**Étude de la dynamique moléculaire *ab initio* par un réseau de neurones de haute dimension : cas de la molécule d’eau**

**M.R. YOUBI KEMMOGNE**, S.G. NANA ENGO

rose.youbi@facsciences-uy1.cm

Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Yaoundé 1

B.P. 812, Yaoundé Cameroun

**Résumé**

L’étude par dynamique moléculaire *ab initio* est l’une des méthodes de simulation utilisées pour déterminer les propriétés les plus exactes possible des molécules. Cependant, la détermination de ces propriétés demeure un challenge pour de nombreuses molécules telles que les protéines. Les raisons principales de cette complexité est la taille des molécules et le coût subséquent lié aux calculs *ab initio*. La combinaison du calcul scientifique moderne avec la théorie de la structure électronique peut conduire à une quantité sans précédent de données se prêtant à une analyse intelligente pour l’identification des relations structure-propriété significatives, nouvelles et prédictives [1]. Dans cette présentation, nous exploitons un modèle de l’apprentissage automatique (*machine learning* en anglais) pour accéder aux propriétés énergétiques de la molécule d’eau (H2O). À cet effet, nous utilisons l’algorithme de réseau de neurones de haute dimension (HDNNP). Nous notons que ce modèle prend en compte la symétrie inter-atomique grâce aux fonctions de symétries radiales et angulaires. Les énergies résultantes permettent de dériver les forces inter et extra-moléculaires [2].

**Mots clés :** Dynamique moléculaire *ab initio*, Machine learning, Réseau de neurones de haute dimension

**Bibliographie**

[1] G. Montavon *et al.* *Machine Learning of Molecular Electronic Properties in Chemical Compound Space*. In: New J. Phys. **15** (2013), p. 095003.

[2] M. R. Youbi Kemmogne, *Machine learning for the interpretation of ab initio molecular dynamics simulations*. In Master Thesis, University of Yaoundé I (2022).