

PARTIE 1: FONDEMENTS THÉORIQUES DES MODÈLES

Decision Tree (Arbre de Décision)

Principe :

- Divise récursivement l'espace des features en régions rectangulaires
- À chaque nœud, choisit la meilleure variable et seuil pour minimiser l'erreur
- Prédiction = moyenne des valeurs dans chaque feuille

Avantages :

- Interprétable et visualisable
- Capture les relations non-linéaires
- Pas besoin de normalisation
- Très rapide

Inconvénients :

- Tendance au sur-apprentissage
- Instable (petits changements = grands impacts)
- Moins performant que les ensembles

Hyperparamètres clés :

- `max_depth` : Profondeur maximale (contrôle la complexité)
- `min_samples_split` : Minimum d'échantillons pour diviser un nœud
- `min_samples_leaf` : Minimum d'échantillons par feuille

Random Forest (Forêt Aléatoire)

Principe :

- Ensemble de nombreux arbres de décision
- Chaque arbre entraîné sur un échantillon aléatoire (bootstrap)
- Prédiction = moyenne des prédictions de tous les arbres
- “Wisdom of the crowd” réduit la variance

Avantages :

- Très robuste au sur-apprentissage
- Gère bien les données bruitées
- Fournit l’importance des features
- Parallélisable (rapide avec multi-threading)

Inconvénients :

- Moins interprétable qu’un seul arbre
- Plus lent que les arbres simples
- Consomme plus de mémoire

Hyperparamètres clés :

- `n_estimators` : Nombre d’arbres
- `max_depth` : Profondeur des arbres
- `max_features` : Nombre de features considérées par split
- `min_samples_leaf` : Régularisation

Gradient Boosting

Principe :

- Construit les arbres séquentiellement
- Chaque nouvel arbre corrige les erreurs du précédent
- Minimise une fonction de perte par descente de gradient
- Combine des “weak learners” en un “strong learner”

Avantages :

- Souvent le plus performant sur des données tabulaires
- Capture des relations complexes
- Moins sensible aux outliers que Random Forest
- Flexibilité dans la fonction de perte

Inconvénients :

- Sensible au sur-apprentissage si mal paramétré
- Plus lent (séquentiel, non parallélisable)
- Nécessite un tuning minutieux

Hyperparamètres clés :

- `n_estimators` : Nombre d’arbres
- `learning_rate` : Taux d’apprentissage (plus petit = plus robuste)
- `max_depth` : Profondeur
- `subsample` : Fraction d’échantillons par arbre

XGBoost (eXtreme Gradient Boosting)

Principe :

- Version optimisée et régularisée du Gradient Boosting
- Techniques avancées : régularisation, pruning, parallélisation
- Algorithme de splitting plus efficace
- Gestion native des valeurs manquantes

Avantages :

- Souvent le meilleur en compétitions
- Plus rapide que Gradient Boosting classique
- Régularisation L1/L2 intégrée
- Gestion automatique des valeurs manquantes

Inconvénients :

- Beaucoup d'hyperparamètres à tuner
- Peut être “overkill” pour des problèmes simples
- Nécessite compréhension approfondie

Hyperparamètres clés :

- `n_estimators` : Nombre d'arbres
- `learning_rate` : Taux d'apprentissage
- `max_depth` : Profondeur des arbres
- `colsample_bytree` : Fraction de features par arbre
- `reg_alpha/reg_lambda` : Régularisation L1/L2

MLP (Réseau de Neurones)

Principe :

- Réseau de neurones artificiels organisés en couches
- Chaque neurone applique : $\text{activation}(\text{weighted_sum}(\text{inputs}) + \text{bias})$
- Apprentissage par rétropropagation du gradient
- Peut approximer n'importe quelle fonction

Avantages :

- Peut capturer des relations très complexes
- Flexible et adaptable
- Bonne généralisation avec assez de données

Inconvénients :

- Nécessite beaucoup de données
- Boîte noire (difficile à interpréter)
- Sensible au scaling des features
- Lent à entraîner
- Instable (résultats variables)

Hyperparamètres clés :

- `hidden_layer_sizes` : Architecture (nombre et taille des couches)
- `activation` : Fonction d'activation (relu, tanh)
- `alpha` : Régularisation L2
- `learning_rate_init` : Taux d'apprentissage initial