



Communiqué de presse

Contact presse

Terri Mueller
Vice President
Global Communications
t.mueller@elsevier.com

Elsevier et Iktos s'associent pour créer une plateforme d'IA pour la chimie de synthèse dédiée à la découverte de médicaments

- *Cette nouvelle plateforme, qui combine la plus grande base de données chimiques au monde, Reaxys d'Elsevier, et les outils d'intelligence artificielle (IA) uniques d'Iktos, permettra aux laboratoires pharmaceutiques de concevoir plus rapidement des candidats médicaments en phase préclinique.*

Londres, Paris, 5 Mars, 2024 – [Elsevier](#), leader mondial de l'information et de l'analyse de données, annonce la signature d'un accord pluriannuel avec [Iktos](#), société spécialisée dans l'intelligence artificielle (IA) pour la découverte de nouveaux médicaments. Ce partenariat renforce [Reaxys](#), la base de données chimiques d'Elsevier, la plus riche au monde, grâce à l'apport des technologies d'intelligence artificielle pour la planification de synthèse (ou rétrosynthèse) développées par Iktos, cela afin de permettre aux laboratoires pharmaceutiques d'accélérer la recherche en chimie.

Mirit Eldor, Managing Director, Life Sciences Solutions, d'Elsevier déclare : "Notre mission est d'aider les organismes de recherche et développement à stimuler leur innovation et la découverte de médicaments grâce à nos algorithmes prédictifs de pointe entraînés sur les données de haute qualité de Reaxys. Nous sommes ravis de nous associer à Iktos afin d'optimiser l'apport unique des informations offertes par Reaxys grâce à l'intelligence artificielle, et de contribuer ainsi à la transformation de la découverte de médicaments."

Ce partenariat vise à aider les centres de R&D à réduire sensiblement le temps nécessaire à la réalisation des cycles de « conception-fabrication-essai-analyse » des petites molécules, réduisant ainsi la durée et le coût de la découverte de médicaments à un stade précoce. Dans ce cadre, de nouveaux modèles prédictifs seront lancés dans le domaine de la prédiction de rétrosynthèse et de l'accessibilité synthétique, ainsi que d'autres prédicteurs basés sur les réactions. Ces nouveaux outils seront fournis via l'interface conviviale de Reaxys ainsi que par Application Programming Interface (API), ce qui accélérera la recherche pour les équipes de chimie synthétique, médicinale, computationnelle et de process dans les entreprises pharmaceutiques, agrochimiques et les organismes de recherche sous contrat (CRO).

Yann Gaston-Mathé, PDG d'Iktos, déclare : "Les données constituent le carburant de l'IA. Nous sommes donc très heureux de nous associer à Elsevier. Nous allons combiner la force de Reaxys, une base de données de réactions chimiques d'un volume, d'une diversité et d'une qualité inégalés, avec la technologie de pointe d'Iktos en matière d'IA appliquée notamment à la retro-synthèse. Nous nous engageons à mettre notre technologie à la disposition des organismes de R&D du monde entier afin de maximiser l'impact de l'IA sur la productivité de la découverte de médicaments."

Les nouveaux outils de prédiction de rétrosynthèse et d'accessibilité synthétique seront basés sur la technologie propriétaire d'Iktos et entraînés sur la base de données de Reaxys. L'outil utilise un modèle de prédiction de déconnexions des molécules basé sur des modèles d'IA, pour ensuite appliquer un filtre propriétaire qui évalue la faisabilité de la réaction et inclut des paramètres de chimio-sélectivité et de régio-sélectivité. L'univers des solutions est exploré efficacement à l'aide d'une fonctionnalité de recherche avancée qui fournit des voies de synthèse prometteuses en quelques minutes. Les nouveaux outils offriront de nombreuses fonctionnalités intéressantes, notamment la prise en charge de la stéréochimie, la définition de la première déconnexion, la possibilité d'inclure ou d'exclure des intermédiaires, d'éviter les conflits de régio-sélectivité et de définir la limite de prix des matériaux de départ. En outre, les clients auront la possibilité de personnaliser le modèle sous-jacent avec des réactions propriétaires et des bibliothèques de matières premières.

Les nouveaux outils de prédiction de rétrosynthèse et d'accessibilité synthétique seront disponibles en tant que modules complémentaires pour les clients de Reaxys. Pour plus d'informations, veuillez consulter la [page d'accueil de Reaxys](#).

