

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
BACHARELADO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

**Dimensionalidade e Escala em
Aprendizado de Máquina**
*Uma Análise Teórica e Experimental da
Redução de Dimensionalidade*

Felipe Pereira Ramos Barboza

MONOGRAFIA FINAL

MAC 499 — TRABALHO DE
FORMATURA SUPERVISIONADO

Supervisora: Prof.^a Dr.^a Nina S. T. Hirata

São Paulo
2025

*O conteúdo deste trabalho é publicado sob a licença CC BY 4.0
(Creative Commons Attribution 4.0 International License)*

Resumo

Felipe Pereira Ramos Barboza. **Dimensionalidade e Escala em Aprendizado de Máquina: Uma Análise Teórica e Experimental da Redução de Dimensionalidade.** Monografia (Bacharelado). Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2025.

O crescimento exponencial na quantidade e complexidade dos dados modernos tem trazido desafios significativos para o aprendizado de máquina e a mineração de dados, especialmente quando se trata de representações em espaços de alta dimensão. Este trabalho apresenta uma análise teórica e prática da redução de dimensionalidade, discutindo tanto os fundamentos matemáticos que asseguram sua viabilidade quanto as técnicas contemporâneas que a implementam. Primeiramente, demonstra-se, com base no Lema de Johnson–Lindenstrauss, que é possível reduzir a dimensionalidade de conjuntos de dados mantendo aproximadamente as distâncias originais entre pontos. Em seguida, investigam-se métodos modernos de redução não linear, como o *t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding* (t-SNE) e o *Uniform Manifold Approximation and Projection* (UMAP), explorando suas propriedades e aplicações em análise de dados de alta dimensão.

Palavras-chave: Redução de Dimensionalidade. Lema de Johnson–Lindenstrauss. t-SNE. UMAP.

Lista de figuras

1.1	Grade 20×20 obtida projetando embeddings do CIFAR-10 com UMAP após extração de features por uma ResNet-50 pré-treinada sobre o ImageNet. As imagens organizam-se por similaridade visual.	2
6.1	Comparação entre t-SNE e UMAP no MNIST. O t-SNE mantém vizinhanças locais com maior fidelidade, enquanto o UMAP produz agrupamentos mais compactos e bem separados.	24
6.2	Comparação entre t-SNE e UMAP no Fashion-MNIST. O t-SNE preserva melhor pequenas variações locais, enquanto o UMAP forma agrupamentos mais definidos mesmo em classes naturalmente sobrepostas.	25
6.3	Comparação entre t-SNE e UMAP no CIFAR-10. O t-SNE revela subestruturas internas dentro das classes, enquanto o UMAP gera clusters mais compactos e separados, coerentes com os valores mais altos de DSC.	25
6.4	Comparação entre t-SNE e UMAP no Breast Cancer. Como o conjunto possui apenas duas classes, ambos os métodos produzem separações claras, com diferenças visuais mais sutis do que nos datasets de imagens.	26

Lista de tabelas

6.1	Tempo de execução (em segundos) para cada método de projeção.	23
6.2	Métricas de avaliação das projeções (valores conforme saída dos experimentos).	24

Sumário

1	Introdução	1
2	É possível reduzir a dimensionalidade?	5
2.1	A viabilidade da redução de dimensionalidade	5
2.2	Demonstração do Lema de Johnson–Lindenstrauss via concentração gaussiana	6
3	Projeções Não Lineares e o Método t-SNE	11
3.1	Limitações das Projeções Aleatórias	11
3.2	Da SNE ao t-SNE: uma evolução motivada por limitações práticas	12
3.3	O modelo probabilístico do SNE	12
3.4	Soluções do t-SNE	13
3.5	Função de custo e otimização	14
4	O Método UMAP	15
4.1	Uma nova perspectiva sobre redução de dimensionalidade	15
4.2	Da probabilidade à topologia: o salto conceitual do t-SNE ao UMAP	15
4.3	Uma visão computacional: grafos e otimização	16
5	Metodologia Experimental	19
5.1	Conjuntos de Dados	19
5.2	Pipeline Experimental	20
5.3	Métricas de Avaliação	20
5.4	Implementação e Reprodutibilidade	21
6	Resultados	23
6.1	Visão Geral dos Resultados	23
6.2	MNIST	24
6.3	Fashion-MNIST	24

6.4	CIFAR-10	25
6.5	Breast Cancer Wisconsin	26
7	Conclusão	27
Apêndices		
A	Notebook de Experimentos	29
	Referências	39

Capítulo 1

Introdução

Em cenários de aprendizado de máquina e mineração de dados, é comum lidar com conjuntos de dados de alta dimensionalidade. Exemplos típicos incluem bases de mercado compostas por milhares de produtos, representações textuais em que cada documento é descrito por um vetor de tamanho igual ao vocabulário, e perfis de expressão gênica com dezenas de milhares de atributos contínuos.

A alta dimensionalidade impõe desafios significativos tanto em termos computacionais, devido ao elevado custo de processamento, quanto estatísticos, em virtude do fenômeno conhecido como *maldição da dimensionalidade* (*curse of dimensionality*). À medida que o número de dimensões cresce, os dados tornam-se mais esparsos e as distâncias entre pontos perdem significado, prejudicando tarefas fundamentais como classificação, agrupamento e visualização.

Para mitigar esses problemas, recorre-se às técnicas de redução de dimensionalidade, cujo objetivo é projetar os dados em um espaço de menor dimensão preservando, tanto quanto possível, suas propriedades geométricas e estruturais. Métodos tradicionais como a Análise de Componentes Principais (PCA) (PEARSON, 1901) e a Análise Discriminante Linear (LDA) (ZHAO *et al.*, 2024) foram amplamente estudados e aplicados nas últimas décadas, com bons resultados em contextos lineares. Entretanto, o aumento da complexidade e não linearidade dos dados modernos evidencia as limitações dessas abordagens e motiva o estudo de técnicas mais robustas.

A base teórica que fundamenta a viabilidade dessa redução é apresentada pelo Lema de Johnson–Lindenstrauss (JL), que demonstra ser possível projetar pontos de um espaço de alta dimensão em um espaço de dimensão muito menor, preservando aproximadamente as distâncias entre eles. Esse resultado fornece um respaldo matemático essencial para o uso de métodos de redução de dimensionalidade em contextos práticos, garantindo que as transformações realizadas mantenham a estrutura global dos dados de forma controlada.

Com base nesse fundamento, surgem técnicas modernas de natureza não linear, como o *t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding* (t-SNE) (MAATEN e HINTON, 2008) e o *Uniform Manifold Approximation and Projection* (UMAP) (MCINNEN *et al.*, 2018). Ambas buscam preservar relações de vizinhança entre os dados, permitindo representar de forma mais fiel a geometria intrínseca de conjuntos complexos em espaços de duas ou três dimensões.

Esses métodos são amplamente utilizados em análises exploratórias e visualizações de dados de alta dimensão, como imagens, textos e dados biológicos.

Para ilustrar de forma concreta o tipo de estrutura que essas técnicas conseguem revelar, a figura 1.1 traz uma visualização usando o CIFAR-10. As imagens são representadas por vetores de 2048 dimensões extraídos de uma ResNet-50 pré-treinada no ImageNet e projetadas em duas dimensões com UMAP, sendo então organizadas em uma grade 20×20. O que aparece na figura é um padrão intuitivo: imagens que ficam próximas na projeção tendem a ser visualmente parecidas. Mesmo sem rótulo explícito de classe, surgem regiões com veículos, animais e outros objetos com aparência semelhante. Esse tipo de organização ajuda a perceber como representações de alta dimensão capturam relações semânticas que vão além de cor ou formato, e por que projeções não lineares são úteis para explorar esses espaços.

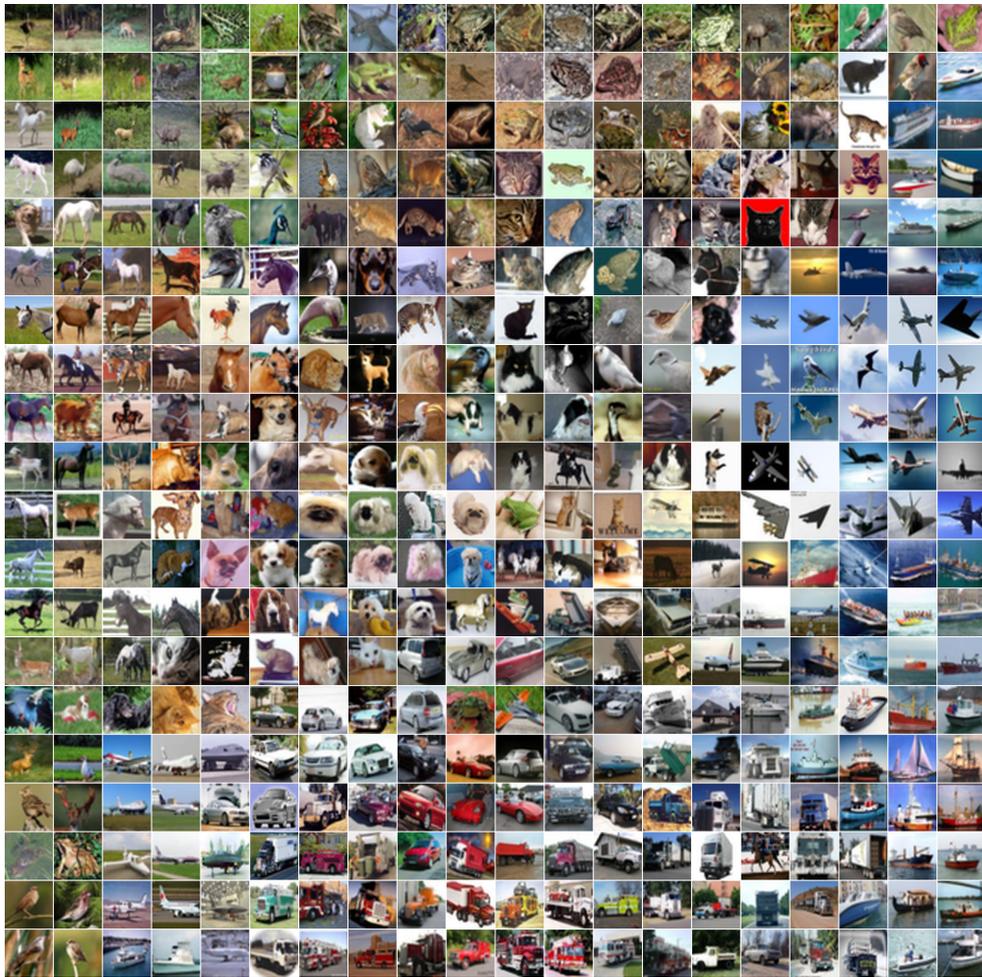


Figura 1.1: Grade 20×20 obtida projetando embeddings do CIFAR-10 com UMAP após extração de features por uma ResNet-50 pré-treinada sobre o ImageNet. As imagens organizam-se por similaridade visual.

