



NovAliX et Chemical.AI s'associent pour développer des outils d'intelligence artificielle pour la découverte de nouveaux médicaments

Le partenariat vise à accélérer le développement des outils de planification de synthèse (Computer-Aided Synthesis Planning – CASP) désormais pilotés par IA

Strasbourg, France, et Wuhan, Chine, le 25 janvier 2021 - NovAliX, société de recherche sous contrat (CRO) spécialisée dans la recherche et le développement de médicaments, et Chemical.AI, une société d'intelligence artificielle (IA) associant expertise humaine et technologie de pointe en IA pour les industries chimique et pharmaceutique, annoncent aujourd'hui un partenariat stratégique dans le domaine de l'intelligence artificielle appliquée à la découverte de nouveaux médicaments. Dans les années à venir, cette collaboration dynamique entre une CRO européenne de premier plan et une société d'intelligence artificielle en pleine croissance permettra de créer des solutions d'IA qui répondent aux demandes des entreprises travaillant sur les médicaments de demain.

NovAliX dispose de 20 ans d'expérience et de savoir-faire dans le domaine de la recherche pharmaceutique. En combinant cette expertise avec l'approche innovante de Chemical.AI en matière d'intelligence artificielle, les partenaires développeront conjointement des outils d'IA pour la découverte de nouveaux médicaments. Cette boîte à outils sera intégrée aux services de NovAliX et une version sera commercialisée par Chemical.AI.

Grâce à cet accord, NovAliX aura un accès privilégié aux outils IA enrichis et personnalisés. De son côté, Chemical.AI pourra s'appuyer sur les chercheurs expérimentés de NovAliX et sur ses données propriétaires uniques et de grande qualité pour développer des outils d'IA toujours plus pertinents. Le premier programme conjoint vise à améliorer le système de planification de synthèse assistée par ordinateur (CASP - Computer-Aided Synthesis Planning) de Chemical.AI, afin d'être à la pointe dans le domaine de la rétrosynthèse prédictive de nouvelle génération.

Le CASP est un domaine de recherche prometteur, qui peut avoir un impact majeur sur l'industrie pharmaceutique et celle de la chimie fine, en réduisant considérablement les taux d'attrition en chimie de synthèse et en augmentant l'efficacité et la productivité. Il accélère le processus par lequel les chimistes décident comment synthétiser des petites molécules. Dans le programme CASP idéal, en s'appuyant sur une structure moléculaire, on peut extraire une liste organisée de schémas de réaction détaillés, chacun reliant une cible à des matières premières disponibles via une série d'étapes de réactions chimiques faciles à réaliser.

« Nous sommes ravis de collaborer avec Chemical.AI, c'est un moment décisif pour nous », déclare Denis Zeyer, PhD, PDG de NovAliX. « Par le biais de cette collaboration, NovAliX et Chemical.AI ont pu lancer un programme de recherche visant à démontrer les performances du système CASP de Chemical.AI. Grâce à ce travail d'équipe, les clients de NovAliX bénéficieront de solutions d'IA de pointe pour leurs projets de recherche. La version la plus avancée du CASP de Chemical.AI est d'ores et déjà utilisée par les chimistes de NovAliX dans le cadre de nos services de découverte et de recherche sur les procédés. »



« La décision de collaborer avec NovAliX était une évidence pour nous », déclare Ning Xia, PhD, dirigeant fondateur de Chemical.AI. « D'une part, nous voulions faire équipe avec des scientifiques qui ont besoin de résoudre des questions de synthèses très complexes. D'autre part, nous souhaitions être reconnus par des chercheurs qui touchent à tout le spectre préclinique en drug discovery, et travaillent notamment sur des projets visant à améliorer les solutions d'IA pertinentes pour l'industrie pharmaceutique. »

Ce partenariat répond à la demande croissante de l'industrie pharmaceutique. Le marché mondial de l'intelligence artificielle appliquée à la découverte de nouveaux médicaments était évalué à 473,4 millions de dollars (395,3 millions d'euros) en 2019 et devrait suivre un taux de croissance annuel ([CAGR – annual growth rate](#)) de 28,8% de 2020 à 2027. On constate aujourd'hui que de nombreuses sociétés pharmaceutiques et de biotechnologie adoptent l'intelligence artificielle et le big data pour accélérer la découverte et le développement de médicaments.

A propos de Chemical.AI

Chemical.AI est une société d'intelligence artificielle mêlant expertise humaine et technologie d'IA. L'entreprise permet aux chimistes d'accélérer leur innovation et ainsi contribue à façonner l'avenir de la chimie. Chemical.AI a développé une plateforme personnalisable pour déterminer des voies de synthèse en quelques minutes. Basée sur des technologies d'apprentissage automatique et de traitement avancé de données, la conception de voies de synthèse assistée par ordinateur suscite beaucoup d'attention dans le domaine de la recherche, et devient un outil pratique pour les chimistes. Le système de Chemical.AI est conçu, utilisé et testé par des chimistes. Il présente entre autres caractéristiques : (i) la prédiction de la voie de synthèse des molécules non déclarées, (ii) la découverte de nouvelles voies pour les molécules rapportées, (iii) le tri ou le filtrage des voies par coût, étapes, « green score », etc. (iv) la génération de plusieurs voies de synthèse en un seul clic, (v) la découverte des conditions plus adaptables pour la réaction d'un client, (vi) potentiellement l'intégration des données ELN (Electronic Lab Notebook) des clients pour fournir des procédures de réaction et (vii) l'installation sur un serveur local pour plus de sécurité. Chemical.AI compte parmi ses clients des CRO de premier plan et des multinationales pharmaceutiques, et les retours clients montrent que Chemical.AI fournit l'une des meilleures solutions CASP du secteur.

www.chemical.ai

A propos de NovAliX

NovAliX est une société de recherche sous contrat créée en 2002 et basée à Strasbourg. Elle emploie 170 collaborateurs, avec des capacités combinant la chimie et la biophysique, offrant à ses clients des prestations étendues, ainsi que des modes collaboratifs originaux, dans le cadre de programmes de recherche consacrés à la découverte de nouveaux médicaments. Elle a pour ambition de poursuivre son développement à la fois en renforçant son internationalisation ainsi qu'en étendant et en intégrant à son socle d'expertises et de technologies de nouvelles capacités indispensables au succès des projets de recherche thérapeutique de ses clients.

<http://www.novalix.com>

Contact presse et analystes
Andrew Lloyd & Associates
Juliette Schmitt – Emilie Chouinard
juliette@ala.com / emilie@ala.com
Tel: +33 1 56 54 07 00
@ALA_Group
