

SymPy par la pratique

Exemple et exercice

K.I.A Derouiche

SUMMER RESEARCH INTERNSHIP, UNIVERSITY OF WESTERN ONTARIO

GITHUB.COM/LAURETHTEX/CLUSTERING

This research was done under the supervision of Dr. Pauline Barmby with the financial support of the MITACS Globalink Research Internship Award within a total of 12 weeks, from June 16th to September 5th of 2014.

First release, August 2014



Contents

0.1	Avant-Propos	4
0.2	Introduction	5
0.2.1	Pourquoi programmer en symbolique	5
1	Calcul formel	7
1.1	Système de calcul formel	8
1.2	Bibliothèque SymPy	8
1.2.1	SymPyGamma	9
1.2.2	Besoin de rester dans le symbolique	9
1.2.3	Passage du symbolique au numérique	9
1.2.4	Faire des dessins	9
2	Convex Sets	11
2.1	Convexity	11
2.1.1	Cone	11
2.2	Convex Functions	12
2.2.1	Epigraph	12
2.3	Support Function	14
2.4	Operations Preserve Convexity of Functions	15
3	Nonlinear Problem	17
3.1	Chaos	17
3.1.1	Pendule simple	17

3.1.2	Pendule à deux bras	17
3.1.3	Les mouvements d'un robot	17
3.2	Solution non linéaire d'équation algébrique	17
3.3	Transport optimal	17
3.4	Le calcul des variations	18
3.5	Figure	18
3.6	Annexe	18
3.6.1	Programmation Orientée Objet	18
3.6.2	Décorateurs	18
3.6.3	Optimisation du code	18
3.6.4	Cython	19
3.6.5	Theano	20
3.7	Interface graphique	21

0.1 Avant-Propos

Ce livre traite de Python, un langage de programmation de haut niveau, orienté objet, totalement libre et terriblement efficace, conçu pour produire du code de qualité, portable et facile à intégrer. Ainsi la conception d'un programme Python est très rapide et offre au développeur une bonne productivité. En tant que langage dynamique, il est très souple d'utilisation et constitue un complément idéal à des langages compilés. Il reste un langage complet et autosuffisant, pour des petits scripts fonctionnels de quelques lignes, comme pour des applicatifs complexes de plusieurs centaines de modules.

Pourquoi ce livre ?

Il existe déjà de nombreux ouvrages excellents traduits de l'anglais qui traitent de Python voire en présentent intégralité des modules disponibles. Citons Python en concentré, le manuel de référence de Mark Lutz et David Ascher, aux éditions O'Reilly, ou encore Apprendre à programmer avec Python de Gérard Swinnen, aux éditions Eyrolles, inspiré en partie du texte How to think like a computer scientist (Downey, Elkner, Meyers), et comme son titre l'indique, très pédagogique. Alors, pourquoi ce livre ?

A qui s'adresse l'ouvrage?

