

# Introduction au Deep LEarning

## Cours 1

### Du perceptron aux réseaux de neurones

Olivier Schwander  
[olivier.schwander@sorbonne-universite.fr](mailto:olivier.schwander@sorbonne-universite.fr)

Master MIND - Sorbonne Université

2025-2026

Slides de N. Baskiotis et V. Guigue

# Retour sur le modèle linéaire

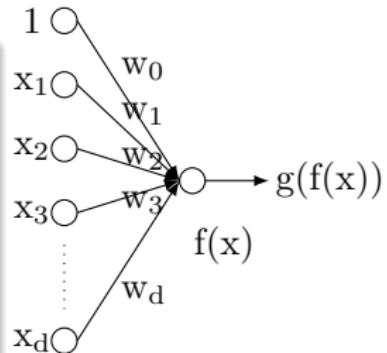
## Problématique de l'apprentissage supervisé

- Ensemble d'apprentissage  $\{(x^i, y^i)\} \in X \times Y$ , ensemble de fonctions  $\mathcal{F}$
- un coût  $L(\hat{y}, y) : Y \times Y \rightarrow \mathbb{R}^+$ , trouver  $f^* = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{F}} \sum_i L(f(x^i), y^i)$

## Perceptron

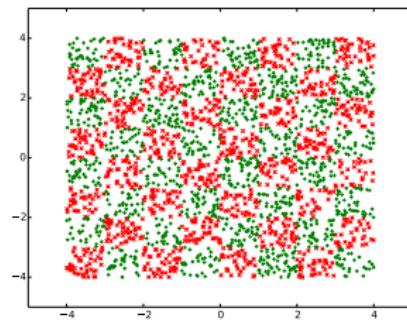
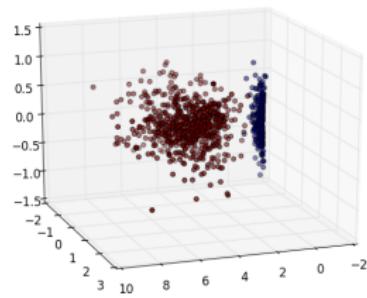
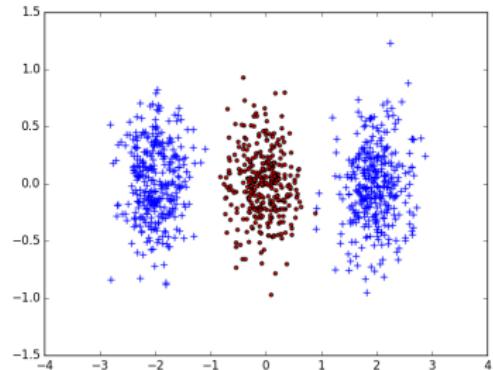
- Hypothèse linéaire :  $f_w(x) = w_0 + \sum_{i=1}^d w_i x_i$
- Coût perceptron :  $L(f_w(x), y) = \max(0, -f_w(x)y)$
- Gradient :

$$\nabla_w L(f_w(x), y) = \begin{cases} 0 & \text{si } (-y < w \cdot x >) < 0 \\ -yx & \text{sinon} \end{cases}$$

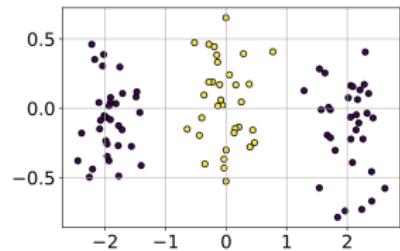
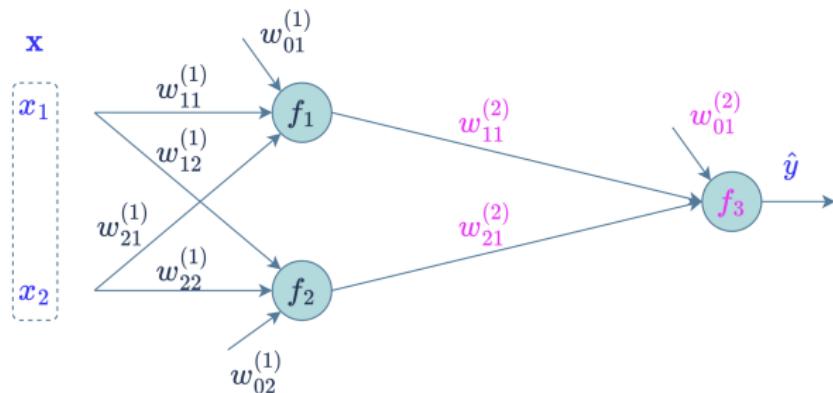


# Limites du perceptron

Est-il capable de séparer ces données ?



# Combinons des neurones

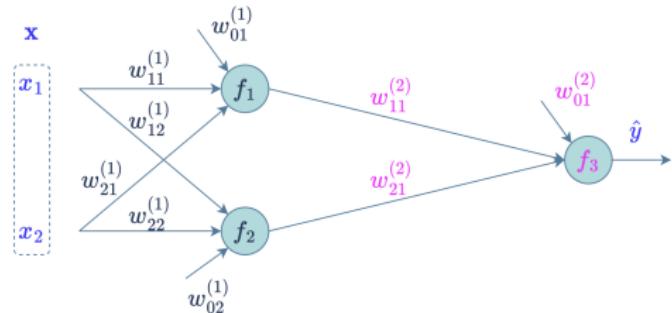


$$f_1(\mathbf{x}) = w_{11}^{(1)}x_1 + w_{21}^{(1)}x_2 + w_{01}^{(1)}, \quad f_2(\mathbf{x}) = w_{12}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{02}^{(1)}$$

$$f_3(\mathbf{x}) = w_{11}^{(2)}f_1(\mathbf{x}) + w_{21}^{(2)}f_2(\mathbf{x}) + w_{01}^{(2)}$$

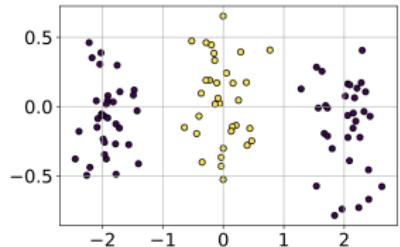
- Combiner des neurones  $\Rightarrow$  suffisant ?

# Combinons des neurones



$$f_1(\mathbf{x}) = w_{11}^{(1)}x_1 + w_{21}^{(1)}x_2 + w_{01}^{(1)}, \quad f_2(\mathbf{x}) = w_{12}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{02}^{(1)}$$

$$f_3(\mathbf{x}) = w_{11}^{(2)}f_1(\mathbf{x}) + w_{21}^{(2)}f_2(\mathbf{x}) + w_{01}^{(2)}$$



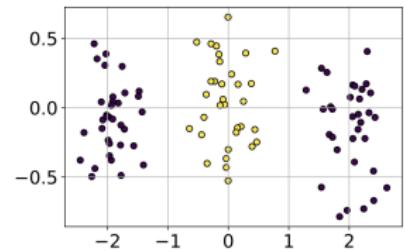
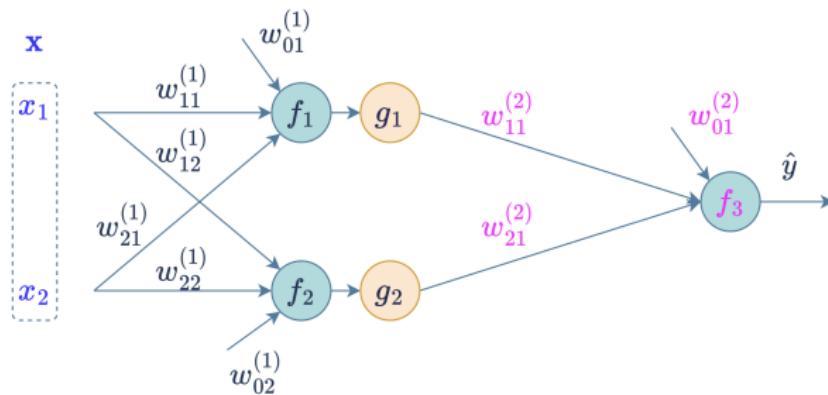
$$f_3(\mathbf{x}) = w_{11}^{(2)}(w_{11}^{(1)}x_1 + w_{21}^{(1)}x_2 + w_{01}^{(1)}) + w_{21}^{(2)}(w_{12}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{02}^{(1)}) + w_{01}^{(2)}$$

$$\Leftrightarrow f_3(\mathbf{x}) = x_1(w_{11}^{(2)}w_{11}^{(1)} + w_{21}^{(2)}w_{12}^{(1)}) + x_2(w_{11}^{(2)}w_{21}^{(1)} + w_{21}^{(2)}w_{22}^{(1)}) + w_{01}^{(2)} + w_{11}^{(2)}w_{01}^{(1)} + w_{21}^{(2)}w_{02}^{(1)}$$

- Combiner des neurones  $\Rightarrow$  suffisant ?