Este trabalho é dividido em capítulos que seguem uma progressão do teórico para o prático. No Capítulo 2, introduz-se a base teórica da redução de dimensionalidade, discutindo o Lema de Johnson–Lindenstrauss e por que ele garante que projeções com

INTRODUÇÃO

baixa distorção são possíveis. O Capítulo 3 é dedicado ao t-SNE, passando pelas limitações das projeções lineares e pela formulação do método em termos probabilísticos. O capítulo 4 trata do UMAP, destacando suas diferenças conceituais em relação ao t-SNE e sua interpretação baseada em grafos e topologia. A parte experimental começa no Capítulo 5, onde é descrita a metodologia experimental, os conjuntos de dados utilizados, o pipeline adotado e as métricas de avaliação. Os resultados obtidos são apresentados e discutidos no Capítulo 6. Por fim, o Capítulo 7 traz as conclusões e comentários finais.

Capítulo 2

É possível reduzir a dimensionalidade?

2.1 A viabilidade da redução de dimensionalidade

A alta dimensionalidade é uma característica onipresente nos dados modernos. Em aprendizado de máquina, é comum lidar com representações que envolvem milhares ou até milhões de dimensões, como vetores de palavras em modelos de linguagem, descritores visuais em imagens ou perfis genéticos em biologia computacional. Embora esses espaços sejam extremamente ricos em informação, eles impõem um custo computacional elevado e dificultam a interpretação, a visualização e o armazenamento dos dados.

Surge, então, uma questão fundamental: *até que ponto é possível reduzir a dimensionalidade dos dados sem comprometer sua estrutura geométrica essencial?* Em outras palavras, podemos projetar um conjunto de pontos de um espaço de alta dimensão para outro de dimensão muito menor, preservando, ao menos aproximadamente, as distâncias entre eles?

Antes de responder, vale lembrar um fato básico de álgebra linear: dados n pontos $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}^D$, esses pontos sempre pertencem a um subespaço de dimensão no máximo $n - 1$. De modo análogo ao fato de que dois pontos definem uma reta e três pontos definem um plano, qualquer conjunto de n pontos é, no máximo, $(n - 1)$ -dimensional. Essa cota é, inclusive, *existencialmente justa*: se os vetores $x_2 - x_1, x_3 - x_1, \dots, x_n - x_1$ forem mutuamente ortogonais, não é possível representá-los em uma dimensão menor sem distorcer completamente as distâncias.

Contudo, esse limite se refere ao caso em que desejamos preservar as distâncias *exatamente*. Se aceitarmos pequenas distorções, ou seja, permitir que as distâncias sejam apenas *aproximadamente* preservadas, será que conseguimos reduzir ainda mais a dimensão?

O **Lema de Johnson–Lindenstrauss** (JOHNSON e LINDENSTRAUSS, 1984) fornece uma resposta surpreendentemente positiva e elegante a essa pergunta. Ele mostra que é possível projetar qualquer conjunto de n pontos de um espaço \mathbb{R}^D em um espaço de dimensão muito menor $k = O(\log n / \varepsilon^2)$, onde ε é o erro máximo tolerado, de forma que todas as distâncias euclidianas sejam preservadas dentro de um fator multiplicativo de $(1 \pm \varepsilon)$.

Formalmente, existe uma transformação

$$f : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^k$$

tal que, para quaisquer $x, y \in \mathbb{R}^D$,

$$(1 - \varepsilon)\|x - y\|^2 \leq \|f(x) - f(y)\|^2 \leq (1 + \varepsilon)\|x - y\|^2.$$

Em outras palavras, os pontos são comprimidos em um espaço de dimensão muito menor, mas sua geometria relativa e, portanto, as relações que estruturam o conjunto de dados permanecem essencialmente inalteradas.

Para ilustrar, considere um modelo de linguagem que associa a cada palavra um vetor em \mathbb{R}^{10000} . Se o vocabulário contém 10^6 palavras, temos um conjunto de um milhão de vetores em 10 mil dimensões, um cenário computacionalmente custoso para cálculos de similaridade. O Lema de Johnson–Lindenstrauss garante, entretanto, que é possível projetar esses vetores em um espaço de dimensão $k \approx 2000$ (para $\varepsilon = 0,1$), preservando as distâncias com erro de apenas 10%.

Esse resultado é notável por duas razões principais. Primeiro, a dimensão reduzida k depende apenas do número de pontos n e do erro ε , e não da dimensão original D . Assim, mesmo dados que residem em espaços de bilhões de dimensões podem ser representados de forma compacta, mantendo sua estrutura geométrica essencial. Segundo, o lema oferece uma base teórica rigorosa para técnicas práticas de redução de dimensionalidade, como projeções aleatórias, que são amplamente empregadas em algoritmos de aprendizado de máquina, mineração de dados e compressão de informação.

Portanto, o Lema de Johnson–Lindenstrauss estabelece, de maneira formal e quantitativa, que a redução de dimensionalidade não é apenas possível: ela é garantida matematicamente dentro de limites de distorção bem controlados. A seguir, apresentaremos a demonstração do lema, baseada em propriedades de concentração de medidas gaussianas.

2.2 Demonstração do Lema de Johnson–Lindenstrauss via concentração gaussiana

A prova utiliza uma abordagem probabilística. A ideia central é mostrar que a probabilidade de existir uma transformação linear que satisfaça as desigualdades do lema é positiva. A exposição foi inspirada no material apresentado em (PARK, s.d.), com adaptações que facilitam alguns trechos da demonstração.

Construção da transformação linear aleatória. Seja $G \in \mathbb{R}^{k \times D}$ uma matriz cujos elementos g_{ij} são variáveis aleatórias independentes, com distribuição normal padrão $\mathcal{N}(0, 1)$. Definimos a aplicação linear aleatória $G : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^k$ dada por $y = Gx$.

Aplicando G a dois pontos $x_p, x_q \in \mathbb{R}^D$, queremos demonstrar que

$$\mathbb{P} \left[\forall x_p, x_q \in \mathbb{R}^D : (1 - \varepsilon)\|x_p - x_q\| \leq \|y_p - y_q\| \leq (1 + \varepsilon)\|x_p - x_q\| \right] > 0. \quad (2.1)$$

Como cada linha de G é composta de variáveis Gaussianas independentes, o vetor $y = Gx$ é uma variável aleatória Gaussiana com média nula e variância $\sum_{i=1}^D x_i^2 = \|x\|^2$. Assim,

$$y = \|x\|z, \quad \text{onde } z = (z_1, \dots, z_k), \quad z_i \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

Para dois vetores distintos x_p e x_q , pela linearidade de Gx , segue que

$$y_p - y_q = \|x_p - x_q\|z.$$

Logo,

$$\|Gx_p - Gx_q\| = \|x_p - x_q\| \|z\|. \quad (2.2)$$

Utilizaremos o seguinte resultado:

Lema 1 (Concentração Gaussiana). (*PANCHENKO, 2016*) *Seja $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ uma função Lipschitz com constante $L > 0$. Seja $g \sim \mathcal{N}(0, I_m)$. Então, para todo $t \geq 0$,*

$$\mathbb{P}(|F(g) - \mathbb{E}[F(g)]| \geq t) \leq 2 \exp\left(-\frac{t^2}{4L^2}\right).$$

Nosso objetivo será, a partir de agora, mostrar que a norma euclidiana $\|z\|$ é uma função Lipschitz, para então aplicarmos o lema de concentração gaussiana e limitar a probabilidade de desvio da norma $\|z\|$ em relação à sua média $\mathbb{E}\|z\|$.

Definição 1 (Função Lipschitz). *Seja $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$. Dizemos que F é Lipschitz com constante $L > 0$ se, para todos $x, y \in \mathbb{R}^m$,*

$$|F(x) - F(y)| \leq L \|x - y\|.$$

Isto é, F não pode aumentar a distância entre dois pontos por mais do que um fator L .

Lema 2. *A norma euclidiana $\|\cdot\| : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função de Lipschitz com constante $L = 1$.*

Demonstração. Sejam $x, y \in \mathbb{R}^m$. Pela desigualdade triangular, temos:

$$\|x\| \leq \|x - y\| + \|y\|.$$

Rearranjando os termos, obtemos:

$$\|x\| - \|y\| \leq \|x - y\|. \quad (*)$$

Aplicando novamente a desigualdade triangular, agora trocando os papéis de x e y , segue que:

$$\|y\| \leq \|y - x\| + \|x\|.$$

Reorganizando,

$$\|y\| - \|x\| \leq \|y - x\|.$$

Como $\|y - x\| = \|(x - y)\| = |-1| \cdot \|x - y\| = \|x - y\|$, podemos reescrever:

$$-(\|x\| - \|y\|) \leq \|x - y\|. \quad (**)$$

Combinando as desigualdades (*) e (**), concluímos que:

$$\|x\| - \|y\| \leq \|x - y\|.$$

Esta é exatamente a condição de Lipschitz para a função $f(x) = \|x\|$, isto é,

$$|f(x) - f(y)| \leq L \cdot \|x - y\|,$$

com constante de Lipschitz $L = 1$. Portanto, a função norma é 1-Lipschitz. \square

A norma euclidiana $\|z\|$ é uma função Lipschitz com constante $L = 1$, portanto, pelo lema de concentração gaussiana, temos:

$$\mathbb{P}(\|z\| - \mathbb{E}\|z\| \geq t) \leq 2e^{-t^2/4}. \quad (2.3)$$

Aproximação da distância. Escolhendo $t = \varepsilon \mathbb{E}\|z\|$, obtemos:

$$\mathbb{P}\left[(1 - \varepsilon)\mathbb{E}\|z\| \leq \|z\| \leq (1 + \varepsilon)\mathbb{E}\|z\|\right] \geq 1 - 2e^{-\varepsilon^2(\mathbb{E}\|z\|)^2/4}.$$

Combinando com (2.2) e normalizando G por $\mathbb{E}\|z\|$, isto é, definindo $\widehat{G} = \frac{1}{\mathbb{E}\|z\|}G$, segue que

$$\mathbb{P}\left[(1 - \varepsilon)\|x_p - x_q\| \leq \|\widehat{G}x_p - \widehat{G}x_q\| \leq (1 + \varepsilon)\|x_p - x_q\|\right] \geq 1 - 2e^{-\varepsilon^2(\mathbb{E}\|z\|)^2/4}.$$

Considerando todos os pares de pontos - Union Bound Existem no máximo $\frac{N^2}{2}$ pares distintos de pontos no conjunto $V = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$. Usando a desigualdade da união e a lei de De Morgan, temos:

$$\mathbb{P}\left[\forall x_p, x_q \in V : (1 - \varepsilon)\|x_p - x_q\| \leq \|\widehat{G}x_p - \widehat{G}x_q\| \leq (1 + \varepsilon)\|x_p - x_q\|\right] \geq 1 - N^2 e^{-\varepsilon^2(\mathbb{E}\|z\|)^2/4}.$$

Por fim, como escolher a dimensão k ? Para garantir que a probabilidade acima seja positiva, impomos:

$$1 - N^2 e^{-\varepsilon^2(\mathbb{E}\|z\|)^2/4} > 0.$$

Sabendo que $\mathbb{E}\|z\| \geq c\sqrt{k}$ para uma constante $c > 0$, segue que a condição é satisfeita se

$$k \geq \frac{8c^2}{\varepsilon^2} \log N.$$

Portanto, se k cresce proporcionalmente a $\frac{\log N}{\varepsilon^2}$, com probabilidade positiva a aplicação linear satisfaz as desigualdades do lema.

