

Objectif... décarbonation !
Entalpic et Centrale Lille Institut, partenaires pour accélérer la
découverte de nouveaux catalyseurs grâce à l'IA

La société Entalpic, basée à Paris, est une jeune pousse de R&D en chimie et matériaux portée par l'intelligence artificielle. En signant il y a quelques semaines un partenariat stratégique avec Centrale Lille Institut, elle accède à la plateforme de criblage haut débit REALCAT et donne une nouvelle dimension à ses ambitions. Objectif partagé par les deux partenaires : accélérer la découverte de nouveaux catalyseurs grâce à l'IA !

Une startup à la croisée de la chimie et de l'intelligence artificielle

Entalpic est née en 2024 à l'initiative de trois experts français de l'IA et de la science des matériaux : Mathieu GALTIER, Victor SCHMIDT et Alexandre DUVAL. Ensemble, ils décident de miser sur l'IA générative pour accélérer la découverte de matériaux et identifier de nouvelles alternatives aux processus polluants, au service d'une chimie industrielle plus durable et plus efficace.

« Nous concevons des nouveaux matériaux et catalyseurs capables d'optimiser des réactions chimiques critiques, pour une réduction significative des émissions de CO₂ », explique M. GALTIER, président d'Entalpic. L'objectif est clair : améliorer les procédés existants - stockage d'énergie, production d'engrais verts, synthèse de polymères, contrôle de pollution...- via des catalyseurs plus performants pour « décarboner la chimie industrielle ».

Technologie clé de l'entreprise, sa plateforme propriétaire d'IA générative modélise les matériaux à l'échelle atomique. Grâce à de puissants algorithmes (Graph Neural Networks, GFlowNets, LLM, Active Learning...), elle intègre données de simulation quantique, résultats expérimentaux, littérature et brevets pour générer et tester rapidement de nouveaux candidats matériaux, ou catalyseurs répondant à des propriétés et contraintes spécifiques. Là où les cycles de R&D traditionnels nécessitent de nombreuses années, la startup ambitionne de ramener ces délais à plusieurs mois

Forte d'une R&D très active, Entalpic a levé 8,5 M€ début 2024 pour renforcer ses outils et recruter une équipe solide : une vingtaine d'experts, ingénieurs et chercheurs en chimie des matériaux, physique et *machine learning*. L'entreprise a par ailleurs déjà une présence au Canada via le Mila, et des projets d'extension aux États-Unis et en Asie.

Une rencontre décisive autour de la catalyse et la data

C'est lors du Congrès mondial de la catalyse ICC2024, à Lyon, que le dialogue s'est noué entre Mathieu GALTIER, CEO d'Entalpic, et Sébastien PAUL, professeur à Centrale Lille Institut et chercheur à l'Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS, UMR 8181). Spécialiste reconnu en chimie catalytique, ce dernier pilote depuis plus de dix ans une infrastructure unique au monde, dédiée au criblage haut débit de catalyseurs : REALCAT.

« Traditionnellement, la recherche de nouvelles espèces catalytiques repose sur un système d'essais/erreurs très chronophage, qui ne permet d'explorer qu'un éventail limité de possibilités », explique t-il. « REALCAT repose sur une idée révolutionnaire : multiplier les expériences catalytiques en parallèle ou en séquentiel grâce à la robotisation. Notre équipe s'intéresse par ailleurs depuis plusieurs années à l'impact de l'IA sur ces tests à haut débit. Des premières pistes ont été explorées, notamment via une thèse et des collaborations avec des chercheurs en informatique et mathématiques du laboratoire CRISTAL et de l'INRIA... »

Avec REALCAT, la découverte ou l'optimisation des procédés catalytiques passe ainsi de plusieurs années à quelques semaines, tout en garantissant une excellente fiabilité et reproductibilité des résultats obtenus.

« En parallèle, les progrès récents en chimie théorique computationnelle ont généré de vastes bases de données - souvent *open source* - utilisées pour entraîner des modèles algorithmiques prédictifs. Mais ces données manquent de robustesse, car issues de simulations numériques ou de littérature scientifique, sans validation expérimentale standardisée », précise Sébastien PAUL.

La collaboration entre Entalpic et Centrale Lille Institut répond à ces besoins croisés : pour Sébastien PAUL et son équipe, exploiter à plus grande échelle la plateforme REALCAT et les bases de données issues de la chimie théorique computationnelle ; pour Entalpic, confronter ses modèles IA à l'expérimentation et valider leur performance...

La plateforme REALCAT : innovation lilloise de criblage catalytique

Lauréate du programme Équipeux (Équipements d'Excellence) lancé en 2010, REALCAT a été inaugurée en 2014 avec un financement initial de 8,7 M€ (+ 0,7 M€ de fonds FEDER). C'est une unité de l'Institut Chevreul (IMEC), hébergée à Villeneuve-d'Ascq dans les locaux de Centrale Lille Institut et portée conjointement par l'UCSC, le laboratoire CRISTAL (UMR 9189) et l'Institut Charles Violette (UMR 1158).