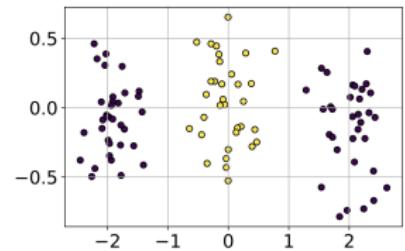
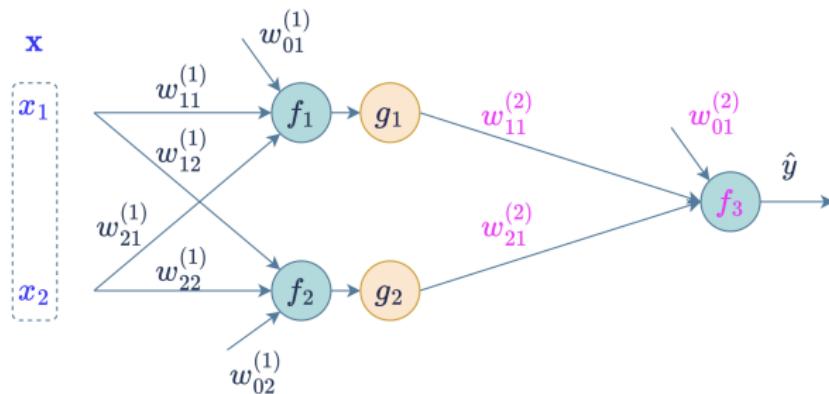
Non ! il faut introduire de la non linéarité, sinon équivalent à un perceptron ...

# Un pas vers les réseaux profonds



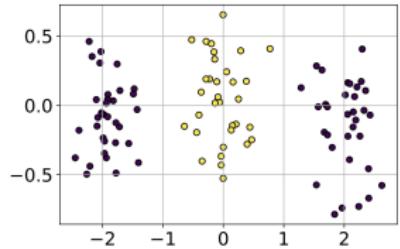
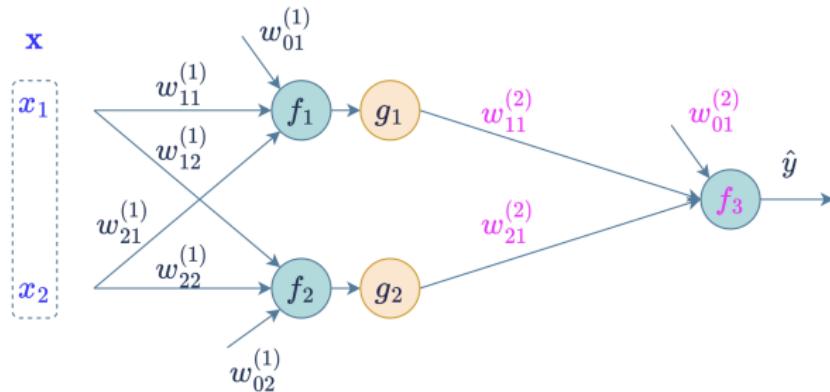
- Quelle non-linéarité ?
  - ▶ Fonction signe ?
  - ⇒ dérivée problématique ...
  - ▶ Fonctions tanh, sigmoïde, ...

# Un pas vers les réseaux profonds

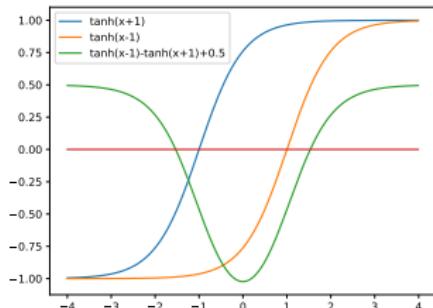


- Quelle non-linéarité ?
  - ▶ Fonction signe ?
  - ⇒ dérivée problématique ...
  - ▶ Fonctions tanh, sigmoïde, ...

# Un pas vers les réseaux profonds

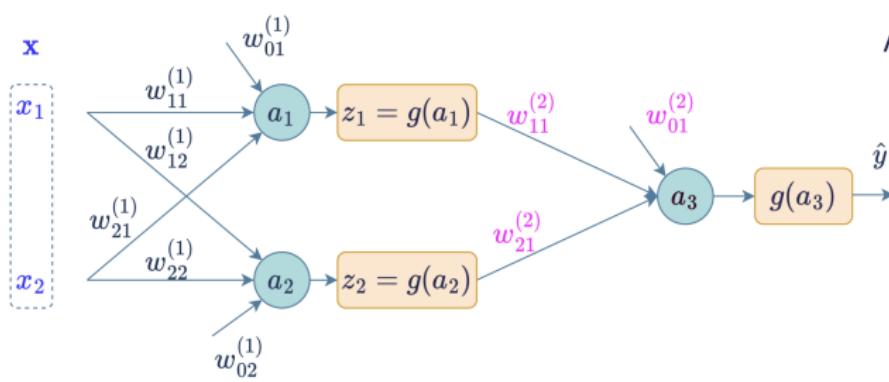


- Quelle non-linéarité ?
  - ▶ Fonction signe ?  
⇒ dérivée problématique ...
  - ▶ Fonctions tanh, sigmoïde, ...



# Plan

# Pour l'inférence



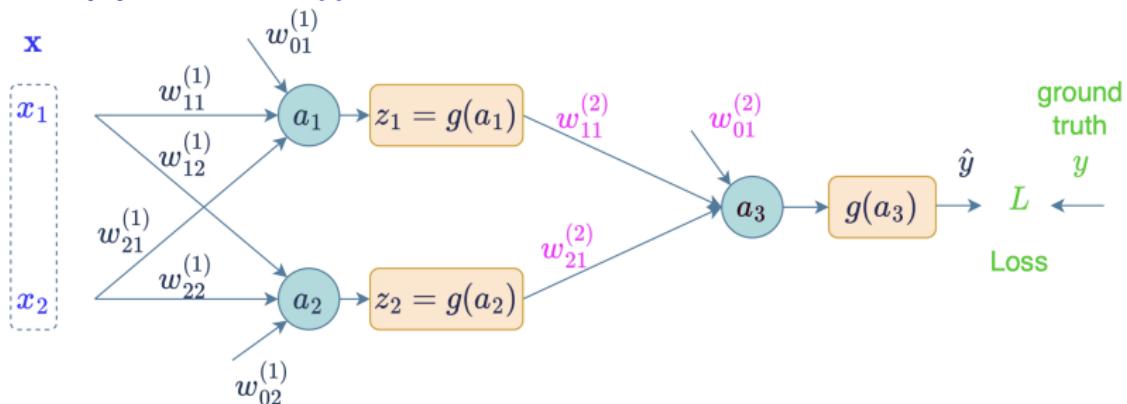
$$\text{Avec } g(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

- $a_1 = w_{01} + w_{11}x_1 + w_{21}x_2$
- $a_2 = w_{02} + w_{12}x_1 + w_{22}x_2$
- $z_1 = g(a_1)$
- $z_2 = g(a_2)$
- $a_3 = w_{01} + w_{11}z_1 + w_{21}z_2$
- $\hat{y} = g(a_3)$

## Vocabulaire

- Inférence : passe forward
- $g$  fonction d'activation (non linéarité du réseau)
- $a_i$  activation du neurone  $i$
- $z_i$  sortie du neurone  $i$  (transformé non linéaire de l'activation).

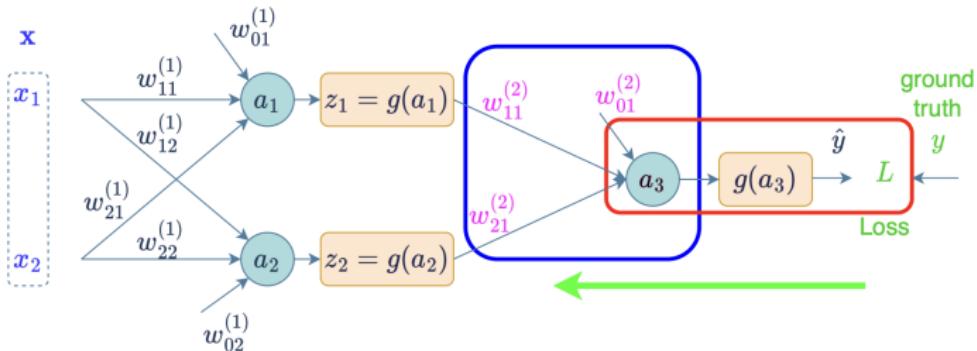
# Pour l'apprentissage



Objectif : apprendre les poids

- Choix d'un coût : moindres carrés  
 $L(\hat{y}, y) = (\hat{y} - y)^2$  (pourquoi est ce un bon choix ?)
- Mais à quel(s) neurone(s) et comment répartir l'erreur entre les poids ?  
⇒ Rétro-propagation de l'erreur :
  - ▶ corriger un peu tous les poids ...
  - ▶ en estimant la part de chacun dans l'erreur
  - ▶ en commençant par la fin et en figeant au fur et à mesure le réseau
- ⇒ descente de gradient : on cherche à calculer tous les  $\frac{\partial L(\hat{y}, y)}{\partial w_{ij}}$

