



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

EL TÍTULO DEL TRABAJO *FIN DE MÁSTER*

Trabajo Fin de Grado presentado por
Daniel López García

Curso 2017/18

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

EL TÍTULO DEL TRABAJO
FIN DE MÁSTER

Trabajo Fin de Grado presentado por
Daniel López García

Curso 2017/18

Tutor: Nombre Apellido1 Apellido2
Departamento: Matemática Aplicada
Área de Conocimiento: Matemática Aplicada

(Página de agradecimientos si los hay)
Thank you.

Índice

1. Esféricos Armónicos	1
1.1. Preliminares	1
1.1.1. Notación	1
1.1.2. La función Γ	2
1.1.3. Resultados básicos de la esfera.	3
1.2. Esféricos Armónicos a partir de Espacios Primitivos.	4
1.2.1. Espacios de Polinomios Homogéneos.	5
1.2.2. Armónicos de Legendre y Polinomios de Legendre	6
1.2.3. Esféricos Armónicos	7
1.3. Teorema de Adición. Consecuencias.	8
1.4. Un Operador de Proyección	10
1.5. Generando Bases Ortonormales para Espacios de Esféricos Armónicos.	11
1.6. Polinomios de Legendre. Fórmulas de Representación	11
1.6.1. Fórmula de Rodrigues	11
1.6.2. Fórmulas de Representación Integral.	11
1.7. Polinomios de Legendre. Propiedades	11
2. Kaggle	13
2.1. Regresión	13
2.2. Descripción del problema	13
2.2.1. Evaluación	13
2.3. Algoritmos	13
2.4. Herramientas.	14
2.5. Preprocesamiento	16

Capítulo 1

Esféricos Armónicos

1.1. Preliminares

1.1.1. Notación

Para empezar fijaremos la notación que seguiremos durante el capítulo. Usaremos $d \in \mathbb{N}$ para representar la dimensión de un conjunto; en particular, el conjunto $\mathbb{R}^d = \{x = (x_1, \dots, x_d)^T : x_j \in \mathbb{R}, 1 \leq j \leq d\}$ es el espacio euclídeo de dimensión d con el producto escalar y la norma

$$(x, y) = \sum_{j=1}^d x_j y_j \quad |x| = (x, x)^{1/2} \quad x, y \in \mathbb{R}^d$$

En \mathbb{R}^d usaremos la base canónica

$$e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T, \dots, e_d = (0, 0, \dots, 1)^T$$

y escribiremos $x = \sum_{j=1}^d x_j e_j, x \in \mathbb{R}^d$.

Para indicar la dimensión explícitamente usaremos $x_{(d)}$ en lugar de x . En tal caso, $x_{(d)} = x_{(d-1)} + x_d e_d$ siendo $x_{(d-1)} = (x_1, \dots, x_{d-1}, 0)^T$. También usaremos $x_{(d-1)}$ para referirnos al vector $(d-1)$ -dimensional $(x_1, \dots, x_{d-1}, 0)^T$.

Trabajaremos sobre la esfera unidad $\mathbb{S}^{d-1} = \{\xi \in \mathbb{R}^d : |\xi| = 1\}$. Por simplicidad, llamaremos esfera a \mathbb{S}^{d-1} .

Definición 1.1. Sean $\xi, \eta \in \mathbb{S}^{d-1}$, definimos las siguientes distancias:

- La distancia euclídea $|\xi - \eta| = \sqrt{2(1 - \xi \cdot \eta)}$
- La distancia geodésica $\theta(\xi, \eta) = \arccos(\xi \cdot \eta)$

Nota 1.2. Usando que $\frac{2}{\pi} \leq \sin t \leq t, t \in [0, \pi/2]$ se deduce la siguiente relación entre ambas distancias:

$$\frac{2}{\pi} \theta(\xi, \eta) \leq |\xi - \eta| \leq \theta(\xi, \eta)$$

Para $x = (x_1, \dots, x_d)$ definimos $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \dots x_d^{\alpha_d}$. Análogamente, para el operador gradiente $\nabla = (\partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_d})^T$ definimos

$$\nabla^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}$$

Y finalmente definimos el operador laplaciano como

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = \sum_{j=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2$$

1.1.2. La función Γ

Definición 1.3. Dado $x \in (\mathbb{R})^+$ definimos la función gamma como

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$$

Proposición 1.4. Se verifican las siguientes formulas:

$$\int_0^\infty tx - 1 e^{-at^b} dt = b^{-1} a^{-x/b} \Gamma(x/b), x, a, b \in \mathbb{R}^+$$

$$\int_0^1 |\ln t|^{x-1} dt = \Gamma(x), x \in \mathbb{R}^+$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x), x \in \mathbb{R}^+$$

$$\Gamma^{(k)}(x) = \int_0^\infty (\ln t)^k t^{x-1} e^{-t} dt, k \in \mathbb{N}_0, x \in \mathbb{R}^+$$

Nota 1.5. $\Gamma(1) = 1$ y de la tercera fórmula se deduce que $\Gamma(n+1) = n!$, $n \in \mathbb{N}_0$. Es decir, la función Γ extiende el operador factorial de los números naturales a los reales positivos.

Lema 1.6.