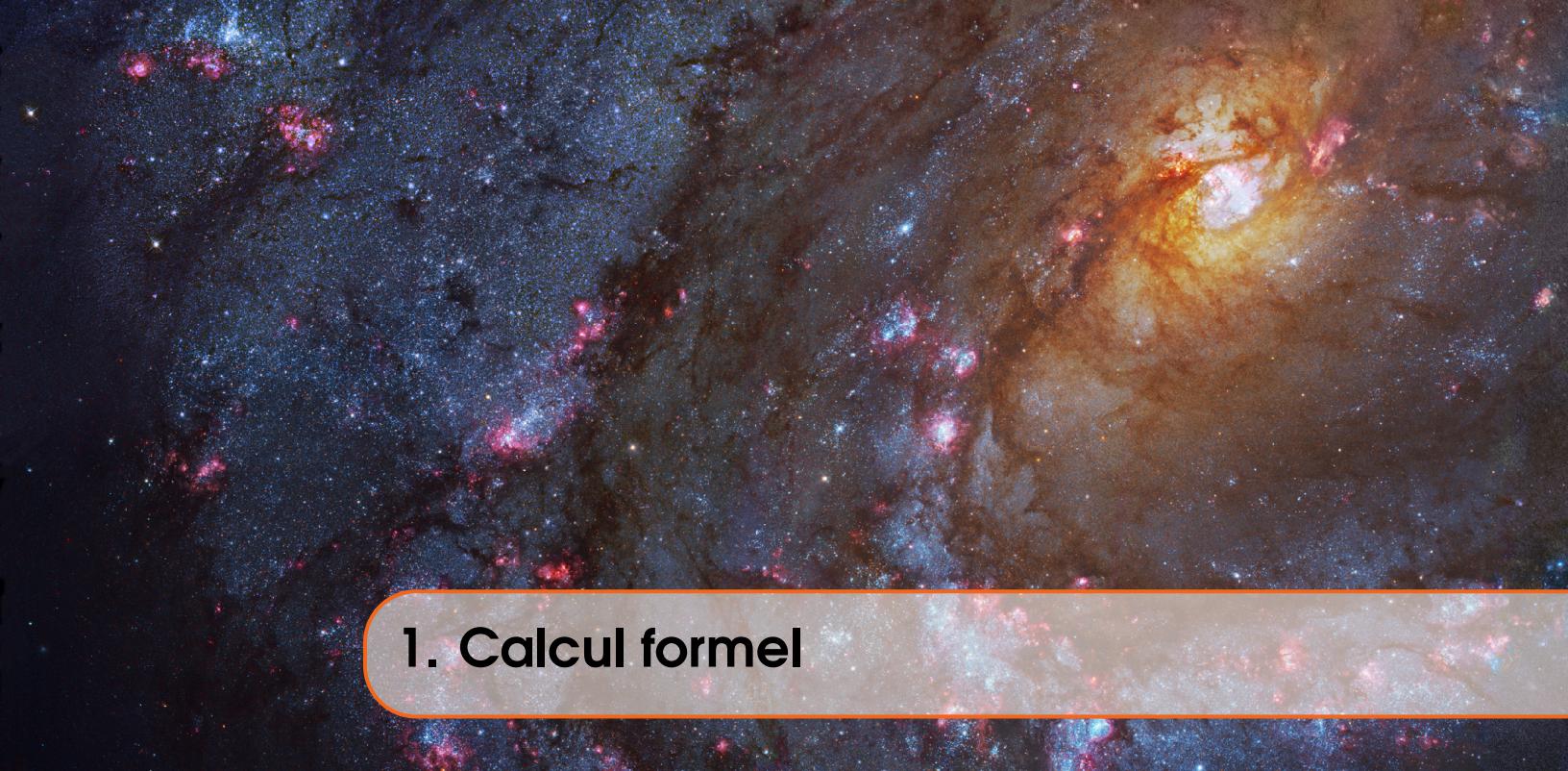
0.2 **Introduction**

Ce recueil d'exercices et de problèmes de programmation s'adresse aussi bien aux débutants qu'aux programmeurs confirmés. Il présente en effet plusieurs états d'esprit dont les deux principaux sont la programmation classique en Pascal pour les étudiants du premier cycle universitaire, et la programmation fonctionnelle en Lisp pour le second cycle.

Ce livre constitue un panorama (non exhaustif, mais suffisant) sur les langages de programmation, et offre une grande variété dans les sujets traités : graphiques, calcul matriciel, traitements de chaînes de caractères, graphes, intelligence artificielle...

La première partie du livre sera consacré à la résolution par une approche symbolique au divers questions posées au étudiants et toute personnes qui aiment savoir et voir s'initier pour des niveaux et des questions rencontrés, la deuxième partie du livre sera questions aux problèmes plus rencontrés pour des étudiants passionnée des questions entre mathématiques et technologies, chercheurs et développeurs d'applications scientifiques, la troisième partie plus consacré aux questions poussées

0.2.1 **Pourquoi programmer en symbolique**



1. Calcul formel

L'approche La simulation numérique est devenue essentielle dans de nombreux domaines tels que la mécanique des fluides et des solides, la météo, l'évolution du climat, la biologie ou les semi-conducteurs. Elle permet de comprendre, de prévoir, d'accéder là où les instruments de mesures s'arrêtent.