# Calcul du gradient : chain rule



Forward:  
 $\hat{y} = 0.5$   
 $y = -1$

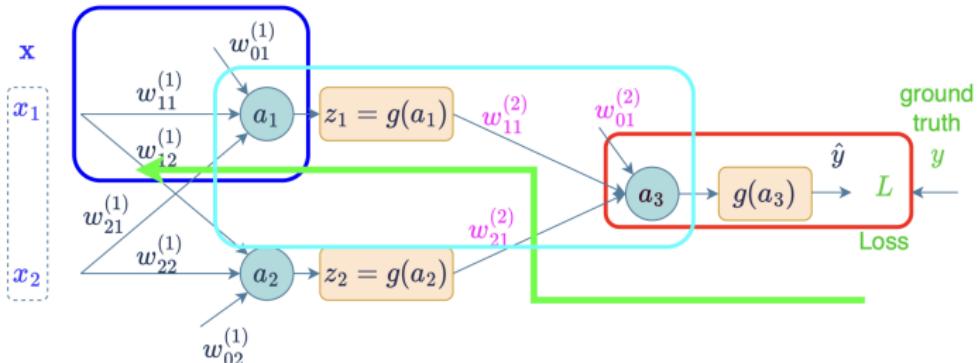
Backward, poids de la dernière couche :  $\nabla_{w_{ij}^{(2)}} L(\hat{y}, y)$

$$L(\hat{y}, y) = (g(a_3) - y)^2 = \left( g\left(w_{01}^{(2)} + w_{11}^{(2)}z_1 + w_{21}^{(2)}z_2\right) - y \right)^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_{i1}^{(2)}} = \frac{\partial L}{\partial a_3} \frac{\partial a_3}{\partial w_{i1}^{(2)}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \frac{\partial L}{\partial a_3} = \frac{\partial L}{\partial g(a_3)} \frac{\partial g(a_3)}{\partial a_3} = \frac{\partial(g(a_3)-y)^2}{\partial a_3} \\ \frac{\partial a_3}{\partial w_{i1}^{(2)}} = \frac{\partial(w_{01}^{(2)} + w_{11}^{(2)}z_1 + w_{21}^{(2)}z_2)}{\partial w_{i1}^{(2)}} \end{cases} = 2g'(a_3)(g(a_3) - y) \\ = z_i$$

Soit:  $\frac{\partial L}{\partial w_{i1}^{(2)}} = 2g'(a_3)(\hat{y} - y)z_i \quad \Rightarrow \text{Mise à jour possible}$

# Calcul du gradient : chain rule



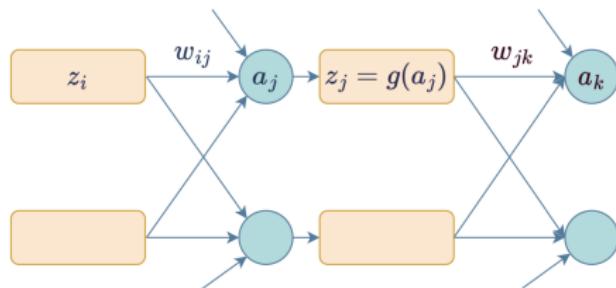
Forward:  
 $\hat{y} = 0.5$   
 $y = -1$

Backward, poids de la première couche:  $w_{i1}^{(1)}$  (par exemple)

$$\frac{\partial L}{\partial w_{i1}} = \frac{\partial L}{\partial a_1} \frac{\partial a_1}{\partial w_{i1}} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial a_1} &= \frac{\partial L}{\partial a_3} \frac{\partial a_3}{\partial a_1} = \frac{\partial L}{\partial a_3} g'(a_1) w_{11}^{(2)} \\ \frac{\partial a_1}{\partial w_{i1}} &= \frac{\partial w_{01}^{(1)} + w_{11}^{(1)} x_1 + w_{21}^{(1)} x_2}{\partial w_{i1}^{(1)}} = x_i \end{aligned}$$

Soit:  $\underbrace{\frac{\partial L}{\partial w_{i1}}}_{\text{correction de } w_{i1}} = \frac{\partial L}{\partial a_1} x_i = \underbrace{\frac{\partial L}{\partial a_3}}_{\text{erreur à propager}} \underbrace{g'(a_1) w_{13}^{(2)}}_{\text{poids de la connexion}} x_i$

# Calcul du gradient : chain rule



$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial a_j}{\partial w_{ij}} \frac{\partial L}{\partial a_j} = z_i \frac{\partial L}{\partial a_j}$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_j} = \sum_k \frac{\partial a_k}{\partial a_j} \frac{\partial L}{\partial a_k}$$

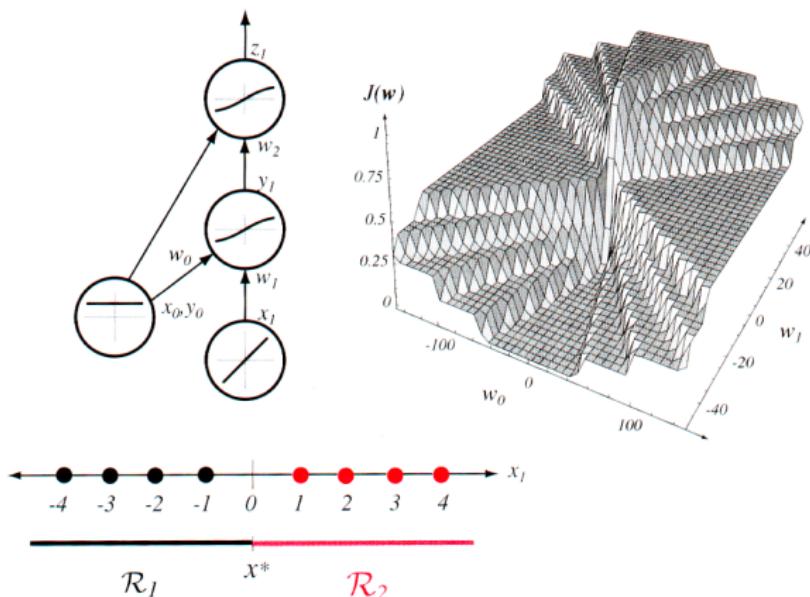
$$\underbrace{\frac{\partial L}{\partial a_j}}_{\text{erreur sur } j} = \sum_k (g'(a_k) w_{jk}) \quad \underbrace{\frac{\partial L}{\partial a_k}}_{\text{erreur à propager}}$$

$$\text{On note: } \delta_j = \frac{\partial L}{\partial a_j}$$

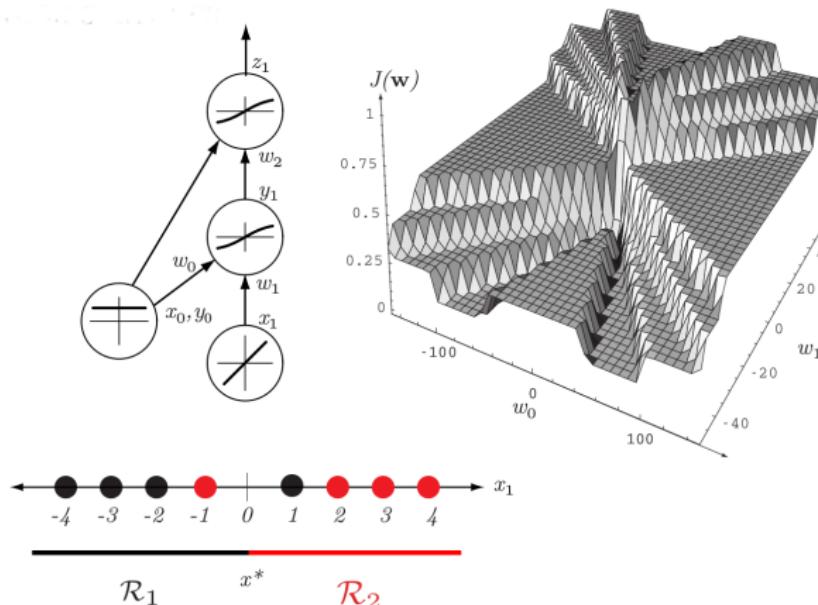
- Lorsque l'erreur *arrive de plusieurs sources*  $\Rightarrow$  somme
- Expression de l'erreur de la couche *j* par rapport à l'erreur de la couche *k*

# Plan

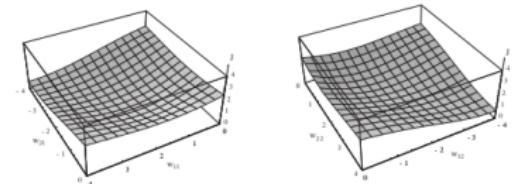
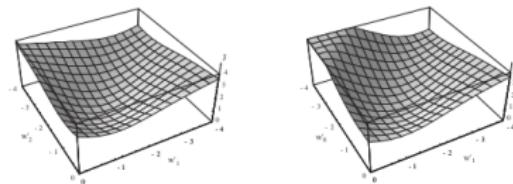
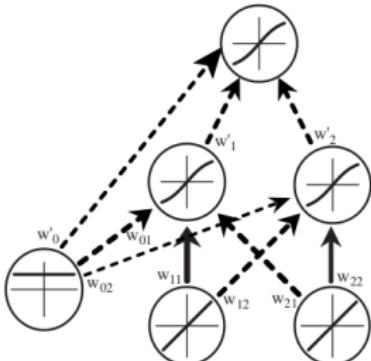
# Analyse de la surface d'erreur