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi}$$

Definición 1.7. Sea $x \in \mathbb{R}$ y $n \in \mathbb{N}$, el símbolo de Pochhammer se define como

$$(x)_0 = 1, (x)_n = x(x+1)(x+2)\dots(x+n-1)$$

Proposición 1.8. Sea $x \in \mathbb{R}^+$ entonces

$$(x)_n = \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)}$$

1.1.3. Resultados básicos de la esfera.

Usaremos dV^d para elemento diferencial de volumen y dS^{d-1} para elemento diferencial de superficie de la esfera. \mathbb{S}^{-1}

Proposición 1.9. Para $d \geq 3$ y $\xi \in \mathbb{S}^{d-1}$, con $\xi_{(d)} = te_d + \sqrt{1-t^2}\xi_{(d-1)}$, $t \in [-1, 1]$, se tiene que

$$dS^{d-1}(te_d + \sqrt{1-t^2}\xi_{(d-1)}) = (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt dS^{d-2}(\xi_{(d-1)})$$

Equivalentemente,

$$dS^{d-1} = (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt dS^{d-2}$$

Ejemplo 1.10. Sea $d=3$ y ξ un punto genérico de la esfera. Usando coordenadas esféricas

$$\xi_{(3)} = \begin{pmatrix} \cos\phi \sin\theta \\ \sin\phi \sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi$$

Sea $t = \cos\theta$ entonces

$$\xi_{(2)} = \begin{pmatrix} \cos\phi \\ \sin\phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

Por tanto, $\xi_{(3)} = te_3 + \sqrt{1-t^2}\xi_{(2)}$ y $dS^1 = d\phi$, $dS^2 = dt d\phi$

Podemos usar la anterior proposición para el cálculo del área de la superficie de la esfera.

Proposición 1.11. Se verifica que

$$|\mathbb{S}^{d-1}| = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} dS^{d-1} = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}$$

Proposición 1.12. Sea $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ ortogonal entonces

$$dS^{d-1}(A\xi) = dS^{d-1}(\xi)$$

$$dV^d(A\xi) = dV^d(\xi)$$

Llamamos $C(S^{d-1})$ al espacio de funciones continuas sobre S^{d-1} . Este espacio es un espacio de Banach con la norma $\|f\|_\infty = \sup\{|f(\xi)| : \xi \in S^{d-1}\}$. Llamaremos $L^2(S^{d-1})$ al espacio de funciones con cuadrado integrable en S^{d-1} . Dicho espacio es un Hilbert con el producto escalar

$$(f, g) = \int_{S^{d-1}} f \bar{g} dS^{d-1}$$

Consideramos el espacio $C(S^{d-1})$ con la norma inducida por el producto escalar de $L^2(S^{d-1})$. Este espacio no es completo. Además, el cierre de $C(S^{d-1})$ respecto a dicha norma es $L^2(S^{d-1})$. Es decir, dado una función $f \in L^2(S^{d-1})$ existe una sucesión $\{f_n\} \subset C(S^{d-1})$ tal que $f_n \rightarrow f$

Proposición 1.13. Sean $\Omega_\delta = \{x \in \mathbb{R}^d : |x| \in [1 - \delta, 1 + \delta]\}$ y $f^*(x) = f(\frac{x}{|x|})$, $x \in \Omega_\delta$ y $k \in \mathbb{N}$. Entonces f es k veces diferenciable en S^{d-1} cuando f^* lo es.

Definición 1.14. Definimos $C^k(S^{d-1})$, $k \in \mathbb{N} \cup 0$ como el espacio de funciones k veces diferenciables en S^{d-1}

Proposición 1.15. $C^k(S^{d-1})$ es un espacio de Banach con la norma

$$\|f\|_{C^k(S^{d-1})} = \|f^*\|_{C^k(\Sigma_\delta)}$$

Nota 1.16. Usaremos $\|f\|_\infty = \|f\|_{C(S^{d-1})}$

1.2. Esféricos Armónicos a partir de Espacios Primitivos.

Consideramos \mathbb{O}^d el conjunto de matrices ortogonales de orden d . Para cualquier $\eta \in \mathbb{O}^d$ vector no nulo, $\mathbb{O}^d(\eta) = \{A \in \mathbb{O}^d : A\eta = \eta\}$ es el subconjunto de matrices ortogonales que deja el subespacio $\text{span}\{\eta\} = \{\alpha\eta : \alpha \in \mathbb{R}\}$ invariante.

Definición 1.17. Sea $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ y $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$, se define f_A como:

$$f_A(x) = f(Ax), \forall x \in \mathbb{R}^d$$

Consideremos un subespacio \mathcal{V} de funciones definidas de \mathbb{R}^d a un subconjunto de \mathbb{R}^d .

Definición 1.18. Sea \mathcal{V} un subespacio de funciones definidas de \mathbb{R}^d a $A \subseteq \mathbb{R}^d$. Se dice que \mathcal{V} es invariante si para $f \in \mathcal{V}$ y $A \in \mathbb{O}^d$, entonces $f_A \in \mathcal{V}$. Considerando \mathcal{V} un subespacio invariante de un espacio proveniente de un producto escalar se define:

- \mathcal{V} es reducible si $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 + \mathcal{V}_2$ con $\mathcal{V}_1 \neq \emptyset$, $\mathcal{V}_2 \neq \emptyset$ verificando $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2$ irreducibles y $\mathcal{V}_1 \perp \mathcal{V}_2$.
- \mathcal{V} es irreducible si no es reducible.
- \mathcal{V} es primitivo si es invariante e irreducible.

