



Consortium Industrie Recherche  
pour l'Optimisation et la  
QUantification d'incertitude  
pour les données Onéreuses

**Consortium en mathématiques appliquées CIROQUO**  
**Programme Journées Scientifiques, 13 & 14 Novembre 2025**  
**IFP Energies Nouvelles – 1-4 av du Bois Préau, 92500 Rueil-Malmaison**

**Jeudi 13 Novembre**, amphï Sequoia  
En visio : Rejoindre la réunion Teams

*Café de bienvenue à partir de 8:45*

---

9:15	9:30	F. Delprat-Jannaud (IFPEN), <i>Introduction de la direction scientifique IFPEN.</i>
9:30	9:45	G. Perrin, M. Binois et M. Menz, <i>Informations générales et organisation des journées.</i>
<b>9:45</b>	<b>11:15</b>	<b>Travaux CIROQUO en préparation</b>
9:45	10:15	G. Pierron (IFPEN) & U. Labbé (Michelin), <i>Présentation croisée thèses Ifpen et Michelin-1.</i>
10:15	10:45	P. Lartaud (CEA), <i>Compensation d'erreurs dans les chaînes de simulation.</i>
10:45	11:15	Cyril Vaucoret et Martin Pauthenet (Liebherr), <i>Présentation du cas d'application Liebherr.</i>

---

*Pause*

---

<b>11:30</b>	<b>12:00</b>	<b>Présentation des premiers résultats</b>
11:30	11:45	P. Castéras (CEA), <i>Bayesian calibration with functional outputs with elastic partial matching.</i>
11:45	12:00	L. Calzolari (IFPEN), <i>Space-Filling Designs in a RKHS.</i>
12:00	12:30	<i>Session logiciel.</i>

---

*Pause déjeuner*

---

<b>14:00</b>	<b>15:45</b>	<b>Travaux en lien avec CIROQUO</b>
14:00	14:45	P. Malisani (IFPEN), <i>Robust stochastic optimal control via variance penalization : Application to Energy Management Systems.</i>
14:45	15:30	A. Cousin (IFPEN), <i>Prise en compte des incertitudes dans la modélisation des éoliennes en mer.</i>
15:30	15:45	<i>Présentations des posters.</i>

---

*Pause*

---

16:00	18:00	T. Faney (IFPEN), <i>Atelier Bataille de la Tech.</i>
18:00	19:00	<i>Réunion du COP (accès limité aux membres du COP).</i>

---

**Vendredi 14 Novembre**, amphi Sequoia  
En visio : Rejoindre la réunion Teams

---

<b>9:00</b>	<b>9:45</b>	<b>Présentation des premiers résultats CIROQUO</b>
9:00	9:45	S. Mukhopadyay (Stellantis), <i>Physics-informed Surrogate Modelling for Computational Fluid Dynamics.</i>
<b>9:45</b>	<b>10:45</b>	<b>Présentation d'ouverture</b>
9:45	10:15	S. Jay (IFPEN), <i>Modélisation numérique de la dispersion atmosphérique de polluants.</i>
10:15	10:45	<i>Présentation de la Flair car.</i>
<i>Pause</i>		
11:00	11:45	<i>Session posters.</i>
11:45	12:00	<i>Conclusions des journées.</i>
12:00	14:00	<i>Réunion du COP (accès limité aux membres du COP).</i>

---

# Multitask Gaussian processes for scalable modeling of complex systems with functional inputs

Razak Christophe SABI GNINKOU

## Abstract

We introduce a multitask Gaussian process framework for probabilistic modeling of complex systems with functional covariates. The proposed approach specifically targets scenarios where the input variables represent time-dependent curves but it can be generalized to multivariate functional data such as spatial, spatio-temporal or other high-dimensional signals. Considering functional data as inputs of complex computer codes has recently been considered in many scientific and engineering applications, however modeling correlation between different tasks remained as an open question.

Our model relies on a fully separable kernel architecture that captures dependencies along three complementary dimensions: the task, the functional input, and the scalar (temporal) domain. The latter scalar covariate is considered to take into account time-varying outputs, a parameter required in our mechanical application where outputs represent time-varying forces. This separability naturally induces a Kronecker product formulation of the covariance operator, enabling exact and scalable inference. Closed-form expressions for the marginal likelihood and posterior predictions are derived, while structured tensor algebra ensures numerical efficiency and GPU compatibility.

