



Le calcul quantique dans l'industrie pharmaceutique

Dans un nouvel épisode de rentrée des podcasts **Decode Quantum**, Fanny Bouton et moi-même recevions Jean-Philip Piquemal. Il suivait le **Decode Quantum** enregistré avec **Marc Porcheron** d'EDF. Ce qui nous fait deux intervenants de suite sur la thématique des logiciels quantiques.

Jean-Philip Piquemal dirige le laboratoire de chimie théorique du CNRS et de Sorbonne Université à Jussieu, où il enseigne également comme professeur attiré. Il a une formation en chimie quantique de cette même université avec une thèse réalisée en 2004. Il a ensuite fait un post-doc au **NIH** (National Health Institute) aux USA. Il enseigne aussi à l'Université d'Austin au Texas.



Il s'est spécialisé dans le domaine de la chimie computationnelle et notamment sur les techniques de simulation chimique sur supercalculateurs et ordinateurs quantiques. Il a notamment participé au développement de **Tinker-HP**, une version massivement parallèle du framework de simulation chimique Tinker, spécialisé dans la simulation de l'électrostatique des molécules. Enfin, il est aussi cofondateur et directeur scientifique de la startup **Qubit Pharmaceuticals**, l'un des rares éditeurs de logiciels quantiques en France, lancée début 2020.

Dans ce podcast, Jean-Philip évoque :

- Son background et sa **thèse de doctorat Evaluation des interactions moléculaires dans des complexes bioinorganiques : du calcul ab initio au potentiel polarisable** soutenue en 2004.
- Il définit le vaste champ de la **chimie computationnelle** et ses usages dans la santé et les biotechs. Cela permet de bien différencier la chimie quantique (qui définit les règles d'organisation des atomes dans les molécules et les interactions entre molécules) du calcul quantique dans la chimie (qui permet de simuler ces règles avec des ordinateurs quantiques) avec entre les deux, la possibilité de réaliser des simulations numériques de chimie quantique dans des ordinateurs traditionnels (toutefois très puissants).

- Il différencie le **recyclage thérapeutique**, la création de thérapies, la simulation 3D de virus, le vaste champ du repliement de protéines, le docking (comment les molécules se relient entre elles).
- Ce que fait la startup **Qubit Pharmaceuticals** exactement aujourd’hui avec les notions de calcul classique *quantum inspired* et de calcul hybride.
- Comment se positionnent les usages respectifs du **quantum annealing**, des **simulateurs quantiques** et des **ordinateurs à portes quantiques**.
- Il explique l’origine **franco-américaine** de Qubit Pharmaceuticals et il décrit son modèle économique plutôt orienté vers la création de solutions directes plus que la vente de logiciels de simulation chimique. C’est un modèle plutôt résilient qui permet de ne pas être trop dépendant de l’arrivée d’ordinateurs quantiques présentant un avantage quantique par rapport aux calculateurs traditionnels.
- Il décrit la manière dont il gère son rôle cumulé d’**enseignant**, de directeur de laboratoire de recherche et de directeur scientifique d’une startup, tout ça à la fois.
- Il évoque aussi les recrutements en cours dans sa startup. Avis aux amateurs !

Le prochain épisode nous fera replonger dans la physique quantique avec **Frédéric Grosshans**, du CNRS LIP6.

Mais avant ça, ce sera la publication ‘mondiale’ de **Understanding Quantum Technologies**, le 27 septembre 2021 (800 pages), le livre (gratuit, numérique) qui essaye de répondre à toutes les questions, ou presque.

Cet article a été publié le 23 septembre 2021 et édité en PDF le 20 mars 2024.
(cc) Olivier Ezratty – “Opinions Libres” – <https://www.oezratty.net>