Proposición 1.19. Si $f_A = f$ para cualquier $A \in \mathbb{O}^d$ entonces $f(x)$ depende de x por medio de $|x|$, luego f es constante en una esfera de radio arbitrario.

Demostración. Sean $x, y \in \mathbb{R}^d$ con $|x| = |y|$, podemos encontrar una matriz $A \in \mathbb{O}^d$ tal que $Ax = y$. Entonces $f(x) = f_A(x) = f(y)$.

□

1.2. ESFÉRICOS ARMÓNICOS A PARTIR DE ESPACIOS PRIMITIVOS.5

Definición 1.20. Dado $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ se define $\text{span}\{f_A : A \in \mathbb{O}^d\}$ como el espacio de las series $\sum c_j f_{A_j}$ convergentes con $A_j \in \mathbb{O}^d, c_j \in \mathbb{C}$

De la definición se deduce que $\text{span}\{f_A : A \in \mathbb{O}^d\}$ es un subespacio de funciones. Además, si \mathcal{V} es un espacio finito dimensional $\mathcal{V} = \text{span}\{f_A\}$

Introduciremos los espacios de armónicos esféricos de diferentes órdenes como subespacios primitivos de $C(\mathbb{S}^{d-1})$.

1.2.1. Espacios de Polinomios Homogéneos.

Consideramos \mathcal{H}_n^d el espacio de polinomios homogéneos de grado n en d dimensiones. Las funciones son de la forma:

$$\sum_{|\alpha|=n} a_\alpha x^\alpha, a_\alpha \in \mathbb{C}$$

Ejemplo 1.21.

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_2^2 &= \{a_1 x_1^2 + a_2 x_1 x_2 + a_3 x_2^2\} \\ \mathbb{H}_3^2 &= \{a_1 x_1^3 + a_2 x_2^3 + a_3 x_1^2 x_2 + a_4 x_1 x_2^2\} \end{aligned}$$

A continuación vamos a estudiar la dimensión de \mathcal{H}_n^d , llegando a la conclusión de que es un espacio invariante finito dimensional. Para determinar $\dim \mathcal{H}_n^d$ contamos los monomios de grado n , es decir, x^α con $\alpha_i \geq 0$ y verificando $\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_d = n$. Tomamos un conjunto $S = \{1, 2, \dots, n+d-1\}$. Seleccionamos $d-1$ números de dicho conjunto y los llamamos $\beta_i, 1 \leq i \leq d-1$. Definimos $\beta_0 = 0$ y $\beta_d = n + d$.

Ahora, tomamos α_i como el número elementos de S entre 2 β_i consecutivos, es decir, $\alpha_i = \beta_i - \beta_{i-1} - 1, 1 \leq i \leq d$. Tenemos que

$$\sum_{i=1}^d \alpha_i = \sum_{i=1}^d \beta_i - \beta_{i-1} - \sum_{i=1}^d 1 = \beta_d - d = n + d - d = n$$

Por tanto tenemos una biyección entre el conjunto de α_i que suman n y el conjunto de β_i . Finalmente, contamos las distintas elecciones posibles de los β_i y tenemos que

$$\dim \mathbb{H}_n^d = \binom{n+d-1}{d-1} = \binom{n+d-1}{n}$$

Definición 1.22. Una función f es armónica si $\Delta f(x) = 0$.

Lema 1.23. Si $\Delta f = 0$, entonces $\Delta f_A = 0, \quad \forall A \in \mathbb{O}^d$

Demostración. Sea $y = Ax$, entonces $\nabla_x = A \nabla_y$. Como $A \in \mathbb{O}^d$ se tiene que

$$\Delta_x = \nabla_x \cdot \nabla_x = \nabla_y \cdot \nabla_y = \Delta_y$$

□

A continuación, vamos a ver un subespacio de H_n^d importante.

Definición 1.24. Llamamos $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)$ al espacio de los polinomios homogéneos de grado n en \mathbb{R}^d que son armónicos.

Ejemplo 1.25. $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d) = \mathbb{H}_n^d$ si $n = 0$ o $n = 1$

Para $d = 1$, $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}) = \emptyset$ para $n \geq 2$

Para $d = 2$, $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^2)$, los polinomios de la forma $(x_1 + ix_2)^n$ pertenecen a $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^2)$. En particular, $\mathbb{Y}_2(\mathbb{R}^2)$ está formado por polinomios de la forma $a(x_1^2 - x_2^2) + bx_1x_2$, $a, b \in \mathbb{C}$

Calculamos ahora la dimensión de $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)$. Llamaremos $N_{n,d}$ a la dimensión de $\mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)$. Sea $H_n \in \mathbb{H}_n^d$, dicho polinomio puede ser escrito de la forma

$$H_n(x_1, \dots, x_d) = \sum_{j=0}^n (x_d)^j h_{n-j}(x_1, \dots, x_{d-1}), h_{n-j} \in \mathbb{H}_{n-j}^{d-1}$$

