

Géométrie des Données et Apprentissage Machine

Lecture 1 – Introduction et Notions Fondamentales

Youssef MESRI - MINES Paris - PSL

November 24, 2025

Plan

- 1 Motivations
- 2 Concentration des distances : preuve par récurrence
- 3 Notions fondamentales
- 4 Réduction de dimension

Lecture 1 : plan

- Notion de données en haute dimension
- Malédiction de la dimension et concentration de distances
- Variétés et distances géodésiques
- Réduction de dimension
 - PCA
 - Isomap
 - Diffusion Maps
 - t-SNE
- Labs

Pourquoi une géométrie des données ?

- Données modernes : **images, sons, textes** → espaces \mathbb{R}^d avec $d \gg 1$.
- Pourtant, elles possèdent souvent une **structure intrinsèque** de faible dimension.
- **Idée clé** : les données sont souvent concentrées sur une **variété** de dimension intrinsèque $k \ll d$.
- **Exemple** : images de chiffres manuscrits (784 dimensions) mais proches d'une variété de dimension *beaucoup* plus petite ≈ 10 .

MNIST

7 4 3 1 0 8 3 4
7 2 4 9 4 8 6 5
6 9 0 3 1 5 8 1
0 0 8 3 4 9 8 0
5 3 8 5 0 1 0 5
4 6 4 3 6 6 1 7
7 3 9 9 6 9 5 0

Explosion dimensionnelle : malédiction de la dimension

- Lorsque la dimension d augmente, le volume de l'espace croît **exponentiellement**.
- Dans un cube unité $[0, 1]^d$, la majeure partie du volume se concentre près des **bords**.
- Les distances deviennent moins discriminantes :

Illustration mathématique

Soient n points tirés uniformément dans $[0, 1]^d$. On définit :

$$d_{\min} = \min_{i \neq j} \|x_i - x_j\|,$$

$$d_{\max} = \max_{i \neq j} \|x_i - x_j\|.$$

On observe que :

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \frac{d_{\max} - d_{\min}}{d_{\min}} \rightarrow 0.$$

Conséquence : toutes les distances deviennent presque égales !

Mise en place

Deux points $x, y \in [0, 1]^d$ i.i.d. uniformes. Définir la distance au carré :

$$S_d := \|x - y\|_2^2 = \sum_{i=1}^d (x_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^d X_i,$$

où X_i sont i.i.d. copies de $X := (U - V)^2$ avec $U, V \sim \mathcal{U}[0, 1]$ indépendants. On montrera : $\mathbb{E}[S_d] = d\mu$, $\text{Var}(S_d) = d\sigma^2$ et la dispersion relative $\rightarrow 0$.

Cas $d = 1$: loi de la différence et moments

Posons $Z := U - V$. Alors $Z \sim$ loi triangulaire sur $[-1, 1]$ de densité $f_Z(z) = 1 - |z|$.

Comme $X = Z^2$:

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-1}^1 z^2(1 - |z|) dz = 2 \int_0^1 z^2(1 - z) dz = 2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4}\right) = \frac{1}{6},$$

$$\mathbb{E}[X^2] = \int_{-1}^1 z^4(1 - |z|) dz = 2 \int_0^1 z^4(1 - z) dz = 2\left(\frac{1}{5} - \frac{1}{6}\right) = \frac{1}{15}.$$

Donc $\mu = \mathbb{E}[X] = \frac{1}{6}$ et $\sigma^2 = \text{Var}(X) = \frac{1}{15} - \frac{1}{36} = \frac{7}{180}$.

Vérification alternative (moments de l'uniforme)

Moments utiles pour $W \sim \mathcal{U}[0, 1]$:

$\mathbb{E}[W] = \frac{1}{2}$, $\mathbb{E}[W^2] = \frac{1}{3}$, $\mathbb{E}[W^3] = \frac{1}{4}$, $\mathbb{E}[W^4] = \frac{1}{5}$. Avec indépendance de U, V :

$$\mathbb{E}[(U - V)^4] = 2\mathbb{E}[U^4] - 4\mathbb{E}[U^3]\mathbb{E}[V] + 6\mathbb{E}[U^2]\mathbb{E}[V^2] - 4\mathbb{E}[U]\mathbb{E}[V^3] = \frac{1}{15}.$$

On retrouve donc $\mathbb{E}[X^2] = \frac{1}{15}$ et $\text{Var}(X) = \frac{7}{180}$.

