

QUELQUES PROBLEMES D'ANALYSE NUMERIQUE ET FONCTIONNELLE
EN PHYSIQUE NUCLEAIRE

B.G. Giraud

Département de Physique Théorique,
CEA-CEN Saclay,
BP n°2, 91190 Gif-sur-Yvette

Contribution au colloque d'analyse numérique de Gouvieux-Chantilly
27 au 30 mai 1980.

RESUME

Une caractéristique essentielle de la physique nucléaire est que le nombre de degrés de liberté à décrire est à la fois, trop grand pour donner lieu à des problèmes exactement solubles en pratique, et trop petit pour justifier un recours complet à la mécanique statistique. Les expériences de physique nucléaire montrent d'ailleurs bien que le comportement des noyaux se réduit dans certains cas à l'évolution d'un (ou de quelques) degré(s) de liberté, dit(s) collectif(s), et que dans d'autres cas aucun paramètre d'ordre ou aucune intégrale première non triviale ne semble être identifiable. Tous les cas intermédiaires entre ces extrêmes étant possibles, et se trouvant réalisés, un problème essentiel de cette physique est la construction d'une méthode mathématique de réduction (ou enrichissement) systématique du nombre de degrés de liberté. Ce problème est illustré dans le présent cours par une analyse de l'équation de Schrödinger, puis de l'équation de Hartree et Fock et enfin de la méthode de la coordonnée génératrice pour la théorie des collisions.

1. INTRODUCTION. ORDRES DE GRANDEUR

Le nombre A de nucléons dans un noyau varie de 1 à 250. Chaque nucléon ayant trois coordonnées, et la présence simultanée de deux noyaux étant fréquente dans un problème de physique nucléaire, on voit qu'un nombre moyen $N = 600$ degrés de liberté n'est pas atypique pour cette physique.

En mécanique classique il y aurait donc lieu de traiter un problème à 600 corps. En mécanique quantique le système est décrit par sa fonction d'onde, dépendante ou non du temps, $\Psi(t, r)$, avec $r \equiv \{r_1, \dots, r_A\}$ et $r_i \equiv \{x_i, y_i, z_i\}$. Cette fonction Ψ appartient à un certain espace de Hilbert

et se développe sur une base infinie dénombrable. Le problème quantique dépend donc en principe d'un nombre infini de paramètres.

Plus précisément, le rayon d'un noyau typique est de quelques fermis (1 fm = 10^{-13} cm), la portée de l'interaction entre deux noyaux est aussi de quelques fermis et des mesures expérimentales ont montré que la densité de matière nucléaire peut varier de façon non négligeable sur une distance de 0,5 à 1 fm. Un réseau optimal d'intégration des équations de la dynamique nucléaire doit donc avoir un pas égal par exemple à 0,5 fm. Son extension totale devra être égale par exemple à 15 fm le long de l'axe de collision de deux noyaux et seulement 10 fm dans les deux directions perpendiculaires, ceci pour chaque nucléon. Le nombre de points d'un tel réseau est donc $(30 \times 20 \times 20)^A = 200^A$, de l'ordre de 10^{800} .

Un tel réseau est évidemment inabordable avec n'importe lequel des ordinateurs actuellement concevables. Il est également douteux que des méthodes d'échantillonnage rapide soient susceptibles de décrire Ψ avec suffisamment de précision, d'autant plus qu'une centaine de pas de temps seront également nécessaires. En effet, le temps typique d'évolution d'un nucléon est de 10^{-23} s et le temps caractéristique de nombreux phénomènes nucléaires est de 10^{-21} s. Une réduction sérieuse du nombre de paramètres du problème est indispensable. Le but de cet exposé est de donner une idée sommaire de quelques-unes de ces méthodes de réduction.

Mathématiquement ces méthodes de réduction peuvent se grouper en deux grandes classes. La première classe comprend les restrictions de l'espace de Hilbert à un de ses sous-espaces. La dynamique gouvernée par l'équation de Schrödinger peut alors se réduire encore à une dynamique linéaire. La seconde classe comprend les restrictions à une sous-variété non linéaire de l'espace, et les équations dynamiques qui en résultent sont alors en général non linéaires. Dans les deux cas des critères physiques sont nécessaires pour optimiser le choix du sous-espace ou de la sous-variété. A titre d'illustration, seront successivement traitées, dans la section II une analyse de l'équation de Schrödinger, dans la section III sa restriction à la variété des déterminants de Slater, et dans la section IV sa restriction à un sous-espace vectoriel de collision.