« Unique au monde, la plateforme REALCAT couvre à la fois la catalyse chimique (homogène et hétérogène) et la biocatalyse, mais aussi des concepts pionniers tels que la catalyse hybride (couplage biocatalyse/chimie) et la catalyse digitale », rappelle son coordinateur.

En dix ans d'activité, plus de 400 projets académiques et industriels ont été menés - dont 60 % au profit des entreprises. Des PME innovantes aux grands groupes, la plateforme est ouverte à tous, pour faire émerger des procédés catalytiques plus performants et respectueux de l'environnement.

L'enjeu dépasse en effet largement le cadre académique : la catalyse est au cœur de la quasi-totalité des procédés chimiques industriels — de la synthèse pharmaceutique à la chimie des polymères, en passant par les procédés de dépollution et la production d'énergie. « Huit objets du quotidien sur dix sont produits grâce à la catalyse », souligne Sébastien PAUL. L'innovation dans ce domaine constitue donc un levier majeur de réduction des émissions de CO₂.

REALTALPIC, la force de l'expertise croisée entre chimie théorique et expérimentale, catalyse, IA et traitement de données

Le partenariat entre Entalpic et Centrale Lille Institut est programmé sur 18 mois. Baptisé REALTALPIC, il incarne la rencontre entre la puissance de l'expérimentation haut débit et les capacités prédictives de l'IA générative.

« En combinant nos expertises en chimie, catalyse et data, nous allons pouvoir développer un algorithme capable de programmer nos robots et d'automatiser le traitement des larges volumes de données issues de nos essais », explique Sébastien PAUL.

La collaboration vise à intégrer directement les modèles d'IA développés par Entalpic, dans les workflows expérimentaux de la plateforme REALCAT, en combinant par exemple synthèse à haut débit, tests parallèles, collecte et annotation automatisées des données ainsi que modélisation prédictive, assistés par l'IA.

Objectif : identifier très rapidement *in silico* le bon catalyseur pour une réaction donnée et en optimiser les conditions de fonctionnement. « Nous sommes convaincus que la modélisation de la matière à l'échelle atomique rendue possible par nos algorithmes d'IA va provoquer un changement majeur en catalyse », souligne le Dr Alexandre DUVAL, directeur scientifique et cofondateur d'Entalpic. « Grâce au criblage haut débit de REALCAT, nous entendons



laboratoire REALCAT - © Cyril FRESILON – CNRS

accélérer l'invention de catalyseurs pour les réactions critiques du monde de demain, là où la nécessité d'innovation est la plus urgente face au changement climatique. »

Les premiers tests menés dans le cadre du projet REALTALPIC portent sur une réaction catalytique modèle, servant de base à un futur *Proof of Concept*. Si les résultats sont concluants, le projet pourra s'étendre à un nombre virtuellement illimité de transformations chimiques critiques. A terme, ces méthodologies seront proposées aux industriels sous forme d'offres de services pour les accompagner dans la décarbonation de leurs procédés.

Centrale Lille Institut, institut d'excellence

Fort d'une histoire de plus de 170 ans, Centrale Lille Institut est issu de la fusion récente de l'École Centrale de Lille (ingénieur généraliste), l'ITEEM (ingénieur manager entrepreneur), l'IG2I (ingénieur pour les systèmes d'informations et les systèmes industriels innovants) et depuis 2020, l'ENSCL (ingénieur chimiste).

Centrale Lille Institut, ce sont donc quatre écoles d'ingénieurs lilloises réunies, mais aussi 16 parcours de masters, 3 doctorats, 7 laboratoires de recherche et 2 laboratoires internationaux associés. Au total, chaque année, plus de 2 200 étudiants - dont 150 doctorants - y sont formés, aux côtés de près de 400 enseignants-chercheurs et personnels techniques

Ancré au cœur de l'écosystème scientifique de Centrale Lille Institut, le partenariat REALTALPIC dépasse la simple collaboration entre une grande école et une jeune pousse technologique. Il illustre la convergence féconde entre IA, criblage haut débit et chimie durable, dans un contexte où les défis industriels et climatiques imposent d'innover autrement.

Pour en savoir plus :
Entalpic : www.entalpic.ai
REALCAT : www.realcat.fr

S. DENIS
© La Gazette du Laboratoire

GEN GAZ

générateurs de gaz pur

Une gamme complète de générateurs d'hydrogène, air et azote



PLINIUS

CLAIRO N30-H1

GÉNÉRATEURS D'AZOTE:

Jusque 80 NI/min avec compresseur intégré



H PLUS

Hydrogène

Azote

Air Zéro

Compresseur

GÉNÉRATEURS D'HYDROGENE:

Ultra haute pureté
Sécurité absolue

FORUM LABO LYON

Stand F54
10 - 11 Mars 2026
Centre des Congrès de Lyon



GET YOUR FREE GIFT!