Étape de récurrence (somme de i.i.d.)

Supposer vrai pour d : $\mathbb{E}[S_d] = d\mu$, $\text{Var}(S_d) = d\sigma^2$. Pour $d + 1$:

$$S_{d+1} = S_d + X_{d+1} \Rightarrow \mathbb{E}[S_{d+1}] = (d+1)\mu, \quad \text{Var}(S_{d+1}) = (d+1)\sigma^2,$$

par indépendance. Par récurrence simple, les formules valent pour tout $d \geq 1$.

Concentration relative et Chebyshev

Coefficient de variation :

$$\frac{\sqrt{\text{Var}(S_d)}}{\mathbb{E}[S_d]} = \frac{\sqrt{d\sigma^2}}{d\mu} = \frac{C}{\sqrt{d}}, \quad C = \frac{\sqrt{\sigma^2}}{\mu} = 6\sqrt{\frac{7}{180}}.$$

Chebyshev : pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\Pr(|S_d - \mathbb{E}[S_d]| \geq \varepsilon \mathbb{E}[S_d]) \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2 \mu^2} \cdot \frac{1}{d} \xrightarrow{d \rightarrow \infty} 0.$$

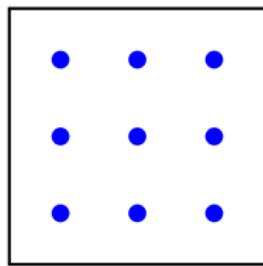
Donc **concentration relative** de S_d autour de sa moyenne.

Interprétation géométrique

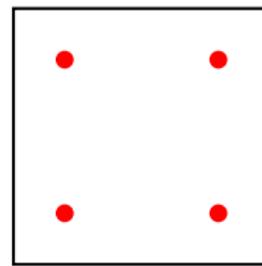
- $\mathbb{E}[S_d] = d/6$ croît linéairement en d (donc $\mathbb{E}[\|x - y\|_2] \asymp \sqrt{d}$).
- L'écart-type est $\asymp \sqrt{d}$ aussi, mais **relativement** à la moyenne il vaut $O(1/\sqrt{d})$.
- En grande dimension, les distances se ressemblent **relativement** : perte de pouvoir discriminant.

Exemple numérique : distances en haute dimension

- Simulation : on génère 10^4 points dans $[0, 1]^d$.
- On calcule la distance moyenne \bar{d} et son écart-type σ_d .
- Résultat : $\sigma_d/\bar{d} \rightarrow 0$ quand $d \rightarrow \infty$.



2D



3D (projection)

Illustration : concentration des distances quand d augmente (ici 2D et projection 3D).

Conséquences pratiques

- Les méthodes classiques basées sur des distances euclidiennes deviennent inefficaces.
- Clustering et k-plus proches voisins perdent leur sens.
- Nécessité de méthodes tenant compte de la **structure intrinsèque** des données.
- D'où la géométrie des données : travailler dans une *dimension intrinsèque* $k \ll d$.

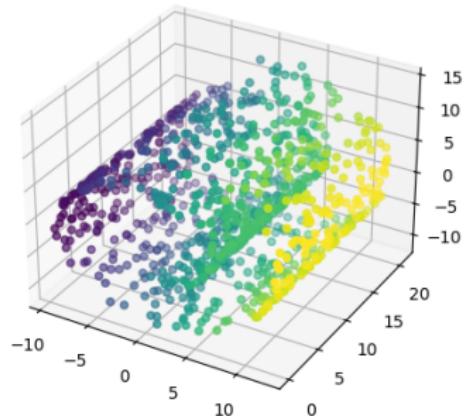
Explosion dimensionnelle

- Données modernes : images, sons, textes → espaces \mathbb{R}^d avec $d \gg 1$.
- **Malédiction de la dimension :**
 - Volume croît exponentiellement avec d .
 - Distances deviennent peu discriminantes.
- Besoin de méthodes exploitant la structure « cachée ».

Exemple : MNIST

- Chaque image : $28 \times 28 = 784$ pixels \rightarrow point dans \mathbb{R}^{784} .
- Mais les chiffres manuscrits vivent sur une structure de dimension **intrinsèque** $k \ll 784$.
- Question : comment trouver k et représenter les données sur \mathbb{R}^k ?

Exemple visuel : Swiss Roll



Un nuage de points en 3D mais structurellement 2D.