A propos d'Elsevier

En tant que leader mondial de l'information et de l'analyse, [Elsevier](#) aide les chercheurs et les professionnels de la santé à faire progresser la science et à optimiser les résultats en termes de santé publique. Pour ce faire, nous facilitons la compréhension et la prise de décisions critiques pour nos clients dans les écosystèmes mondiaux de la recherche et de la santé. Dans tout ce que nous publions, nous respectons les normes de qualité et d'intégrité les plus strictes. Nous appliquons la même rigueur à nos solutions d'analyse de l'information destinées aux chercheurs, aux responsables universitaires, aux bailleurs de fonds, aux entreprises à forte intensité de R&D, aux médecins et aux infirmières.

Elsevier emploie 9.000 personnes dans le monde, dont plus de 2.500 technologues. Nous soutenons le travail de nos partenaires dans le domaine de la recherche et de la santé depuis plus de 140 ans. Issus de nos racines dans l'édition, nous offrons des connaissances et des analyses précieuses qui aident les utilisateurs à faire des percées et à stimuler le progrès sociétal. Des solutions numériques telles que [ScienceDirect](#), [Scopus](#), [SciVal](#), [ClinicalKey](#) et [Sherpath](#) promeuvent la [gestion stratégique de la recherche](#), la [performance de la R&D](#), [l'aide à la décision clinique](#) et [l'éducation à la santé](#). Les chercheurs et les professionnels de la santé peuvent s'appuyer sur plus de 2.800 revues, dont [The Lancet](#) et [Cell](#), sur plus de 46.000 livres électroniques et sur des ouvrages de référence emblématiques, tels que *Gray's Anatomy*. Avec la [Fondation Elsevier](#) et notre [conseil consultatif externe sur l'inclusion et la diversité](#), nous travaillons en partenariat avec diverses parties prenantes pour faire progresser [l'inclusion et la diversité](#) dans la science, la recherche et les soins de santé dans les pays en développement et dans le monde entier.

Elsevier fait partie de [RELX](#), un fournisseur mondial d'outils d'analyse et de décision basés sur l'information pour les professionnels et les entreprises.

A propos de Reaxys

Reaxys est une solution de recherche et de formation, développée par Elsevier, dans le domaine de la chimie qui fournit des informations sur les substances, propriétés et réactions chimiques ainsi que la chimie médicinale tant pour la chimie expérimentale que pour alimenter les processus de machine learning utilisés dans la découverte de médicaments et la R&D chimique et pharmaceutique. Reaxys fournit la base de données de

chimie et de bio-activité la plus complète, extraite manuellement et curatée, couvrant plus d'un milliard de faits expérimentaux publiés, dont 280 millions de composés organiques, inorganiques et organométalliques, 74 millions de réactions chimiques, 46 millions de bioactivités à partir de plus de 110 millions de documents, y compris des brevets et des journaux.

À propos d'Iktos

Créée en octobre 2016, Iktos est une start-up française spécialisée dans le développement de solutions d'intelligence artificielle appliquées à la recherche en chimie, plus particulièrement à la chimie médicinale et à la conception de nouveaux médicaments. Iktos développe une solution innovante basée sur des modèles génératifs de deep learning, qui permet, à partir de données existantes, de concevoir des molécules optimisées in silico pour répondre à l'ensemble des critères de réussite d'un projet de découverte de molécule. L'utilisation de la technologie Iktos permet des gains de productivité majeurs dans la phase amont de la R&D pharmaceutique. Iktos propose sa technologie à travers les plateformes logicielles SaaS Makya™, pour la conception générative de médicaments, et Spaya™, pour la rétrosynthèse, et via des collaborations stratégiques avec des laboratoires pharmaceutiques pour qui Iktos mobilise sa plateforme et ses capacités uniques pour accélérer la découverte de médicaments à base de petites molécules. Iktos a également développé Iktos Robotics, une plateforme unique d'automatisation de la synthèse pilotée par l'IA qui accélère considérablement le cycle Design-Make-Test dans la découverte de médicaments.

Plus d'informations sur : <http://www.iktos.ai/>

Contacts presse Iktos

Yann Gaston-Mathé (CEO) – contact@iktos.com

Nicolas Daniels – ndaniels@ulyse-communication.com / + 33 6 63 66 59 22

Charles Courbet – ccourbet@ulyse-communication.com / + 33 6 28 93 03 06