# Principes du ML & Régression Linéaire

## Jour 1 — Après-midi

Julien Rolland

Formation M2 Développement Fullstack

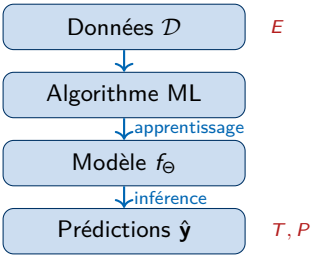
Jour 1

# Plan du module

## Définition (Tom Mitchell, 1997)

Pour une **tâche** $T$, un algorithme **apprend** si sa **performance** $P$ sur $T$ s'améliore avec l'**expérience** $E$.

| | **Concept** | **En pratique** |
|---|---|---|
| $T$ | Tâche | Prédire un prix |
| $P$ | Performance | Erreur MSE |
| $E$ | Expérience | Dataset d'entraînement |




## Paradigme clé

On ne **programme** plus les règles.
On **montre des exemples** — le modèle induit les règles.

## Supervisé

$(x_i, y_i)$

Données **étiquetées**

*Régression, Classification*

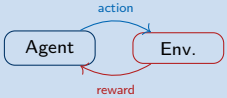
## Non-supervisé

$x_i$ seulement

Données **sans labels**

*Clustering, Embeddings*

## Renforcement




Apprentissage par **récompense**

*Jeux, Robotique*

## Ce cours

Focus sur l'**apprentissage supervisé** (J1–J4) et les outils de mise en production (J5). Le non-supervisé apparaît en J4 (embeddings).

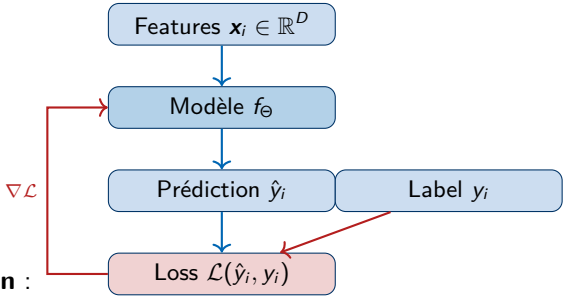
**Dataset** $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$

- $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^D$ — vecteur de **features**
- $y_i \in \mathbb{R}$ (régression) ou $\{0, 1\}$ (classification) $\Rightarrow$ le **label** (ground truth)
- $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times D}$ — matrice de données

$\Theta$ = paramètres **appris** pendant l'entraînement.

**Modèle** $f_\Theta$ — appliqué à $\boldsymbol{x}_i$ donne une **prédiction** :

$$\hat{y}_i = f_\Theta(\boldsymbol{x}_i)$$




**Apprentissage** = trouver $\Theta^*$ qui minimise l'écart entre $\hat{y}_i$ et $y_i$ :

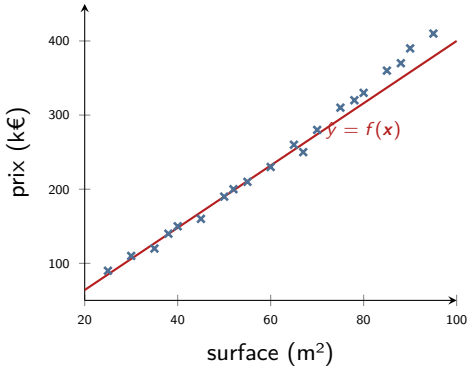
$$\Theta^* = \arg\min_{\Theta} \; \mathcal{L}(\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{y})$$

**Objectif :** prédire une sortie **continue** $y \in \mathbb{R}$ à partir de features $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^D$.

**Exemples :**

- Surface + localisation $\rightarrow$ prix d'un logement
- Historique météo $\rightarrow$ température demain
- Âge + poids $\rightarrow$ glycémie

On cherche $f : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $f(\boldsymbol{x}_i) \approx y_i$.



## Modèle linéaire ($D = 1$)

$$f_{w,b}(x) = wx + b$$

## Modèle linéaire (multivarié)

$$f_{\mathbf{w},b}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{x} + b = \sum_{j=1}^{D} w_j x_j + b$$

## Modèle polynomial (feature map $\Phi$)

$$f_\Theta(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta}^\top \Phi(\boldsymbol{x})$$

*Ex :* $\Phi(x) = [1, x, x^2, x^3]$ pour degré 3.

## Mean Squared Error (MSE)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left( f_\Theta(\boldsymbol{x}_i) - y_i \right)^2 = \frac{1}{N} \left\| \hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y} \right\|^2$$

avec $\hat{\mathbf{y}} = [f_\Theta(\boldsymbol{x}_1), \ldots, f_\Theta(\boldsymbol{x}_N)]^\top \in \mathbb{R}^N$ le vecteur des prédictions.