Hypothèse de variété

Les données $x_i \in \mathbb{R}^d$ sont concentrées sur une variété \mathcal{M} de dimension $k \ll d$.

$$x_i \in \mathcal{M} \subset \mathbb{R}^d, \quad \dim(\mathcal{M}) = k$$

Espace métrique

Un espace métrique est une paire (X, d) avec :

$$d(x, y) \geq 0 \quad (\text{positivité})$$

$$d(x, y) = 0 \iff x = y \quad (\text{séparation})$$

$$d(x, y) = d(y, x) \quad (\text{symétrie})$$

$$d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z) \quad (\text{inégalité triangulaire})$$

Distances usuelles

- Norme ℓ^2 : $d(x, y) = \|x - y\|_2 = \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2}$.
- Norme ℓ^1 : $d(x, y) = \sum_i |x_i - y_i|$.
- Cosinus: $d(x, y) = 1 - \frac{\langle x, y \rangle}{\|x\| \|y\|}$.
- Distances adaptées aux graphes et variétés.

Distance cosinus et distance angulaire

Pour deux vecteurs $x, y \in \mathbb{R}^d$ non nuls :

$$\cos \theta = \frac{x \cdot y}{\|x\| \|y\|}.$$

- **Distance cosinus classique :**

$$d_{\text{cos}}(x, y) = 1 - \cos \theta = 1 - \frac{x \cdot y}{\|x\| \|y\|}.$$

- Varie entre 0 et 2. - Très utilisée en NLP et apprentissage automatique. - Pas une vraie métrique : triangle inequality peut échouer.

- **Distance basée sur l'angle :**

$$d_{\text{angle}}(x, y) = \arccos \left(\frac{x \cdot y}{\|x\| \|y\|} \right).$$

- Angle réel entre les vecteurs. - Vraie métrique : satisfait la triangle inequality. - Correspond à distance géodésique sur la sphère unité S^{d-1} .

- Une variété \mathcal{M} est un espace qui ressemble localement à \mathbb{R}^k .
- Exemple : sphère S^2 dans \mathbb{R}^3 .

Définition simplifiée

Pour chaque $x \in \mathcal{M}$, il existe un voisinage U et une bijection $\varphi : U \rightarrow V \subset \mathbb{R}^k$.

Distance géodésique

Sur une variété \mathcal{M} , la distance naturelle est la longueur du plus court chemin γ contenu dans \mathcal{M} :

$$d_{\mathcal{M}}(x, y) = \inf_{\gamma: [0, 1] \rightarrow \mathcal{M}} \int_0^1 \|\dot{\gamma}(t)\| dt$$

Exemple : distance sur la sphère = angle central multiplié par le rayon.

Variétés de données : définition détaillée

Définition informelle : Une variété \mathcal{M} de dimension k est un sous-ensemble de \mathbb{R}^d qui, localement autour de chaque point, ressemble à \mathbb{R}^k .

- Pour chaque point $x \in \mathcal{M}$, il existe un voisinage U et une application bijective **carte** $\varphi : U \rightarrow V \subset \mathbb{R}^k$ telle que φ et φ^{-1} soient continues (ou différentiables pour les variétés différentiables).
- k est la **dimension intrinsèque** de la variété.
- Exemple : le cercle $S^1 \subset \mathbb{R}^2$ est une variété 1D, la sphère $S^2 \subset \mathbb{R}^3$ est une variété 2D.

Notation : $\mathcal{M}^k \subset \mathbb{R}^d$ indique une variété de dimension k dans \mathbb{R}^d .

Propriétés fondamentales d'une variété

- **Localement Euclidienne** : autour de chaque point, les distances et topologie se comportent comme dans \mathbb{R}^k .
- **Dimension intrinsèque** : le nombre minimal de coordonnées nécessaires pour paramétriser la variété.
- **Continuité et différentiabilité** : cartes et applications de transition doivent être continues ou différentiables.
- **Géodésiques** : la distance naturelle sur la variété est la longueur du plus court chemin restant dans la variété.
- **Courbure** : mesure locale de la déviation par rapport à un espace plat \mathbb{R}^k .