Aplicamos el operador laplaciano a H_n ,

$$\Delta_{(d)} H_n(x_{(d)}) = \sum_{j=0}^{n-2} (x_d)^j [\Delta_{(d-1)} h_{n-j}(x_{(d-1)}) + (j+2)(j+1)h_{n-j-2}(x_{(d-1)})]$$

Luego, si $H_n \in \mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)$ entonces $\Delta_{(d)} H_n(x_{(d)}) \equiv 0$ y

$$h_{n-j-2} = -\frac{1}{(j+2)(j+1)} \Delta_{(d-1)} h_{n-j}, 0 \leq j \leq n-2$$

En consecuencia un armónico homogéneo está únicamente determinado por $h_n \in \mathbb{H}_n^{d-1}$ y $h_{n-1} \in \mathbb{H}_{n-1}^{d-2}$. De este modo, obtenemos la siguiente relación

$$N_{n,d} = \dim \mathbb{H}_n^{d-1} + \mathbb{H}_{n-1}^{d-1}$$

Usando la formula obtenida para $\dim \mathbb{H}_n^d$ se tiene que para $d \geq 2$,

$$N_{n,d} = \frac{(2n+d-2)(n+d-3)!}{n!(d-2!)}, n \in \mathbb{N}$$

1.2.2. Armónicos de Legendre y Polinomios de Legendre

Ahora, nos centraremos en unos armónicos homogéneos especiales, los armónicos de Legendre de grado n en d dimensiones.

Definición 1.26. Se define los armónicos de Legendre, $L_{n,d} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ verificando las siguientes condiciones:

- $L_{n,d} \in \mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)$

1.2. ESFÉRICOS ARMÓNICOS A PARTIR DE ESPACIOS PRIMITIVOS.7

- $L_{n,d}(Ax) = L_{n,d}(x) \quad \forall A \in \mathbb{O}^d(e_d), \forall x \in \mathbb{R}^d$
- $L_{n,d}(e_d) = 1$

Nota 1.27. La segunda condición implica que $h_{n-j}(A_1 x_{d-1}) = h_{n-j}(x_{d-1}), \forall A_1 \in \mathbb{O}^{(d-1)}, \quad x_{(d-1)} \in \mathbb{R}^{d-1}, \quad 0 \leq j \leq n$

De la proposición 1.19 se deduce que por ser h_{n-j} polinomio homogéneo, $(n-j)$ es par y

$$h_{n-j}(x_{(d-1)}) = \begin{cases} c_k |x_{(d-1)}|^{2k} & \text{si } n-j = 2k \\ 0 & \text{si } n-j = 2k+1 \end{cases} \quad (1.2.1)$$

Por tanto,

$$L_{n,d}(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} c_k |x_{(d-1)}|^{2k} (x_d)^{n-2k}$$

Determinamos ahora los coeficientes c_k

$$c_k = -\frac{(n-2k+2)(n-2k+1)}{2k(2k+d-3)} c_{k-1}, \quad 1 \leq k \leq [n/2]$$

Usando la condición de normalidad se tiene que $c_0 = 1$ y

$$c_k = (-1)^k \frac{n! \Gamma(\frac{d-1}{2})}{4^k k! (n-2k)! \Gamma(k + \frac{d-1}{2})}, \quad 0 \leq k \leq [n/2]$$

Finalmente, obtenemos la siguiente expresión

$$L_{n,d}(x) = n! \Gamma(\frac{d-1}{2}) \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{|x_{(d-1)}|^{2k} (x_d)^{n-2k}}{4^k k! (n-2k)! \Gamma(k + \frac{d-1}{2})}$$

Usando coordenadas polares $x_{(d)} = r\xi_{(d)}, \xi_{(d)} = te_d + \sqrt{1-t^2}\xi_{(d-1)}$, definimos el polinomio de Legendre de grado n en d dimensiones, $P_{n,d}(t) = L_{n,d}(\xi_{(d)})$ como la restricción a la esfera unidad del armónico de Legendre. Por tanto

$$P_{n,d}(t) = n! \Gamma(\frac{d-1}{2}) \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{(1-t^2)^k t^{n-2k}}{4^k k! (n-2k)! \Gamma(k + \frac{d-1}{2})}$$

Nota 1.28. $P_{n,d}(1) = 1$ y $L_{n,d}(x) = L_{n,d}(r\xi_{(d)}) = r^n P_{n,d}(t)$

1.2.3. Esféricos Armónicos

Definición 1.29. Se llama espacio de esféricos armónicos de orden n en d dimensiones a $\mathbb{Y}_n^d = \mathbb{Y}_n(\mathbb{R}^d)|_{\mathbb{S}^{d-1}}$