II. QUELQUES PROPRIETES DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER DE LA PHYSIQUE NUCLEAIRE

On suppose connue l'interaction nucléaire $V(r_i - r_j)$, interaction pour chaque paire de nucléons. L'opérateur

$$\mathcal{H} = \mathcal{C} + \mathcal{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \Delta_i + \sum_{i>j=1}^A V(r_i - r_j), \quad (II.1)$$

où m est la masse du nucléon, \hbar la constante de Planck réduite, Δ_i le Laplacien pour la particule i et \mathcal{C} et \mathcal{V} sont les opérateurs d'énergie cinétique et potentielle totale, représente le Hamiltonien, opérateur d'énergie totale du système. Dans la mesure où V est bien connu (ce n'est en fait pas le cas), un problème de physique nucléaire consiste à trouver un état propre Ψ_E de \mathcal{H} , problème indépendant du temps,

$$(\mathcal{H} - E) \Psi_E(r) = 0, \quad (II.2)$$

ou à résoudre l'équation d'évolution avec une condition initiale $\Psi(0, r)$

$$[i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}] \Psi(t, r) = 0. \quad (II.3)$$

On a déjà vu dans l'introduction que la mise sur réseau de ces deux équations de Schrödinger, eqs. (II.2) et (II.3), est impraticable. Il est plus facile de concevoir leur manipulation pratique dans une représentation matricielle. Soit $\{\phi_n(r)\}$ une base orthonormée de l'espace de Hilbert de Ψ , avec le développement

$$\Psi(t, r) = \sum_n c_n(t) \phi_n(r). \quad (II.4)$$

Le système d'équations différentielles couplées

$$i \dot{c}_m = \sum_n \mathcal{H}_{mn} c_n, \quad \dot{c}_m \equiv \frac{dc_m}{dt}, \quad \hbar = 1, \quad (II.5)$$

est, trivialement, la traduction en langage matriciel de l'éq. (II.3). On a défini ici l'élément de matrice

$$\langle \phi_m | \mathcal{H} | \phi_n \rangle \equiv \mathcal{H}_{mn} \equiv \int dr \phi_m^*(r) [\mathcal{H} \phi_n](r). \quad (II.6)$$

Le reste de la présente section établira maintenant que ce système, éq. (II.5), peut être tronqué de façon plus ou moins naturelle.

On notera d'abord que ce système est équivalent à une infinité d'oscillations harmoniques classiques couplées. Ce résultat est bien connu et il suffit de définir pour variables de position q_n et d'impulsion p_n du $n^{\text{ième}}$ oscillateur

$$\begin{aligned} q_n &= 2^{1/2} \operatorname{Re} c_n, \\ p_n &= 2^{1/2} \operatorname{Im} c_n, \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

avec la fonction Hamiltonienne totale (quadratique)

$$\mathcal{E}(q_1, p_1, q_2, p_2, \dots) \equiv \sum_{mn} \frac{1}{2} (q_m - i p_m) \mathcal{H}_{mn} (q_n + i p_n). \quad (\text{II.8})$$

On vérifie alors que le système

$$\begin{cases} \dot{q}_m = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial p_m} \\ \dot{p}_m = - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial q_m} \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

n'est autre que la traduction du système (II.5). L'hermiticité de \mathcal{H} rend \mathcal{E} réel et quadratique par rapport aux q_n, p_n . On reconnaît bien les équations de Hamilton d'un système infini d'oscillateurs harmoniques. On sait ainsi que le problème sera terminé si les modes normaux peuvent être identifiés, ce qui traduit l'éq. (II.2) par

$$\sum_n [\mathcal{H}_{nn} - E \delta_{nn}] c_n = 0. \quad (\text{II.10})$$

On s'intéressera pour l'instant plutôt à l'équation dépendante du temps, éq. (II.9). Sa nature hamiltonienne conduit à la recherche d'intégrales premières comme méthode traditionnelle de réduction du nombre des variables. On voit immédiatement que tous les moments de \mathcal{H}

$$\langle \mathcal{H}^\alpha \rangle \equiv \sum_{mn} c_m^*(t) \mathcal{H}_{mn}^\alpha c_n(t), \quad (\text{II.11})$$

où \mathcal{H}_{mn}^α est l'élément de matrice de \mathcal{H}^α , défini comme pour l'éq. (II.6),

sont constants dans le temps. Dans l'espace de phase des p_m et q_n , l'équation de conservation

$$\langle \Psi(t) | \mathcal{H}^\alpha | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \mathcal{H}^\alpha | \Psi(0) \rangle \tag{II.12}$$

défini donc une quadrique entièrement déterminée par la condition initiale $\Psi(0) \equiv \Psi(0,r)$. La trajectoire du système dans cet espace de phase $\{p,q\}$ peut donc être restreinte à l'intersection de toutes les quadriques obtenues pour toutes les valeurs de α pour lesquelles le moment se calcule facilement. Ceci pose bien entendu le problème d'une technique commode de calcul de l'élément de matrice d'une puissance de \mathcal{H} . Il reste également à identifier les variables conjuguées de ces moments et à faire le changement de variables correspondant. Il est clair que ce programme est prometteur et réduit systématiquement le nombre de paramètres du problème.