# Analyse de la surface d'erreur

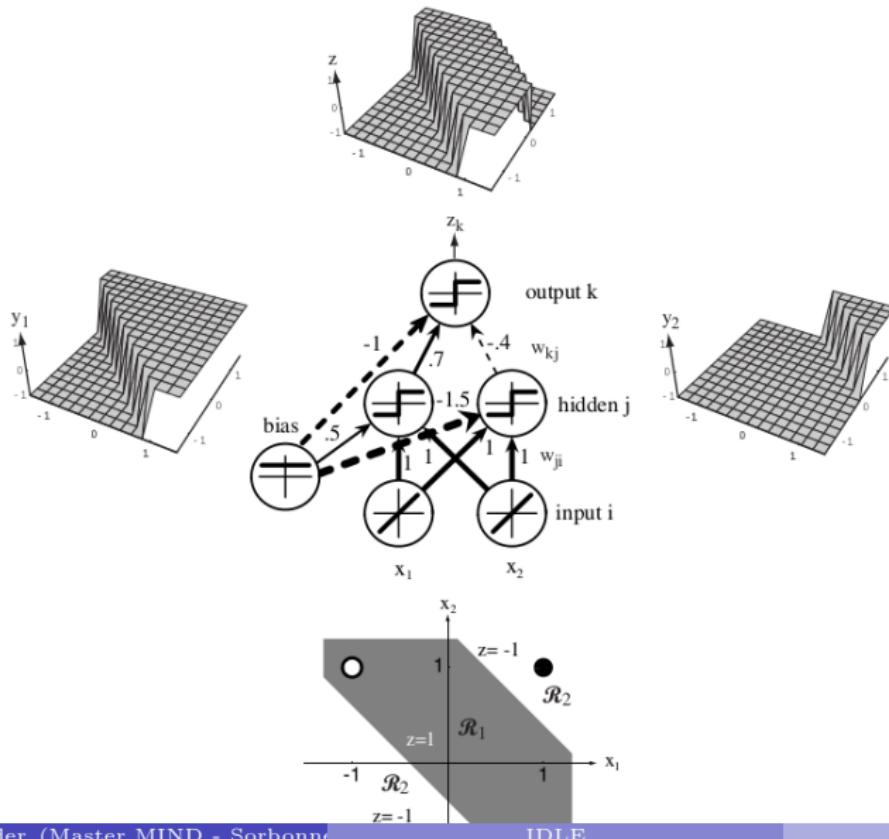


# Analyse de la surface d'erreur



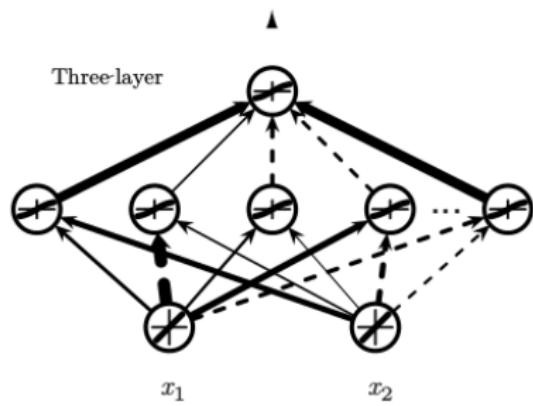
# Exemple

Le XOR selon [Duda et al 00]

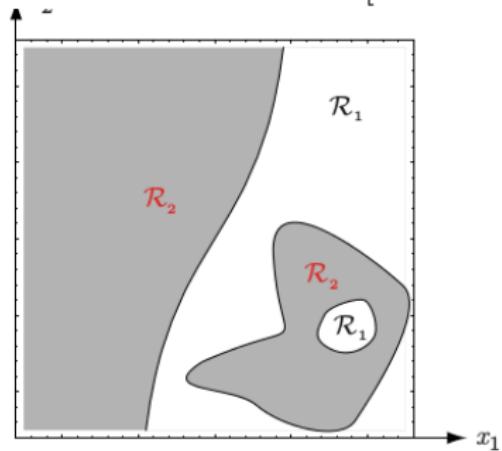


# Exemple

Non convexité des régions apprises

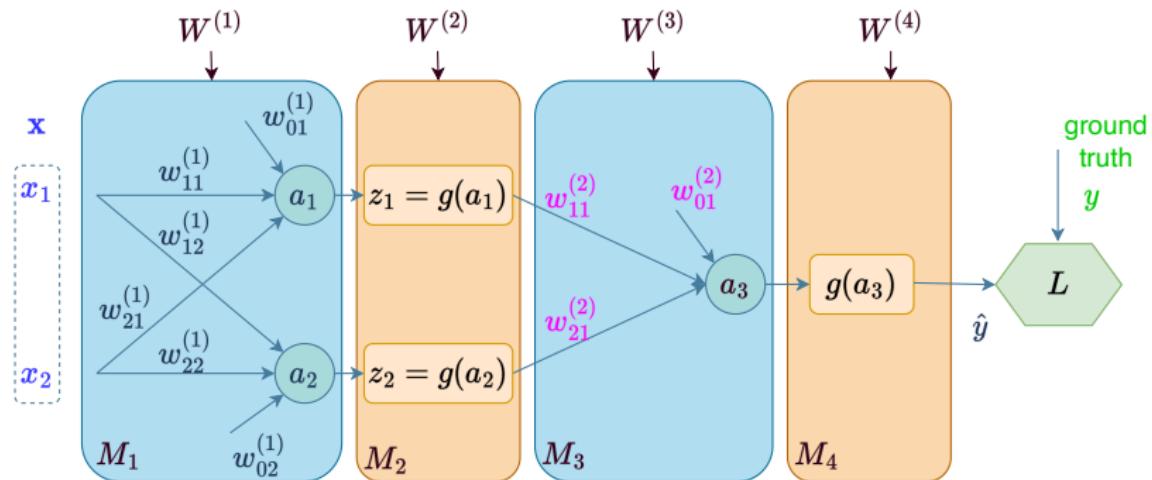


[Duda et al 00]



# Plan

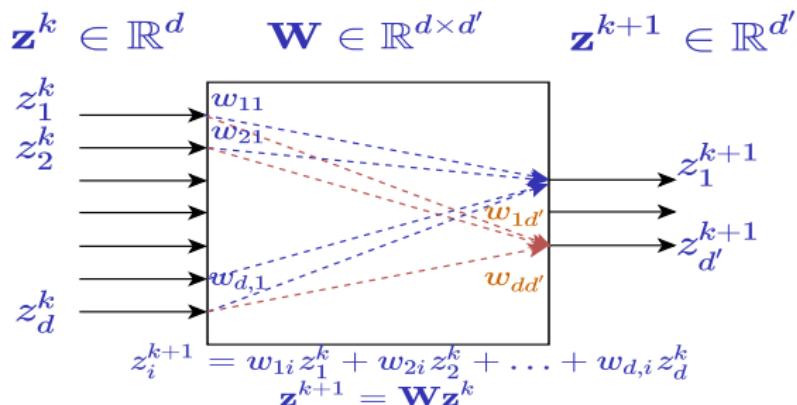
# Réseau : assemblage de modules



Un module  $M^k$

- a des entrées : le résultat de la couche précédente  $z^{k-1}$
- a possiblement des paramètres  $W^{(k)}$  [vu également comme des entrées]
- produit une sortie  $z^k$

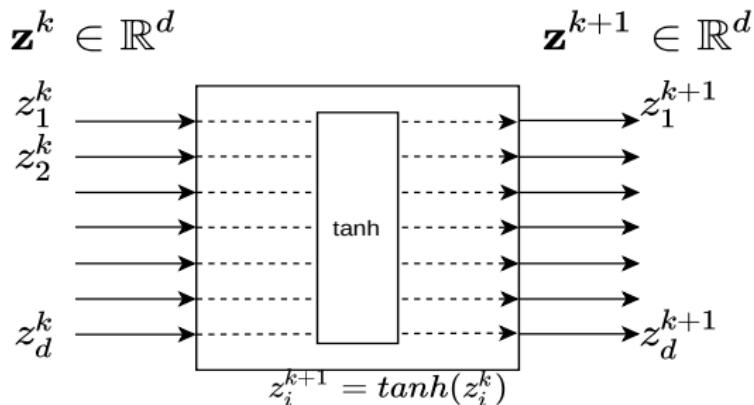
# Type usuel de modules : Module linéaire



Transformation linéaire paramétrée de  $\mathbb{R}^d$  vers  $\mathbb{R}^{d'}$

- $\mathbf{z}^k = M^k(\mathbf{z}^{k-1}, \mathbf{W}^k) = \mathbf{W}^k \mathbf{z}^{k-1}$  avec  $\mathbf{W}^k \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d'}$ ,  $\mathbf{z}^{k+1} \in \mathbb{R}^{d'}$
- Chaque sortie  $z_i^{k+1} = W_{i,:}^k \cdot z^k = \langle w_i^k, z^k \rangle$  correspond au calcul d'un perceptron
- La matrice  $\mathbf{W}^k$  est l'empilement des  $w_i$ , poids de chaque perceptron.