# MSE — Justification par la Vraisemblance

**Hypothèse :** $y_i \sim \mathcal{N}(\hat{y}_i, \sigma^2)$ avec $\hat{y}_i = f_\theta(x_i)$ (bruit gaussien)

$$\implies L = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\implies \ln L = \sum_{i=1}^{n} \left[\ln\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right) - \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$\implies \operatorname{argmax}_\theta \ln L \iff \operatorname{argmax}_\theta \left(-\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2\right)$$

$$\implies \operatorname{argmax}_\theta \ln L \iff \operatorname{argmin}_\theta \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$\implies \operatorname{argmin}_\theta \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \iff \textbf{argmin MSE}$$

# Régression Linéaire — Récapitulatif du Problème

**Données** $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$

- $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^D$ — features (surface, nb pièces...)
- $y_i \in \mathbb{R}$ — valeur cible à prédire (prix...)

**Modèle** — une droite (ou hyperplan) :

$$\hat{y}_i = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b$$

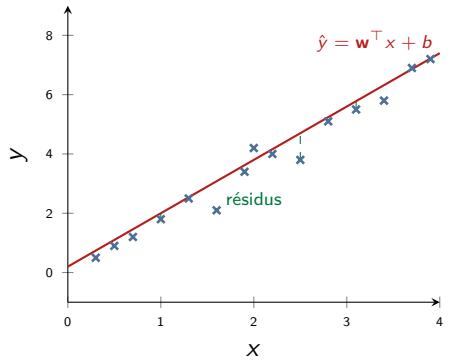
On cherche $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$ et $b \in \mathbb{R}$ qui **ajustent** cette droite aux données.

**Objectif** — minimiser l'erreur quadratique :

$$\text{argmin}_{\mathbf{w},\, b} \ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\hat{y}_i - y_i\right)^2$$

Trouver la droite la **plus proche** de tous les points.

Ajuster une droite aux données



**Problème :** gérer le biais $b$ séparément est fastidieux.

$$\hat{y}_i = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b \quad \Rightarrow \quad \text{deux termes à maintenir}$$

**Astuce :** ajouter une colonne de 1 dans $\mathbf{X}$ :

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_i = \begin{pmatrix} 1 \\ x_{i,1} \\ \vdots \\ x_{i,D} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{D+1} \qquad \tilde{\mathbf{w}} = \begin{pmatrix} b \\ w_1 \\ \vdots \\ w_D \end{pmatrix}$$

$$\hat{y}_i = \tilde{\mathbf{w}}^\top \tilde{\boldsymbol{x}}_i \quad \Leftarrow \text{un seul terme !}$$

**En NumPy :**

```python
# X : (N, D)  ->  X_aug : (N, D+1)
ones = np.ones((N, 1))
X_aug = np.hstack([ones, X])
# w_aug contient [b, w1, ..., wD]

# Prediction
y_hat = X_aug @ w_aug
```

**Avantage**

Toutes les équations (gradient, solution analytique) s'écrivent **sans cas particulier** pour $b$.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \frac{1}{N} \|\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}\|^2 \\
&= \frac{1}{N} (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})^\top (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) \\
&= \frac{1}{N} \left(\mathbf{w}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} - 2\mathbf{w}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{y} + \mathbf{y}^\top \mathbf{y}\right) \\
\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L} &= \frac{1}{N} \left(2\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} - 2\mathbf{X}^\top \mathbf{y}\right) \\
\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L} &= \frac{2}{N} \mathbf{X}^\top (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})
\end{aligned}
$$

## Résultat

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L} = \frac{2}{N} \mathbf{X}^\top (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})$$

## Convexité

$$\nabla^2_{\mathbf{w}} \mathcal{L} = \frac{2}{N} \mathbf{X}^\top \mathbf{X}$$

$\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ est une matrice de Gram :

$$\forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^D, \quad \boldsymbol{v}^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X}) \boldsymbol{v} = \|\mathbf{X}\boldsymbol{v}\|^2 \geq 0$$

$\Rightarrow \nabla^2_{\mathbf{w}} \mathcal{L} \succeq 0 \Rightarrow$ **minimum global unique**.

## Solution analytique

La MSE est convexe : son minimum est atteint quand le gradient s'annule.

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L} = 0 \implies \frac{2}{N} \mathbf{X}^\top (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) = 0 \implies \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

$$\boxed{\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}}$$

### Avantages

- Solution **exacte** en un calcul
- Pas d'hyperparamètre ($\alpha$, nb itérations)

### Limites

- Inverser $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ coûte $\mathcal{O}(D^3)$
- Inutilisable si $D$ ou $N$ est très grand
- Ne généralise pas aux modèles non-linéaires

$\Rightarrow$ En pratique on préfère la **descente de gradient**, généralisable à tout modèle.