En fait cette méthode des moments, sur laquelle il n'est pas possible de s'étendre dans le cadre du présent cours, est plutôt employée dans le sens d'une reconstruction de l'opérateur d'évolution par des approximants de Padé. Plus précisément on développe la résolvante

$$(1 - z\mathcal{H})^{-1} \equiv 1 + z\mathcal{H} + z^2\mathcal{H}^2 + \dots \tag{II.13}$$

et on reconstruit par approximants de Padé son élément de matrice

$$\langle \Psi(0) | (1 - z\mathcal{H})^{-1} | \Psi(0) \rangle = 1 + z \langle \mathcal{H} \rangle + z^2 \langle \mathcal{H}^2 \rangle + \dots \tag{II.14}$$

Il est connu que cette reconstruction est équivalente à la méthode de Lanczos, qui consiste à prendre une base spéciale de l'espace de Hilbert. Cette base est construite à partir des vecteurs $\Psi(0), \mathcal{H}\Psi(0), \mathcal{H}^2\Psi(0)$, etc... et tronquée à un certain ordre N . Cette méthode présente des aspects variationnels intéressants et, en tout état de cause, le développement d'algorithmes numériques efficaces pour le calcul de puissances ou de moments de \mathcal{H} est un problème prioritaire, encore mal résolu.

On vient donc de rencontrer le concept d'une base $\{\phi_n\}$ tronquée à un ordre fini N . Cette opération est bien évidemment le moyen le plus direct de réduire le nombre de paramètres du problème quantique. Encore faut-il

choisit la base $\{\phi_n\}$ de façon optimale. Comme il n'est pas toujours possible de construire cette base à l'aide de puissances de \mathcal{H} , il arrive fréquemment que l'on parte a priori d'une base $\{\phi_n\}$ plus ou moins arbitraire, en fait guidée par des intuitions physiques. Les vecteurs en nombre fini ϕ_n , $n \leq N^0$, qui formeront ensuite la base tronquée seront sélectionnés plus ou moins qualitativement, par un critère tel que la minimisation de l'énergie $\langle \phi_n | \mathcal{H} | \phi_n \rangle$. Un tel critère est en effet évidemment lié au principe variationnel de Rayleigh-Ritz, et il est assez bien adapté à la recherche de fondamentaux selon l'éq. (II.2). On trouve cependant en général que, pour cette troncature d'une base arbitraire, la convergence des valeurs et vecteurs propres approchés est plus lente, quand $N^0 \rightarrow \infty$, que la convergence obtenue par la méthode de Lanczos. Le problème d'un schéma optimal pour la construction de la base $\{\phi_n\}$ et sa troncature reste donc ouvert.

Selon l'évidence expérimentale il existe des conditions initiales $\Psi(0)$ très particulières qui engendrent des intégrales premières (empiriques) en très grand nombre. Il ne s'agit pas alors de la conservation de variables quantiques c_n , ou de fonctions de ces variables, mais de la conservation de la plupart des fonctions d'un système complet dépendant des degrés de liberté classiques r_i . Plus précisément, soit un changement de variables qui fait passer des A vecteurs r_i à $3A$ fonctions algébriquement indépendantes

$$Q_j = \sum_{i=1}^A f_j(r_i) \quad . \quad (II.15)$$

Alors, dans un cas extrême mais se produisant assez facilement, les conditions initiales particulières font que l'opérateur d'évolution $\exp(-i\mathcal{H}t)$ peut être remplacé par une fonction de la première \mathcal{P}_1 des nouvelles variables, éq. (II.15) et de l'opérateur conjugué \mathcal{P}_1 éventuellement disponible.

Plus généralement, la dynamique nucléaire à partir de ces conditions initiales peut se réduire à l'orbite d'un groupe de Lie ayant pour algèbre quelques uns des Q_j et des \mathcal{P}_j .