Assim, concluímos que existe uma transformação linear $\widehat{G} : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^k$ tal que, para todos os $x_p, x_q \in V$,

$$(1 - \varepsilon)\|x_p - x_q\| \leq \|\widehat{G}(x_p) - \widehat{G}(x_q)\| \leq (1 + \varepsilon)\|x_p - x_q\|.$$

□

Capítulo 3

Projeções Não Lineares e o Método t-SNE

3.1 Limitações das Projeções Aleatórias

O Lema de Johnson–Lindenstrauss, discutido no capítulo anterior, fornece uma base teórica sólida para a redução de dimensionalidade linear por meio de projeções aleatórias. A simplicidade e a generalidade desse resultado o tornam atraente: basta uma transformação linear gerada aleatoriamente para garantir, com alta probabilidade, que as distâncias entre pontos sejam aproximadamente preservadas. Contudo, embora eficaz em termos geométricos globais, essa abordagem ignora aspectos cruciais da estrutura interna dos dados.

Em muitas aplicações práticas, os dados de alta dimensão não estão distribuídos uniformemente no espaço \mathbb{R}^D , mas organizam-se em regiões de baixa dimensionalidade — chamadas de *variedades* (*manifolds*) — imersas no espaço original. Essa estrutura não linear é típica em contextos como reconhecimento de imagens, representação semântica de textos e análise de expressões gênicas. Em tais casos, preservar apenas as distâncias euclidianas globais pode distorcer significativamente as relações de vizinhança locais que definem a geometria intrínseca dos dados.

Além disso, projeções aleatórias e outros métodos lineares tratam todas as direções do espaço de forma equivalente, sem distinguir regiões de maior densidade ou agrupamentos naturais. Como consequência, embora as distâncias médias sejam preservadas, a *estrutura local*, essencial para a interpretação e visualização, é frequentemente perdida. Isso torna tais técnicas pouco adequadas para tarefas exploratórias em que se busca compreender padrões, agrupamentos e transições entre regiões do espaço de dados.

Essas limitações motivam o estudo de métodos de redução de dimensionalidade **não lineares**, capazes de preservar não apenas as distâncias globais, mas também as relações de vizinhança locais que revelam a estrutura subjacente do conjunto de dados.

3.2 Da SNE ao t-SNE: uma evolução motivada por limitações práticas

O *t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding* (t-SNE) foi proposto por van der Maaten e Hinton em 2008 [MAATEN e HINTON, 2008](#) como uma evolução conceitual e prática do método *Stochastic Neighbor Embedding* (SNE) originalmente desenvolvido por Hinton e Roweis em 2002. Ambos os algoritmos têm como objetivo representar, em baixa dimensão, a estrutura de similaridade entre pontos de um conjunto de dados de alta dimensão, de modo que padrões e agrupamentos possam ser visualizados de forma intuitiva.

O ponto de partida é a observação de que métodos lineares, como PCA e projeções aleatórias, não são capazes de capturar estruturas não lineares presentes nos dados. Muitas vezes, as observações de um conjunto residem em uma variedade de baixa dimensão imersa em um espaço muito maior. Nesse contexto, preservar distâncias euclidianas globais – como fazem as projeções lineares – pode distorcer significativamente as relações locais entre vizinhos próximos. A motivação principal do SNE e de seu sucessor t-SNE é, portanto, preservar relações de vizinhança probabilísticas, em vez de distâncias absolutas.

3.3 O modelo probabilístico do SNE

O SNE original propõe uma formulação probabilística para medir similaridades entre pontos. Dado um conjunto de vetores de alta dimensão $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^D$, define-se a probabilidade condicional $p_{j|i}$ de que o ponto x_i escolheria x_j como seu vizinho, caso os vizinhos fossem selecionados de acordo com uma distribuição gaussiana centrada em x_i :

$$p_{j|i} = \frac{\exp(-\|x_i - x_j\|^2 / 2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} \exp(-\|x_i - x_k\|^2 / 2\sigma_i^2)}.$$

O parâmetro σ_i é ajustado individualmente para que a entropia da distribuição local em torno de x_i corresponda a uma *perplexidade* especificada pelo usuário, que controla o número efetivo de vizinhos considerados.

De modo análogo, para os pontos em baixa dimensão $y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}^k$ (tipicamente com $k = 2$ ou 3), define-se uma probabilidade condicional $q_{j|i}$ baseada nas distâncias entre os pontos projetados:

$$q_{j|i} = \frac{\exp(-\|y_i - y_j\|^2)}{\sum_{k \neq i} \exp(-\|y_i - y_k\|^2)}.$$

O objetivo do SNE é minimizar a divergência de Kullback–Leibler (KL) entre as distribuições condicionais $P_i = \{p_{j|i}\}$ e $Q_i = \{q_{j|i}\}$ para todos os pontos i :

$$C = \sum_i KL(P_i \| Q_i) = \sum_i \sum_j p_{j|i} \log \frac{p_{j|i}}{q_{j|i}}.$$

Assim, o algoritmo busca uma configuração de pontos em baixa dimensão em que as

relações de vizinhança sejam preservadas o mais fielmente possível.

Apesar de inovador, o SNE original apresenta duas limitações principais:

1. **Assimetrias nas probabilidades:** as distribuições condicionais $p_{j|i}$ e $p_{i|j}$ não são necessariamente iguais, o que introduz inconsistências entre pares de pontos.
2. **Problema de *crowding*:** ao projetar um espaço de alta dimensão em duas dimensões, torna-se difícil representar corretamente todas as relações locais, levando a sobreposição de grupos.

Esses problemas motivaram o desenvolvimento de uma versão modificada, o t-SNE, que introduz ajustes probabilísticos e geométricos para contornar tais limitações.

3.4 Soluções do t-SNE

Para resolver o problema da assimetria, o t-SNE substitui as probabilidades condicionais $p_{j|i}$ por probabilidades conjuntas simétricas:

$$p_{ij} = \frac{p_{i|j} + p_{j|i}}{2n}.$$

Essa reformulação garante que $p_{ij} = p_{ji}$ e que a soma de todas as probabilidades é igual a 1. No espaço de baixa dimensão, define-se de forma análoga:

$$q_{ij} = \frac{(1 + \|y_i - y_j\|^2)^{-1}}{\sum_{k \neq l} (1 + \|y_k - y_l\|^2)^{-1}}.$$

A escolha da função $(1 + \|y_i - y_j\|^2)^{-1}$ corresponde à densidade da distribuição t de Student com um grau de liberdade, introduzida para lidar com o problema de *crowding*.

O *crowding problem* decorre do fato de que, ao reduzir de alta para baixa dimensão, o volume disponível para posicionar os vizinhos próximos diminui rapidamente. Em espaços de alta dimensão, há muito “espaço” em torno de um ponto para abrigar seus vizinhos, mas em duas dimensões esse espaço é drasticamente reduzido, o que causa sobreposição de grupos e perda de separabilidade visual.

O t-SNE resolve esse problema substituindo a distribuição gaussiana usada no espaço de baixa dimensão por uma distribuição t-Student com um grau de liberdade, cuja cauda longa permite representar separações maiores entre grupos distintos. Isso evita que pontos distantes sejam projetados muito próximos, preservando melhor a estrutura global de agrupamentos.

3.5 Função de custo e otimização

O t-SNE minimiza a divergência de Kullback–Leibler entre as distribuições $P = \{p_{ij}\}$ e $Q = \{q_{ij}\}$:

$$C = KL(P\|Q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}.$$

Essa função mede o quanto a distribuição de vizinhança no espaço de baixa dimensão difere da original. O gradiente do custo em relação a cada ponto y_i é dado por:

$$\frac{\partial C}{\partial y_i} = 4 \sum_j (p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j)(1 + \|y_i - y_j\|^2)^{-1}.$$

A presença do fator $(1 + \|y_i - y_j\|^2)^{-1}$ reduz a influência de pares distantes, concentrando o ajuste nas relações locais mais relevantes. O custo é minimizado por descida de gradiente, com técnicas auxiliares como *momentum* e uma fase inicial de *early exaggeration*, que amplifica temporariamente as probabilidades p_{ij} para facilitar a separação de agrupamentos no início da otimização.

É importante observar que a perplexidade não aparece explicitamente na expressão da função de custo nem no gradiente do t-SNE. Ela atua em uma etapa anterior do algoritmo, ao definir as probabilidades p_{ij} no espaço de alta dimensão. Mais especificamente, para cada ponto x_i , o parâmetro σ_i da distribuição gaussiana local é ajustado de modo que a entropia da distribuição $P_i = \{p_{ji}\}$ corresponda a um valor de perplexidade previamente fixado pelo usuário. Esse ajuste é realizado por meio de uma busca binária em σ_i .

Do ponto de vista intuitivo, a perplexidade estabelece o que o algoritmo considera como uma vizinhança local em torno de cada ponto. Ela pode ser interpretada como uma estimativa suave do número efetivo de vizinhos relevantes: valores baixos de perplexidade fazem com que o t-SNE se concentre em relações muito próximas, enquanto valores mais altos ampliam essa noção de vizinhança. Uma vez fixadas essas probabilidades no espaço original, a etapa de otimização atua apenas para encontrar uma configuração em baixa dimensão que reproduza, o melhor possível, essa estrutura de vizinhança.

Capítulo 4

O Método UMAP

4.1 Uma nova perspectiva sobre redução de dimensionalidade

O *Uniform Manifold Approximation and Projection* (UMAP) (McINNES *et al.*, 2018) combina fundamentos geométricos e computacionais em um método eficiente de redução de dimensionalidade. Enquanto o t-SNE concentra-se em preservar relações locais entre pontos, o UMAP estende essa ideia ao incorporar princípios topológicos que descrevem a estrutura global dos dados.