# Descente de Gradient — Intuition Géométrique

On cherche $\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w})$.

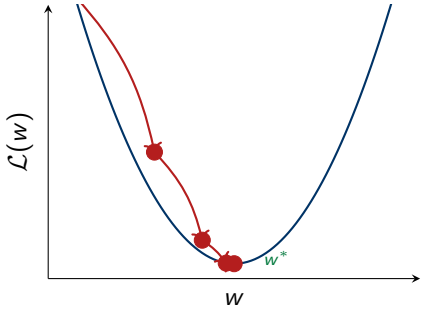
**Idée :** le gradient $\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L}$ pointe vers la **plus grande pente montante**.
On avance dans la **direction opposée**.

**Règle de mise à jour :**

$$\boxed{\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \alpha \, \nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L}(\mathbf{w})}$$

| | |
|---|---|
| $\alpha$ | learning rate (hyperparamètre) |
| $\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L}$ | gradient de la loss |

Répéter jusqu'à **convergence**.



# L'Algorithme — Descente de Gradient (Batch)

```python
def gradient_descent(X, y, lr, n_iters):
    N, D = X.shape
    w = np.zeros(D)          # init

    for t in range(n_iters):
        y_hat = X @ w
        error = y_hat - y    # (N,)

        grad = (2/N) * X.T @ error   # (D,)
        w = w - lr * grad

    return w
```

**Variantes :**

| | |
|---|---|
| Batch GD | Gradient sur **tout** le dataset |
| SGD | Gradient sur **1 exemple** aléatoire |
| Mini-Batch | Gradient sur un **batch** de taille $B$ |

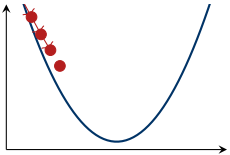
## Complexité

$\mathcal{O}(N \cdot D)$ par itération.
Sur grand dataset : utiliser **Mini-Batch GD**.

## En pratique

Mini-Batch ($B = 32$ à $256$) est le standard.
C'est ce qu'utilise PyTorch avec `DataLoader`.

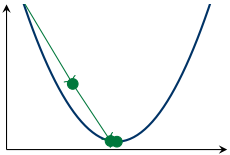
# Choix du Learning Rate $\alpha$



**$\alpha$ trop petit**

Convergence **lente**.

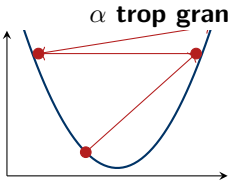
Beaucoup d'itérations.



**$\alpha$ adapté**

Convergence **rapide**.

Atteint le minimum.



**$\alpha$ trop grand**

**Diverge**.

Oscille ou explose.

## Règle pratique

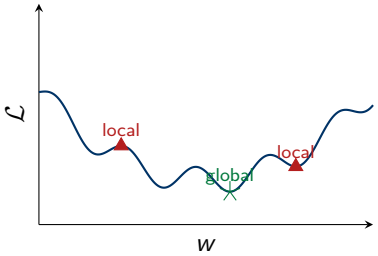
Commencer à $\alpha = 10^{-3}$, observer la courbe de loss.

Si la loss **oscille** $\rightarrow$ diviser par 10. Si elle **stagne** $\rightarrow$ multiplier par 3.

## Problèmes généraux

- Converge vers un **minimum local** (pas nécessairement global)
- Résultat dépend de **l'initialisation**
- Peut **ne pas converger** si $\alpha$ trop grand
- Lent sur de très grands datasets (Batch GD)

Minima locaux vs global




## Bonne nouvelle pour la régression linéaire

La MSE est **convexe** $\Rightarrow$ un seul minimum, GD le trouve toujours.
C'est une propriété exceptionnelle — les réseaux profonds ne l'ont pas.

## Vocabulaire ML

- Task $T$, Performance $P$, Experience $E$
- Supervisé / Non-supervisé / Renforcement
- Features $\mathbf{X}$, labels $\mathbf{y}$, modèle $f_\Theta$, loss $\mathcal{L}$

## Descente de Gradient

- $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \alpha \nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}$
- Batch / SGD / Mini-Batch
- $\alpha$ trop petit : lent $\quad$ $\alpha$ trop grand : diverge
- MSE convexe $\Rightarrow$ minimum global garanti

## Régression Linéaire

- $\hat{y} = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{x} + b$
- MSE : $\mathcal{L} = \frac{1}{N} \|\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$
- Gradient : $\frac{2}{N} \mathbf{X}^\top (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})$
- Augmented data : biais intégré dans $\mathbf{w}$