Cette situation est celle du mouvement collectif, où les $3A$ degrés de liberté classiques se réduisent à quelques degrés actifs et où tous les autres degrés peuvent être gelés et ignorés. Il reste bien entendu à

identifier correctement ces quelques fonctions actives f_j , ou encore l'espace de Hilbert associé, en correspondance avec un sous-espace ou une sous-variété de l'espace de Hilbert initial. Un tel programme concernant le mouvement collectif a donné lieu à un nombre considérable de modèles empiriques, mais il n'existe pas encore de méthode systématique permettant de déduire à partir de \mathcal{H} les conditions initiales spéciales $\Psi(0)$ et l'algèbre des \mathcal{Q}_j et \mathcal{P}_j correspondants. Les exemples qui suivent dans les sections III et IV donneront seulement une ébauche de cette méthode.

III. LA METHODE DE HARTREE ET FOCK

Au lieu de restreindre la dynamique nucléaire à un sous-espace linéaire de fonctions d'onde, sous-tendu par une base $\{\phi_n\}$, $n \leq \mathcal{N}$, on peut chercher à restreindre cette dynamique à une variété *non linéaire* de fonctions d'onde. On a vu en effet dans la section II que le choix des $\{\phi_n\}$ n'est pas facile à optimiser : entre la possibilité de choisir une base arbitraire, tronquée ensuite par le biais d'un critère sur l'énergie, et la possibilité d'utiliser la hiérarchie de Lanczos $\{\mathcal{H}^n \Psi(0)\}$ par exemple, bien d'autres choix sont possibles. Au contraire, si on accepte une variété non linéaire, un choix évident s'impose, celui des déterminants de Slater.

Plus précisément, il est évident que les fonctions d'onde les plus simples qu'on puisse concevoir pour A particules sont des fonctions factorisées

$$\phi_\alpha(r_1, \dots, r_A) = \varphi_{\alpha_1}(r_1) \dots \varphi_{\alpha_A}(r_A) \quad , \quad (\text{III.1})$$

car les intégrales multiples exigées par des éléments de matrice de type (II.6) se ramèneront à des produits d'intégrales qui porteront chacune sur une ou deux particules.

Une complication mineure se produit en physique nucléaire de fait que les nucléons sont des fermions et que les fonctions d'onde doivent être antisymétrisées. Ainsi, pour 2 nucléons, l'éq. (III.1) est-elle remplacée par

$$\phi_\alpha(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{\alpha_1}(r_1) \varphi_{\alpha_2}(r_2) - \varphi_{\alpha_1}(r_2) \varphi_{\alpha_2}(r_1) \right], \quad (\text{III.2})$$

mais on peut continuer à raisonner avec (III.1) dans ce qui suit.

Il est clair, qu'une somme de produits n'étant pas en général un produit, l'ensemble des fonctions factorisées (déterminants) ϕ_α ne forme plus une variété linéaire. L'adaptation à cette structure non linéaire de l'équation de mouvement (II.3) donnera forcément lieu par conséquent à une équation non linéaire, en principe plus difficile à comprendre ou à interpréter. On verra cependant que cette équation non linéaire, dite de Hartree et Fock dépendante du temps (HFDT), peut se résoudre numériquement de façon aisée. Toutefois son interprétation restera difficile.

L'approximation de HFDT qui consiste ainsi à remplacer la fonction d'onde exacte Ψ de l'éq. (II.3) par un déterminant de Slater ϕ présente un avantage essentiel dans l'étude des mouvements collectifs. En effet, s'il est exact que $\exp(-i \mathcal{H} t) \phi$ pas plus que $\mathcal{H} \phi$, $\mathcal{H}^2 \phi$, ..., $\mathcal{H}^n \phi$, etc ne sont des déterminants de Slater, à cause du terme à deux corps V dans l'éq. (II.1), on trouve au contraire que $\exp(i \mathcal{Q}_j) \phi$ reste un déterminant de Slater quelque soit l'opérateur à un corps \mathcal{Q}_j . En effet, d'après les eqs. (II.15) et (III.1),

$$\exp \left[i \sum_k f(r_k) \right] \prod_l \varphi_l(r_l) = \prod_l \exp \left[i f(r_l) \right] \varphi_l(r_l). \quad (\text{III.3})$$

Plus généralement, si l'opérateur à un corps est non local,

$$\mathcal{Q} = \sum_{k=1}^A f(r_k, p_k), \quad (\text{III.4})$$

et si la fonction ϕ est antisymétrisée,

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det [\varphi_l(r_k)] \quad (\text{III.5})$$

il est trivial de vérifier que

$$\exp(i \mathcal{Q}) \phi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \left[\exp \left[i f(r_k, p_k) \right] \varphi_l(r_k) \right]. \quad (\text{III.6})$$

Autrement dit la non-linéarité compliquera la traduction de l'éq. (II.3) et fera perdre les intégrales premières décrites par l'éq. (II.12), mais sera compatible avec l'élément essentiel du problème, à savoir l'observation d'une évolution dans le temps restreinte à l'orbite de groupes de Lie avec pour générateur des opérateurs à un corps tels que \mathcal{Q} , eq. (III.4). On cherche donc à découvrir des modes d'évolution intérieurs aux déterminants de Slater et à la dynamique de HFDT qui soient caractéristiques des mouvements collectifs.