The proposed framework is validated on both synthetic and real mechanical datasets, demonstrating its ability to deliver accurate predictions and well-calibrated uncertainty estimates at a reduced computational cost. The entire approach is implemented in `PyTorch/GPyTorch`, leveraging optimized tensor operations and GPU acceleration for efficient computation of the marginal likelihood and posterior predictions. This work establishes a general and efficient probabilistic modeling paradigm for high-dimensional functional inputs, applicable to a wide range of domains from computational mechanics to other data-driven complex systems.

**Keywords:** Multitask Gaussian processes; functional data; separable kernels; Kronecker product; surrogate modeling; uncertainty quantification; complex systems.

---

## References

1. Rasmussen, C. E., Williams, C. K. I. (2006). *Gaussian Processes for Machine Learning*. MIT Press, Cambridge, MA.
2. Ramsay, J. O., Silverman, B. W. (2005). *Functional Data Analysis*, 2nd edition. Springer.
3. Bonilla, E. V., Chai, K. M. A., Williams, C. K. I. (2008). *Multi-task Gaussian process prediction*. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, vol. 20, pp. 153–160, Vancouver, Canada.
4. López-Lopera, A. F., Massa, F., Turpin, I., Leconte, N. (2022). *Modeling complex mechanical computer codes with functional input via Gaussian process*. In *XLIII Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE)*.

# Operator Splitting for Large Scale Nonlinear Stochastic Optimal Control

François Caffier<sup>1,2</sup> Paul Malisani<sup>1</sup> Laurent Pfeiffer<sup>2</sup>

<sup>1</sup>IFP Energies nouvelles

<sup>2</sup>Inria Saclay, Laboratoire des Signaux et Systèmes, CentraleSupélec.

**Keywords:** Stochastic Optimization, Large Scale Optimization, Nonconvex Optimization, Aggregative Optimization, Optimal Control, Douglas-Rachford Splitting.

This poster addresses the numerical resolution of an aggregative stochastic optimal control problem, in which agents are subject to a common source of uncertainty represented by a scenario tree.

The problem is motivated by a practical framework for the optimal and coordinated management of a large number of nonlinear energy systems under uncertainty - such as renewable energy production.

The agents' dynamics may be nonlinear, making the problem typically nonconvex. The aim of our work is to adapt optimization splitting methods to develop an efficient numerical procedure for solving this problem. The proposed algorithm relies on decomposition across agents and scenarios, and is well-suited to high-dimensional settings such as the one considered here.

# Processus Gaussiens multi-fidélités pour des sorties bruitées et des plans d'expérience non-emboîtés

## Résumé

Les méta-modèles permettent de fournir des approximations rapides de codes de calcul coûteux tout en conservant une précision raisonnable, à partir de quelques observations du code en question. Dans le cadre multi-fidélité, nous supposons que plusieurs codes de calcul, avec des coûts et des précisions différentes, sont disponibles. Le code haute-fidélité est le plus précis, mais aussi le plus coûteux, alors que le code basse-fidélité est bien plus rapide mais plus approximatif.

Nous proposons un méta-modèle multi-fidélité par processus Gaussiens se basant sur le modèle auto-régressif qui suppose une relation linéaire entre les différents niveaux de fidélité, initialement développé par [1], puis amélioré par [2] à travers la formulation récursive du modèle. Deux hypothèses importantes sont faites dans ces travaux: les sorties sont toutes supposées déterministes, et les plans d'expérience sont "emboîtés", c'est-à-dire qu'au niveau des entrées, chaque point du plan haute-fidélité coïncide avec un point du plan basse-fidélité. Ce cadre permet de simplifier les équations intervenant dans le calcul des prédictions du méta-modèle, ainsi que dans l'optimisation de ses paramètres. Nous souhaitons relâcher ces hypothèses en nous appuyant sur l'approche proposée par [3], qui utilise l'algorithme EM (espérance-maximisation) pour estimer les paramètres lorsque les plans d'expérience sont non-emboîtés mais pour des sorties déterministes. Nous généralisons cette approche au cas des sorties bruitées, et au cas où la fonction multiplicative dans le modèle auto-régressif est un prédicteur linéaire dépendant d'un vecteur de paramètres à estimer, et pas seulement une fonction fixée.