Ce livre présente des méthodes performantes du calcul scientifique : matrices creuses, résolution efficace des grands systèmes linéaires, ainsi que de nombreuses applications à la résolution par éléments finis et différences finies. Alternant algorithmes et applications, les programmes sont directement présentés en langage C++. Ils sont sous forme concise et claire, et utilisent largement les notions de classe et de généralité du langage C++.

Le contenu de ce livre a fait l'objet de cours de troisième année à l'école nationale supérieure d'informatique et de mathématiques appliquées de Grenoble (ENSIMAG) ainsi qu'au mastère de mathématiques appliquées de l'université Joseph Fourier. Des connaissances de base d'algèbre matricielle et de programmation sont recommandées. La maîtrise du contenu de cet ouvrage permet d'appréhender les principaux paradigmes de programmation du calcul scientifique. Il est alors possible d'appliquer ces paradigmes pour aborder des problèmes d'intérêt pratique, tels que la résolution des équations aux dérivées partielles, qui est abordée au cours de ce livre. La diversité des sujets abordés, l'efficacité des algorithmes présentés et leur écriture directe en langage C++ font de cet ouvrage un recueil fort utile dans la vie professionnelle d'un ingénieur.

Le premier chapitre présente les bases fondamentales pour la suite : présentation du langage C++ à travers la conception d'une classe de quaternions et outils d'analyse asymptotique du temps de calcul des algorithmes. Le second chapitre aborde l'algorithme de transformée de Fourier rapide et développe deux applications à la discrétisation d'équations aux dérivées partielles par la méthode des différences finies. Le troisième chapitre est dédié aux matrices creuses et à l'algorithme du gradient conjugué. Ces notions sont appliquées à la méthode des éléments finis. En annexe sont groupés des exemples de génération de maillage et de visualisation graphique.

S'il est cependant recommandé de maîtriser les notions du premier chapitre pour aborder le reste du livre, les chapitres deux et trois sont complètement indépendants et peuvent être abordés séparément. Ces chapitres sont complétés par des exercices qui en constituent des développements,

ainsi que des notes bibliographiques retraçant l'historique des travaux et fournissant des références sur des logiciels et librairies récents implémentant ou étendant les algorithmes présentés.

1.1 Système de calcul formel

Dans cette section en va exposer les systèmes de calcul formel, leur intérêt qui à vue un renouveau ces dernières années à cause de l'émergence de technique, technologie et nouvelle approche de programmation pour le domaine scientifique et industriel, hormis le fait que le logiciel de calcul formel en soient sont un outil pédagogique indispensable pour les scientifiques et les ingénieurs

■ **Example 1.1** Let $G = \{x \in \mathbb{R}^2 : |x| < 3\}$ and denoted by: $x^0 = (1, 1)$; consider the function:

$$f(x) = \begin{cases} e^{|x|} & \text{si } |x - x^0| \leq 1/2 \\ 0 & \text{si } |x - x^0| > 1/2 \end{cases} \quad (1.1)$$

The function f has bounded support, we can take $A = \{x \in \mathbb{R}^2 : |x - x^0| \leq 1/2 + \varepsilon\}$ for all $\varepsilon \in]0; 5/2 - \sqrt{2}[$. ■

qui exprime ce qui nous permet notre choix pour un CAS qui possède des caractéristiques techniques et sur le plan du coût très important quand peut résumer dans les points suivants:

1. Leger et
2. S'appuie sur le langage de programmation Python
3. Portabilité dans toute transparence

L'un des systèmes qui peut nous permettre d'écrire cette exemple avec un ordinateurs avec SymPy qui semble mieu intégré