Les équations dynamiques de HFDT ressemblent à l'éq. (II.3) en prenant la forme

$$[i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - h(\Phi)] \Phi(t, r) = 0 \quad , \quad (\text{III.7})$$

ou encore, pour chaque orbite individuelle φ_j constituante de Φ ,

$$[i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - h_j(\Phi)] \varphi_j(t, r_j) = 0 \quad . \quad (\text{III.8})$$

Dans ces éqs. (III.7) et (III.8) on a défini le Hamiltonien de Hartree et Fock

$$h(\Phi) = \sum_{j=1}^A h_j(\Phi) \quad (\text{III.9})$$

avec

$$h_j(\Phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + U(r_j) \quad (\text{III.10})$$

et

$$U(r_j) = \int dr V(r_j - r) \rho(r) \quad , \quad \rho(r) = \sum_{k=1}^A |\varphi_k(r)|^2. \quad (\text{III.11})$$

En fait le potentiel à un corps U , dit potentiel moyen, est une fonction un peu plus compliquée de Φ que ne le montre la formule donnée par l'éq. (III.11), du fait de l'antisymétrisation. Mais il suffira de raisonner sur cette formule, qui montre bien que la densité ρ et le potentiel U sont des fonctions quadratiques. La non linéarité de l'éq. (III.8) est donc cubique.

Pour justifier l'éq. (III.8) on peut copier ce qui a été fait au niveau de l'éq. (II.8). Sur la base - de l'éq. (III.1), qui néglige l'antisymétrisation - de la définition de l'énergie par l'éq. (II.6) avec $\Phi_m = \Phi_n = \Phi$ déterminant de Slater - et d'un choix des orbites φ_ℓ de telle sorte que ces orbites soient orthonormées, l'énergie de Φ est donnée par une fonctionnelle de degré 4 de la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \int dr \varphi_k^*(r) [\Delta \varphi_k(r)] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k\ell} \int dr dr' \varphi_k^*(r) \varphi_\ell^*(r') V(r-r') \varphi_k(r) \varphi_\ell(r') \\ &\quad (\text{terme d'échange omis}). \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

On remarque alors que l'éq. (II.5) se déduit de l'éq. (II.8) par l'identité

$$i \dot{c} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial c} \quad (III.13)$$

On copie alors ce processus par l'équation

$$i \hbar \dot{\varphi}_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_k + \left[\sum_{\ell} \int dr' V(r-r') |\varphi_{\ell}(r')|^2 \right] \varphi_k \quad (III.14)$$

qui n'est autre que l'éq. (III.8).

L'analogie entre l'éq. (III.13) et les éqs. (II.9) et (II.5) montre que l'approximation de HFDT donne encore lieu à des équations de Hamilton. Mais il est évident que $h(\phi)$ dépend du temps par l'intermédiaire de ϕ , et on ne retrouve plus les nombreuses intégrales premières de l'équation de Schrödinger.

La résolution pratique de l'éq. (III.8) sur ordinateur procède comme suit. Le réseau d'intégration pour une particule est toujours de l'ordre de $(30 \times 20 \times 20)$ comme on l'a vu précédemment, mais le nombre total de paramètres est maintenant obtenu en *multipliant* ce nombre par A et non plus en l'élevant à la puissance A . En effet les inconnues sont les A fonctions φ_{ℓ} et non la fonction Ψ des A particules. Il y a donc eu une réduction considérable du nombre de paramètres.