De la definición se deduce que un esférico armónico $\mathbb{Y}_n \in \mathbb{Y}_n^d$ está asociado a un armónico homogéneo $\mathbb{H}_n \in \mathbb{Y}_n^d$ de la siguiente forma:

$$\mathbb{H}_n(r\xi) = r^n \mathbb{Y}_n(\xi)$$

En consecuencia, $\dim \mathbb{Y}_n^d = N_{n,d}$

Teorema 1.30. *Sea $\mathbb{Y}^d \in \mathbb{Y}_n^d$ y $\xi \in \mathbb{S}^{d-1}$. Entonces \mathbb{Y}_n es invariante respecto a $\mathbb{O}^d(\xi)$, si y sólo si, $\mathbb{Y}_n(\eta) = \mathbb{Y}_n(\xi) \mathbb{P}_{n,d}(\xi \cdot \eta) \forall \eta \in \mathbb{S}^{d-1}$*

Demostración. (\Rightarrow) Dado que ξ es un vector unitario podemos encontrar $A_1 \mathbb{O}^d$ tal que $\xi = A_1 e_d$. Sea $Y_n(\eta) = Y_n(A_1 \eta)$, $\eta \in \mathbb{S}^{d-1}$, que es invariante respecto a $\mathbb{O}^d(e_d)$. De la definición de armónico de Legendre sabemos que $r^n Y_n(\eta) = c_1 L_{n,d}(r^n \eta)$, $r \geq 0$, $\eta \in \mathbb{S}^{d-1}$ con c_1 una constante.

Por tanto, $Y_n(\eta) = c_1 L_{n,d}(\eta)$ y tomando $\eta = e_d$ tenemos que $c_1 = Y_n(e_d)$.

Finalmente como

$$Y_n(\eta) = Y_n(e_d) \mathbb{P}_{n,d}(\eta \cdot e_d)$$

se tiene que

$$\mathbb{Y}_n(\eta) = Y_n(A_1^T \eta) = Y_n(A_1^T \eta) \mathbb{P}_{n,d}(A_1^T \eta \cdot e_d) = Y_n(A_1^T \eta) \mathbb{P}_{n,d}(\eta \cdot A_1 e_d) = \mathbb{Y}_n(\xi) \mathbb{P}_{n,d}(\xi \cdot \eta)$$

(\Leftarrow) Obvio □

1.3. Teorema de Adición. Consecuencias.

Teorema 1.31. *Sea $\{Y_{n,j} : 1 \leq j \leq N_{n,d}\}$ una base ortonormal de \mathbb{Y}^d , es decir,*

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_{n,j}(\eta) \overline{Y_{n,j}(\eta)} d\mathbb{S}^{d-1} = \delta_{j,k}, 1 \leq j, k \leq N_{n,d}$$

Entonces,

$$\sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,j}(\xi) \overline{Y_{n,j}(\eta)} = \frac{N_{n,d}}{|\mathbb{S}^{d-1}|} P_{n,d}(\xi \cdot \eta) \forall \xi, \eta \in \mathbb{S}^{d-1}$$

Demostración. Sean $A \in \mathbb{O}^d$ y $1 \leq k \leq N_{n,d}$, $Y_{n,k}(A\xi) \in \mathbb{Y}_n^d$ podemos escribir

$$Y_{n,k}(A\xi) = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} c_{kj} Y_{n,j}(\xi), \quad c_{kj} \in \mathbb{C}$$

Como

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_{n,k}(A\xi) \overline{Y_{n,k}(A\xi)} d\mathbb{S}^{d-1}(\xi) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_{n,k}(\eta) \overline{Y_{n,k}(\eta)} d\mathbb{S}^{d-1}(\eta) = \delta_{j,k}$$

tenemos que

$$\delta_{jk} = \sum_{l,m=1}^{N_{n,d}} c_{j,l} \overline{c_{k,m}} (Y_{n,l}, Y_{n,m}) = \sum_{l,m=1}^{N_{n,d}} c_{j,l} \overline{c_{k,l}}$$

Sea $C = (c_{j,l})$ y C^H su matriz conjugada transpuesta. Se verifica que $CC^H = I$ y $C^H C = I$ luego C es unitaria y

$$\sum_{j=1}^{N_{n,d}} \overline{c_{j,l}} c_{j,k} = \delta_{lk} \quad 1 \leq l, k \leq N_{n,d}$$

Ahora, consideramos la suma

$$Y(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,j}(\xi) \overline{Y_{n,j}(\eta)}, \quad \xi, \eta \in \mathbb{S}^{d-1}$$

Para $A \in \mathbb{O}^d$ y fijado ξ se tiene que

$$Y(A\xi, A\eta) = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,j}(A\xi) \overline{Y_{n,j}(A\eta)} = \sum_{j,k,l=1}^{N_{n,d}} c_{jk} \overline{c_{jl}} Y_{n,k}(\xi) \overline{Y_{n,l}(\eta)} = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,k}(\xi) \overline{Y_{n,k}(\eta)} = Y(\xi, \eta)$$

luego $Y(\xi, \cdot) \in \mathbb{Y}_n^d$ es invariante respecto a $\mathbb{O}^d(\xi)$. Por el teorema 1.30 $Y(\xi, \eta) = Y(\xi, \xi) P_{n,d}(\xi, \eta)$. Análogamente, $Y(\xi, \eta) = Y(\eta, \eta) P_{n,d}(\xi, \eta)$. En consecuencia, $Y(\xi, \xi) = Y(\eta, \eta)$ y es una constante en \mathbb{S}^{d-1} . Para determinar dicha constante, integramos la igualdad $Y(\xi, \xi) = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} |Y_{n,j}(\xi)|^2$ sobre la esfera, obteniendo que

$$Y(\xi, \xi) |\mathbb{S}^{d-1}| = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |Y_{n,j}(\xi)|^2 d\mathbb{S}^{d-1} = N_{n,d}$$