Parte-se da hipótese de que os dados estão organizados em torno de uma variedade de baixa dimensão imersa em um espaço de dimensão maior. Reduzir a dimensionalidade, portanto, significa projetar essa variedade em um espaço plano preservando, tanto quanto possível, suas relações de vizinhança. O UMAP traduz essa formulação geométrica em um algoritmo prático, capaz de reconstruir a conectividade dos dados e projetá-la em baixa dimensão de modo coerente e eficiente.

4.2 Da probabilidade à topologia: o salto conceitual do t-SNE ao UMAP

O t-SNE parte de uma visão essencialmente estatística. Ele interpreta as distâncias entre pontos como probabilidades de vizinhança e tenta construir, em baixa dimensão, uma distribuição de similaridades que imite a do espaço original. Esse modelo funciona surpreendentemente bem para revelar agrupamentos, mas peca em dois aspectos: falta-lhe uma noção de continuidade global (os diferentes grupos aparecem isolados, sem relações entre si) e seu custo computacional cresce rapidamente com o número de pontos.

O UMAP nasce como uma resposta a essas limitações. McInnes, Healy e Melville reformulam o problema não como a preservação de probabilidades, mas como a preservação de uma estrutura topológica. A proximidade entre dois pontos deixa de ser uma questão de probabilidade e passa a ser entendida como a intensidade de uma conexão em um grafo

de vizinhança, uma espécie de mapa da geometria local da variedade subjacente. Cada ponto é conectado aos seus vizinhos mais próximos, e a força dessa conexão depende da densidade local: em regiões mais povoadas, o “alcance” da conexão é menor; em regiões mais esparsas, ele se expande para compensar.

O resultado é um grafo ponderado que captura, de forma adaptativa, as relações de vizinhança entre os dados. Em vez de uma distribuição probabilística como no t-SNE, o UMAP constrói o que seus autores chamam de um *fuzzy simplicial set*: uma representação difusa da topologia da variedade, que descreve como as regiões de dados se conectam entre si.

4.3 Uma visão computacional: grafos e otimização

Do ponto de vista teórico, o UMAP foi construído sobre conceitos de topologia algébrica e teoria das categorias, mas, em sua forma computacional, ele se traduz em algo mais tangível: a construção e a manipulação de um grafo ponderado. No fim das contas, todo o aparato teórico de variedades e conjuntos simpliciais se materializa como um grafo em que cada nó representa um ponto do conjunto de dados e cada aresta representa o grau de conectividade entre pares de pontos. É por isso que o UMAP se encaixa naturalmente na família dos algoritmos de aprendizado baseados em grafos de vizinhança, ao lado do Isomap (TENENBAUM *et al.*, 2000), do Laplacian Eigenmaps (BELKIN e NIYOGI, 2003) e, sob certo ponto de vista, também do t-SNE.

O algoritmo pode ser compreendido em duas grandes etapas conceituais. Na primeira, constrói-se um grafo que descreve a estrutura local dos dados no espaço original de alta dimensão. Na segunda, busca-se uma disposição dos mesmos vértices em um espaço de baixa dimensão tal que esse novo grafo, agora projetado, preserve as relações do grafo original tanto quanto possível. Essas duas fases, construção e layout, são comuns a toda a classe de algoritmos baseados em grafos. O que distingue o UMAP é a forma como ele define a conectividade entre pontos e como traduz essa estrutura em um problema de otimização.

Construindo o grafo de vizinhança

Começemos pelo grafo inicial. Dado um conjunto de pontos $V = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ e uma métrica $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$, o UMAP procura identificar, para cada ponto x_i , os seus k vizinhos mais próximos segundo essa métrica. Em vez de apenas conectar cada ponto aos seus vizinhos, o algoritmo atribui um peso a cada aresta — um valor entre 0 e 1 que expressa o “grau de pertencimento” de x_j à vizinhança de x_i .

Esse peso é dado por uma função exponencial suavizada:

$$w_{ji} = \exp\left(-\frac{\max(0, d(x_i, x_j) - \rho_i)}{\sigma_i}\right),$$

em que dois parâmetros locais, ρ_i e σ_i , regulam a escala da vizinhança. O valor ρ_i é definido como a menor distância positiva de x_i a outro ponto do conjunto, garantindo que cada nó do grafo esteja conectado a pelo menos um vizinho com peso máximo igual a 1. Já σ_i é determinado de modo que a soma dos pesos dentro da vizinhança de x_i corresponda aproximadamente a $\log_2(k)$; é, portanto, um fator de normalização que adapta a noção

de “escala local” à densidade dos dados. Essas escolhas asseguram que o grafo resultante respeite a conectividade local da variedade subjacente, uma propriedade crucial em espaços de alta dimensão, onde as distâncias brutas tendem a perder significado.

O resultado dessa etapa é um grafo dirigido, já que as relações de vizinhança não são simétricas em geral. Para obter uma representação coerente da conectividade, o UMAP combina as direções opostas por meio de uma operação inspirada na teoria dos conjuntos fuzzy:

$$w_{ij} = w_{i|j} + w_{j|i} - w_{i|j} w_{j|i}.$$

Se interpretarmos $w_{i|j}$ como a “probabilidade” de uma aresta dirigida existir de x_i para x_j , então w_{ij} representa a probabilidade de que ao menos uma das duas arestas, de i para j ou de j para i , esteja presente. O grafo resultante é ponderado, não-direcional, e descreve, de maneira compacta, a estrutura de conectividade do conjunto de dados. Ele é, do ponto de vista topológico, o esqueleto de um conjunto simplicial difuso que aproxima a geometria local da variedade em que os dados residem.

O layout em baixa dimensão

Uma vez construída essa representação, o objetivo é encontrar um novo conjunto de pontos $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$ em baixa dimensão que preserve a estrutura do grafo. Em termos intuitivos, trata-se de um problema de layout de grafo: queremos posicionar os vértices em um plano de modo que arestas fortes mantenham os pontos próximos e arestas fracas os afastem. Essa é uma ideia herdada dos métodos de *force-directed graph drawing* (FRUCHTERMAN e REINGOLD, 1991), em que o layout emerge do equilíbrio entre forças atrativas e repulsivas.

No caso do UMAP, a força atrativa entre dois pontos y_i e y_j é proporcional ao peso da aresta w_{ij} e à derivada da função de conectividade no espaço reduzido. De forma simplificada, a relação de proximidade entre dois pontos projetados é modelada por:

$$q_{ij} = \frac{1}{1 + a\|y_i - y_j\|^{2b}},$$

onde a e b são parâmetros que controlam a forma da curva — ajustados para que ela se comporte como uma função logística invertida, com caudas longas que evitam o colapso dos clusters. O processo de otimização consiste em minimizar a divergência cruzada entre os pesos w_{ij} do grafo original e os valores q_{ij} do grafo projetado:

$$C = \sum_{i < j} \left[w_{ij} \log \frac{w_{ij}}{q_{ij}} + (1 - w_{ij}) \log \frac{1 - w_{ij}}{1 - q_{ij}} \right].$$

Essa função mede o quanto a estrutura de vizinhança do espaço original é preservada na projeção. Seu gradiente em relação às coordenadas y_i pode ser interpretado como um sistema de forças: as arestas com pesos altos puxam os pontos para mais perto, enquanto pares de pontos desconectados geram uma leve repulsão, impedindo que tudo colapse em uma única região.

Computacionalmente, o algoritmo é implementado de forma eficiente por meio de

amostragem negativa — uma técnica que permite estimar as forças repulsivas sem calcular todas as interações possíveis entre pares de pontos, reduzindo a complexidade para algo próximo de linear. Além disso, a inicialização do layout não é aleatória: o UMAP utiliza uma decomposição espectral aproximada do laplaciano do grafo, o que oferece um ponto de partida coerente com a estrutura global dos dados e acelera a convergência do processo de otimização.

Ao final dessa etapa, o conjunto de pontos Y forma uma representação bidimensional (ou tridimensional) que reflete, tanto quanto possível, a conectividade e a forma da variedade original. É como se o algoritmo tivesse descoberto uma maneira de “achatar” o grafo que descreve o espaço de dados sem rasgá-lo nem distorcê-lo, preservando os vínculos locais e a estrutura global.

Capítulo 5

Metodologia Experimental

Este capítulo descreve a metodologia utilizada para comparar empiricamente os métodos de redução de dimensionalidade estudados no trabalho, em particular o t-SNE e o UMAP. A estrutura geral segue princípios adotados em estudos quantitativos recentes sobre projeções, como o de Espadoto et al. (ESPADOTO *et al.*, 2021), mas foi adaptada para um escopo mais enxuto e voltado à visualização. A ideia é apresentar claramente quais dados foram utilizados, como as projeções foram construídas e quais critérios foram empregados para avaliar seus resultados, sempre buscando manter reprodutibilidade e coerência entre os experimentos.

5.1 Conjuntos de Dados

Para analisar o comportamento das projeções em contextos variados, quatro conjuntos de dados bem conhecidos na literatura de aprendizado de máquina foram escolhidos, cobrindo tanto imagens quanto dados tabulares. O primeiro deles é o *MNIST*, formado por imagens de dígitos manuscritos com resolução 28×28. Ele é um ponto de partida clássico porque produz agrupamentos bem definidos, o que facilita observar como cada técnica lida com vizinhanças locais.

Em seguida, utiliza-se o *Fashion-MNIST*, que tem a mesma estrutura do *MNIST*, mas com classes compostas por artigos de vestuário. Aqui a separação entre as categorias é menos evidente, e isso costuma exigir mais das projeções, especialmente quando o objetivo é revelar padrões mais sutis.

O terceiro conjunto é o *CIFAR-10*, que contém imagens coloridas de 32×32 pixels em dez classes variadas, como aviões, carros, pássaros e gatos. A projeção direta dos pixels não costuma gerar resultados informativos, então foram escolhidas representações extraídas por uma ResNet-50 pré-treinada, obtendo vetores de 2 048 dimensões. Essa estratégia segue uma prática comum em estudos comparativos: utilizar uma rede já treinada para fornecer descrições mais ricas das imagens, permitindo que t-SNE e UMAP operem sobre um espaço mais estruturado.

Além dos datasets de imagens, inserimos também o *Breast Cancer Wisconsin*, que é

um conjunto tabular com 569 amostras e 30 atributos numéricos. Ele funciona como um contraponto importante, pois não depende de processamento visual, e as distâncias entre os pontos já têm significado direto no espaço original.