1.2 Bibliothèque SymPy

Dans un cas plus simple l'exemple 1.1 se formule beaucoup plus dans un outil comme SymPy est une bibliothèque de calcul formel elle est aussi un environnement pour l'apprentissage de l'algèbre, l'analyse, géométrie, combinatoire, cryptographie, mécanique classique et quantique pour le lycée et l'université mais aussi un environnement de développement et de recherche. SymPy écrit entièrement en Python un langage de programmation facile à apprendre et adapté à l'apprentissage, elle fourni aux étudiant *SymPyGamma* une application web notamment des primitives générales de traitement des expressions algébriques (développement, factorisation, ...), des aides à l'organisation des objets mathématiques intervenant dans la résolution d'un problème ainsi qu'une assistance à la preuve. Il permet au professeur de préparer et de suivre le travail de l'élève. Différentes maquettes ont été développées et testées auprès d'élèves. Dans la plus récente, nous nous sommes attachés à explorer une nouvelle forme d'activité algébrique. Alors que le calcul en papier crayon et les logiciels standards considèrent les expressions de façon isolée, l'environnement que nous développons organise en réseau les différentes expressions intervenant dans la résolution d'un problème. L'ordinateur peut facilement mettre à jour ce réseau quand l'utilisateur modifie certains de ses éléments. Il devient ainsi possible, pour aborder un problème générique, d'explorer facilement des cas particuliers et de conduire une généralisation. Les relations entre expressions algébriques sont mieux mises en évidence du fait de leur invariance dans les modifications du réseau. De façon très concise, Casyopée peut être défini

1.2.1 SymPyGamma

Est une interface onWeb marche avec un navigateur contient plusieurs catégorie liée de calcul, dynamique. L'interet de cette outil qu'il est facilement partageable adapté pour l'enseignement et surtout l'auto-apprentissage

1.2.2 Besoin de rester dans le symbolique

Le symbolique est une grande importance d'un point de vue technique, car il permet de limité les risques de bug dans l'exécution des programmes, dans le contexte de la vérification formelle si en prend le programme suivant:

1.2.3 Passage du symbolique au numérique

Généralement, le symbolique parmis c'est

1.2.4 Faire des dessins

2. Convex Sets

2.1 Convexity

2.1.1 Cone

■ **Definition 2.1.1 — Cone.** A set $K \in \mathbb{R}^n$, when $x \in K$ implies $\alpha x \in K$.

A non convex cone can be hyper-plane.

For convex cone $x + y \in K, \forall x, y \in K$.

Cone don't need to be "pointed". e.g.

Direct sums of cones $C_1 + C_2 = \{x = x_1 + x_2 | x_1 \in C_1, x_2 \in C_2\}$.

■ **Example 2.1** $S_1^n \{X | X = X^n, \lambda(x) \geq 0\}$

A matrix with positive eigenvalues.

Operations preserving convexity

Intersection $C \cap_{i \in \mathbb{I}} C_i$

Linear map Let $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a linear map. If $C \in \mathbb{R}^n$ is convex, so is $A(C) = \{Ax | x \in C\}$

Inverse image $A^{-1}(D) = \{x \in \mathbb{R}^n | Ax \in D\}$

Operations that induce convexity

Convex hull on $S = \cap \{C | S \in C, C \text{ is convex}\}$

■ **Example 2.2** $Co\{x_1, x_2, \dots, x_m\} = \{\sum_{i=1}^m \alpha_i x_i | \alpha \in \Delta_m\}$

For a convex set $x \in C \Rightarrow x = \sum \alpha_i x_i$.

■ **Theorem 2.1.1 — Carathéodory's theorem.** If a point $x \in \mathbb{R}^d$ lies in the convex hull of a set P , there is a subset P' of P consisting of $d+1$ or fewer points such that x lies in the convex hull of P' . Equivalently, x lies in an r -simplex with vertices in P .

