

Les masses des noyaux TERAssées par le calcul haute performance

La connaissance des propriétés des noyaux nucléaires est essentielle pour améliorer la description des divers processus de nucléosynthèse stellaire et comprendre l'abondance des différents éléments qui constituent l'univers actuel ou pour mieux exploiter les nouveaux équipements tant industriels qu'expérimentaux faisant intervenir de nombreux noyaux radioactifs. Sachant que, pour la plupart des noyaux, nous ne disposons d'aucune information expérimentale, seules des approches théoriques permettent de prédire les propriétés requises. Le problème est cependant difficile à appréhender car, non seulement l'interaction qui assure la cohésion des neutrons et protons au sein des noyaux est imparfaitement connue, mais, de plus, la résolution exacte du problème à N corps est impossible dès lors que l'on s'intéresse à des systèmes contenant plus d'une dizaine de nucléons.

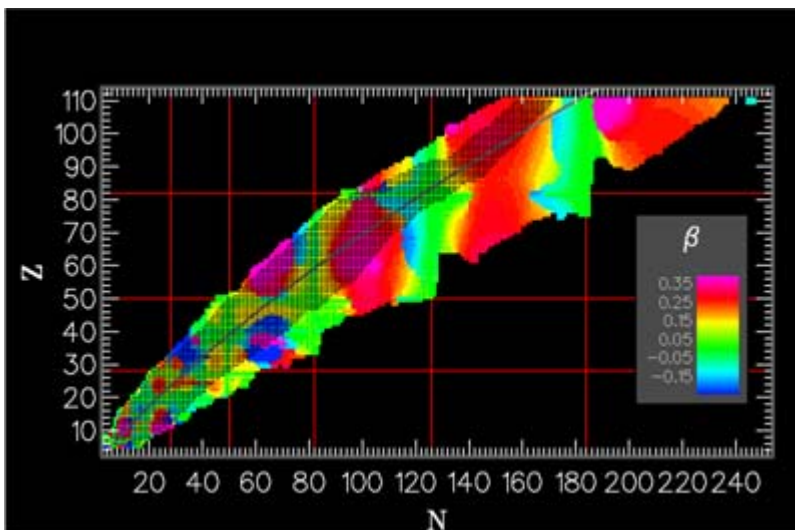
Pour pallier ces limitations, les physiciens spécialistes de la structure nucléaire utilisent des interactions effectives et des méthodes de résolution approchée du problème à N corps, pour tenter de reproduire fidèlement des informations expérimentales relatives aux noyaux stables ou proches de la stabilité. Parmi ces interactions, la force dite de Gogny, développée il y a près de trente ans présente la particularité de permettre aux nucléons du noyau d'interagir à distance. Si cette spécificité a fait sa renommée, elle a aussi longtemps limité son champ d'application à un nombre réduit de noyaux tant l'utilisation de cette force requiert un temps de calcul important par rapport à des interactions plus simples.

Avec le développement de nouveaux moyens de calculs, l'étude systématique de tous les noyaux susceptibles d'exister a été rendue possible. Le potentiel prédictif global de la force de Gogny a ainsi été confirmé mais certaines de ses limites ont aussi été mises en évidence, dont la principale est une description insuffisante des énergies de liaison des noyaux, qui se dégrade d'autant plus que l'on s'éloigne de la vallée de stabilité.

Le challenge physique

Il s'agit d'améliorer ce principal point faible tout en conservant par ailleurs les bonnes propriétés déjà validées par plusieurs dizaines d'années d'études approfondies. La difficulté principale de cette tâche réside dans l'amplitude du domaine de variation des paramètres de l'interaction, et se double d'une contrainte en temps de calcul qui rend illusoire l'idée d'une optimisation automatique de ces paramètres dans une durée raisonnable. Le processus d'optimisation a donc été découpé en plusieurs étapes itératives couplées. Le calcul théorique de la masse d'un noyau fait en effet intervenir plusieurs termes dont certains, dominants, peuvent être calculés systématiquement durant le processus d'optimisation, alors que d'autres, correctifs, peuvent n'être déterminés qu'épisodiquement. Ces termes correctifs sont donc supposés, dans une première phase comme étant indépendants de l'interaction et ne sont recalculés que lorsqu'une avancée significative est produite par les termes prépondérants, afin de retrouver une nouvelle cohérence.

L'aboutissement d'un tel projet n'était envisageable que grâce au grand nombre de processeurs qu'offrent les supercalculateurs. Dans notre approche, nous devons en effet, calculer les masses de quelques centaines de noyaux indépendamment les uns des autres en utilisant des maillages dont les nœuds sont eux aussi indépendants. Au total, environ 70000 points de calculs doivent être considérés ce qui nécessite quelques 250 processeurs pendant une semaine, et ce pour chaque interaction testée intégralement. Grâce au calculateur TERA-10, nous avons ainsi pu tester de façon cohérente 25 interactions après avoir utilisé environ un million d'heures de calcul (soit environ un siècle) sur une période de 6 mois.



Moment quadrupolaire des noyaux fonction du nombre de neutrons N et du nombre de protons Z calculé en formalisme Hartree-Fock-Bogoliubov avec l'interaction de Gogny

Le bilan

Nous avons mis au point une interaction qui répond à nos exigences puisque la déviation standard obtenue entre les énergies de liaison théoriques et expérimentales des 2149 masses connues est de 798 keV ce qui se compare assez bien aux meilleures approches disponibles dans le domaine et constitue une avancée significative par rapport à la déviation supérieure à 2 MeV fournie par le jeu de paramètres initial. Les analyses préliminaires effectuées avec cette nouvelle interaction ne révèlent pas de dégradation majeure des autres propriétés vis-à-vis de l'interaction initiale. Ce travail a d'ores et déjà donné lieu à publication (Physical Review Letters 102, 242501 (2009)).