

Communiqué de presse

Qubit Pharmaceuticals et Sorbonne Université réalisent une percée scientifique majeure avec une simulation de calculs quantiques à plus de 40 qubits exacts sur ordinateurs classiques

- **Qubit Pharmaceuticals présente son émulateur Hyperion-1, développé en partenariat avec Sorbonne Université et capable d'exécuter des algorithmes quantiques accélérés et exacts à plus de 40 qubits.**
- **Tirant parti des dernières améliorations de calcul haute performance, Hyperion-1 démontre une vitesse de calcul unique au monde, plaçant Qubit Pharmaceuticals parmi les leaders de la simulation exacte d'ordinateur quantique sur infrastructure de calcul (HPC) classique.**
- **Hyperion-1 va permettre d'accélérer le développement d'algorithmes quantiques à application réelle.**
- **Une percée qui conforte l'objectif de la société de devenir le leader de la découverte de médicaments par modélisation moléculaire.**

Paris, le 6 décembre 2023 - Qubit Pharmaceuticals, société deeptech spécialisée dans la découverte de nouveaux candidats médicaments grâce à la simulation et la modélisation moléculaire accélérée par le calcul hybride HPC et quantique, annonce une percée scientifique majeure après avoir réussi des calculs quantiques simulant 40 qubits avec son nouvel émulateur Hyperion-1.

« Il s'agit bien d'une simulation exacte de 40 qubits logiques réalisée avec une très grande vélocité, ce qui est un exploit inédit dans l'application des calculs quantiques notamment à la chimie quantique », confirme Jean-Philip Piquemal, professeur à Sorbonne Université et directeur du Laboratoire de Chimie Théorique (Sorbonne Université/CNRS), co-fondateur, directeur scientifique de Qubit Pharmaceuticals et responsable de l'équipe qui a développé Hyperion-1.

Un tel niveau de performance place Qubit Pharmaceuticals parmi les acteurs leaders du calcul quantique à l'échelle mondiale, d'autant qu'il a été obtenu sans approximation et avec un niveau de fidélité maximale, c'est-à-dire sans erreur (ou « sans bruit », selon l'expression en vigueur dans la physique quantique) et dans un temps très court, proche de ce qu'on pourrait attendre d'un véritable ordinateur quantique. Cette performance a été réalisée en partenariat avec le Laboratoire de Chimie Théorique de Sorbonne Université et les calculs ont été menés en seulement quelques heures sur le supercalculateur convergé HPC/IA Jean Zay sur 16 nœuds de calculs (128 GPUs¹ A100 NVIDIA) de GENCI hébergé et opéré par le centre de calcul de l'IDRIS (CNRS), sur lequel l'émulateur Hyperion-1 a été développé.

L'objectif : diviser par 2 le temps nécessaire pour sélectionner un candidat médicament

Cet accomplissement conforte Qubit Pharmaceuticals dans son objectif de devenir la référence de la découverte de médicaments par modélisation moléculaire. Issue de travaux de recherche académique menés par des scientifiques de renommée internationale, en France et aux Etats-Unis², Qubit

Pharmaceuticals modélise les molécules et simule leurs interactions afin d'identifier des candidats médicaments plus efficaces et plus sûrs. L'objectif est de diviser par 2 le temps nécessaire pour sélectionner et optimiser un candidat d'intérêt, et par plus de 10 les investissements nécessaires. Ce processus nécessite d'immenses capacités de calculs, disponibles aujourd'hui avec les supercalculateurs et démultipliées demain avec les ordinateurs quantiques.

Les atouts clés d'Hyperion-1, le nouvel émulateur de Qubit Pharmaceuticals

- Simulations révolutionnaires : Hyperion-1 est capable de réaliser en production des simulations convergées de 40 qubits (et plus) sans aucune erreur ni bruit, définissant de nouveaux standards de précision dans la recherche quantique.
- Capacité de traitement massivement parallèle : grâce à son émulation d'un ordinateur quantique sur une architecture classique accélérée par des GPUs⁽¹⁾, Hyperion-1 offre une précision exceptionnelle et une capacité de traitement massivement parallèle capable de concentrer la puissance de calcul classique.
- Performances exceptionnelles : Hyperion-1 a démontré des performances exceptionnelles en simulant très rapidement des circuits quantiques complexes jusqu'à 40 qubits tout en utilisant des ressources de calcul modérées, i.e. 16 nœuds Jean Zay chacun accéléré par 8 GPU NVIDIA A100 80GB. Cette vitesse accrue permet de converger des simulations de chimie quantique nécessitant des centaines d'itérations des algorithmes.
- Technologie avancée : doté d'un code interne optimisé s'appuyant sur une librairie mathématique propriétaire et agnostique, i.e. pouvant utiliser tout type de supercalculateur, Hyperion-1 utilise une accélération parallèle via MPI et exploite pleinement les nouvelles générations de nœuds accélérés NVIDIA DGX-A100 pour une performance accrue.

L'émulation quantique d'Hyperion ouvre des perspectives sur la technologie de demain

Dans le paysage évolutif de l'informatique quantique, un fossé critique persiste entre les machines dotées d'un nombre limité de qubits parfaits et celles qui possèdent de nombreux qubits mais qui sont chargées d'erreurs (de bruit et d'instabilité). Hyperion-1, avec la vitesse et l'exactitude des calculs qu'il permet, témoigne des immenses possibilités qui se profilent. Ses capacités démontrent ce qui sera possible dans le paysage plus large de l'émulation et l'informatique quantiques. Qubit Pharmaceuticals est fière du potentiel d'Hyperion, non seulement en tant qu'outil propriétaire, mais aussi en tant que symbole d'une émulation parfaite, favorisant une nouvelle ère d'innovation technologique dont les répercussions seront considérables sur des secteurs tels que l'industrie pharmaceutique, la finance, le cryptage et bien d'autres encore.