Exemples de variétés courantes

- Cercle S^1 dans \mathbb{R}^2 (dimension 1).
- Sphère S^2 dans \mathbb{R}^3 (dimension 2).
- Cylindre dans \mathbb{R}^3 (dimension 2).
- Variétés de matrices de rang fixe : $\{X \in \mathbb{R}^{m \times n} : \text{rank}(X) = r\}$.
- Espace des rotations $SO(3)$ (dimension 3), utilisé en robotique et vision.

Carte et atlas

- **Carte** : fonction $\varphi : U \subset \mathcal{M} \rightarrow V \subset \mathbb{R}^k$ qui localement paramétrise la variété.
- **Atlas** : collection de cartes $\{(U_i, \varphi_i)\}$ recouvrant toute la variété.
- **Exemple** : sphère S^2 , on peut utiliser coordonnées sphériques différentes pour couvrir les pôles et l'équateur.
- Les cartes permettent de définir des notions de dérivée, intégrale et courbure sur la variété.

Distances et géodésiques sur une variété

- La distance euclidienne $\|x - y\|$ dans \mathbb{R}^d ne respecte pas toujours la structure intrinsèque de la variété.
- La **distance géodésique** $d_M(x, y)$ est la longueur du chemin le plus court restant dans la variété.
- Exemples :
 - Cercle S^1 : distance géodésique = arc le plus court entre deux points.
 - Sphère S^2 : distance géodésique = longueur de l'arc de grand cercle.
- Les distances géodésiques sont fondamentales pour la réduction de dimension non linéaire et le clustering sur variétés.

Distance géodésique sur la sphère : arc de grand cercle

- Le plus court chemin sur la sphère est l'**arc de grand cercle** reliant A et B .
- Longueur de l'arc : $L = R \cdot \theta$, avec θ en radians.
- Angle au centre : $\theta = \arccos\left(\frac{x \cdot y}{R^2}\right)$ pour $x, y \in S^2$.
- Pour une sphère unité ($R = 1$) : $d_{S^2}(x, y) = \arccos(x \cdot y)$.

Applications des variétés en science des données

- Réduction de dimension non linéaire : Isomap, LLE, Diffusion Maps.
- Détection de structure intrinsèque dans des données haute dimension.
- Modélisation de données sur des espaces non Euclidiens : rotations, formes, graphes.
- Méthodes de machine learning adaptées aux données de faible dimension intrinsèque.

Laplacien de graphe

Pour un graphe $G = (V, E)$ avec poids w_{ij} :

$$D_{ii} = \sum_j w_{ij},$$

$$L = D - W.$$

Propriétés :

- L est semi-défini positif.
- L approxime le Laplacien sur la variété sous-jacente.

Exemple : chaleur sur un graphe

$$\frac{du}{dt} = -Lu$$

L joue le rôle de dérivée seconde discrète. Solution : $u(t) = e^{-tL}u(0)$.

Résumé

Idée clé

Les données haute dimension vivent souvent sur une variété de faible dimension. La géométrie des données permet d'exploiter cette structure via distances, graphes et spectre.

Prochain module

Réduction de dimension non linéaire (Isomap, Diffusion Maps, etc.).

Introduction à la réduction de dimension

But : trouver $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^k$ qui conserve la géométrie.

- PCA : directions de variance maximale.
- Isomap : distances géodésiques.
- Diffusion maps : diffusion de chaleur.

PCA en formule

$$\Sigma = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)(x_i - \mu)^T$$

vecteurs propres de $\Sigma \Rightarrow$ directions principales.

Analyse en Composantes Principales (PCA) : Introduction

- PCA est une méthode linéaire de réduction de dimension.
- Objectif : trouver les directions principales (axes) qui capturent le plus de variance dans les données.
- Idée : projeter les données dans un sous-espace de dimension $k \ll d$ en minimisant la perte d'information.
- Utile pour visualisation, compression, prétraitement de machine learning.

Formulation mathématique de la PCA

- Soient $X = [x_1, \dots, x_n]^\top \in \mathbb{R}^{n \times d}$ les données centrées ($\bar{x} = 0$).
- Matrice de covariance :

$$\Sigma = \frac{1}{n} X^\top X \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

- Cherchons vecteurs propres v_j et valeurs propres λ_j :

$$\Sigma v_j = \lambda_j v_j, \quad j = 1, \dots, d.$$

- Les v_j sont les directions principales (composantes principales).