Por tanto, $Y(\xi, \xi) = \frac{N_{n,d}}{|\mathbb{S}^{d-1}|}$ y se cumple $\sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,j}(\xi) \overline{Y_{n,j}(\eta)} = Y(\xi, \eta) = Y(\xi, \xi) P_{n,d}(\xi, \eta) = \frac{N_{n,d}}{|\mathbb{S}^{d-1}|} P_{n,d}(\xi, \eta)$ \square

Veamos ahora algunas aplicaciones del teorema de adición. En primer lugar, aplicaremos el teorema para encontrar una expresión reducida del kernel de \mathbb{Y}_n^d .

Cada $Y_n \in \mathbb{Y}_n^d$ puede escribirse de la forma

$$Y_n(\xi) = \sum_{j=1}^{N_{n,d}} (Y_n, Y_{n,j})_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_{n,j}(\xi)$$

Aplicando el teorema,

$$Y(\xi) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_n(\eta)$$

Teorema 1.32. Para cualquier $n \in \mathbb{N}_0$ y $d \in \mathbb{N}$ el espacio \mathbb{Y}_n^d es irreducible

Demostración. Razonamos por deducción al absurdo. Supongamos que \mathbb{Y}_n^d es reducible entonces $\exists V_1, V_2$ no vacíos, verificando que $\mathbb{Y}_n^d = V_1 + V_2$ y $V_1 \perp V_2$. Tomamos una base ortonormal de \mathbb{Y}_n^d tal que las primeras N_1 funciones recubren V_1 y las restantes $N_2 = N_{n,d} - N_1$ recubren V_2 . Podemos aplicar el teorema de adición a V_1 y V_2 con las funciones de Legendre $P_{n,d,1}$ y $P_{n,d,2}$.

Como $V_1 \perp V_2$

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} P_{n,d,1}(\xi\eta)P_{n,d,2}(\xi\eta)d\mathbb{S}^{d-1}(\eta) = 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{S}^{d-1} \quad (1.3.1)$$

Fijamos $\xi \in \mathbb{S}^{d-1}$ y sea ϕ una función tal que $\phi(\eta) = P_{n,d,1}(\xi\eta)$. Tomamos $A \in \mathbb{O}^d(\xi)$ y se cumple que $A^T \xi = \xi$. Entonces

$$P_{n,d,1}(\xi \cdot A \cdot \eta) = P_{n,d,1}(A^T \xi \cdot \eta) = P_{n,d,1}(\xi \cdot \eta)$$

es decir, ϕ es invariante respecto a $\mathbb{O}^d(\xi)$. Por el teorema 1.30

$$P_{n,d,1}(\xi \cdot \eta) = P_{n,d,1}(\xi \cdot \xi) \cdot P_{n,d}(\xi \cdot \eta) = P_{n,d}(\xi \cdot \eta)$$

Razonando de forma análoga para $P_{n,d,2}$ se tiene que

$$P_{n,d,2}(\xi \cdot \eta) = P_{n,d}(\xi \cdot \eta)$$

Sin embargo, tenemos que

$$0 = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} P_{n,d,1}(\xi\eta)P_{n,d,2}(\xi\eta)d\mathbb{S}^{d-1}(\eta) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |P_{n,d}(\xi\eta)|^2 d\mathbb{S}^{d-1}(\eta) = \frac{|\mathbb{S}^{d-1}|}{N_{n,d}}$$

Hemos llegado a una contradicción, por tanto, \mathbb{Y}_n^d es irreducible \square

1.4. Un Operador de Proyección

Buscamos la mejor aproximación de una función $f \in L^2(\mathbb{S}^{d-1})$ en \mathbb{Y}_n^d , es decir, $\inf \|f - Y_n\|_{L^2(\mathbb{S}^{d-1})} : Y_n \in \mathbb{Y}_n^d$.

Definición 1.33. Se define la proyección de $f \in L^1(\mathbb{S}^{d-1})$ en \mathbb{Y}_n^d como

$$(P_{n,d}f)(\xi) = \frac{N_{n,d}}{|\mathbb{S}^{d-1}|} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} P_{n,d}(\xi \cdot \eta) f(\eta) d\mathbb{S}^{d-1}, \quad \xi \in \mathbb{S}^{d-1}$$

Nota 1.34. El operador $P_{n,d}$ es lineal

Proposición 1.35. El operador proyección $P_{n,d}$ conmuta con las transformaciones ortogonales, es decir, $P_{n,d}f_A = (P_{n,d}f)_A \quad \forall A \in \mathbb{O}^d$

Demostración. \square

Teorema 1.36.

Demostración. \square

1.5. GENERANDO BASES ORTONORMALES PARA ESPACIOS DE ESFÉRICOS ARMÓNICOS

1.5. Generando Bases Ortonormales para Espacios de Esféricos Armónicos.

1.6. Polinomios de Legendre. Fórmulas de Representación

El estudio de los esféricos armónicos requiere un conocimiento de los polinomios de Legendre.