Par une méthode aux différences finies, le calcul de $\Delta \varphi(t, r)$ se fait aisément. De même on calcule $\rho(t, r)$ et $U(t, r)$ selon l'éq. (III.11). On peut alors opérer le pas de temps par la formule explicite

$$\varphi_{\ell}(t + dt, r_{\ell}) = \left[1 - i dt h_{\ell}(\phi) \right] \varphi_{\ell}(t, r_{\ell}), \quad (III.15)$$

qui présente cependant le défaut de n'être pas strictement une transformation unitaire de φ_{ℓ} . La transformation implicite

$$\left[1 + i dt h_{\ell}(\phi)/2 \right] \varphi_{\ell}(t + dt, r_{\ell}) = \left[1 - i dt h_{\ell}(\phi)/2 \right] \varphi_{\ell}(t, r_{\ell}) \quad (III.16)$$

est également utilisable, avec l'avantage de l'unitarité et l'inconvénient d'une inversion matricielle.

Diverses corrections de type "prédicteur-correcteur", avec divers ordres de la série de Taylor, sont possibles afin de tenir compte de ce que $h(\Phi)$ dépend du temps. Par exemple dans l'éq. (III.16) on peut chercher à utiliser non pas $h(\Phi(t))$ mais $h[\Phi(t + dt/2)]$. Les présents programmes de physique nucléaire sur des ordinateurs de la taille d'un CDC 7600 traitent en moyenne 100 pas de temps en 10 à 15 minutes pour une centaine de nucléons.

Un calcul de HFDT est ainsi effectué numériquement, à partir d'une condition initiale $\Phi(t = 0)$ a priori arbitraire. Il reste à observer le résultat du calcul et à optimiser la condition initiale afin d'observer un mode collectif.

Il n'est pas possible, dans le cadre de cet exposé, de détailler l'ensemble des modes d'observation du calcul et d'optimisation de la condition initiale. Seules deux méthodes seront ici mentionnées - celle du fibré invariant - celle des rayons de courbure.

La méthode du fibré invariant part de l'observation qu'un déterminant de Slater réel Φ_r peut être interprété comme une fonction d'onde ne présentant pas de vitesse collective. Seul des déterminants complexes sont porteurs de vitesse. On constitue donc la base d'un fibré à l'aide d'une séquence $\Phi_r(\lambda)$ de déterminants réels, dépendant d'un paramètre λ . Les fibres consistent à rendre ces déterminants complexes, à l'aide de l'ansatz

$$\Phi(\lambda, \tau) = \exp(i \tau \mathcal{Q}) \Phi_r(\lambda) \quad , \quad (\text{III.17})$$

où \mathcal{Q} est un opérateur hermitique à un corps tel que défini par l'éq. (II.15) ou l'éq. (III.4). On spécifie que \mathcal{Q} est réel et que ϕ est défini à une phase globale près. On peut enfin supposer que \mathcal{Q} ne dépend pas de λ , ou n'en dépend que faiblement.

Le fibré ainsi défini est dit invariant si, étant donné les conditions initiales $\lambda(0)$, $\tau(0)$, il existe des fonctions $\lambda(t)$ et $\tau(t)$ telles que $\Phi[\lambda(t), \tau(t)]$ soit une solution de l'éq. (III.7) de HFDT. Un tel cas se produit par exemple dans le cas des translations, avec $\mathcal{Q} \equiv \mathcal{R}$, coordonnée du centre de masse, ainsi que

$$\Phi_r(\lambda) = \exp(-i \lambda \mathcal{P}) \Phi_0 \quad , \quad (\text{III.18})$$

où on reconnaît l'impulsion \mathcal{P} du centre de masse et une solution statique de Hartree et Fock ϕ_0 . Il est trivial de vérifier que les lois du mouvement donnent $\tau(t) = \tau(0)$ et $\lambda(t) = \lambda(0) + t \tau(0)/\mu$, avec un paramètre de masse μ fixe. Autrement dit, dans le cas des translations, on constate bien que la classe de solutions de HFDT

$$\phi = \exp[i \tau(0)\mathcal{R}] \exp \left\{ -i[\lambda(0) + t \tau(0)/\mu]\mathcal{P} \right\} \phi_0 \quad (\text{III.19})$$

fabrique bien un fibré tel que décrit par l'éq. (III.17).

On connaît d'autres cas de fibrés invariants que celui fourni trivialement par les translations, mais ces cas ne sont pas en général des résultats exacts. En fait, l'existence d'un fibré invariant est un résultat assez exceptionnel. Il est toutefois possible de donner des conditions pour que, aux ordres les plus bas par rapport au paramètre d'adiabaticité τ , une famille à un paramètre de trajectoires de HFDT forme un fibré invariant. Le détail de ces conditions ne peut être donné ici. Il est clair toutefois que la construction d'un fibré invariant, ou son observation à partir de solutions de HFDT, est un pas essentiel pour la découverte d'un mode collectif. En effet, on reconnaît alors que le générateur \mathcal{Q} de la fibre est un opérateur collectif d'accélération et que le générateur \mathcal{P} de la base est un opérateur collectif de déplacement.