5.2 Pipeline Experimental

Independentemente do conjunto de dados, adotamos o mesmo fluxo de pré-processamento e projeção para evitar vieses entre os experimentos. Todas as variáveis numéricas foram padronizadas por média e desvio padrão, e os valores de pixel foram reescalados para a faixa $[0, 1]$ antes da padronização. No caso do CIFAR-10, as representações fornecidas pela ResNet-50 foram normalizadas da mesma forma.

Após o pré-processamento, uma redução de dimensionalidade preliminar com 50 componentes principais foi aplicada apenas para os datasets de imagens, com a finalidade de reduzir ruído e estabilizar a execução dos métodos subsequentes. Essa prática é recomendada inclusive no trabalho original do t-SNE e tende a melhorar a consistência dos resultados.

As projeções finais foram obtidas exclusivamente com t-SNE e UMAP. Para o t-SNE, utilizamos *perplexity* igual a 30, taxa de aprendizado de 200 e mil iterações, mantendo a configuração de *early exaggeration* nos primeiros 250 passos. O UMAP foi executado com 15 vizinhos, parâmetro *min_dist* igual a 0.1 e métrica euclidiana. Esses valores foram escolhidos por funcionarem bem em uma variedade de datasets, segundo recomendações difundidas na literatura, e também para evitar ajustes extensivos que poderiam atrapalhar a comparabilidade.

5.3 Métricas de Avaliação

Para avaliar a qualidade das projeções, foi explorado um conjunto de métricas que medem não apenas a preservação estrutural dos dados, mas também características diretamente ligadas à percepção visual dos agrupamentos. A ideia é capturar como cada técnica organiza as classes no plano, tanto em termos de separação entre grupos quanto de consistência interna.

A primeira métrica é a *trustworthiness*, que indica o quanto das vizinhanças locais presentes no espaço original foi mantida após a projeção. Ela penaliza pontos que aparecem como vizinhos apenas no espaço reduzido, mas não no original. Em sentido complementar, a *continuity* avalia o fenômeno inverso: o quanto vizinhos originais continuam próximos após a projeção. As duas juntas fornecem um panorama razoável sobre o grau de distorção local introduzido por cada técnica.

Além dessas, empregamos métricas voltadas especificamente à análise visual de classes, conforme propostas em trabalhos anteriores sobre avaliação de projeções. A primeira é a ABW (*Average Between/Within-class Distance Ratio*), que compara a média das distâncias entre classes (ABTN) com a média das distâncias dentro de cada classe (AWTN) (SEDLMAIR e AUPETIT, 2015). Uma projeção com ABW alto tende a apresentar separações visuais mais claras entre grupos, enquanto valores baixos indicam mistura ou sobreposição entre classes.

Foi utilizada também a métrica DSC (*class-center-of-mass consistency*), que mede a proporção dos pontos cujo centro de massa mais próximo pertence à mesma classe do próprio ponto. Essa métrica é particularmente útil para avaliar a coerência dos clusters na projeção, pois captura se cada grupo permanece organizado em torno de uma região central bem definida.

5.4 Implementação e Reprodutibilidade

Os experimentos foram implementados em Python 3.11, utilizando `scikit-learn` para as métricas e para o cálculo da redução preliminar, `umap-learn` para o UMAP e `torchvision` para a extração das embeddings do CIFAR-10 com a ResNet-50. As projeções de t-SNE foram executadas com a implementação do `sklearn`. Além disso, o `random_state` é fixado em 42 durante todas as execuções para facilitar a reprodutibilidade.

O código completo, incluindo carregamento dos datasets, geração das projeções e cálculo das métricas, encontra-se organizado no Apêndice ao final deste trabalho.

Capítulo 6

Resultados

Após a execução dos experimentos descritos no capítulo anterior, os resultados serão apresentados em duas tabelas principais. A primeira apresenta o tempo de execução de cada projeção, enquanto a segunda reúne as métricas definidas anteriormente: ABTN, AWTN, ABW, DSC, trustworthiness e continuity. Essas duas visões complementares ajudam a contextualizar tanto o custo computacional quanto a qualidade das projeções obtidas.

6.1 Visão Geral dos Resultados

A Tabela 6.1 resume os tempos de execução medidos para cada combinação de dataset e método. Os valores indicam claramente a diferença de comportamento entre t-SNE e UMAP, especialmente nos conjuntos de imagens.

Conjunto de dados	t-SNE (s) ¹	UMAP (s) ¹
MNIST	96.89	37.86
Fashion-MNIST	74.48	36.19
CIFAR-10	133.87	38.96
Breast Cancer	3.77	1.32

Tabela 6.1: Tempo de execução (em segundos) para cada método de projeção.

A Tabela 6.2 apresenta as métricas quantitativas calculadas para cada projeção. Elas sintetizam diferentes aspectos da estrutura projetada: separação entre classes (ABTN, ABW), coesão interna (AWTN), estabilidade dos centróides (DSC), preservação de vizinhanças (trustworthiness) e consistência reversa (continuity).

A partir daqui, os resultados são analisados dataset por dataset. Em cada seção, as métricas das tabelas são discutidas junto às projeções obtidas, o que ajuda a interpretar o comportamento de cada método em diferentes situações.

¹ Os valores exatos variam de acordo com o tamanho do subconjunto utilizado. No ambiente do experimento, os tempos seguem a mesma tendência das demais projeções: t-SNE demanda vários segundos, enquanto UMAP permanece na faixa de frações do tempo demandado pelo t-SNE.

Dataset	ABTN	AWTN	ABW	DSC	Trust.	Cont.
MNIST (t-SNE)	69.21	28.80	2.40	0.8224	0.9857	0.9746
MNIST (UMAP)	6.76	1.98	3.41	0.8389	0.9533	0.9748
Fashion (t-SNE)	67.67	30.64	2.21	0.6741	0.9941	0.9875
Fashion (UMAP)	8.14	2.39	3.40	0.6749	0.9801	0.9883
CIFAR-10 (t-SNE)	56.51	24.85	2.27	0.6954	0.9660	0.9429
CIFAR-10 (UMAP)	4.65	1.37	3.38	0.7772	0.9241	0.9519
Breast Cancer (t-SNE)	21.01	12.26	1.71	0.9350	0.9499	0.9483
Breast Cancer (UMAP)	4.21	2.35	1.79	0.9375	0.9259	0.9477

Tabela 6.2: Métricas de avaliação das projeções (valores conforme saída dos experimentos).

6.2 MNIST

O MNIST costuma ser um bom ponto de partida porque possui estrutura clara e classes bem definidas. O t-SNE alcançou um dos seus melhores desempenhos neste dataset, especialmente em *trustworthiness* (0,9857), sinal de que a vizinhança local foi mantida com precisão. O UMAP, por sua vez, apresentou ABW maior (3,41), refletindo uma separação mais nítida entre classes, algo que normalmente se observa visualmente nas projeções. O DSC também favoreceu o UMAP (0,8389 contra 0,8224), indicando que os centróides projetados tendem a representar melhor cada classe. Foi interessante notar que, apesar desses ganhos estruturais, o UMAP permaneceu consideravelmente mais rápido.

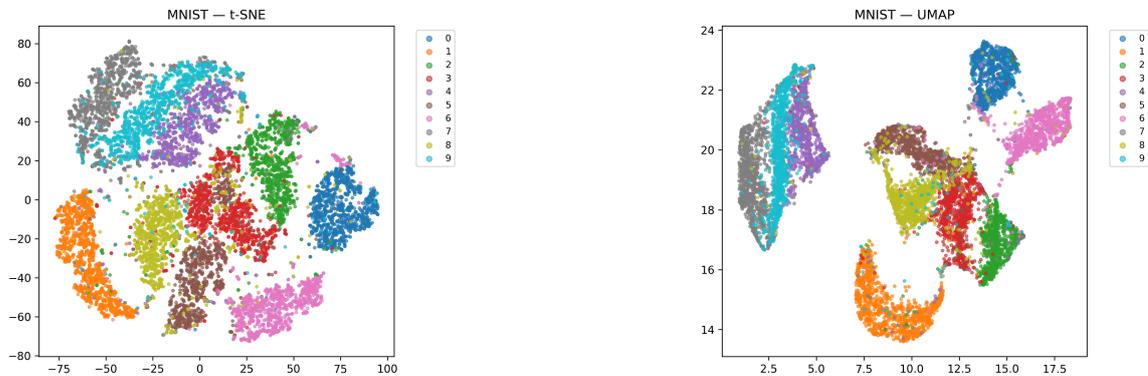


Figura 6.1: Comparação entre t-SNE e UMAP no MNIST. O t-SNE mantém vizinhanças locais com maior fidelidade, enquanto o UMAP produz agrupamentos mais compactos e bem separados.

6.3 Fashion-MNIST

O Fashion-MNIST exige mais das técnicas porque suas classes têm contornos menos definidos. Os valores de *trustworthiness* do t-SNE se mantiveram muito altos (0,9941), enquanto o UMAP produziu um valor levemente menor, mas ainda forte (0,9801). Por outro lado, o UMAP voltou a apresentar ABW maior (3,40 contra 2,21 do t-SNE), sugerindo

que, mesmo com classes mais confusas, a projeção favorece a separação entre grupos no plano. Os dois métodos ficaram praticamente empatados em DSC, o que combina com a dificuldade inerente do dataset: separar roupas diferentes usando apenas geometria local é uma tarefa mais complexa.

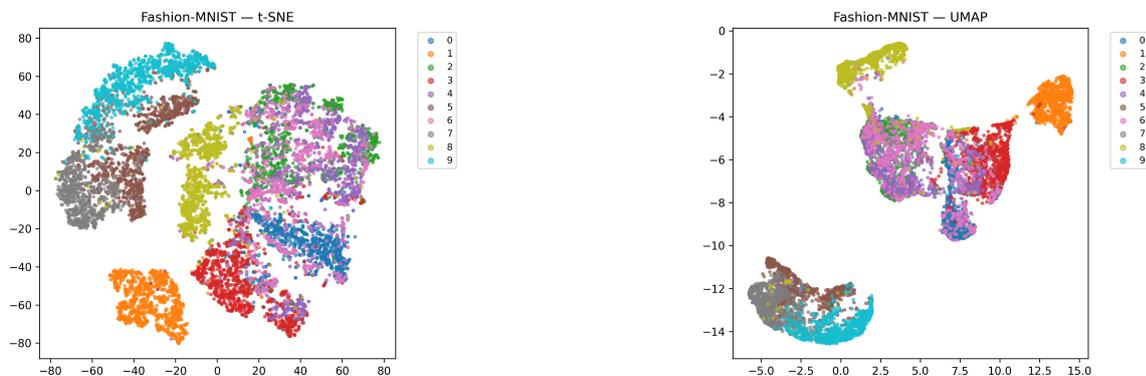


Figura 6.2: Comparação entre *t-SNE* e *UMAP* no *Fashion-MNIST*. O *t-SNE* preserva melhor pequenas variações locais, enquanto o *UMAP* forma agrupamentos mais definidos mesmo em classes naturalmente sobrepostas.