1.6.1. Fórmula de Rodrigues

Teorema 1.37.

$$P_{n,d}(t) = (-1)^n \frac{\Gamma(\frac{d-1}{2})}{2^n \Gamma(n + \frac{d-1}{2})} (1-t^2)^{\frac{3-d}{2}} \left(\frac{d}{dt}\right)^n (1-t^2)^{n+\frac{d-3}{2}}, \quad d \geq 2$$

Nota 1.38. A la constante $R_{n,d} = \frac{\Gamma(\frac{d-1}{2})}{2^n \Gamma(n + \frac{d-1}{2})}$ se le llama constante de Rodrigues

Ejemplo 1.39. ■ Si $d = 2$,

$$P_{n,2}(t) = (-1)^n \frac{2^n n!}{(2n)!} (1-t^2)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d}{dt}\right)^n (1-t^2)^{n-\frac{1}{2}}, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

. Una forma reducida se obtiene usando el polinomio de Chebyshev obteniendo que $P_{n,2}(t) = \cos(n \arccos t)$, $t \in [-1, 1]$

■ Si $d=3$,

$$P_{n,3}(t) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{d}{dt}\right)^n (t^2 - 1)^n, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

1.6.2. Fórmulas de Representación Integral.

1.7. Polinomios de Legendre. Propiedades

Proposición 1.40. Si $f \in C^n([-1, 1])$ entonces

$$\int_{-1}^1 f(t) P_{n,d}(t) (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt = R_{n,d} \int_{-1}^1 f^{(n)}(t) (1-t^2)^{n+\frac{d-3}{2}} dt$$

donde la constante $R_{n,d}$ viene dada por !!

Capítulo 2

Kaggle

2.1. Regresión

2.2. Descripción del problema

2.2.1. Evaluación

2.3. Algoritmos

Nota: Para la ejecución de los algoritmos los datos nominales se han pasado a numérico

A priori desconocemos que algoritmo se adapta mejor a nuestro problema, es por ello que realizaremos un estudio comparando varios algoritmos. Los algoritmos elegidos son los siguientes:

- Un algoritmo clásico como la regresión lineal.
- Algoritmos "básicos" como KNN y Árboles de clasificación y regresión (CART).
- Otros algoritmos como NeuralNetwork, Gaussian y SVR (para hallar relaciones no lineales)
- Multclasificadores ya que debido a su fácil paralelización ofrecen una buena escalabilidad. En este caso he seleccionado 3 algoritmos:
 - RandomForest. Basado en crear muchos árboles ligeramente diferentes y obtiene el resultado mediante el voto mayoritario.
 - Boosting. Los árboles se crean de forma lineal teniendo en cuenta los fallos anteriores. Esta técnica permite reducir el sesgo.
 - Bagging.

En la siguiente gráfica se muestran los resultados obtenidos.

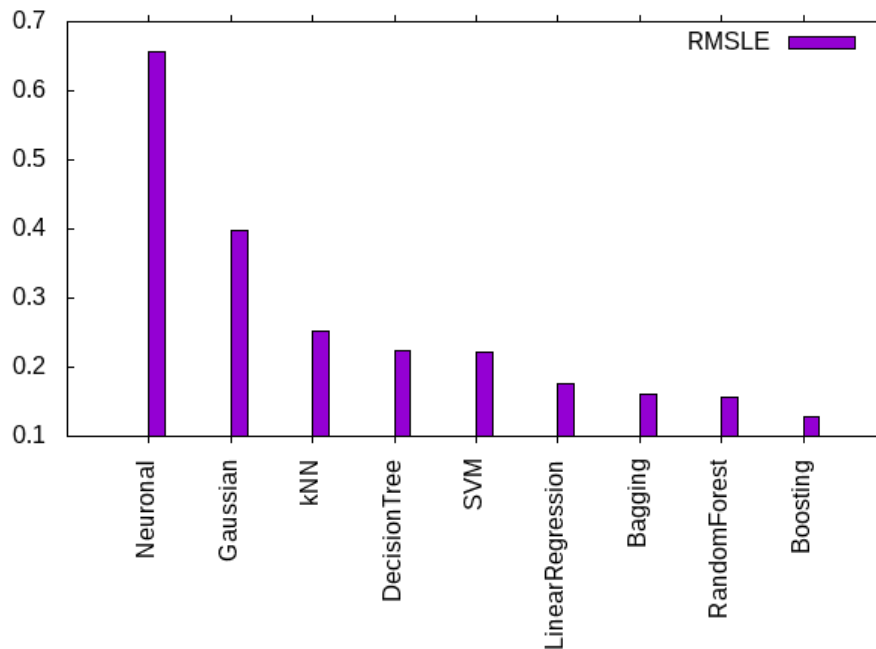


Figura 2.3.1: Test de algoritmos.Error.

Se puede observar que los algoritmos que mayor precisión proporcionan en este caso son los multclasificadores. Por tanto, estudiaremos en profundidad RandomForest y Boosting para mejorar los resultados.