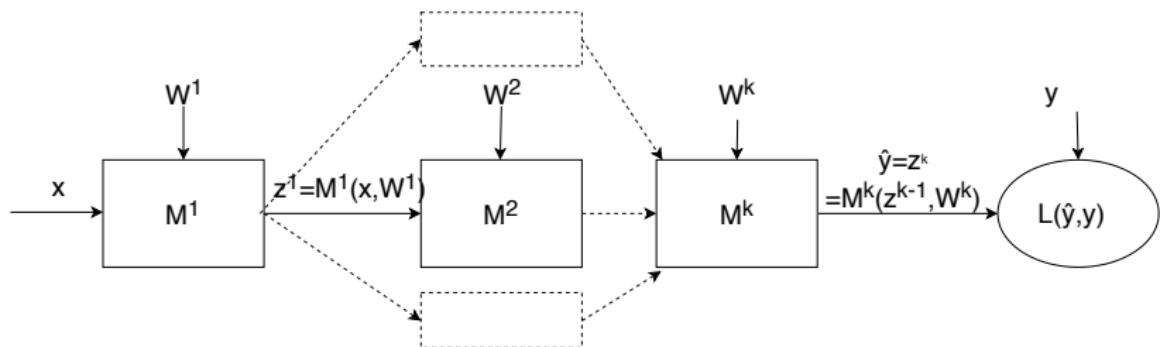
# Type usuel de modules : Module d'activation



Fonction d'activation de  $\mathbb{R}^d$  vers  $\mathbb{R}^d$

- tangente hyperbolique :  
 $M^k(z^{k-1}, 0) = \tanh(z^{k-1}) = (\tanh(z_1^{k-1}), \tanh(z_2^{k-1}), \dots, \tanh(z_d^{k-1}))$
- sigmoïde :  $M^k(z^{k-1}, 0) = \sigma(z^{k-1}) = (\sigma(z_1^{k-1}), \sigma(z_2^{k-1}), \dots, \sigma(z_d^{k-1}))$
- ReLU :  $M^k(z^{k-1}, 0) = \text{ReLU}(z^{k-1}) = (\max(0, z_1^{k-1}), \max(0, z_2^{k-1}), \dots, \max(0, z_d^{k-1}))$

# Type usuel de modules : Module de coût

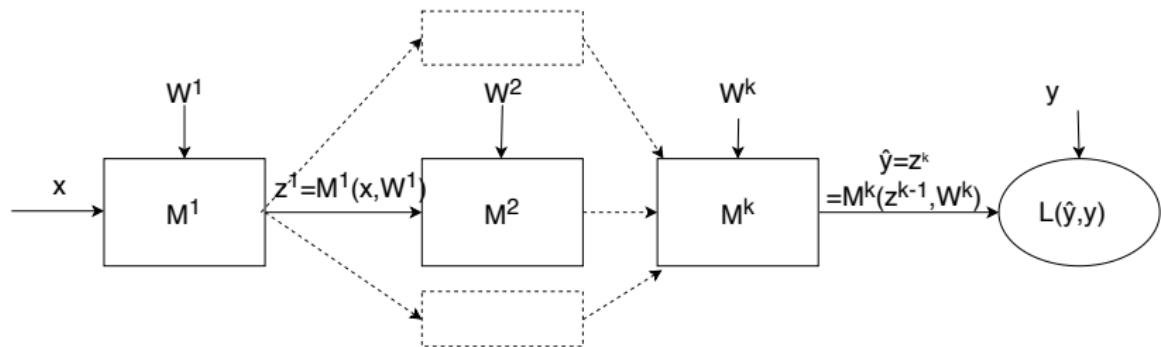


## Fonction de coût

Bloc final : deux entrées, la supervision et la sortie du réseau  $\hat{y} = z^k$ .

- MSE :  $L(\hat{y}, y) = \|\hat{y} - y\|^2$
- Negative Log-Likelihood :  $L(\hat{y}, y) = - \sum_{i=1}^d y_i \log \hat{y}_i$
- KL-divergence :  $L(\hat{y}, y) = - \sum_{i=1}^d y_i \log \frac{\hat{y}_i}{y_i}$

# Un réseau Assemblage de modules

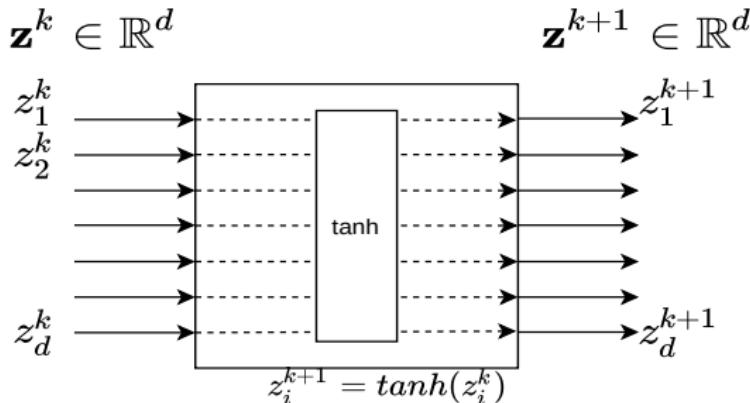


Un module  $M^k$  est caractérisé

- par ses entrées : le résultat de la couche précédente  $z^{k-1}$  (et potentiellement d'autres variables)
- par possiblement ses paramètres  $W^k$  (vu également comme des entrées)
- produit une sortie  $z^k = M^k(z^{k-1}, W^k)$

D'un point de vue formel, il n'y pas de différences entre les paramètres du module et les entrées : ce sont tous des arguments de la fonction du module.

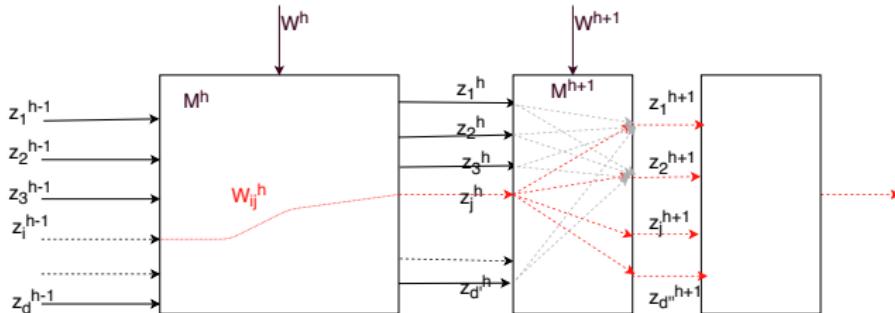
# Rétro-propagation du gradient



Pour apprendre le réseau :

- Pour chaque module, il faut calculer  $\nabla_{W^k} L(\hat{y}, y)$
- Cas simple : paramètres constants (module d'activation), le gradient est nul (il n'y a rien à apprendre pour ce module)
- Rétro-propagation pour les autres.

## Zoom sur un module



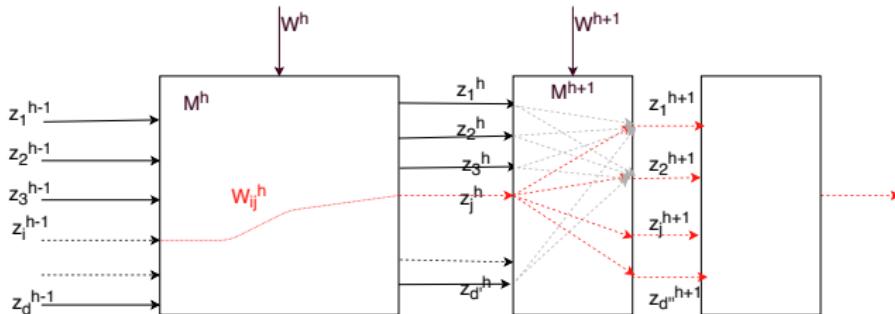
Rétro-propagation pour  $M^h$ ,  $z^h = M(z^{h-1}, W^h)$

- $\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^h} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial z_k^h} \frac{\partial z_k^h}{\partial w_{ij}^h} = \frac{\partial L}{\partial z_j^h} \frac{\partial z_j^h}{\partial w_{ij}^h} = \frac{\partial L}{\partial z_j^h} \frac{\partial M^h(z^{h-1}, W^h)}{\partial w_{ij}^h}$  ( $w_{ij}^h$  n'influe que sur  $z_j^h$ )
- $\frac{\partial L}{\partial z_j^h} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial z_k^{h+1}} \frac{\partial z_k^{h+1}}{\partial z_j^h} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial z_k^{h+1}} \frac{M^{h+1}(z^h, W^h)}{\partial z_j^h}$
- On introduit  $\delta_j^h = \frac{\partial L}{\partial z_j^h} = \sum_k \delta_k^{h+1} \frac{\partial M^{h+1}(z^h, W^h)}{\partial z_j^h} : \frac{\partial L}{\partial w_{ij}^h} = \delta_j^h \frac{\partial M^h(z^{h-1}, W^h)}{\partial w_{ij}^h}$

$\Rightarrow$  Les  $\delta_i^h$  sont calculés en partant de la fin du réseau

- Pour la dernière couche,  $\delta_j^{\text{last}} = \frac{\partial L(z^{\text{last}}, y)}{\partial z_j^{\text{last}}}$ , le gradient du coût par rapport à la prédiction.

