

Bristol Myers Squibb закупает систему ИИ от Nvidia для разработки лекарств

Источник: AI News Healthcare

Дата публикации: 2026-07

Оригинал: <https://www.artificialintelligence-news.com/news/bristol-myers-squibb-nvidia-ai-system-drug-discovery/>

drug discovery

биотехнологии

инфраструктура

обучение моделей

фармацевтика

Bristol Myers Squibb приобретает **Nvidia DGX SuperPOD**, построенный на архитектуре чипов **Vera Rubin**, для поддержки использования искусственного интеллекта (ИИ) во всех операциях по поиску и разработке лекарственных препаратов.

Фармацевтическая компания заявила, что станет первой группой в сфере наук о жизни, которая приобретет **DGX SuperPOD** на базе **Vera Rubin**. Nvidia представила эту архитектуру в начале этого года как преемницу своего текущего поколения вычислительных систем для ИИ.

Расширение вычислительных мощностей

Новый кластер будет состоять из восьми систем **DGX Vera Rubin NVL72**, где каждая стоечная система объединяет центральные процессоры **Nvidia Vera** и графические процессоры **Rubin**.

BMS будет использовать эту инфраструктуру для обучения проприетарных моделей и запуска прогнозов в рамках своих исследовательских программ. Система будет поддерживать работу с соединениями, белками и другими научными данными.

Финансовые условия сделки не разглашаются. Данная покупка расширяет существующую инфраструктуру BMS от Nvidia, которая включает более старый **SuperPOD**, который руководители компании описали как отстающий от **Vera Rubin** на две или три генерации.

BMS эксплуатирует свой существующий **DGX SuperPOD** около трех лет. Компания планирует объединить его с системой **Vera Rubin** в единую вычислительную среду, доступную из ее исследовательских центров по всему миру.

Программный стек **SuperPOD** позволяет планировать рабочие нагрузки по обучению, прогнозированию и разработке в рамках всей инфраструктуры. В BMS заявили, что расширенная среда обеспечит большему количеству ученых прямой доступ к вычислительным ресурсам.

Грег Майерс, директор по цифровым технологиям и технологиям (CDTO) в BMS, отметил, что требования к вычислениям возросли по мере того, как компания внедряет более крупные модели ИИ в своей исследовательской организации.

Эрин Дэвис, вице-президент по анализу исследовательского бизнеса и технологиям в BMS, заявила, что существующая инфраструктура работает на пределе своих возможностей. Она объяснила этот спрос крупномасштабными прогнозами, связанными с большими молекулами, и разработкой внутренних базовых моделей (foundation models).

Дэвис добавила, что новая система не будет ограничена узкой группой исследователей-вычислителей. BMS планирует сделать ее доступной для всей исследовательской организации без периодов ожидания и ограничений доступа, характерных для ее текущей инфраструктуры.

Применение ИИ в поиске лекарств

В BMS отметили, что ИИ определяет дизайн каждой программы по поиску малых молекул и большинства программ по поиску больших молекул. Технология применяется для идентификации мишеней, оптимизации соединений-лидеров, прогнозирования свойств больших молекул и разработки внутренних моделей.

Компания сообщила, что идентификация мишеней с помощью ИИ сократила объем некоторых ручных исследовательских работ на несколько недель. Рабочие нагрузки по прогнозированию больших молекул также способствуют росту спроса на дополнительные мощности графических процессоров.

Роберт Плендж, главный исследователь BMS, сказал, что новая система позволит ученым оценивать больше потенциальных кандидатов в лекарственные препараты на ранних стадиях разработки.

«Возможно, раньше мы могли обработать 10 вариантов, а теперь сможем — десятки», — сказал Плендж.

Вычислительный скрининг позволяет исследователям оценивать потенциальные соединения перед отбором небольшой группы для синтеза и лабораторных испытаний.

BMS применяет этот подход с помощью метода, который она называет «Predict First» («Сначала прогнозируй»), использующего сгенерированные моделями прогнозы для исключения молекул, не соответствующих требуемым свойствам, еще до того, как кандидаты будут отобраны для синтеза.

Паял Шет, старший вице-президент по наукам о терапевтических открытиях в BMS, отметила, что исследователи используют прогнозы для идентификации молекул с необходимым сочетанием свойств.