La méthode des rayons de courbure généralise celle des fibrés invariants au cas à plusieurs degrés de liberté collectifs. Si la base est une variété à plusieurs dimensions, elle a plusieurs générateurs $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n$. De même la fibre a plusieurs générateurs $\mathcal{Q}_1, \dots, \mathcal{Q}_n$. Le fibré de dimension $2n$ est alors l'orbite du groupe de générateurs $\mathcal{Q}_1, \dots, \mathcal{Q}_n, \mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{P}_n$. Si l'algèbre des générateurs se ferme bien, le fibré est alors l'orbite du groupe de Lie correspondant.

On connaît justement en physique nucléaire certains groupes de Lie associés à des mouvements collectifs bien caractérisés (rotations, vibrations, etc). Avec une métrique convenable, on trouve alors que la courbure des géodésiques tracées sur les orbites de ces groupes particulièrement intéressants est systématiquement de l'ordre de $\sqrt{3}$. Inversement, si la courbure d'une trajectoire de HFDT s'approche de $\sqrt{3}$, on peut penser que l'algèbre d'évolution de cette solution $\phi(t)$ est peut-être celle d'un groupe de Lie de mouvement collectif.

Cette courbure se définit ainsi. Avec le produit scalaire hermitien usuel de l'espace de Hilbert des fonctions d'onde, l'élément de longueur est défini par

$$\left(\frac{d\lambda}{dt}\right)^2 = \left\langle \frac{d\phi}{dt} \left| \frac{d\phi}{dt} \right\rangle . \quad (\text{III.20})$$

Le vecteur unitaire tangent est donné par la définition

$$|T(\lambda)\rangle = \left| \frac{d\phi}{d\lambda} \right\rangle \quad (\text{III.21})$$

et la courbure se définit alors par

$$C^2(\lambda) = \left\langle \frac{dT}{d\lambda} \left| \frac{dT}{d\lambda} \right\rangle . \quad (\text{III.22})$$

Les trois opérations (III.20) à (III.22) peuvent se faire numériquement, et on peut ainsi découvrir quelles solutions de HFDT sont de bonnes candidates à décrire un mouvement collectif. Il restera alors à analyser l'algèbre qui guide leur évolution, afin d'identifier des variables collectives \mathcal{P}, \mathcal{Q} .

IV. METHODE DE LA COORDONNEE GENERATRICE. THEORIE DES COLLISIONS.

Il existe d'assez nombreuses situations où on connaît le degré de liberté collectif \mathcal{Q} , mais où le changement de variables qui permettrait de passer des coordonnées individuelles r_i à \mathcal{Q} complété par des variables ξ complémentaires est hors de question. Dans le cas des collisions entre un noyau A et un noyau B par exemple, il faudrait passer des r_i , $i = 1 \dots (A+B)$ à des combinaisons linéaires R, centre de masse total, $\rho = R_A - R_B$ distance relative et ξ_{A-1}, ξ_{B-1} variables relatives internes. Il est évident que les coefficients de ces combinaisons linéaires, quoique faciles à trouver, rendent très vite fastidieux le changement de variables et impraticable l'application du principe de Pauli. En effet ces coefficients brisent la symétrie du problème, alors que l'antisymétrisation entre nucléons ne se fait facilement que dans la représentation des variables initiales r.

La variable collective \mathcal{Q} intéressante dans le cas d'une collision est évidemment la distance relative ρ . Comment travailler avec ρ tout en gardant la représentation r ? Pour cela, on peut prendre des déterminants de Slater ϕ_s avec A orbites localisées autour d'un point de coordonnée $Bs/(A+B)$ et B orbites localisées autour d'un point de coordonnée $-As/(A+B)$.

Les deux nuages de densité nucléaire sont alors réparés par la distance s et il est évident que si on faisait le changement de variable $r \Rightarrow R, \rho, \xi$, on constaterait que

$$\phi_s(r) \approx \Gamma(R) \mathcal{A} \gamma(\rho-s) \chi_A(\xi_{A-1}) \chi_B(\xi_{B-1}) \quad (IV.1)$$

En effet, la localisation des orbites qui a été choisie pour ϕ_s entraîne forcément que le centre de masse total est localisé près de l'origine en un paquet d'onde $\Gamma(R)$. De même la distance relative est restreinte à un paquet d'onde $\gamma(\rho-s)$ qui localise ρ près de la valeur moyenne s . Enfin chacun des noyaux a une fonction interne $\chi(\xi)$. Le tout est antisymétrisé par l'opérateur \mathcal{A} .