# Zoom sur un module



Rétro-propagation pour  $M^h$ ,  $z^h = M(z^{h-1}, W^h)$

$$\text{Avec } \delta_j^h = \frac{\partial L}{\partial z_j^h} = \sum_k \delta_k^{h+1} \frac{\partial M^{h+1}(z^h, W^h)}{\partial z_j^h} : \frac{\partial L}{\partial w_{ij}^h} = \delta_j^h \frac{\partial M^h(z^{h-1}, W^h)}{\partial w_{ij}^h}$$

Pour chaque module, on a besoin :

- du gradient  $\nabla_{W^h} M^h(z^{h-1}, W^h)$  par rapport à ses paramètres : maj des paramètres (nul si pas de paramètres)
- du gradient  $\nabla_{z^{h-1}} M^h(z^{h-1}, W^h)$  par rapport à ses entrées : rétro-propagation de l'erreur

# Complexité et expressivité

- Efficacité en apprentissage
  - ▶ En  $O(|w|)$  pour chaque passe d'apprentissage où  $|w|$  est le nombre de poids
  - ▶ Il faut typiquement plusieurs centaines de passes (voir plus loin)
  - ▶ Il faut typiquement recommencer plusieurs dizaines de fois un apprentissage en partant avec différentes initialisations des poids
- Efficacité en reconnaissance
  - ▶ Possibilité de temps réel

## Expressivité

- Quelle influence du nombre de couches ?
  - du nombre de neurones par couche ?
- ⇒ Une couche cachée suffit pour un apprentissage universel ! Mais ...

# Vers les réseaux profonds

Problème : plus le réseau est profond plus il est dur à entraîner

- le gradient s'évapore (vanishing)
- le sur-apprentissage est très favorisé

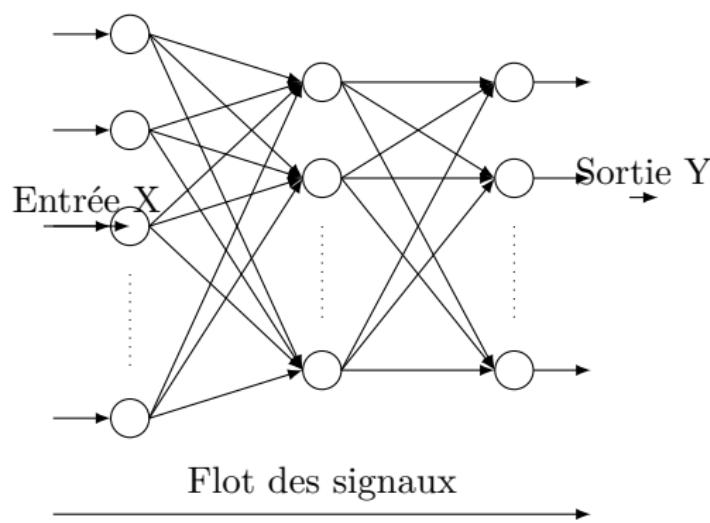
## Quelques solutions

- utiliser des architectures peu propices au sur-apprentissage (convolutives, RBM, ...)
- Early-stopping
- Apprentissage en bruitant les données d'entrées  
⇒ pas suffisant
- Première passe d'apprentissage pour “bien initialiser” les couches ⇒ (apprentissage couche par couche, auto-encoders)
- Drop-out : permet de limiter le sur-apprentissage (éteindre/supprimer un nombre de neurones aléatoirement pendant l'apprentissage)
- utilisation de fonctions d'activation spécifiques (ReLU etc)
- utilisation d'architecture spécifiques (couches résiduelles etc)

# Plan

# Topologie typique

Couche d'entrée    Couche cachée    Couche de sortie



Pour chaque neurone k, la sortie  $z_k$

$$z_k = g \left( \sum_{j=0}^d w_{j,k} z_j \right) = g(a_k)$$

où

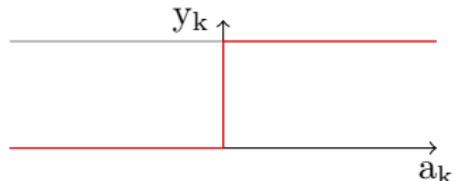
- $w_{j,k}$  : poids de la connexion de cellule j à la cellule k
- $a_k$  : activation de la cellule k  
$$a_k = \sum_{j=0}^d w_{j,k} z_j$$
- g : fonction d'activation

## Apprentissage :

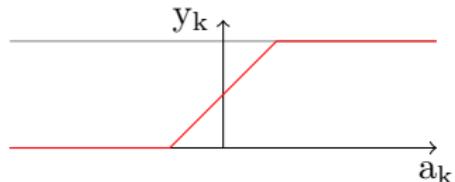
- Minimiser la fonction de coût  $L(W, \{X, Y\})$  en fonction du paramètre  $W = (w_{i,j})$
- Algorithme de rétro-propagation de gradient  $\Delta w_{i,j} \propto \frac{\partial L}{\partial w_{i,j}}$

# Fonction d'activation

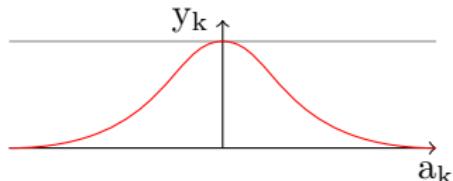
- Fonction à seuil



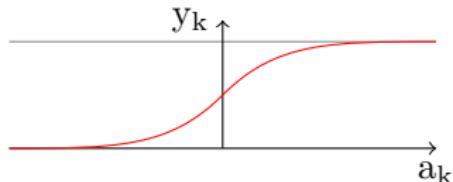
- Fonction à rampe



- Fonction radiale



- Fonction sigmoïde



- ▶ 
$$g(a) = \frac{1}{1+\exp(-a)}$$
- ▶ 
$$g'(a) = g(a)(1 - g(a))$$

# Algorithme

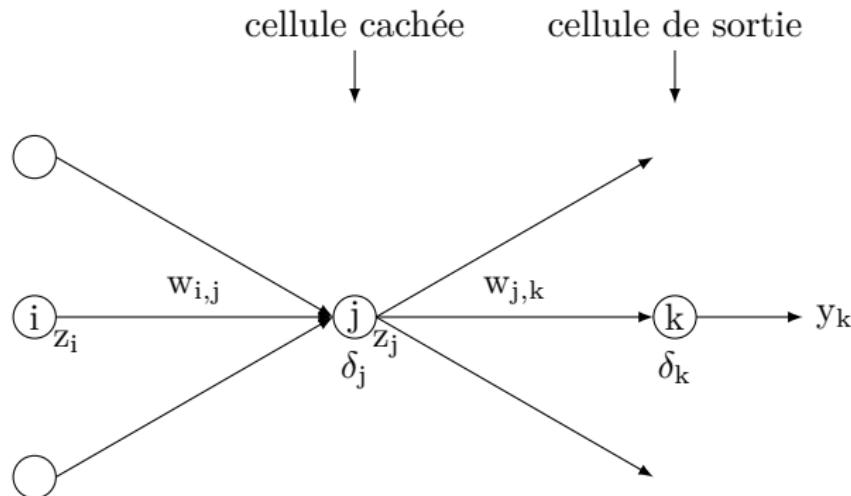
- ① Présentation d'un/des exemple(s) parmi l'ensemble d'apprentissage
- ② Calcul de l'état du réseau (phase forward)
- ③ Calcul de l'erreur avec un coût donné : e.g.  $= (y - \hat{y})^2$
- ④ Calcul des gradients (par l'algorithme de rétro-propagation du gradient)
- ⑤ Modification des poids
- ⑥ Critère d'arrêt (sur l'erreur, nombre de présentation d'exemples...)
- ⑦ Retour en 1

# La rétro-propagation de gradient

- Le problème :
  - ▶ Détermination des responsabilités (credit assignment problem)
  - ▶ Quelle connexion est responsable, et de combien, de l'erreur ?
- Principe :
  - ▶ Calculer l'erreur sur une connexion en fonction de l'erreur sur la couche suivante
- Deux étapes :
  - ① Evaluation des dérivées de l'erreur par rapport aux poids
  - ② Utilisation de ces dérivées pour calculer la modification de chaque poids

# La rétro-propagation de gradient

- $a_i$  : activation de la cellule  $i$
- $z_i$  : sortie de la cellule  $i$
- $\delta_i$  : erreur attachée à la cellule  $i$

