

# THESE DE DOCTORAT

NANTES UNIVERSITE

ECOLE DOCTORALE N° 596

*Matière, Molécules, Matériaux et Géosciences*

Spécialité : Chimie Physique, Chimie Théorique

Par

**Aravind SENTHIL VEL**

## **Développement et analyse d'algorithmes pour l'optimisation de réactions chimiques**

Avec un accent sur les variables mixtes et les problèmes multi-objectifs

Thèse présentée et soutenue à Nantes, le 23 mai 2025

Unité de recherche : CEISAM UMR CNRS 6230 de Nantes Université, France

### **Rapporteurs avant soutenance :**

Richard BOURNE	Professeur, Université de Leeds
Laurence GRIMAUD	Directeur de recherche, CNRS, ENS Paris

### **Composition du Jury :**

Président :	Prénom Nom	Fonction et établissement d'exercice (8)
Examineurs :	Richard BOURNE Laurence GRIMAUD Céline HELBERT Jean-Nicolas DUMEZ	Professeur, Université de Leeds Directeur de recherche, CNRS, ENS Paris Maître de Conférence HDR, Ecole Centrale de Lyon Directeur de recherche, CNRS, Nantes Université
Dir. de thèse :	François-Xavier FELPIN	Professeur, Nantes Université

### **Invité**

Daniel CORTES-BORDA      Ingénieur chimiste, Improcess Technology & Consulting Group, S.L.

---

**Titre:** Développement et analyse d'algorithmes pour l'optimisation de réactions chimiques

.....

**Mots clés :** optimisation de réactions, optimisation bayésienne, variables catégorielles, optimisation multi-objectif

**Résumé :** Ces dernières années, les procédés de synthèse ont connu une transformation majeure avec l'apport de nouvelles technologies. L'étape clé d'optimisation de réactions, traditionnellement réalisée par les chimistes sur la base de leur intuition, est désormais efficacement prise en charge par des algorithmes d'optimisation. Ce changement a d'abord été porté par l'essor des réacteurs auto-optimisants, où l'automatisation a permis d'intégrer concrètement la prise de décision algorithmique. Aujourd'hui, ces algorithmes sont aussi utilisés pour des procédés développés sans automatisation.

La majorité des travaux dans ce domaine se sont concentrés sur les variables continues, en négligeant souvent les variables catégorielles, pourtant essentielles.

De plus, la plupart se sont limités à des problèmes à objectif unique, alors que l'optimisation multi-objectif est souvent nécessaire en synthèse chimique.

Cette tendance s'explique par la difficulté des problèmes de type "boîte noire", coûteux à évaluer. Cette thèse propose de nouvelles approches pour accélérer efficacement l'optimisation, notamment pour les problèmes à variables mixtes, et évalue les méthodes multi-objectifs existantes afin d'identifier les solveurs les plus adaptés.

---

**Title:** Development and Analysis of Algorithms for Chemical Reaction Optimization

.....

**Keywords:** reaction optimization, Bayesian optimization, categorical variables, multi-objective optimization

**Abstract:** In recent years, the way chemicals are developed has been undergoing a significant transformation. The critical step of reaction optimization, which was traditionally carried out by chemists relying on intuition, is now being efficiently addressed using optimization algorithms. This shift was initially enabled by the rise of self-optimizing reactors, where automation made algorithmic decision-making practical. However, these algorithms are now also being used for processes developed without automation.

Despite this transformation, most existing works that applied algorithms to reaction optimization have primarily focused on continuous variables, often overlooking categorical variables, which are equally important.

Furthermore, most of the existing work has focused solely on single-objective optimization problems, even though optimizing multiple objectives is often crucial in chemical synthesis.

One of the reasons for this trend lies in the inherent challenges of expensive black-box problems. This thesis aims to address these limitations by developing new approaches to efficiently accelerate the optimization process, with a particular focus on mixed-variable problems, specifically for mixed-variable problems. In addition, existing methods for multi-objective optimization are analysed and compared to help identify solvers that are both efficient and suitable for reaction optimization tasks.