Si maintenant on intègre sur le paramètre s (la coordonnée génératrice) on obtient

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \int ds f(s) \phi_s(r) \\ &\approx \Gamma(R) \mathcal{A} g(\rho) \chi(\xi) \quad , \end{aligned} \quad (IV.2)$$

où on reconnaît que $g(\rho)$ est une fonction d'onde relative (de collision), engendrée par le choix d'une amplitude convenable $f(s)$

$$g(\rho) = \int ds \gamma(\rho-s) f(s) \quad (IV.3)$$

Il est remarquable que dans l'éq. (IV.2) on intègre sur le paramètre s , les variables explicites étant des variables r , alors que la formule (IV.3) révèle que cette intégration est une opération dynamique sur la seule variable intéressante ρ . Cette méthode est bien une méthode de manipulation d'un degré de liberté isolé parmi d'autres.

Il reste à choisir $f(s)$. Pour cela on écrit que Ψ est aussi proche que possible d'un état propre

$$\langle \phi_s | (\mathcal{H} - E) | \Psi \rangle = 0 \quad , \quad \forall s' \quad , \quad (IV.4)$$

d'où l'équation intégrale

$$\int ds'' \left[H(s's'') - E N(s's'') \right] f(s'') = 0 \quad , \quad (IV.5)$$

avec

$$\left. \begin{array}{l} H(s' s'') \\ N(s' s'') \end{array} \right\} = \langle (s') | \mathcal{H}_1 | \phi(s'') \rangle . \quad (\text{IV.6})$$

Cette équation intégrale s'écrit matriciellement

$$(H - EN) f = 0 . \quad (\text{IV.7})$$

Elle pose plusieurs problèmes numériques et analytiques.

Le premier problème consiste à calculer les noyaux H et N de façon efficace à partir de leur définition (IV.6). On rappelle que, d'après l'éq. (II.6) et le choix pour ϕ_s de déterminants de Slater, les intégrales à effectuer se factorisent. Le problème est donc possible, et a d'ailleurs été résolu pour des noyaux légers $A \leq 40$. Mais il y a de nombreux termes à additionner et le calcul de chaque terme est d'ailleurs délicat car on sait que les orbites ne sont pas toutes centrées au même point.

Le second problème consiste à trouver une racine carrée, hermitique ou non, de N. La solution la plus évidente est de poser

$$N = N^{1/2} N^{1/2} \quad (\text{IV.8})$$

pour résoudre

$$(N^{-1/2} H N^{-1/2} - E) (N^{1/2} f) = 0. \quad (\text{IV.9})$$

Mais on constate numériquement, et on prévoit analytiquement, que le spectre de N contient des zéros, et en tout cas s'accumule vers zéro. Donc $N^{-1/2}$ est singulier.

Il peut donc être avantageux de chercher un noyau rectangulaire M telle que

$$N = M^+ M , \quad (\text{IV.10})$$

et de trouver une identification de la forme

$$H = M^+ h_{\text{red}} M , \quad (\text{IV.11})$$

afin de résoudre

$$(h_{\text{red}} - E) (M f) = 0 \quad . \quad (\text{IV.12})$$

De nombreuses applications ont été entreprises dans la littérature, mais il reste à améliorer les algorithmes numériques permettant de trouver M et h_{red} . En effet E est dans le spectre continu du problème et une grande précision numérique est nécessaire.

V. CONCLUSION

Au cours des trois sections II, III et IV on a vu que les théories nucléaires font abondamment appel à des modèles, souvent empiriques, où le nombre de degrés de liberté est fortement réduit. Il paraît possible, bien que difficile, de rendre cette réduction moins artificielle. Pour cela on peut notamment chercher des intersections de quadriques d'intégrales premières, comme dans la section II, ou des fibrés invariants, comme dans la section III. Mais cette recherche doit encore s'appuyer sur des calculs numériques importants, ce qui nécessite encore de sérieux progrès dans le calcul des moments ou celui des opérateurs d'évolution. Le cas des collisions nucléaires, en particulier, malgré les progrès réalisés à l'aide de la méthode de la coordonnée génératrice, reste un domaine où des progrès numériques sérieux sont encore nécessaires pour la résolution des équations de collision.

Nous remercions vivement les organisateurs de ce colloque pour l'occasion qui nous a été offerte de passer en revue quelques problèmes mathématiques posés par la physique nucléaire, pour leur accueil, et pour les discussions stimulantes dont nous avons bénéficié.