## References

- [1] Marc Kennedy and Anthony O'Hagan. Predicting the output from a complex computer code when fast approximations are available. *Biometrika*, 87, 10 2000.
- [2] Loic Le Gratiet and Josselin Garnier. Recursive co-kriging model for design of computer experiments with multiple levels of fidelity. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 4(5):365–386, 2014.
- [3] Federico Zertuche. *Assessment of uncertainty in computer experiments when working with multifidelity simulators*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, October 2015.

# Approches certifiables pour la prise de décision en ingénierie

M. Temple-Boyer<sup>†,1,2</sup>, G. Perrin<sup>§,2</sup>, V. Chabridon<sup>1</sup>, J. Pelamatti<sup>1</sup>, E. Remy<sup>1</sup>

<sup>†</sup> Doctorante (présentatrice). <sup>§</sup> Directeur de thèse.

Durée prévue de la thèse : Septembre 2024 – Août 2027.

<sup>1</sup> EDF R&D, 6 quai Watier, 78401 Chatou, France

{marie.temple-boyer,vincent.chabridon,julien.pelamatti,emmanuel.remy}@edf.fr

<sup>2</sup> Université Gustave Eiffel, COSYS, 14-20 Boulevard Newton, 77447 Marne-la-Vallée, France

guillaume.perrin@univ-eiffel.fr

L'évaluation de la fiabilité d'un système industriel critique (tels que les systèmes de production d'électricité) repose sur une analyse des incertitudes et, en fin de compte, sur l'estimation d'une *mesure du risque* caractérisant le risque de défaillance du système. Cette estimation peut être obtenue à partir d'un simulateur numérique supposé modéliser le comportement du système dans son environnement. La prise en compte des incertitudes en entrée de ce système se fait à l'aide d'une démarche méthodologique de "traitement des incertitudes" bien établie [2]. Les mesures de risques utilisées correspondent généralement à des probabilités de défaillance ou à des quantiles d'ordre élevé. Néanmoins, une gamme plus large de mesures de risque peut être considérée en pratique. Par exemple, le superquantile [5] et la probabilité de défaillance amortie [3] sont des quantités utilisées dans la quantification des risques en finance, et peuvent s'avérer pertinentes en ingénierie aussi, en partie grâce leurs nombreuses propriétés théoriques intéressantes [1, 5].

Dans ce poster, un critère de décision pratique est proposé, dans l'esprit de [4]. Ce critère permet de garantir, avec un niveau de confiance choisi, que la probabilité de défaillance est bien inférieure à un seuil de sécurité fixé a priori. Sous certaines hypothèses, ce critère est équivalent à un critère sur l'estimateur d'un quantile tel qu'obtenu par la méthode de Wilks [6]. Un des intérêts majeurs de ce critère repose sur ses garanties statistiques non-asymptotiques : les codes de calculs en ingénierie étant très coûteux, seul un nombre raisonnable d'échantillons est souvent disponible. Par ailleurs, l'intérêt des autres mesures de risque (superquantile et probabilité de défaillance amortie) est discuté, à l'aune de leurs propriétés théoriques et de leur possibilité d'estimation.

## Références

- [1] P. Artzner, F. Delbaen, J-M Eber, and D. Heath. Coherent Measures of Risk. *Mathematical Finance*, 9(3) :203–228, 1999.
- [2] E. De Rocquigny, N. Devictor, and S. Tarantola. *Uncertainty in industrial practice : a guide to quantitative uncertainty management*. John Wiley & Sons, 2008.
- [3] A. Mafusalov and S. Uryasev. Buffered Probability of Exceedance : Mathematical Properties and Optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 28(2) :1077–1103, 2018.
- [4] G. Perrin, J. Reygner, and V. Chabridon. Enhancing Reliability Analysis with Limited Observations : A Statistical Framework for System Safety Margins. 2024.
- [5] R.T. Rockafellar and J.O. Royset. Engineering Decisions under Risk Averseness. *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A : Civil Engineering*, 1(2) :04015003, 2015.
- [6] S. S. Wilks. Determination of Sample Sizes for Setting Tolerance Limits. *The Annals of Mathematical Statistics*, 12(1) :91–96, 1941.