Robert Marino, PDG de Qubit Pharmaceuticals, déclare : « *Ces calculs de chimie quantique sur 40 qubits exacts dépassent de loin les performances réalisées à ce jour en Europe et placent Qubit Pharmaceuticals au niveau des meilleurs géants américains de la tech. Cette percée nous permet de réaliser en quelques heures des calculs qui prennent plusieurs mois traditionnellement.* »

Jean-Philip Piquemal, professeur à Sorbonne Université et directeur du Laboratoire de Chimie Théorique (Sorbonne Université/CNRS), co-fondateur et directeur scientifique de Qubit Pharmaceuticals, déclare : « *Hyperion-1 permet de simuler les états quantiques tout en bénéficiant de la stabilité des ordinateurs classiques, évitant ainsi les erreurs inhérentes aux ordinateurs quantiques disponibles aujourd’hui. Grâce aux GPUs de nos machines et de l’infrastructure du GENCI, nous sommes en mesure de développer et valider de nouveaux algorithmes quantiques appliqués à la découverte de médicaments ; un domaine de recherche avec une vraie utilité publique.* »

Élisabeth Angel-Perez, vice-présidente Recherche et innovation de Sorbonne Université : « *Sorbonne Université, c’est une communauté de talents, et c’est aussi un engagement : l’engagement d’accompagner l’innovation issue de la recherche française. Et c’est parce que nous nous sommes donné les moyens nécessaires pour développer un écosystème de transfert d’expertise et d’innovation que nous avons pu accompagner, et soutenir, de véritables pépites telles que Qubit Pharmaceuticals. La science doit être au service de la société et de son mieux-être. C’est la dynamique que nous soutenons aux côtés des chercheurs et chercheuses qui font la richesse de Sorbonne Université.* »

⁽¹⁾ GPU= Graphics Processing Unit

⁽²⁾ Louis Lagardère (Sorbonne Université et CNRS), Matthieu Montes (CNAM), Jean-Philip Piquemal (Sorbonne Université et CNRS), Jay Ponder (Washington University in St Louis), Pengyu Ren (University of Texas at Austin).

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. Fruit de l’essaimage des travaux de recherches de cinq scientifiques de renommées internationales - Louis Lagardère (Sorbonne Université et CNRS), Matthieu Montes (CNAM), Jean-Philip Piquemal (Sorbonne Université et CNRS), Jay Ponder (Washington University in St Louis), Pengyu Ren (University of Texas at Austin) -, Qubit Pharmaceuticals s’appuie sur sa plateforme Atlas pour découvrir de nouveaux médicaments grâce à la simulation et la modélisation moléculaire accélérée par le calcul hybride HPC et quantique. L’équipe pluridisciplinaire, dirigée par le PDG Robert Marino, 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 pour rejoindre une équipe ambitieuse, visitez le site www.qubit-pharmaceuticals.com

À propos de Sorbonne Université

Sorbonne Université est une université pluridisciplinaire de recherche intensive de rang mondial couvrant les champs disciplinaires des lettres et humanités, de la santé, et des sciences et ingénierie. Ancrée au coeur de Paris et présente en région, Sorbonne Université compte 55 000 étudiants, 7 300 personnels d’enseignement et de recherche, et plus d’une centaine de laboratoires. Aux côtés de ses partenaires de l’Alliance Sorbonne Université, et via ses instituts et initiatives pluridisciplinaires, elle conduit et programme des activités de recherche et de formation afin de renforcer sa contribution collective aux défis de trois grandes transitions : approche globale de la santé (One Health), ressources pour une planète durable (One Earth), sociétés, langues et cultures en mutation (One Humanity). Sorbonne Université est également membre de l’Alliance 4EU+, un modèle novateur d’université européenne qui développe des partenariats stratégiques internationaux et promeut l’ouverture de sa communauté sur le reste du monde.

<https://www.sorbonne-universite.fr>

@ServicePresseSU

À propos de GENCI

Créé par les pouvoirs publics en 2007, GENCI est une grande infrastructure de recherche publique qui vise à démocratiser l'usage de la simulation numérique par le calcul haute performance associé à l'utilisation de l'intelligence artificielle, et maintenant de l'informatique quantique, pour soutenir la compétitivité scientifique et industrielle française.

GENCI est chargé de trois missions :

- Mettre en œuvre la stratégie nationale de mise à disposition de moyens de calcul haute performance, de stockage et de traitement de données massives associées aux technologies de l'IA au profit de la recherche scientifique ouverte française en lien avec les trois centres de calcul nationaux.
- Soutenir la création d'un écosystème HPC intégré au niveau national et européen.
- Promouvoir la simulation numérique par le calcul intensif à l'échelle de la recherche académique et de l'industrie.

GENCI est une société civile, détenue à 49% par le gouvernement français, représenté par le ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, à 20% par le CEA, à 20% par le CNRS, à 10% par les Universités représentées par France Université et à 1% par Inria.

Contacts presse

Qubit Pharmaceuticals

Nicolas Daniels – ndaniels@ulyse-communication.com – +33 (0)6.66.59.22.63

Charles Courbet – ccourbet@ulyse-communication.com - + 33 (0)6.28.93.03.06

Sorbonne Université

Marion Valzy - marion.valzy@sorbonne-universite.fr - +33 (0)6 14 02 20 51

Claire de Thoisy-Méchin - claire.de_thoisy-mechin@sorbonne-universite.fr –

+33 (0)1 44 27 23 34 / +33 (0)6 74 03 40 19