2.2 Convex Functions

Definition 2.2.1 — Convex function. Let $C \in \mathbb{R}^n$ be convex, $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ is convex on f if $x, y \in C \times C$. $\forall \alpha \in (0, 1)$, $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq f(\alpha x) + f((1 - \alpha)y)$

Definition 2.2.2 — Strictly Convex function. Let $C \in \mathbb{R}^n$ be convex, $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ is strictly convex on f if $x, y \in C \times C$. $\forall \alpha \in (0, 1)$, $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < f(\alpha x) + f((1 - \alpha)y)$

Definition 2.2.3 — Strongly convex. $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ is strongly convex with modulus $u \geq 0$ if $f - \frac{1}{2}u\|\cdot\|^2$ is convex.

Interpretation: There is a convex quadratic $\frac{1}{2}u\|\cdot\|^2$ that lower bounds f .

■ **Example 2.3** $\min_{x \in C} f(x) \leftrightarrow \min \bar{f}(x)$ Useful to turn this into an unconstrained problem.

$$\bar{f}(x) = \begin{cases} f(x) & \text{if } x \in C \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

Definition 2.2.4 A function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \infty$ is convex if $x, y \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, $\forall x, y, \bar{f}(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq f(\alpha x) + f((1 - \alpha)y)$

Definition 1 is equivalent to definition 2 if $f(x) = \infty$.

■ **Example 2.4** $f(x) = \sup_{j \in J} f_j(x)$

2.2.1 Epigraph

Definition 2.2.5 — Epigraph. For $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$, its epigraph $epi(f) \in \mathbb{R}^{n+1}$ is the set $epi(f) = \{(x, \alpha) | f(x) \in \alpha\}$

Next: a function is convex i.f.f. its epigraph is convex.

Definition 2.2.6 A function $f : C \rightarrow \mathbb{R}$, $C \in \mathbb{R}^n$ is convex if $\forall x, y \in C$, $f(ax + (1 - a)x) \leq af(x) + (1 - a)f(y) \quad \forall a \in (0, 1)$.

Strict convex: $x \neq y \Rightarrow f(ax + (1 - a)x) < af(x) + (1 - a)f(y)$

(R) f is convex $\Rightarrow -f$ is concave.

Level set: $S_\alpha f = \{x | f(x) \leq \alpha\}$.

$S_\alpha f$ is convex $\Leftrightarrow f$ is convex.

Definition 2.2.7 — Strongly convex. $f : C \rightarrow \mathbb{R}$ is strongly convex with modulus μ if $\forall x, y \in C$, $\forall \alpha \in (0, 1)$, $f(ax + (1 - \alpha)y) \leq af(x) + (1 - \alpha)f(y) - \frac{1}{2\mu}\alpha(1 - \alpha)\|x - y\|^2$.

(R)

- f is 2nd-differentiable, f is convex $\Leftrightarrow \nabla^2 f(x) \succ 0$.
- f is strongly convex $\Leftrightarrow \nabla^2 f(x) \succ \mu I \Leftrightarrow x \geq \mu$

Definition 2.2.8 — 2. $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$ is convex if $x, y \in \mathbb{R}, \alpha \in (0, 1), f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$.

The effective domain of f is $\text{dom } f = \{x | f(x) < +\infty\}$

■ **Example 2.5 — Indicator function.** $\delta_C(x) = \begin{cases} 0 & x \in C \\ +\infty & \text{elsewhere} \end{cases}$.
 $\text{dom } \delta_C(x) = C$

Definition 2.2.9 — Epigraph. The epigraph of f is $\text{epif} = \{(x, \alpha) | f(x) \leq \alpha\}$

The graph of epif is $\{(x, f(x)) | x \in \text{dom } f\}$.

Definition 2.2.10 — III. A function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$ is

Theorem 2.2.1 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$ is convex $\iff \forall x, y \in \mathbb{R}^n, \alpha \in (0, 1), f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$.