Projection sur les composantes principales

- Les k premières composantes principales correspondent aux k plus grandes valeurs propres $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k$.
- Projection :

$$y_i = V_k^\top x_i, \quad V_k = [v_1, \dots, v_k] \in \mathbb{R}^{d \times k}.$$

- Reconstruction approchée :

$$\hat{x}_i = V_k y_i = V_k V_k^\top x_i.$$

- Erreur de reconstruction : minimisée par la PCA.

Propriété d'optimalité

La PCA est l'approximation linéaire optimale au sens des moindres carrés :

$$\min_{V_k \in \mathbb{R}^{d \times k}, V_k^\top V_k = I_k} \sum_{i=1}^n \|x_i - V_k V_k^\top x_i\|^2.$$

La solution est donnée par les k vecteurs propres associés aux k plus grandes valeurs propres de Σ .

Variance expliquée

- Variance totale : $\text{Tr}(\Sigma) = \sum_{j=1}^d \lambda_j$.
- Variance capturée par les k premières composantes : $\sum_{j=1}^k \lambda_j$.
- Fraction de variance expliquée :

$$\text{FVE}(k) = \frac{\sum_{j=1}^k \lambda_j}{\sum_{j=1}^d \lambda_j}.$$

- Permet de choisir le nombre optimal k pour la réduction de dimension.

Exemple numérique

- Données $X \in \mathbb{R}^{100 \times 5}$ simulées.
- Calculer $\Sigma = X^\top X / 100$.
- Calcul des valeurs propres et vecteurs propres.
- Projection sur $k = 2$ premières composantes principales pour visualisation.
- Observer la concentration des données le long des directions principales.

PCA et SVD

- Alternative : utiliser la décomposition en valeurs singulières (SVD) :
 $X = U\Sigma V^\top$.
- Composantes principales : colonnes de V .
- Valeurs propres : carrés des valeurs singulières divisées par n .
- Utile pour $d \gg n$ ou pour stabilité numérique.

Exercice PCA

Soit un ensemble de données centrées $X \in \mathbb{R}^{10 \times 3}$:

- Calculer la matrice de covariance Σ .
- Déterminer les vecteurs propres et valeurs propres.
- Projeter les données sur les 2 premières composantes principales.

Corrigé exercice PCA

- Étape 1 : $\Sigma = X^\top X / 10$.
- Étape 2 : calcul des valeurs propres $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ et vecteurs propres v_1, v_2, v_3 .
- Étape 3 : projection $y_i = [v_1, v_2]^\top x_i$.
- Étape 4 : visualisation et analyse de la variance expliquée.

Isomap

- ① Construire graphe k -NN.
- ② Approximer distances géodésiques par plus courts chemins.
- ③ Appliquer MDS (multidimensional scaling).

Isomap : Introduction

- Isomap (Isometric Mapping) est une méthode non-linéaire de réduction de dimension.
- Objectif : préserver les distances géodésiques entre les points d'une variété plongée dans un espace de haute dimension.
- Extension de MDS (Multidimensional Scaling) aux variétés non-linéaires.

Idée clé d'Isomap

- ① Construire un graphe des plus proches voisins (k -NN ou ϵ -voisinage).
- ② Approximer les distances géodésiques par des plus courts chemins dans le graphe.
- ③ Appliquer le MDS classique avec ces distances géodésiques approximées.

Étape 1 : Graphe de voisinage

- Pour chaque point x_i , on relie ses k plus proches voisins (ou tous les voisins dans une boule de rayon ϵ).
- Arêtes pondérées par la distance euclidienne :

$$w_{ij} = \|x_i - x_j\|_2.$$

- Graphe $G = (V, E)$ approximant la structure locale de la variété.

Étape 2 : Distances géodésiques

- La distance géodésique entre x_i et x_j est approximée par la longueur du plus court chemin dans G :

$$d_G(i, j) = \min_{chemins(i \rightarrow j)} \sum_{(u, v) \in chemin} w_{uv}.$$

- Utilisation d'algorithmes classiques : Dijkstra ou Floyd–Warshall.
- Matrice des distances géodésiques $D_G = (d_G(i, j))_{i,j}$.

