

## PROPOSITION DE SUJET DE THÈSE - ECOLE DOCTORAL SMI

TITRE : Classification supervisée performante et interprétable via l'optimisation mathématique.

MOTS CLÉS : Optimisation linéaire en variables mixtes, Arbres de décision, Classification supervisée, interprétabilité, Optimisation Combinatoire et Intelligence Artificielle.

CONTEXTE :

Les progrès dans le domaine de la classification supervisée au cours des précédentes décennies ont permis d'obtenir d'excellentes performances dans des applications aussi ardues que la vision par ordinateur, ou le traitement du langage naturel par exemple. Ceci s'explique notamment grâce à l'utilisation de modèles sophistiqués, tels que les réseaux de neurones profonds ou les forêts aléatoires. Ces modèles, très performants pour de nombreuses applications, ont pour inconvénient d'être difficilement *interprétables*. En effet, pendant de nombreuses années, la performance a été privilégiée par rapport à l'interprétabilité qui permet de quantifier dans quelle mesure un humain serait capable de prédire de manière cohérente le résultat d'un modèle [10]. Bien que cette notion soit peu importante dans certains contextes de prédiction (recommandation de films ou de destination de vacances), elle est devenue un critère prépondérant lorsque les modèles sont amenés à prendre des décisions plus "sensibles" (proposition de durées d'emprisonnement, choix de trajectoire d'une voiture, ou bien encore identification de tumeurs, *etc.*). Récemment, de nombreux régulateurs financiers se sont par exemple inquiétés du manque d'interprétabilité des modèles utilisés en finance [1, 6, 2]. Ainsi, les questions cruciales suscitées par la réticence à accepter des décisions basées sur l'IA placent l'interprétabilité des algorithmes comme un critère prépondérant qui devient l'une des mesures clés pour l'évaluation des nouveaux modèles d'IA.

Parmi les méthodes classiques d'apprentissage supervisés, les arbres de classification fournissent un bon compromis entre la précision de la prédiction, et l'interprétabilité du résultat obtenu [8]. Ils sont basés sur un concept simple où les données suivent un chemin dans l'arbre (depuis sa racine jusqu'aux feuilles) dont la structure (branchement) correspond aux règles qui conduisent aux décisions possibles, situées aux extrémités des branches (les feuilles). Ainsi, l'enjeu est de construire la structure de l'arbre, i.e. de définir les règles qui définissent les branchements. Les algorithmes classiques pour construire des arbres de classifications sont en général heuristiques, comme par exemple le populaire CART [7]. Afin d'obtenir des classificateurs à la fois interprétables et performants, de récents travaux portent sur la formulation, via la programmation linéaire en nombres entiers (PLNE), du problème de conception de la structure optimale des arbres de classification [3, 4, 11, 5]. Les limites de ces méthodologies se trouvent dans la taille des instances qu'ils permettent de résoudre. Cependant, les modèles obtenus peuvent être utilisés pour déduire des heuristiques efficaces qui sont capables de passer à l'échelle [9].

DESCRIPTIF DES TRAVAUX :

L'objectif de cette thèse est d'améliorer la qualité de prédiction des arbres de classification par la résolution de programmes mathématiques faisant intervenir des variables entières. Plus précisément, dans les travaux [3, 4, 5, 11], la résolution d'un PLNE fournit un arbre de classification optimal pour des règles de branchements qui sont décrites par des fonctions linéaires. Afin d'améliorer la qualité de prédiction de tels arbres, la contribution théorique de cette thèse portera tout d'abord sur la conception de modèles d'optimisation mathématique où les règles de branchements peuvent être décrites par des fonctions séparables ou non linéaires. Une étude des propriétés structurelles du modèle est également attendue. D'un point de vue expérimental, la principale difficulté apparaissant en considérant cette modélisation plus fine est le passage à l'échelle. Le travail expérimental

consistera à implanter les méthodes de résolution proposées, dans un premier temps en utilisant les outils standards de programmation mathématique. Dans un deuxième temps, un algorithme de résolution approché, mêlant les techniques classiques d'optimisation (identification et séparation de familles d'inégalités valides, génération de colonnes, méthode de Benders, relaxation lagrangienne, ..) sera proposé et implanté. Enfin, une évaluation des méthodes élaborées, via une comparaison avec l'état de l'art sera effectuée.

CONNAISSANCES REQUISES :

- Programmation mathématique, résolution de problèmes de grande taille ;
- Optimisation linéaire et non-linéaire en variables mixtes ;
- Notions en apprentissage supervisé.

ENCADRANTS :

- Zacharie ALES ;
- Marie-Christine COSTA ;
- Amélie LAMBERT.

## References

- [1] Governance of artificial intelligence in finance. <https://acpr.banque-france.fr/en/governance-artificial-intelligence-finance>, 2020. Accessed: 2021-08-03.
- [2] Eba report on big data and advanced analytics. [https://www.eba.europa.eu/sites/default/documents/files/document\\_library/Final%20Report%20on%20Big%20Data%20and%20Advanced%20Analytics.pdf](https://www.eba.europa.eu/sites/default/documents/files/document_library/Final%20Report%20on%20Big%20Data%20and%20Advanced%20Analytics.pdf), 2020. Accessed: 2021-08-03.
- [3] Sina Aghaei, Mohammad Javad Azizi, and Phebe Vayanos. Learning optimal and fair decision trees for non-discriminative decision-making. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 33, pages 1418–1426, 2019.
- [4] Dimitris Bertsimas and Jack Dunn. Optimal classification trees. *Machine Learning*, 106(7):1039–1082, 2017.
- [5] Dimitris Bertsimas, Jean Pauphilet, and Bart Van Parys. Sparse regression: Scalable algorithms and empirical performance. *arXiv preprint arXiv:1902.06547*, 2019.
- [6] Bracke P., Datta A., Jung C., and Sen S. Machine learning explainability in finance: an application to default risk analysis. <https://www.bankofengland.co.uk/working-paper/2019/machine-learning-explainability-in-finance-an-application-to-default-risk-analysis>, 2019. Accessed: 2021-08-03.
- [7] Leo Breiman, Jerome Friedman, Charles J Stone, and Richard A Olshen. *Classification and regression trees*. CRC press, 1984.
- [8] Dam H., Tran T., Ghose A. Explainable software analytics. <https://arxiv.org/pdf/1802.00603.pdf>, 2019. Accessed: 2021-08-03.

- [9] Jack William Dunn. *Optimal trees for prediction and prescription*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2018.
- [10] Tim Miller. Explanation in artificial intelligence: Insights from the social sciences. *Artificial intelligence*, 267:1–38, 2019.
- [11] Sicco Verwer and Yingqian Zhang. Learning optimal classification trees using a binary linear program formulation. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 33, pages 1625–1632, 2019.