Proof. \Rightarrow take $x, y \in \text{dom } f, (x, f(x)) \in \text{epif}, (y, f(y)) \in \text{epif}$. ■

■ **Example 2.6 — Distance.** Distance to a convex set $d_C(x) = \inf\{\|z - x\| | z \in C\}$. Take any two sequences $\{y_k\}$ and $\{\bar{y}_k\} \subset C$ s.t. $\|y_k - x\| \rightarrow d_C(x)$, $\|\bar{y}_k - \bar{x}\| \rightarrow d_C(\bar{x})$. $z_k = \alpha y_k + (1 - \alpha)\bar{y}_k$.

$$\begin{aligned} d_C(\alpha x + (1 - \alpha)\bar{x}) &\leq \|z_k - \alpha x - (1 - \alpha)\bar{x}\| \\ &= \|\alpha(y_k - x) + (1 - \alpha)(\bar{y}_k - \bar{x})\| \\ &\leq \alpha\|y_k - x\| + (1 - \alpha)\|\bar{y}_k - \bar{x}\| \end{aligned}$$

Take $k \rightarrow \infty, d_C(\alpha x + (1 - \alpha)\bar{x}) \leq \alpha d(x) + (1 - \alpha)d(\bar{x})$

■ **Example 2.7 — Eigenvalues.** Let $X \in S^n := \{n \times \text{nsymmetricmatrix}\}$. $\lambda_1(x) \geq \lambda_2(x) \geq \dots \geq \lambda_n(x)$.

$$f_k(x) = \sum_i^n \lambda_i(x).$$

Equivalent characterization

$$\begin{aligned} f_k(x) &= \max\{\sum_i v_i^T X v_i | v_i \perp v_j, i \neq j\} \\ &= \max\{\text{tr}(V^T X V) | V^T V = I_k\} \end{aligned}$$

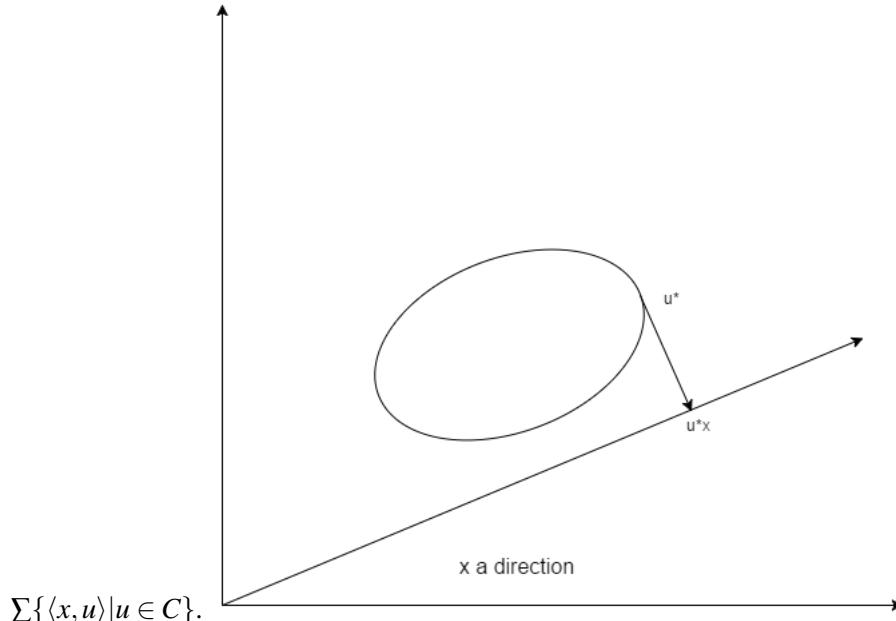
$\max\{\text{tr}(V^T X V)\}$ by circularity

Note $\langle A, B \rangle = \text{tr}(A, B)$ is true for symmetric matrix.

$$\langle A, A \rangle = |A|_F^2 = \sum_i A_{ii}^2$$

2.3 Support Function

Take a set $C \in \mathbb{R}^n$, not necessarily convex. The support function is $\sigma_C = \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$. $\sigma_C(x) =$



Fact 2.3.1 The support function binds the supporting hyper-plane.