Étape 3 : Application de MDS

- Objectif : trouver une configuration de points $Y_1, \dots, Y_n \in \mathbb{R}^d$ telle que

$$\|Y_i - Y_j\|^2 \approx d_G(i, j)^2.$$

- On applique le MDS classique (Scaling multidimensionnel) :

- On construit la matrice des distances au carré $D_G^{(2)} = (d_G(i, j)^2)_{ij}$.
- On centre cette matrice :

$$B = -\frac{1}{2}HD_G^{(2)}H, \quad H = I - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top.$$

- B est une approximation de la matrice de Gram YY^\top .
- On diagonalise $B = V\Lambda V^\top$.
- Les coordonnées en dimension d sont données par :

$$Y = V_d \Lambda_d^{1/2},$$

où V_d contiennent les d vecteurs propres principaux et Λ_d les d plus grandes valeurs propres.

- Ainsi, on obtient une immersion en d dimensions qui préserve au mieux les distances géodésiques.

Étape 3 : Application de MDS

- On applique le MDS classique sur D_G pour obtenir une représentation en basse dimension.
- Centrage double :

$$B = -\frac{1}{2}HD_G^{(2)}H, \quad H = I - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top.$$

- Décomposition spectrale :

$$B = V\Lambda V^\top.$$

- Coordonnées en dimension d :

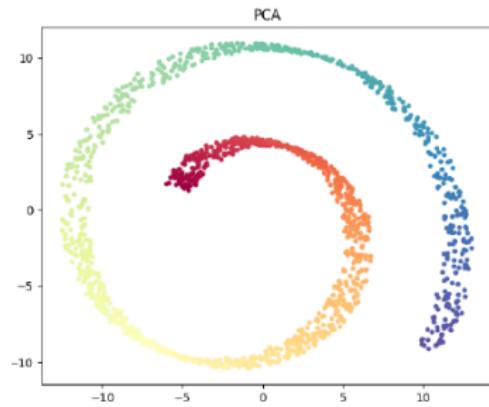
$$Y = V_d\Lambda_d^{1/2}.$$

Propriétés d'Isomap

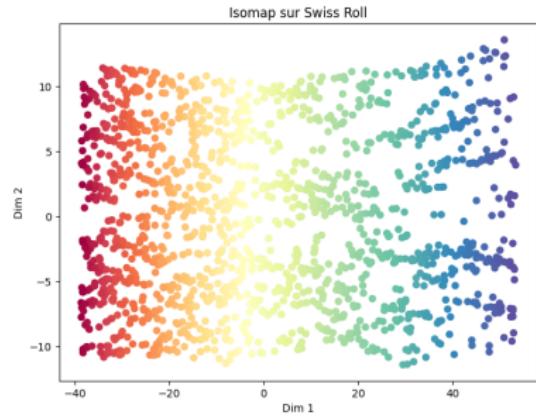
- Préserve la géométrie globale de la variété.
- Gère des données fortement non-linéaires (spirale, Swiss roll).
- Consistance théorique : converge vers la métrique de la variété quand $n \rightarrow \infty$.
- Sensible aux choix de k ou ϵ .

Exemple : Swiss Roll

- Données 3D enroulées en spirale (« rouleau suisse »).
- PCA : incapacité à « dérouler » la structure.
- Isomap : reconstitue correctement la structure 2D sous-jacente.



PCA (projection)



Isomap (unrolling)

Exercice Isomap

- Générer un jeu de données 3D de type Swiss roll.
- Construire le graphe k -NN avec $k = 10$.
- Calculer les plus courts chemins (algorithme de Dijkstra).
- Appliquer MDS sur la matrice de distances.
- Visualiser la représentation 2D obtenue.

Corrigé Exercice Isomap

- Étape 1 : génération des points (x, y, z) .
- Étape 2 : construction du graphe k -NN.
- Étape 3 : distances géodésiques via Dijkstra.
- Étape 4 : matrice B et décomposition spectrale.
- Résultat : une carte 2D déroulant le Swiss roll.

Résumé intuitif d'Isomap

- But : représenter les données dans un espace de dimension réduite d (typiquement 2 ou 3).
- On calcule d'abord les distances géodésiques $d_G(i,j)$ entre points dans l'espace original (via le graphe de voisinage).
- Puis on cherche des points $Y_i \in \mathbb{R}^d$ tels que :

$$\|Y_i - Y_j\| \approx d_G(i,j).$$

- Ainsi :
 - Les distances locales sont respectées.
 - La géométrie intrinsèque de la variété est préservée.
 - On obtient une carte en basse dimension reflétant la structure réelle des données.
- Différence clé avec PCA : Isomap ne se base pas uniquement sur les distances euclidiennes globales, mais sur les distances intrinsèques (géodésiques).