiile teoretice si statistice. Unicele date experimentale sunt pentru sectiunile de fisiune si sunt foarte bine descrise de evaluarile noastre in special noile masuratori efectuate la IRMM. Modele rafinate, folosite deja pentru a evalua multiplicitatea de neutroni prompti si spectrul pentru multe actinide, sunt folosite pentru evaluarea de multiplicitati pentru  $^{233,231}\text{Pa}$  pentru energii incidente de la cele termice la 30 MeV. Parametrii de model sunt obtinuti prin tratarea "punct cu punct" in cazul  $^{234-232}\text{Pa}$  pentru care exista mase ale fragmentelor de fisiune experimentale si distributii de energie cinetica. Pentru celelalte nuclee fisionabile de Pa, a fost folosita sistematica parametrilor. Multiplicitatile de neutroni prompti pentru  $^{231,233}\text{Pa}$  si energiile razelor gamma prompte au fost obtinute in acord foarte bun cu sistematica dezvoltata in legatura cu datele de fragmente de fisiune. Evaluarile multiplicitatii neutronilor prompti si a spectrelor pentru Pa-233 si Pa-231 vor fi incluse in noile fisiere de date nucleare evaluate pentru ciclul Th-U coordonate de IAEA-Vienna.

### **Rezultate obținute în stagii efectuate în străinătate:**

- 2 stagii de lucru la GSI-Darmstadt, Germania.
  - Montarea in aranjamentul experimental si testarea cu surse radioactive a unui nou prototip de detector TRD pentru rate mari de numarare, realizat in cadrul grupului nostru din Bucuresti
  - Testarea in fascicul folosind particule cu ionizare minima a prototipului de detector mentionat mai sus
  - Monitorarea si analiza preliminara
  - Discutarea etapelor urmatoare ce urmeaza a fi realizate in cadrul JRA4 din proiectul I3HP a FP6.
- Stagiul de lucru la IPN Orsay, Franta.

Studii asupra fenomenului de multifragmentare nucleara - efecte de izospin. Investigarea posibilitatii determinarii termenului de asimetrie al ecuatiei de stare nucleare folosind multiplicitati izotopice obtinute in reactii de multifragmentare ale unor nuclee echilibrate aflate in conditii termodinamice existente dar cu izospin diferit.

### **Stadiul realizării obiectivelor:**

Obiectivele etapei au fost realizate integral.

### **Stadiul valorificării rezultatelor:**

- Configuratie de calcul pentru simularea, reconstructia si analiza datelor pentru experimentul ALICE, functionala pe reseaua de calcul distribuit a NIHAM, componenta a ALICE-GRID. Coduri de calcul de mare anvergura care sunt folosite eficient pe ferma de calculatoare a NIHAM, componenta a ALICE-GRID.

- Lucrari:

1. Neutron data evaluation for the  $n+^{233}\text{Pa}$  and  $n+^{231}\text{Pa}$  reactions up to 30 MeV incident energy, Anabella TUDORA, lucrare elaborata pentru a fi prezentata la: "Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor Applications", 9-11 Octombrie 2006, Cadarache, Franta.

2. Prezentare la Conferinta de GRID-EGEE din 21-22 martie, Bucuresti

Rezultate preliminare au fost publicate in:

3. Calculation of the neutron induced fission cross-section of  $^{233}\text{Pa}$  up to 20 MeV, G.Vladuca, F.-J. Hamsch, A. Tudora et al, Nuclear Physics A740 (2004) 3-19

4.  $^{233}\text{Pa}$  (n,f) cross section up to  $E_n = 8.5$  MeV, F. Tovesson, ..., A. Tudora, G. Vladuca, Nuclear Physics A733 (2004) 3-19

5. Calculation of the neutron-induced fission cross section of  $^{233}\text{Pa}$ , G. Vladuca, F.-J. Hamsch, A. Tudora et al., Phys. Rev. C69 (2004) 021604 (R)

**Prezentare succintă a obiectivelor prevăzute pentru etapa următoare:**

Va fi proiectata, construita si testata o noua generatie de TRD cu eficienta ridicata si timp scurt de drift.

DIRECTOR DE PROIECT,

Prof. Dr. M. Petrovici