# History-aware approaches for time-series analysis

Mouad Yachouti<sup>†,1</sup>, Guillaume Perrin<sup>§,2</sup>, Josselin Garnier<sup>§,1</sup>

<sup>†</sup> PhD student (presenting author).    <sup>§</sup> PhD supervisor

PhD expected duration: Jan. 2024 – Jan. 2027

<sup>1</sup> CMAP, CNRS, École polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, 91120 Palaiseau, France  
`{mouad.yachouti, josselin.garnier}@polytechnique.edu`

<sup>2</sup> COSYS, Université Gustave Eiffel, 14-20 Boulevard Newton, 77447 Marne-la-Vallée, France  
`guillaume.perrin@univ-eiffel.fr`

## Abstract

Vast amount of historical data is collected to monitor complex dynamic systems in different fields, such as physics, biology, finance, manufacturing, etc. There is nowadays a critical need for the explainability of the outcomes of these time varying systems and the assessment of related risks. Several methods from Sensitivity Analysis (SA) and eXplainable AI (XAI) allow to explain time-dependent outputs. However, explaining the latter using both current and past observations remained an understudied problem.

In this work [1], we make a step towards a holistic methodology of time-series sensitivity analysis that aims at clarifying and quantifying the contribution of both instantaneous variables and lag variables to the output. The approach relies on a novel decomposition of the output time-series into multiple interpretable non-correlated components, namely an instantaneous component, lag components, and a residual. While the instantaneous part quantifies the effects of current observations, the lag components allow further analysis by taking into account effects carried by lag observations and that cannot be captured by the former component. We evaluate this methodology on synthetic data and demonstrate its effectiveness in providing insights in real world cases. Finally, we discuss more generally to which extent lag effects are useful for different purposes such as prediction, forecasting and inversion.

## References

- [1] Yachouti, M., Perrin, G., Garnier, J.: Towards History-aware Sensitivity Analysis For Time Series (Apr 2025), <https://hal.science/hal-05031234>, working paper or preprint

# Prediction of physical fields under linear constraints

N. Mahamat Hamdan<sup>†,1,3</sup>, C. Gauchy<sup>1</sup>, P-E. Angeli<sup>2</sup>, S. Da Veiga<sup>§,3</sup>,

<sup>†</sup> PhD student (presenting author).    <sup>§</sup> PhD supervisor

PhD expected duration: Oct. 2024 – Sep. 2027

<sup>1</sup> Université Paris-Saclay, CEA, Service de Génie Logiciel pour la Simulation, France

<sup>2</sup> Université Paris-Saclay, CEA, Service de Thermohydraulique et de Mécaniques des Fluides, France  
 {mahamat-hamdan.nassouradine, clement.gauchy, pierre-emmanuel.angeli}@cea.fr

<sup>3</sup> ENSAI, CREST, F-35000 Rennes, France  
 sebastien.da-veiga@ensai.fr

## Abstract

Metamodeling is a key technique in uncertainty quantification and design optimization, enabling the approximation of expensive simulations to perform a large number of predictions at low computational cost. Simulation outputs are nowadays of high-dimension for exascale numerical simulators, such as spatial fields on meshes with about  $10^5$  vertices or time dependent responses and sometimes involve multiple physical fields that may be subject to linear constraints. Existing techniques, such as Gaussian process regression combined with dimensionality reduction methods like PCA[1], are effective for handling such high-dimensional data. However, they do not always ensure that constraints are satisfied when making predictions. In this work, we propose a two-step approach: first, a joint modeling of multiple spatial fields using multi-output Gaussian processes combined with PCA[2]; second, an extension to account for linear constraints between fields when these constraints are known through prior physical knowledge. The model was initially validated on a population-dynamics problem derived from the Lotka–Volterra equations. In this study, we extend its application to an industrial case by constructing a metamodel for spatial tensor fields generated via CFD under linear physical constraints. We then benchmark our approach against several state-of-the-art spatial-field prediction models to rigorously evaluate both constraint compliance and predictive accuracy.

## Funding

This work has been half funded by the *Agence Nationale de la Recherche* Exa-MA project, under the France 2030 initiative, with reference ANR-22-EXNU-0002.

## References

- [1] Dave Higdon, James Gattiker, Brian Williams, and Maria Rightley. Computer model calibration using high-dimensional output. *Journal of the American Statistical Association*, 103(482):570–583, 2008.
- [2] Shihong Wang, Xueying Zhang, Yichen Meng, and Wei W Xing. E-lmc: Extended linear model of coregionalization for spatial field prediction. In *2022 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pages 1–8. IEEE, 2022.