2.4. Herramientas.

Otra decisión que debemos de tomar es qué herramientas usar para abordar la resolución del problema. En primer lugar debemos elegir un lenguaje de programación, para tomar esta decisión veremos el rendimiento de algunos de los lenguajes mas usados en data mining(https://www.ibm.com/developerworks/community/blogs/jfp/entry/What_Language_Is_Best_For_Machine_Learning_And_Data_Science?lang=en). En cada caso usaremos bibliotecas open source(sklearn,weka y librerías de R). Para determinar cual de las 3 es la más conveniente en este caso, realizaré pruebas con los diferentes algoritmos y compararemos el tiempo de ejecución y el uso de memoria. Además, se debe tener en cuenta la facilidad para tratar los datos tanto para su lectura, como para la generación de los archivos con las predicciones.

Los resultados obtenidos se muestran en las siguientes gráficas:

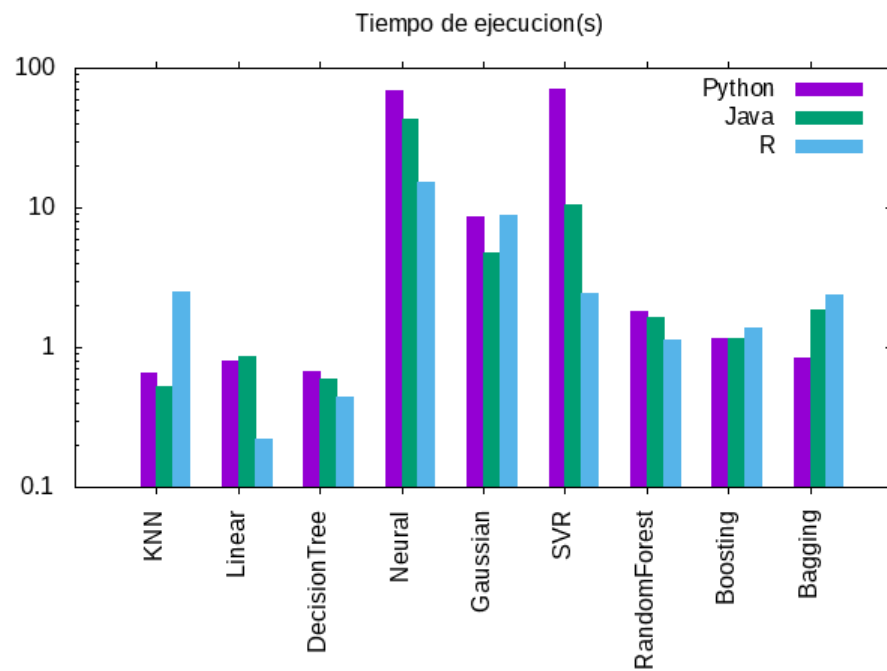


Figura 2.4.1: Test de algoritmos.Tiempo de ejecución

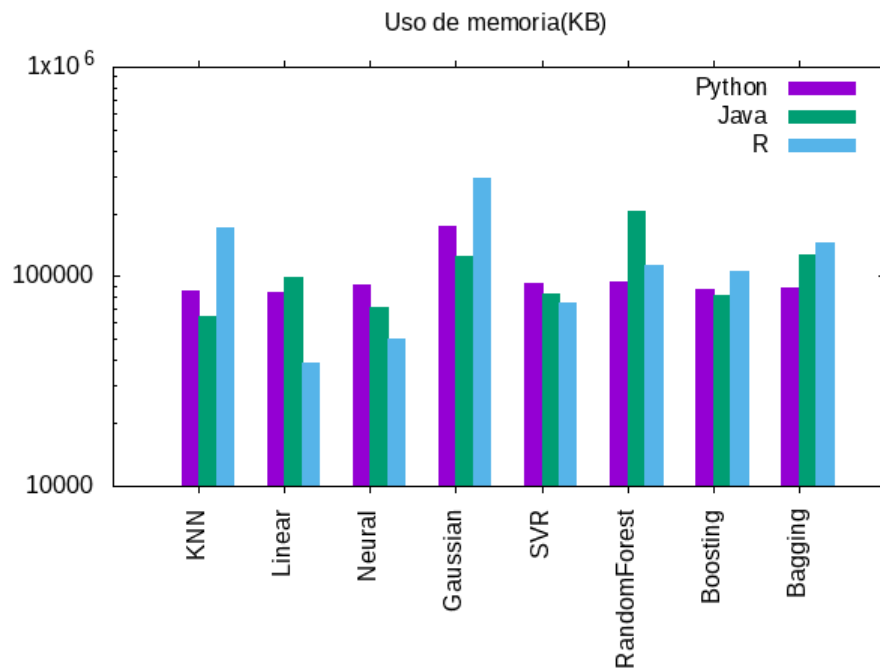


Figura 2.4.2: Test de algoritmos.Memoria usada

De los resultados se deduce que no existe una alternativa que nos proporcione un rendimiento claramente superior al resto. En conclusión, el lenguaje a usar será Python ya que permite un manejo de los datos flexible y un código legible propio de este lenguaje. Esta decisión se apoya en que en términos de rendimiento no hay una alternativa "mucho mejor".

2.5. Preprocesamiento

En primer lugar elimino los outliers. Pruebo varios valores de contaminación y me quedo el óptimo. Normalizar datos. Cambiar datos missing por None (se puede entender que NaN quiere decir que no hay?).