6.4 CIFAR-10

A análise do CIFAR-10, mesmo após a extração de características com a ResNet-50, evidencia a diferença entre preservar vizinhanças e produzir agrupamentos claros. O *t-SNE* manteve melhor *trustworthiness* (0,9660) do que o *UMAP*, mas novamente o *UMAP* apresentou *ABW* e *DSC* superiores, o que sugere clusters mais distintos na projeção final. Essa diferença qualitativa costuma aparecer de forma marcante quando se observam os gráficos: o *t-SNE* tende a revelar subestruturas internas dentro das classes, enquanto o *UMAP* organiza as classes como entidades mais compactas.

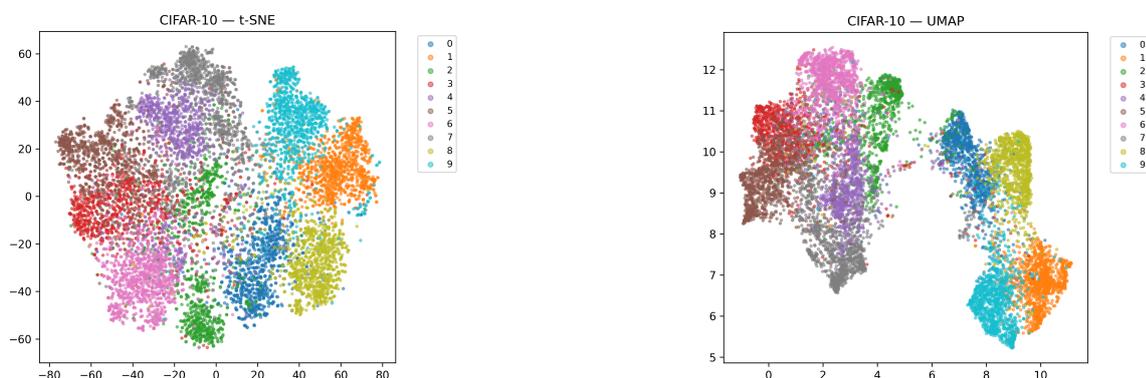


Figura 6.3: Comparação entre *t-SNE* e *UMAP* no *CIFAR-10*. O *t-SNE* revela subestruturas internas dentro das classes, enquanto o *UMAP* gera clusters mais compactos e separados, coerentes com os valores mais altos de *DSC*.

6.5 Breast Cancer Wisconsin

No dataset tabular, sem a complexidade visual das imagens, as duas técnicas se comportaram de maneira bastante próxima. O DSC ultrapassou 0,93 para ambos os métodos, e os valores de ABW ficaram próximos (1,71 e 1,79). Aqui o foco é menos em separar dez categorias e mais em verificar se a projeção preserva a divisão binária existente nos dados, e ambas as técnicas cumprem esse papel adequadamente.

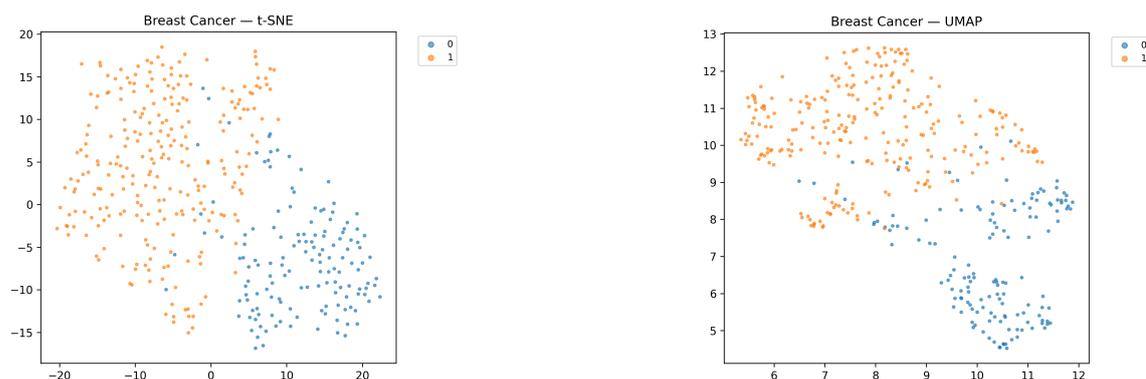


Figura 6.4: Comparação entre *t-SNE* e *UMAP* no Breast Cancer. Como o conjunto possui apenas duas classes, ambos os métodos produzem separações claras, com diferenças visuais mais sutis do que nos datasets de imagens.

Capítulo 7

Conclusão

Este trabalho partiu de uma pergunta conceitualmente simples, mas central em aprendizado de máquina: até que ponto é possível reduzir a dimensionalidade de dados sem perder a estrutura que realmente importa? A partir dessa motivação, procura-se conectar três níveis diferentes de análise: (i) a base teórica que garante a possibilidade de projeções com distorção controlada, via Lema de Johnson–Lindenstrauss; (ii) a formulação probabilística e topológica por trás de métodos modernos de projeção não linear, em particular o t-SNE e o UMAP; e (iii) uma avaliação experimental, ainda que modesta, que ajuda a enxergar, na prática, como essas técnicas se comportam em diferentes tipos de dados.

No primeiro bloco do texto, analisa-se a viabilidade da redução de dimensionalidade em termos formais, mostrando como o Lema de Johnson–Lindenstrauss garante que é possível projetar conjuntos finitos de pontos em um espaço de dimensão logarítmica no número de amostras, preservando aproximadamente as distâncias euclidianas. Essa parte ajuda a enquadrar a redução de dimensionalidade não como um truque heurístico, mas como uma transformação com respaldo matemático bem definido.

Em seguida, o foco se volta para métodos não lineares usados no dia a dia para visualização, com ênfase em t-SNE e UMAP. No caso do t-SNE, foi discutido o caminho desde o SNE original até a formulação atual, baseada em probabilidades conjuntas simétricas e em uma distribuição t de Student em baixa dimensão para mitigar o *crowding problem*. Já o UMAP foi apresentado a partir de sua interpretação geométrica e topológica: construção de um grafo de vizinhança ponderado, modelagem como um *fuzzy simplicial set* e posterior otimização de um layout em baixa dimensão que preserva essa estrutura. A comparação conceitual entre os dois algoritmos mostra que, embora ambos partam da ideia de vizinhança, eles chegam lá por caminhos bastante diferentes: um mais estatístico, outro mais ligado a grafos e topologia.

Na parte experimental, o objetivo foi aproximar a discussão teórica do uso prático. Foi implementado um pipeline comum para quatro conjuntos de dados bastante distintos. O pré-processamento e os hiperparâmetros foram mantidos o mais consistentes possível entre os experimentos, e as projeções foram avaliadas não apenas por métricas clássicas, como *trustworthiness* e *continuity*, mas também por medidas voltadas à percepção visual de classes, como ABW e DSC.

Os resultados apontam para um padrão relativamente estável. De modo geral, o t-SNE exibiu valores mais altos de *trustworthiness*, sugerindo uma preservação mais cuidadosa das vizinhanças locais do espaço original. O UMAP, por outro lado, obteve ABW e DSC sistematicamente maiores na maioria dos datasets, o que indica clusters mais compactos e separações mais nítidas entre classes na projeção. Em termos de tempo de execução, a diferença foi clara: o UMAP rodou em ordem de grandeza menor que o t-SNE, mesmo quando aplicado a milhares de pontos com embeddings de alta dimensão. No conjunto tabular, as duas técnicas ficaram mais próximas, o que sugere que, em situações menos “geométricas” e com poucas classes, a escolha entre elas é menos crítica.

Embora os experimentos tenham escala modesta, eles reforçam empiricamente uma intuição que já aparece na literatura: o UMAP tende a ser preferível quando se quer visualizações mais limpas, com grupos bem separados, e quando o custo computacional é uma preocupação real. Ao mesmo tempo, os resultados mostram que não existe uma “melhor projeção universal”: o comportamento de cada método depende do tipo de dados, da métrica de avaliação e do que o usuário considera mais importante na tarefa de visualização.

Em resumo, o trabalho buscou fazer uma ponte entre teoria e prática em redução de dimensionalidade, mostrando como um resultado abstrato como o Lema de Johnson–Lindenstrauss se conecta, ainda que indiretamente, ao comportamento de algoritmos concretos usados diariamente para visualizar dados. Acreditamos que essa visão integrada combinando fundamentos, modelagem e experimentos é um passo útil para quem precisa escolher, aplicar e interpretar técnicas de projeção em cenários de alta dimensão.