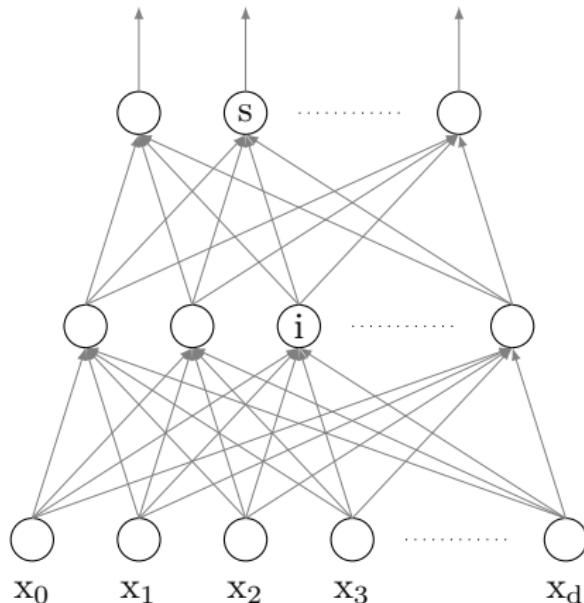


# Passe avant (forward) Illustrations J.-N. Vittaut

Couche de sortie

Couche cachée

Couche d'entrée

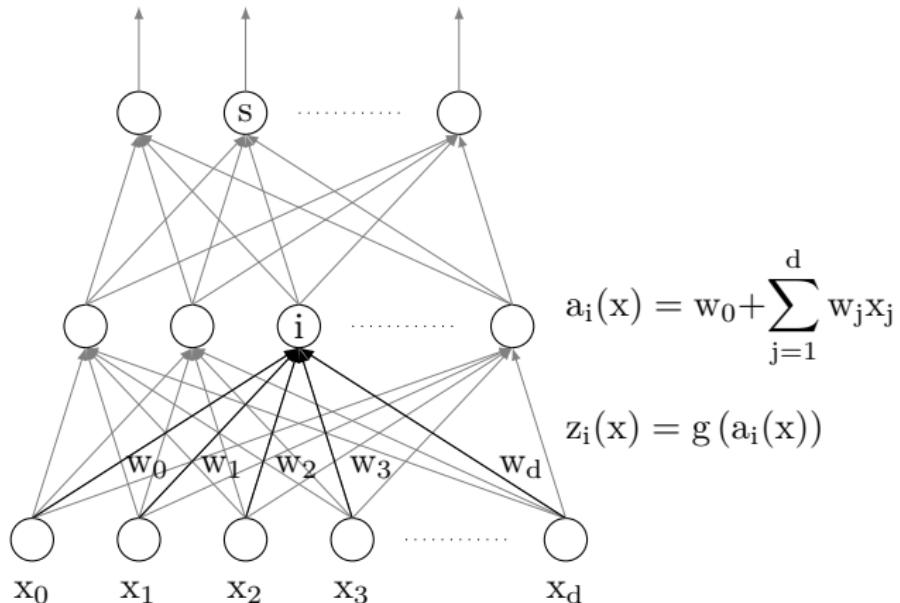


# Passe avant (forward) Illustrations J.-N. Vittaut

Couche de sortie

Couche cachée

Couche d'entrée

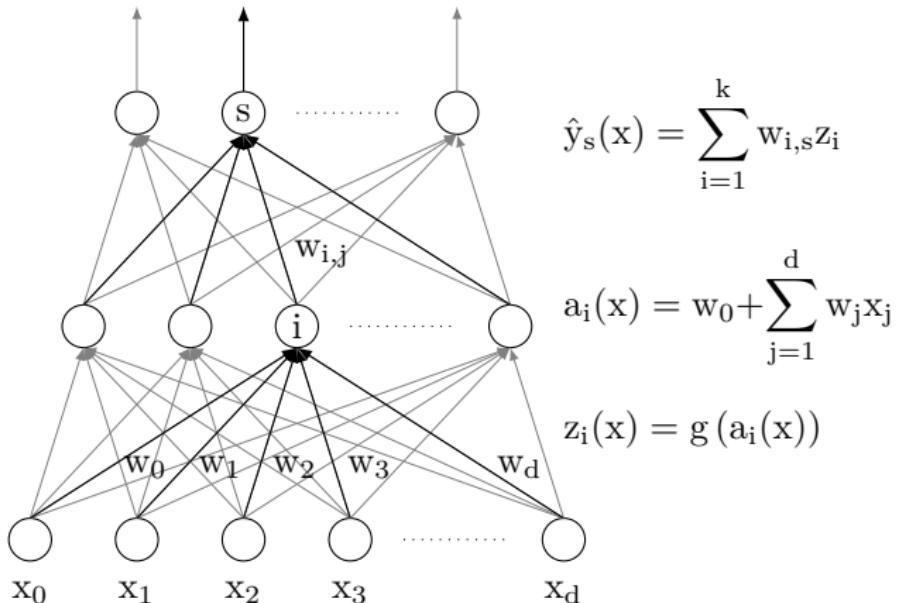


# Passe avant (forward) Illustrations J.-N. Vittaut

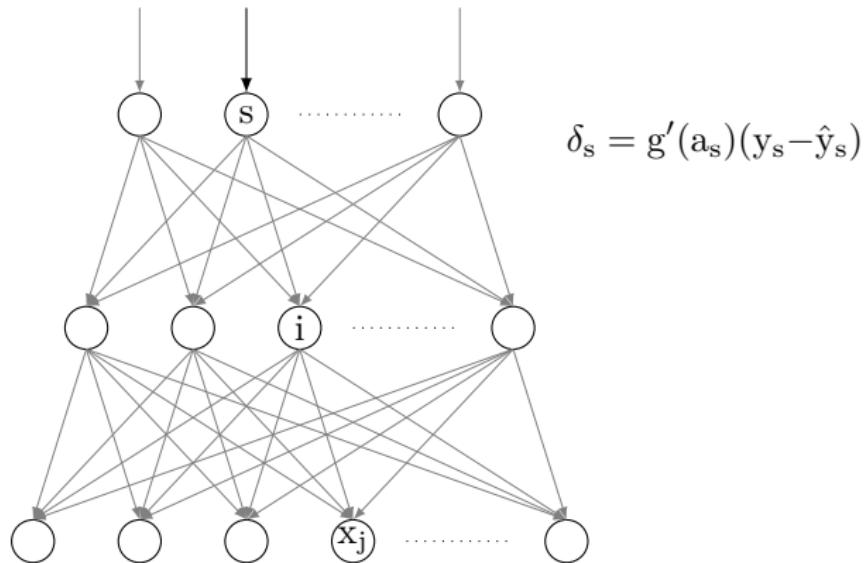
Couche de sortie

Couche cachée

Couche d'entrée

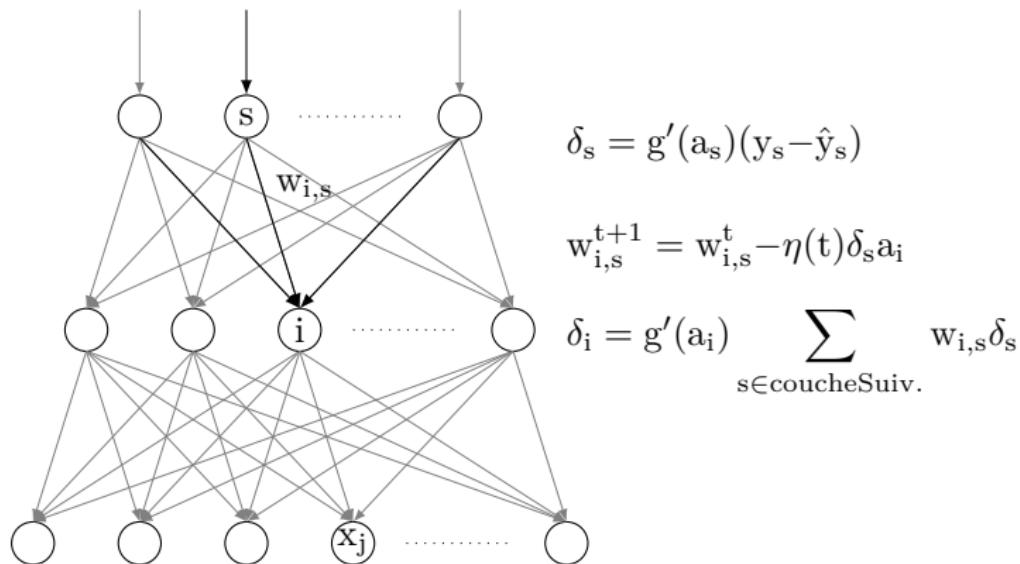


## Passe arrière (backward)



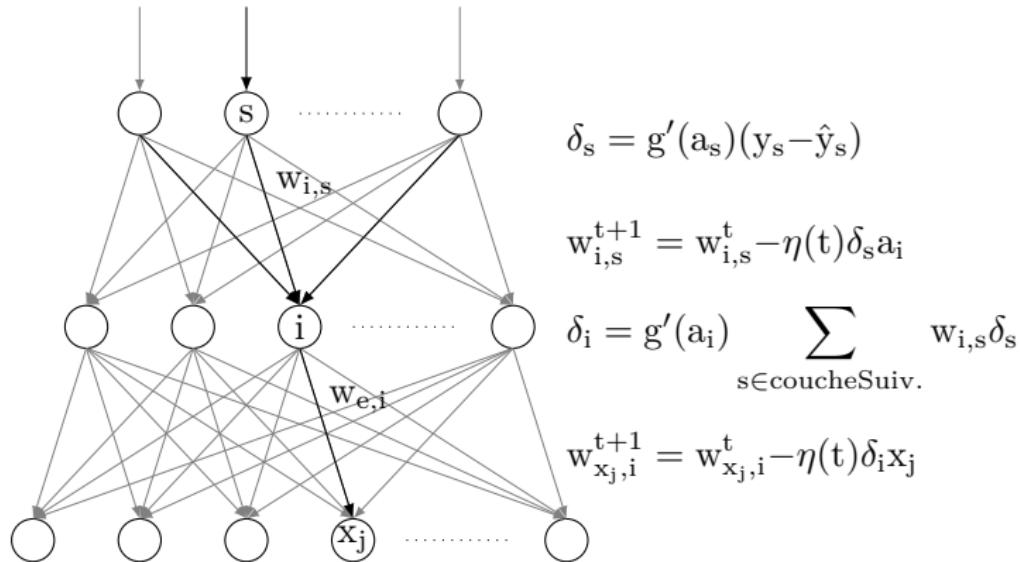
- $\delta_s$  : erreur en sortie
- $\delta_i$  : somme des erreurs provenant des cellules suivantes

## Passe arrière (backward)



- $\delta_s$  : erreur en sortie
- $\delta_i$  : somme des erreurs provenant des cellules suivantes

## Passe arrière (backward)



- $\delta_s$  : erreur en sortie
- $\delta_i$  : somme des erreurs provenant des cellules suivantes

# La rétro-propagation de gradient

- 1. Evaluation de l'erreur  $L$  due à chaque connexion :  $\frac{\partial L}{\partial w_{i,j}}$ 
  - ▶ calculer l'erreur sur la connexion  $w_{i,j}$  en fonction de l'erreur après la cellule  $j$

$$\frac{\partial L}{\partial w_{i,j}} = \frac{\partial L}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial w_{i,j}} = \delta_j z_i$$

- ▶ Pour les cellules de la couche de sortie :

$$\delta_k = \frac{\partial L}{\partial a_k} = g'(a_k)(y_k - \hat{y}_k)$$

- ▶ Pour les cellules d'une couche cachée :

$$\delta_j = \frac{\partial L}{\partial a_j} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial a_j} = \sum_k \delta_k \frac{\partial a_k}{\partial z_j} \frac{\partial z_j}{\partial a_j} = g'(a_j) \cdot \sum_k w_{j,k} \delta_k$$

# Plan

# PyTorch et Tensorflow

## PyTorch, c'est ...

- Un framework pour le développement et l'apprentissage de réseaux Deep sur CPU et GPU
- Une architecture modulaire de contenants et conteneurs pour la construction d'architecture flexible
- Un mécanisme de différenciation automatique : l'Autograd
- Une couche d'abstraction pour l'optimisation qui permet d'utiliser une variété de descentes de gradient
- Une gestion simplifiée des données pour la constitution des mini-batchs

## PyTorch vs TensorFlow

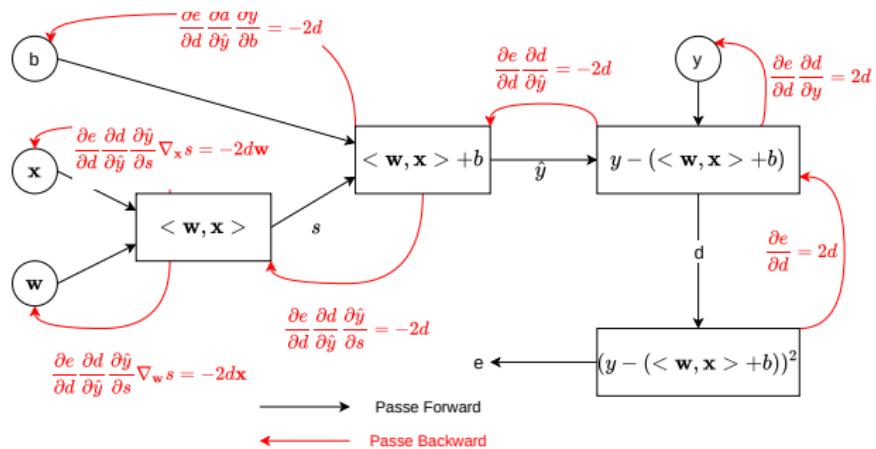
- PyTorch plus récent, donc moins intégré dans l'industrie
- Déploiement, rapidité et processus industriel en faveur de TensorFlow
- Flexibilité, prototyping, simplicité en faveur de PyTorch

Les deux frameworks ont tendance à se rapprocher en termes de fonctionnalités ces derniers temps.

# Objet de base en PyTorch : le Tenseur

```
# Création de tenseurs et caractéristiques
## Créer un tenseur à partir d'une liste
print(torch.tensor([[1.,2.,3.],[2.,3,4.]]))
## Créer un tenseur tensor rempli de 1 de taille 2x3x4
print(torch.ones(2,3,4))
## tenseur de zéros de taille 2x3 de type float
print(torch.zeros(2,3,dtype=torch.float))
## tirage uniforme entier entre 10 et 15,
## remarquez l'utilisation du _ dans random pour l'opération inplace
print(torch.zeros(2,3).random_(10,15))