«Мы используем прогнозы как способ приоритизации синтеза молекул с многопараметрической оптимизацией», — сказала Шет. «Это гарантирует, что драгоценные лабораторные эксперименты будут направлены на продвижение молекул с наивысшей вероятностью успеха».

Этот метод сужает количество соединений, отправляемых на лабораторные испытания, позволяя исследователям сосредоточить эксперименты на молекулах, соответствующих прогнозируемым требованиям программы.

BMS также использует ИИ для расширения своей библиотеки соединений **CELMoD**, которые разработаны для селективной деградации вызывающих рак белков. Компания изучает эти соединения при лечении рака крови и других заболеваний.

В BMS заявили, что работа по моделированию помогла исследователям изучить дополнительные белковые мишени и потенциальные соединения перед принятием решения о том, какие кандидаты следует изучать экспериментально.

Компания также использует инструменты ИИ, чтобы сократить время, необходимое для производства лекарств для клинических исследований. Плендж сообщил, что этот процесс уже сократился на 20–30% и может достичь 50% в ближайшие годы.

В качестве примера исследований с поддержкой ИИ он привел экспериментальный метод лечения серповидноклеточной анемии на ранней стадии клинической разработки. Плендж заявил, что без инструментов ИИ компании это лечение, вероятно, не было бы обнаружено.

Указанные цифры относятся к времени, необходимому для идентификации и производства кандидатов для клинических испытаний, а не к их последующей эффективности в ходе испытаний.

Система **Vera Rubin** также предоставит исследователям доступ к инструментарию **Nvidia BioNeMo Agent Toolkit** для биологических приложений и поиска лекарств.

BioNeMo предоставляет инструменты для прогнозирования структуры белков, генерации молекул, молекулярного докинга, анализа последовательностей и геномики. Он также может объединять несколько вычислительных инструментов в рамках одного исследовательского процесса.

Руководители BMS подчеркнули, что ученые-люди продолжают проверять результаты работы моделей и принимать решения о том, какие соединения или программы должны продвигаться дальше.

Объединение исследовательских центров

BMS внедряет инструменты, предназначенные для снижения уровня специализированных знаний, необходимых для запуска сложных вычислительных задач. Компания заявила, что исследователи смогут запускать некоторые запросы на прогнозирование, используя инструкции на естественном языке.

Согласно данным BMS, среда будет управляться через **Nvidia Mission Control**, функции которой включают подготовку кластеров, мониторинг инфраструктуры и управление рабочими нагрузками.

Единая инфраструктура позволит использовать данные и результаты моделей, созданные в одном центре, командами в других местах. В BMS отметили, что, например, наборы данных из программы в Лоуренсвилле, штат Нью-Джерси, могут быть включены в модели, используемые исследователями в Сан-Диего.

Шет добавила, что общая среда предназначена для сохранения информации об экспериментах и исследовательских программах по всей организации.

«Вычислительная инфраструктура — это то, что связывает всех наших ученых воедино и гарантирует, что наши знания становятся институциональными», — сказала Шет.

Два **SuperPOD** будут работать через общую среду данных, позволяя командам в разных локациях получать доступ к общим наборам данных и результатам моделей. В BMS заявили, что среда будет включать информацию об экспериментах, клинических данных и исследовательских партнерствах.

Компания планирует распределить новые вычислительные мощности между проектированием малых и больших молекул, клиническими исследованиями и приложениями цифровых двойников (digital twins). BMS не предоставила подробностей о планируемой работе с цифровыми двойниками или объеме мощностей, выделяемых на каждую область.

Майерс отметил, что система **Vera Rubin** обеспечит большую вычислительную мощность относительно потребляемой электроэнергии. BMS и Nvidia заявили, что кластер из восьми систем обеспечит производительность в 10 раз выше на мегаватт по сравнению с инфраструктурой, которую он заменяет.

«Когда вы размещаете такие системы, вам приходится платить за электричество», — сказал Майерс. «Думайте об этом как о десятикратном увеличении вычислительной мощности на каждый затраченный ватт... Электричество не становится дешевле».

BMS не назвала конкретную дату развертывания и не уточнила, где именно будет размещена новая система.

Перевод выполнен: 21.07.2026 | ai4med.ru

Машинный перевод. Рекомендуем сверять с оригиналом при клиническом использовании.