**Zeitschrift:** Horizons : le magazine suisse de la recherche scientifique
**Herausgeber:** Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique
**Band:** 24 (2012)
**Heft:** 94

**Artikel:** Le maître du laboratoire virtuel
**Autor:** Leiva, Leonid
**DOI:** https://doi.org/10.5169/seals-970904

**Nutzungsbedingungen**
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

**Conditions d'utilisation**
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

**Terms of use**
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

**Download PDF:** 09.12.2025

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch**

# Le maître du laboratoire virtuel

**Avec ses simulations informatiques, Michele Parrinello a renouvelé la physique. La méthode de Car et Parrinello est aujourd'hui utilisée dans presque tous les secteurs de recherche, y compris la fabrication de médicaments.** *Par Leonid Leiva*

Cela fait presque trois décennies que le portrait du père de la physique computationnelle, Aneesur Rahman, est accroché au mur du bureau de Michele Parrinello. Cette photo du physicien américain d'origine indienne l'a accompagné à toutes les étapes de sa vie de chercheur: de Messine à Lugano, en passant par Trieste, Zurich, Stuttgart et de nouveau Zurich. La rencontre avec Aneesur Rahman, il y a trente ans, a façonné le destin de ce scientifique, l'un des meilleurs dans le domaine des simulations informatiques.

C'était en 1980. Michele Parrinello, alors jeune physicien, était en visite à l'Argonne National Laboratory, aux Etats-Unis. Son séjour sur place, initialement prévu pour trois mois, avait finalement duré deux ans. «A l'époque, j'étais un physicien théorique traditionnel, se souvient-il. Je travaillais avec un crayon et du papier. En m'initiant aux avantages des calculs computationnels, Aneesur Rahman a influencé ma carrière de façon décisive.» Celui-ci travaillait déjà depuis les années 1960 sur des simulations informatiques et avait développé une méthode appelée aujourd'hui dynamique moléculaire qui permettait de reproduire par ordinateur certains processus, comme le pliage de protéines, atome par atome, et de les étudier. Mais cette technique de simulation souffrait d'un déficit fondamental: elle représentait les liaisons chimiques entre atomes sous la forme de ressorts en spirale, ce qui rend possible la reproduction des oscillations des atomes, mais pas des réactions chimiques. Chez ces dernières, les liaisons entre les atomes doivent en effet être rompues et recréées. Or, les ressorts des simulations d'origine ne peuvent pas disparaître sans autre et réapparaître ailleurs. Il fallait donc plutôt décrire la répartition des électrons autour des noyaux des atomes, celle-ci correspondant à la force des liaisons.

Michele Parrinello n'a trouvé la solution qu'une fois de retour à son institut, à Trieste. C'est là-bas qu'il a rencontré Roberto Car. Ce dernier étudiait la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), utilisée pour le calcul des mouvements électroniques. Malgré des mises en garde alarmistes de nombreux physiciens renommés, les deux hommes ont réussi leur percée en combinant dynamique moléculaire et DFT. «Notre naïveté était notre plus grande force», affirme le chercheur. A l'époque, la plupart des spécialistes étaient convaincus que l'intégration des électrons ralentirait énormément les simulations, en raison de calculs beaucoup plus complexes: à chaque étape de calcul pour les noyaux des atomes, s'ajoutaient environ mille étapes pour les électrons, dont les mouvements sont beaucoup plus rapides. «Nous avons résolu ce problème grâce à une série d'astuces de calcul et limité ainsi la complexité», explique-t-il. En 1985, leur travail était publié dans *Physical Review Letters*, l'une des plus importantes revues de physique.

> « Notre naïveté était notre plus grande force. »

Le succès de cette publication réside dans le fait que la méthode de Car et Parrinello va au-delà de la physique. Chimistes, biologistes et physiciens l'utilisent pour mieux comprendre certains processus rapides et complexes. «C'est le grand avantage des simulations, note Michele Parrinello. On peut tester sur l'ordinateur des choses qui seraient trop onéreuses ou trop dangereuses en laboratoire. Ou interpréter des mesures issues d'expériences réelles, car la simulation offre d'un seul tenant un microscope et un ralenti.» Il n'est donc pas étonnant que l'utilisation de l'informatique soit aujourd'hui considérée comme le troisième pilier des sciences naturelles, à côté de la théorie et de l'expérimentation. «Pour moi, les simulations informatiques étaient le domaine idéal», poursuit ce maître du laboratoire virtuel. La méthode de Car et Parrinello est appli-

## Michele Parrinello

Michele Parrinello est né en 1945 à Messine et a fait ses études de physique à Bologne. Au début des années 1990, il a créé au centre de recherche IBM à Rüschlikon (ZH) un groupe de recherche en physique computationnelle. Depuis 2001, il est professeur en sciences computationnelles à l'EPFZ et, depuis 2011, il enseigne à l'Université de Lugano. Il a aussi reçu de nombreuses distinctions, notamment le prix Marcel Benoist, en 2011.

quée dans presque tous les secteurs de recherche. Cela va du développement de nouvelles substances actives pharmaceutiques ou de nouveaux engrais à l'étude de matériaux précieux pour la technologie, comme le silicium amorphe, en passant par la compréhension de la transformation du graphite en diamant.

**Un homme modeste**

En dépit des nombreuses distinctions, notamment le prix Aneesur Rahman, Michele Parinello est un homme modeste, qui choisit ses mots avec circonspection et porte des jugements modérés. Malgré des offres alléchantes d'universités nord-américaines, il est resté en Europe et s'y sent bien. Mais il ne cache pas sa déception à l'égard de la situation en Italie où, dit-il, aucun politicien, quel que soit son camp, ne considère la recherche fondamentale comme une priorité. Il estime avoir de la chance de travailler en Suisse, pays dans lequel la science est considérée comme un investissement à long terme pour la prospérité générale. Selon lui, si l'on veut qu'il en reste ainsi, il faut toutefois agir au niveau de l'école secondaire, car l'aversion de nombreux jeunes envers les mathématiques est due au fait que leurs enseignants ne sont pas suffisamment bons.

Pourtant lui-même, lorsqu'il était écolier, ne s'intéressait guère aux chiffres : « Je lisais beaucoup, raconte-t-il. Notamment Dostoïevski, Tolstoï et Tchekov. C'est grâce à une biographie d'Enrico Ferni, le physicien italien, que je suis venu à la physique. » S'il ne nie pas l'utilité de la culture générale, il est persuadé que les écoles devraient donner aujourd'hui la priorité aux sciences naturelles, car les carences dans ces branches sont parfois béantes. Quant aux politiciens, il conviendrait qu'il dispose de connaissances solides en statistiques. ■