Apêndice A

Notebook de Experimentos

O código completo utilizado neste trabalho, incluindo carregamento dos conjuntos de dados, pré-processamento, extração de características, geração das projeções e cálculo das métricas, está reproduzido a seguir. Trata-se do mesmo notebook utilizado para produzir as tabelas e figuras do capítulo de Resultados.

```
1 # %%
2 import sys
3 try:
4     import pandas as pd
5     print("pandas já instalado:", pd.__version__)
6 except ModuleNotFoundError:
7     print("pandas não encontrado, instalando via pip...")
8     import subprocess
9     subprocess.check_call([sys.executable, "-m", "pip", "install", "pandas"])
10    import pandas as pd
11    print("pandas instalado:", pd.__version__)
12
13
14 # %%
15 # imports gerais
16 import os
17 import time
18 import numpy as np
19 from tqdm import tqdm
20
21 # sklearn
22 from sklearn.datasets import load_breast_cancer
23 from sklearn.decomposition import PCA
24 from sklearn.manifold import TSNE, trustworthiness as skl_trustworthiness
25 from sklearn.preprocessing import StandardScaler
26 from sklearn.metrics import pairwise_distances
27
28 # UMAP
29 import umap
30
31 # PyTorch / torchvision
32 import torch
33 import torch.nn as nn
```

```
34 import torchvision
35 import torchvision.transforms as T
36 from torch.utils.data import DataLoader, Subset
37
38 # plots
39 import matplotlib.pyplot as plt
40
41 # reprodutibilidade
42 RANDOM_STATE = 42
43 np.random.seed(RANDOM_STATE)
44 torch.manual_seed(RANDOM_STATE)
45
46 # %%
47 # =====
48 # baixar e preparar datasets
49 # =====
50 data_dir = "./data"
51 os.makedirs(data_dir, exist_ok=True)
52
53 transform_basic = T.Compose([T.ToTensor()])
54
55 mnist_train = torchvision.datasets.MNIST(
56     root=data_dir, train=True, download=True, transform=transform_basic
57 )
58 mnist_test = torchvision.datasets.MNIST(
59     root=data_dir, train=False, download=True, transform=transform_basic
60 )
61
62 fashion_train = torchvision.datasets.FashionMNIST(
63     root=data_dir, train=True, download=True, transform=transform_basic
64 )
65 fashion_test = torchvision.datasets.FashionMNIST(
66     root=data_dir, train=False, download=True, transform=transform_basic
67 )
68
69 cifar_train = torchvision.datasets.CIFAR10(
70     root=data_dir, train=True, download=True, transform=transform_basic
71 )
72 cifar_test = torchvision.datasets.CIFAR10(
73     root=data_dir, train=False, download=True, transform=transform_basic
74 )
75
76 bc = load_breast_cancer()
77 X_bc = bc.data
78 y_bc = bc.target
79
80 def concat_torchvision_dataset(ds_train, ds_test):
81     X_list, y_list = [], []
82     for img, label in ds_train:
83         X_list.append(img.numpy())
84         y_list.append(label)
85     for img, label in ds_test:
86         X_list.append(img.numpy())
87         y_list.append(label)
88     X = np.stack(X_list)
89     y = np.array(y_list)
```

```

90     return X, y
91
92     X_mnist, y_mnist = concat_torchvision_dataset(mnist_train, mnist_test)
93     X_fashion, y_fashion = concat_torchvision_dataset(fashion_train,
94     fashion_test)
95
96     X_cifar, y_cifar = concat_torchvision_dataset(cifar_train, cifar_test)
97
98     print("MNIST shape:", X_mnist.shape, y_mnist.shape)
99     print("Fashion-MNIST shape:", X_fashion.shape, y_fashion.shape)
100    print("CIFAR-10 shape:", X_cifar.shape, y_cifar.shape)
101    print("BreastCancer shape:", X_bc.shape, y_bc.shape)
102
103
104    # %%
105
106    # =====
107    # subamostragem
108    # =====
109    N_SUBSET_MNIST = 10000
110    N_SUBSET_FASHION = 10000
111    N_SUBSET_CIFAR = 10000
112    N_SUBSET_BC = 400
113
114    rng = np.random.RandomState(42)
115
116    idx_mnist = rng.choice(len(X_mnist), size=N_SUBSET_MNIST, replace=False)
117    X_mnist_sub = X_mnist[idx_mnist]
118    y_mnist_sub = y_mnist[idx_mnist]
119
120    idx_fashion = rng.choice(len(X_fashion), size=N_SUBSET_FASHION, replace=
121    False)
122    X_fashion_sub = X_fashion[idx_fashion]
123    y_fashion_sub = y_fashion[idx_fashion]
124
125    idx_cifar = rng.choice(len(X_cifar), size=N_SUBSET_CIFAR, replace=False)
126    X_cifar = X_cifar[idx_cifar]
127    y_cifar = y_cifar[idx_cifar]
128
129    N_BC = min(N_SUBSET_BC, len(X_bc))
130    idx_bc = rng.choice(len(X_bc), size=N_BC, replace=False)
131    X_bc_sub = X_bc[idx_bc]
132    y_bc_sub = y_bc[idx_bc]
133
134    print("MNIST subset:", X_mnist_sub.shape)
135    print("Fashion subset:", X_fashion_sub.shape)
136    print("CIFAR subset:", X_cifar.shape)
137    print("BreastCancer subset:", X_bc_sub.shape)
138
139
140    # %%
141
142    # =====
143    # pré-processamento (flatten + escala)
144    # =====
145    scaler = StandardScaler()
146
147    def preprocess_images_flat(X_images):
148        n, c, h, w = X_images.shape

```

```

144     X_flat = X_images.reshape(n, -1)
145     return scaler.fit_transform(X_flat)
146
147 X_mnist_flat = preprocess_images_flat(X_mnist_sub)
148 X_fashion_flat = preprocess_images_flat(X_fashion_sub)
149
150 scaler_bc = StandardScaler()
151 X_bc_scaled = scaler_bc.fit_transform(X_bc_sub)
152
153 print("MNIST pré-processado:", X_mnist_flat.shape)
154 print("Fashion pré-processado:", X_fashion_flat.shape)
155 print("BreastCancer pré-processado:", X_bc_scaled.shape)
156
157
158 # %%
159 # =====
160 # extração de features CIFAR-10 com ResNet-50
161 # =====
162 N_SUBSET = 10000
163
164 feature_path = f"./cifar10_resnet50_features_subset_{N_SUBSET}.npy"
165 labels_path = f"./cifar10_resnet50_labels_subset_{N_SUBSET}.npy"
166
167 if os.path.exists(feature_path) and os.path.exists(labels_path):
168     print(f"Carregando features CIFAR-10 pré-computadas ({N_SUBSET} amostras)
169         ...")
170     X_cifar_feats = np.load(feature_path)
171     y_cifar_feats = np.load(labels_path)
172     print("Features carregadas:", X_cifar_feats.shape)
173 else:
174     print(f"Extraindo features da ResNet-50 para {N_SUBSET} amostras...")
175
176     total = len(X_cifar)
177     idx = np.random.RandomState(42).choice(total, size=N_SUBSET, replace=
178         False)
179     X_cifar_subset = X_cifar[idx]
180     y_cifar_subset = y_cifar[idx]
181
182     resnet_model = torchvision.models.resnet50(pretrained=True)
183     modules = list(resnet_model.children())[:-1]
184     feature_extractor = nn.Sequential(*modules).to(DEVICE)
185     feature_extractor.eval()
186
187     imagenet_transform = T.Compose([
188         T.ToPILImage(),
189         T.Resize(224),
190         T.ToTensor(),
191         T.Normalize(
192             mean=[0.485, 0.456, 0.406],
193             std=[0.229, 0.224, 0.225]
194         )
195     ])
196
197     class NumpyCIFARDataset(torch.utils.data.Dataset):
198         def __init__(self, X_np, y_np, transform):
199             self.X = X_np

```

```

198         self.y = y_np
199         self.transform = transform
200     def __len__(self):
201         return len(self.X)
202     def __getitem__(self, idx):
203         img = (self.X[idx] * 255).astype(np.uint8).transpose(1, 2, 0)
204         img_t = self.transform(img)
205         return img_t, int(self.y[idx])
206
207     batch_size = 64
208     cifar_dataset = NumpyCIFARDataset(X_cifar_subset, y_cifar_subset,
209                                     imagenet_transform)
210     cifar_loader = DataLoader(cifar_dataset, batch_size=batch_size, shuffle=
211                             False, num_workers=4)
212
213     features = []
214     labels = []
215
216     with torch.no_grad():
217         for imgs, lbls in tqdm(cifar_loader, desc="Extraíndo features CIFAR10"):
218             :
219             imgs = imgs.to(DEVICE)
220             out = feature_extractor(imgs)
221             out = out.view(out.size(0), -1).cpu().numpy()
222             features.append(out)
223             labels.append(lbls.numpy())
224
225     features = np.concatenate(features, axis=0)
226     labels = np.concatenate(labels, axis=0)
227
228     scaler_cifar = StandardScaler()
229     X_cifar_feats = scaler_cifar.fit_transform(features)
230     y_cifar_feats = labels
231
232     np.save(feature_path, X_cifar_feats)
233     np.save(labels_path, y_cifar_feats)
234
235     print("Extração concluída e salva:", X_cifar_feats.shape)
236
237     # %%
238     # =====
239     # PCA (50 componentes)
240     # =====
241     pca50 = PCA(n_components=50, random_state=RANDOM_STATE)
242
243     X_mnist_pca50 = pca50.fit_transform(X_mnist_flat)
244     X_fashion_pca50 = pca50.fit_transform(X_fashion_flat)
245     X_cifar_pca50 = pca50.fit_transform(X_cifar_feats)
246
247     print("MNIST PCA50:", X_mnist_pca50.shape)
248     print("Fashion PCA50:", X_fashion_pca50.shape)
249     print("CIFAR feats PCA50:", X_cifar_pca50.shape)
250
251     # %%
252     # =====

```

```
251 # t-SNE e UMAP (2D) + tempos
252 # =====
253 tsne_params = dict(
254     n_components=2,
255     perplexity=30,
256     learning_rate=200,
257     max_iter=1000,
258     init="pca",
259     random_state=RANDOM_STATE,
260     verbose=1
261 )
262
263 umap_params = dict(
264     n_components=2,
265     n_neighbors=15,
266     min_dist=0.1,
267     metric="euclidean",
268     random_state=RANDOM_STATE
269 )
270
271 def compute_embeddings(X, method="tsne"):
272     inicio = time.time()
273     if method == "tsne":
274         model = TSNE(**tsne_params)
275         emb = model.fit_transform(X)
276     elif method == "umap":
277         model = umap.UMAP(**umap_params)
278         emb = model.fit_transform(X)
279     else:
280         raise ValueError("method precisa ser 'tsne' ou 'umap'")
281     fim = time.time()
282     return emb, fim - inicio
283
284 print("Calculando embeddings MNIST...")
285 X_mnist_tsne, t_mnist_tsne = compute_embeddings(X_mnist_pca50, method="tsne")
286
287 print(f" Tempo MNIST t-SNE: {t_mnist_tsne:.2f} s")
288 X_mnist_umap, t_mnist_umap = compute_embeddings(X_mnist_pca50, method="umap")
289
290 print(f" Tempo MNIST UMAP: {t_mnist_umap:.2f} s\n")
291
292 print("Calculando embeddings Fashion-MNIST...")
293 X_fashion_tsne, t_fashion_tsne = compute_embeddings(X_fashion_pca50, method="tsne")
294
295 print(f" Tempo Fashion t-SNE: {t_fashion_tsne:.2f} s")
296 X_fashion_umap, t_fashion_umap = compute_embeddings(X_fashion_pca50, method="umap")
297
298 print(f" Tempo Fashion UMAP: {t_fashion_umap:.2f} s\n")
299
300 print("Calculando embeddings CIFAR-10...")
301 X_cifar_tsne, t_cifar_tsne = compute_embeddings(X_cifar_pca50, method="tsne")
302
303 print(f" Tempo CIFAR t-SNE: {t_cifar_tsne:.2f} s")
304 X_cifar_umap, t_cifar_umap = compute_embeddings(X_cifar_pca50, method="umap")
305
306 print(f" Tempo CIFAR UMAP: {t_cifar_umap:.2f} s\n")
```

```

301
302 print("Calculando embeddings Breast Cancer...")
303 X_bc_tsne, t_bc_tsne = compute_embeddings(X_bc_scaled, method="tsne")
304 print(f" Tempo Breast Cancer t-SNE: {t_bc_tsne:.2f} s")
305 X_bc_umap, t_bc_umap = compute_embeddings(X_bc_scaled, method="umap")
306 print(f" Tempo Breast Cancer UMAP: {t_bc_umap:.2f} s\n")
307
308 print("Todos os embeddings foram calculados.")
309
310
311 # %%
312 # =====
313 # métricas ABTN, AWTN, ABW, DSC
314 # =====
315 def class_centroids(X, labels):
316     classes = np.unique(labels)
317     centroids = np.vstack([X[labels == c].mean(axis=0) for c in classes])
318     return classes, centroids
319
320 def ABTN_between_class_average_distance(X, labels):
321     classes, centroids = class_centroids(X, labels)
322     if len(centroids) < 2:
323         return 0.0
324     D = pairwise_distances(centroids, metric="euclidean")
325     iu = np.triu_indices_from(D, k=1)
326     return D[iu].mean()
327
328 def AWTN_within_class_average_distance(X, labels):
329     classes = np.unique(labels)
330     medias = []
331     for c in classes:
332         Xc = X[labels == c]
333         n = Xc.shape[0]
334         if n <= 1:
335             medias.append(0.0)
336             continue
337         D = pairwise_distances(Xc, metric="euclidean")
338         iu = np.triu_indices(n, k=1)
339         medias.append(D[iu].mean())
340     return float(np.mean(medias))
341
342 def ABW_ratio(X, labels):
343     abtn = ABTN_between_class_average_distance(X, labels)
344     awtn = AWTN_within_class_average_distance(X, labels)
345     if awtn == 0:
346         return np.inf if abtn > 0 else 0.0
347     return abtn / awtn
348
349 def DSC(X, labels):
350     classes, centroids = class_centroids(X, labels)
351     D = pairwise_distances(X, centroids, metric="euclidean")
352     nearest_idx = D.argmax(axis=1)
353     centroid_labels = classes[nearest_idx]
354     return (centroid_labels == labels).mean()
355
356