## tirage suivant la loi normale
a=torch.zeros(2,3).normal_(1,0.1)
print(a)
## équivalent à zeros(3,4).normal_
b = torch.randn(3,4)
## Création d'un vecteur
c = torch.randn(3)
## concaténation de tenseurs
print(torch.cat((a,a),1))
## Taille des tenseurs/vecteurs
print(a.size(1),b.shape,c.size())
## Conversion de type
print(a.int(),a.int().type())
# Opérations élémentaires sur les tenseurs
## produit scalaire (et contrairement à numpy, que produit scalaire)
print(c.dot(c))
## produit matriciel : utilisation de @ ou de la fonction mm
print(a.mm(b), a @ b)
## transposé
print(a.t(),a.T)
## index du maximum selon une dimension
print("argmax : ",a.argmax(dim=1))
## somme selon une dimension/de tous les éléments
print(b.sum(1), b.sum())
## moyenne selon une dimension/sur tous les éléments
print(b.mean(1), b.mean())
## changer la taille du tenseur (la taille totale doit être inchangée)
print(b.view(2,6))
## somme/produit/puissance termes a termes
print(a*a,a*a,a**2)
## attention ! comme sous numpy, il peut y avoir des pièges !
## Vérifier toujours les dimensions !!
a=torch.zeros(5,1)
b = torch.zeros(5)
## la première opération fait un broadcast et le résultat est tenseur à 2 dimensions,
## le résultat de la deuxième opération est bien un vecteur
print(a+b,a.t()-b)
```

# Autograd et Graphe de calcul



## Graphe de calcul

- Graphe orienté, décrit l'enchaînement des opérations de calcul
- Chaque source est une variable d'entrée, un seul nœud de sortie : le résultat du calcul
- En connaissant les dérivées de chaque opération, le graphe permet de calculer les gradients de la sortie par rapport à chaque variable d'entrée.

# Autograd en PyTorch : Régression linéaire

- Nécessite d'avoir le flag `requires_grad` fixé à `True` lorsque l'on souhaite calculer le gradient par rapport à ce tenseur :

```
data_x, data_y = ...
w = torch.randn(1,data_x.size(1),requires_grad=True)
b = torch.randn(1,1,requires_grad=True)
```

- On effectue le calcul

```
yhat = (x @ w.T)+b
loss_mse = ((yhat.view(-1,1)-data_y.view(-1,1))**2).sum()
loss_mse = loss_mse/data_x.size(0)
```

- Puis on exécute l'Autograd

```
loss_mse.backward()
```

- On obtient les gradients de `loss_mse` par rapport à `w` et `b`

```
print(w.grad, b.grad)
```

# Les premiers pièges et quelques astuces

- Le graphe de calcul coûte très cher ! (en mémoire, en temps)
  - ▶ par défaut, un tenseur est créé sans le flag requires\_grad
  - ▶ si un backward est effectué  $\Rightarrow$  message d'erreur
  - ▶ les gradients intermédiaires ne sont pas stockés ! (juste calculés et oubliés)

- Possibilité de désactiver temporairement l'autograd :

```
with torch.no_grad():
    # graphe de calcul désactivé
    w = ...
    z = ...
    # graphe de calcul activé
    y = ...
```

- Une fois le backward exécuté, on ne peut plus le refaire (une seule passe) !
- L'opération est cumulative ! La variable grad n'est pas remise à zéro, tout s'accumule (pourquoi ?)
- A retenir : `z.backward()`  $\Rightarrow$  dérivée partielle de `z` par rapport à tout ce qui a servi à la construire (et résultats dans la variable grad des variables en question).