



Communiqué de presse

Qubit Pharmaceuticals crée avec NVIDIA la plateforme de calcul la plus puissante au monde pour accélérer la découverte de médicaments

- **L'utilisation d'une informatique hybride, classique et quantique, permet de réduire significativement le temps nécessaire à la découverte de candidats médicaments et par 10 le montant des investissements nécessaires**
- **Cette plateforme haute performance d'une puissance de plusieurs pétaflops permet d'accélérer massivement les calculs classiques et d'émuler les futurs ordinateurs quantiques**
- **Qubit accélère ainsi ses programmes de recherche dans l'oncologie, les maladies inflammatoires et les antiviraux**

Paris (France), le 30 novembre 2022 – Qubit Pharmaceuticals, société deeptech spécialisée dans la simulation et la modélisation moléculaire grâce à l'utilisation de la physique quantique, annonce la création d'une plateforme visant à accélérer la découverte de médicaments par calcul hybride, classique et quantique sur le NVIDIA Quantum Optimized Device Architecture (QODA). Qubit Pharmaceuticals exploite l'un des supers ordinateurs GPU les plus puissants en France dédié à la recherche médicale avec pour objectif de construire un portefeuille de candidats médicaments dans les domaines de l'oncologie, des maladies inflammatoires et des antiviraux. Dès 2023, les premiers candidats-médicaments, issus de cette collaboration, devraient être testés par des laboratoires pharmaceutiques.

Un million de milliards d'opérations par seconde

La recherche de médicaments par simulation et modélisation nécessite des capacités de calcul inédites dépassant le pétaflop, soit plus d'un million de milliards d'opérations par seconde. La nouvelle plateforme combine la suite logicielle Atlas de Qubit et la puissance de calcul de NVIDIA.

En créant des jumeaux numériques des molécules physiques, la plateforme Atlas de Qubit accélère les calculs d'un facteur 100.000 réalisant en quelques heures des calculs qui nécessitent plusieurs années par des voies conventionnelles. Alors qu'une recherche classique nécessite typiquement 5 000 synthèses moléculaires, la simulation réduit ce nombre à environ 200. La simulation permet également d'explorer en parallèle plusieurs familles chimiques, plutôt qu'en séquentiel.

La nouvelle plateforme est accélérée par 200 GPU (cartes graphiques de dernière génération) dont les systèmes DGX A100 de NVIDIA, offrant une puissance pour la simulation et les calculs d'intelligence artificielle inégalée. L'association de la plateforme de calcul accélérée de NVIDIA et du logiciel Atlas de Qubit vise à diviser par plus de 2 le temps nécessaire pour cribler, sélectionner un candidat médicament d'intérêt et l'optimiser ; et par plus de 10 les investissements nécessaires.

Trois domaines de recherche privilégiés

Dans l'immédiat, la nouvelle plateforme vise à développer 10 programmes internes de recherche dans les domaines de l'oncologie, des maladies inflammatoires et des antiviraux. Les premiers candidats-médicaments devraient être testés par des laboratoires pharmaceutiques dès 2023.

Démarrage de la simulation par calcul quantique

L'avenir de la modélisation et de la simulation moléculaires dans la découverte de médicaments devrait résider dans l'utilisation hybride de super-ordinateurs classiques et d'ordinateurs quantiques. Les ordinateurs quantiques servent d'accélérateurs pour certains calculs clés aux côtés des supercalculateurs GPU. Pour explorer ce nouveau domaine de recherche, Qubit a choisi NVIDIA QODA, une plate-forme de calcul hybride quantique-classique. QODA permet l'intégration transparente de l'informatique quantique avec le supercalculateur accéléré par GPU, et est compatible avec toutes les ressources quantiques, y compris les QPU physiques et l'émulation avec cuQuantum.

La collaboration entre NVIDIA et Qubit Pharmaceuticals jette les bases de la simulation informatique quantique et de la modélisation moléculaire pour la découverte de médicaments, et contribuera à créer les architectures informatiques qui seront utilisées dans les années à venir. Cette coopération vise à ce que les algorithmes soient prêts lorsque les ordinateurs quantiques le seront.

Robert Marino, Président de Qubit Pharmaceuticals a déclaré : « *Nous sommes extrêmement fiers deux années après la création de Qubit d'avoir obtenu la confiance d'un leader mondial tel que NVIDIA. En associant la puissance de calcul de NVIDIA et la capacité de simulation et de modélisation moléculaire de Qubit, nous sommes confiants dans notre capacité à réduire considérablement le temps de développement de nouveaux médicaments et de diviser par dix le coût des développements avant la pré-clinique. Cette collaboration unique au monde est également précurseur dans le domaine de la physique quantique et devrait nous permettre de développer les premiers algorithmes dans ce domaine appliqué à la découverte de médicaments.* »

Craig Rhodes, EMEA Industry Lead - AI for Healthcare and Life Science, a déclaré : « *Accélérer la découverte de médicaments est une priorité majeure pour NVIDIA, et nous développons du software et du hardware spécifiquement pour relever ce défi. Nous avons trouvé de grandes synergies avec Qubit et nous travaillons ensemble pour repousser les frontières de la découverte de médicaments.* »

À propos de Qubit Pharmaceuticals

Qubit Pharmaceuticals a été fondée en 2020 avec la vision de codévelopper, avec les sociétés pharmaceutiques et biotechnologiques, de nouveaux médicaments plus efficaces et plus sûrs. Ses logiciels tirent le meilleur parti des superordinateurs existants et émergents pour modéliser au niveau microscopique les effets quantiques avec un maximum de précision. L'équipe pluridisciplinaire et les fondateurs sont basés en France au sein de la pépinière Paris Santé Cochin et aux États-Unis à Boston. Pour plus d'informations, ou postuler pour des emplois dans une équipe ambitieuse, visitez le site www.qubit-pharmaceuticals.com

A propos de NVIDIA

Depuis sa création en 1993, [NVIDIA](https://www.nvidia.com) (NASDAQ : NVDA) est un pionnier du calcul informatique accéléré. L'invention du GPU par la société en 1999 a stimulé la croissance du marché des jeux sur PC, redéfini l'univers de l'infographie, a permis l'entrée dans l'ère de l'IA moderne et a contribué à la création du métavers. NVIDIA est désormais une société d'informatique complète avec des offres à l'échelle du centre de données qui remodèlent l'industrie.

Plus d'informations sur <https://nvidianews.nvidia.com/>.

Contacts presse

NVIDIA

Lydia Mekrez, PR Manager / lmekrez@nvidia.com / +33 6.33.31.41.82

Qubit Pharmaceuticals

Bruno Arabian / barabian@ulyse-communication.com / +33 6.87.88.47.26

Nicolas Daniels / ndaniels@ulyse-communication.com / +33 6.63.66.59.22