```

```

357 # %%
358 # =====
359 # trustworthiness e continuity
360 # =====
361 def compute_trustworthiness(X_orig, X_embedded, n_neighbors=10):
362     return skl_trustworthiness(X_orig, X_embedded, n_neighbors=n_neighbors)
363
364 def compute_continuity(X_orig, X_embedded, n_neighbors=10):
365     # aqui a ideia é inverter os papéis para obter uma medida parecida com
366     # continuity
367     return skl_trustworthiness(X_embedded, X_orig, n_neighbors=n_neighbors)
368
369 # %%
370 # =====
371 # tabela de resultados
372 # =====
373 results = []
374
375 def evaluate_and_record(name, X_orig, X_emb, labels):
376     row = {}
377     row["dataset"] = name
378     row["n_samples"] = X_orig.shape[0]
379     row["ABTN"] = ABTN_between_class_average_distance(X_emb, labels)
380     row["AWTN"] = AWTN_within_class_average_distance(X_emb, labels)
381     row["ABW"] = ABW_ratio(X_emb, labels)
382     row["DSC"] = DSC(X_emb, labels)
383     row["trustworthiness_k10"] = compute_trustworthiness(X_orig, X_emb,
384     n_neighbors=10)
385     row["continuity_k10"] = compute_continuity(X_orig, X_emb, n_neighbors=10)
386     return row
387
388 results.append(evaluate_and_record("MNIST_tsne", X_mnist_pca50, X_mnist_tsne,
389 y_mnist_sub))
390 results.append(evaluate_and_record("MNIST_umap", X_mnist_pca50, X_mnist_umap,
391 y_mnist_sub))
392
393 results.append(evaluate_and_record("Fashion_tsne", X_fashion_pca50,
394 X_fashion_tsne, y_fashion_sub))
395 results.append(evaluate_and_record("Fashion_umap", X_fashion_pca50,
396 X_fashion_umap, y_fashion_sub))
397
398 results.append(evaluate_and_record("CIFAR_tsne", X_cifar_pca50, X_cifar_tsne,
399 y_cifar_feats))
400 results.append(evaluate_and_record("CIFAR_umap", X_cifar_pca50, X_cifar_umap,
401 y_cifar_feats))
402
403 results.append(evaluate_and_record("BreastCancer_tsne", X_bc_scaled,
404 X_bc_tsne, y_bc_sub))
405 results.append(evaluate_and_record("BreastCancer_umap", X_bc_scaled,
406 X_bc_umap, y_bc_sub))
407
408 df_results = pd.DataFrame(results)
409 df_results
410
411 # %%
412 # =====

```

```

403 # plots dos embeddings
404 # =====
405 os.makedirs("figures", exist_ok=True)
406
407 def plot_embedding(X_emb, y, title=None, save_path=None, figsize=(6, 5),
408                 alpha=0.6, s=6):
409     if X_emb.shape[0] != len(y):
410         raise ValueError(
411             f"Dimensões incompatíveis: X_emb={X_emb.shape[0]}, y={len(y)}"
412         )
413
414     plt.figure(figsize=figsize)
415     classes = np.unique(y)
416     num_classes = len(classes)
417     cmap = plt.get_cmap("tab10" if num_classes <= 10 else "tab20")
418
419     for cls in classes:
420         mask = (y == cls)
421         plt.scatter(
422             X_emb[mask, 0],
423             X_emb[mask, 1],
424             s=s,
425             alpha=alpha,
426             label=str(cls),
427         )
428
429     plt.legend(
430         markerscale=2,
431         bbox_to_anchor=(1.05, 1),
432         loc="upper left",
433         fontsize="small",
434     )
435     if title:
436         plt.title(title)
437     plt.tight_layout()
438
439     if save_path is not None:
440         plt.savefig(save_path, dpi=300, bbox_inches="tight")
441
442     plt.show()
443
444 def plot_all_embeddings():
445     plot_embedding(
446         X_mnist_tsne, y_mnist_sub,
447         title="MNIST -- t-SNE",
448         save_path="figures/mnist_tsne.png"
449     )
450
451     plot_embedding(
452         X_mnist_umap, y_mnist_sub,
453         title="MNIST -- UMAP",
454         save_path="figures/mnist_umap.png"
455     )
456
457     plot_embedding(
458         X_fashion_tsne, y_fashion_sub,

```

```
458     title="Fashion-MNIST -- t-SNE",
459     save_path="figures/fashion_tsne.png"
460 )
461
462 plot_embedding(
463     X_fashion_umap, y_fashion_sub,
464     title="Fashion-MNIST -- UMAP",
465     save_path="figures/fashion_umap.png"
466 )
467
468 plot_embedding(
469     X_cifar_tsne, y_cifar_feats,
470     title="CIFAR-10 -- t-SNE",
471     save_path="figures/cifar_tsne.png",
472     alpha=0.5,
473     s=5
474 )
475
476 plot_embedding(
477     X_cifar_umap, y_cifar_feats,
478     title="CIFAR-10 -- UMAP",
479     save_path="figures/cifar_umap.png",
480     alpha=0.5,
481     s=5
482 )
483
484 plot_embedding(
485     X_bc_tsne, y_bc_sub,
486     title="Breast Cancer -- t-SNE",
487     save_path="figures/bc_tsne.png"
488 )
489
490 plot_embedding(
491     X_bc_umap, y_bc_sub,
492     title="Breast Cancer -- UMAP",
493     save_path="figures/bc_umap.png"
494 )
495
496 plot_all_embeddings()
```

Referências

- [BELKIN e NIYOGI 2003] Mikhail BELKIN e Partha NIYOGI. “Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation”. *Neural Computation* 15.6 (2003), pp. 1373–1396. DOI: [10.1162/089976603321780317](https://doi.org/10.1162/089976603321780317) (citado na pg. 16).
- [ESPADOTO *et al.* 2021] Mateus ESPADOTO, Rafael M. MARTINS, Andreas KERREN, Nina S. T. HIRATA e Alexandru C. TELEA. “Toward a quantitative survey of dimension reduction techniques”. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 27.3 (2021), pp. 2153–2173. DOI: [10.1109/TVCG.2019.2944182](https://doi.org/10.1109/TVCG.2019.2944182) (citado na pg. 19).
- [FRUCHTERMAN e REINGOLD 1991] Thomas M. J. FRUCHTERMAN e Edward M. REINGOLD. “Graph drawing by force-directed placement”. *Software: Practice and Experience* 21.11 (1991), pp. 1129–1164. DOI: <https://doi.org/10.1002/spe.4380211102>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/spe.4380211102>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/spe.4380211102> (citado na pg. 17).
- [JOHNSON e LINDENSTRAUSS 1984] William B. JOHNSON e Joram LINDENSTRAUSS. “Extensions of lipschitz mappings into a hilbert space”. *Contemporary Mathematics* 26 (1984), pp. 189–206 (citado na pg. 5).
- [MAATEN e HINTON 2008] Laurens van der MAATEN e Geoffrey HINTON. “Visualizing data using t-sne”. *Journal of Machine Learning Research* 9 (2008), pp. 2579–2605 (citado nas pgs. 1, 12).
- [MCINNES *et al.* 2018] Leland MCINNES, John HEALY e James MELVILLE. “Umap: uniform manifold approximation and projection for dimension reduction”. *arXiv preprint arXiv:1802.03426* (2018) (citado nas pgs. 1, 15).
- [PANCHENKO 2016] Dmitry PANCHENKO. “Gaussian distributions with applications”. Notas de aula, material não publicado. 2016 (citado na pg. 7).
- [PARK s.d.] Kevin Min Seong PARK. “The johnson–lindenstrauss lemma”. Notas de curso, disciplina MAT477 (citado na pg. 6).
- [PEARSON 1901] Karl PEARSON. “On lines and planes of closest fit to systems of points in space”. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 2.11 (1901), pp. 559–572. DOI: [10.1080/14786440109462720](https://doi.org/10.1080/14786440109462720) (citado na pg. 1).

- [SEDLMAIR e AUPETIT 2015] M. SEDLMAIR e M. AUPETIT. “Data-driven evaluation of visual quality measures”. *Comput. Graph. Forum* 34.3 (jun. de 2015), pp. 201–210. ISSN: 0167-7055 (citado na pg. 20).
- [TENENBAUM *et al.* 2000] Joshua B. TENENBAUM, Vin de SILVA e John C. LANGFORD. “A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction”. *Science* 290.5500 (2000), pp. 2319–2323 (citado na pg. 16).
- [ZHAO *et al.* 2024] Shuang ZHAO, Bo ZHANG, Jie YANG *et al.* “Linear discriminant analysis”. *Nature Reviews Methods Primers* 4 (2024), p. 70. DOI: [10.1038/s43586-024-00346-y](https://doi.org/10.1038/s43586-024-00346-y) (citado na pg. 1).