Supporting functions are

- Positively homogeneous
 $\sigma_C(\alpha x) = \alpha \sigma_C(x) \forall \alpha > 0$
 $\sigma_C(\alpha x) = \sup_{u \in C} \langle \alpha x, u \rangle = \alpha \sup_{u \in C} \langle x, u \rangle = \alpha \sigma_C(x)$
- Sub-linear (a special case of convex, linear combination holds $\forall \alpha$).
 $\sigma_C(\alpha x + (1 - \alpha)y) = \sup_{u \in C} \langle \alpha x + (1 - \alpha)y, u \rangle \leq \alpha \sup_{u \in C} \langle x, u \rangle + (1 - \alpha) \sup_{u \in C} \langle y, u \rangle$

■ **Example 2.8 — L2-norm.** $\|x\| = \sup_{u \in C} \{\langle x, u \rangle, u \in \mathbb{R}^n\}$.

$\|x\|_p = \sup\{\langle x, u \rangle, u \in B_q\}$ where $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. $B_q = \{\|x\|_q \leq 1\}$.

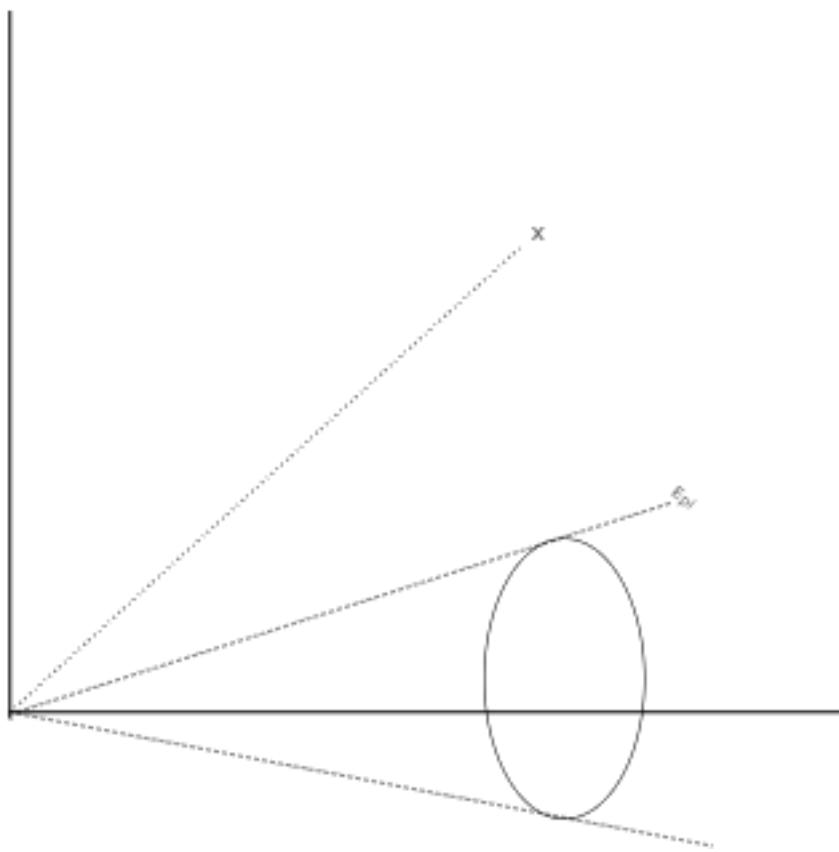
The norm is

- Positive homogeneous
- sub-linear
- If $0 \in C$, σ_C is non-negative.
- If C is central-symmetric, $\sigma_C(0) = 0$ and $\sigma_C(x) = \sigma_C(-x)$

■ **Fact 2.3.2 — Epigraph of a support function.** $epi\sigma_C = \{(x, t) | \sigma_C(x) \leq t\}$. Suppose $(x, t) \in epi\sigma_C$.

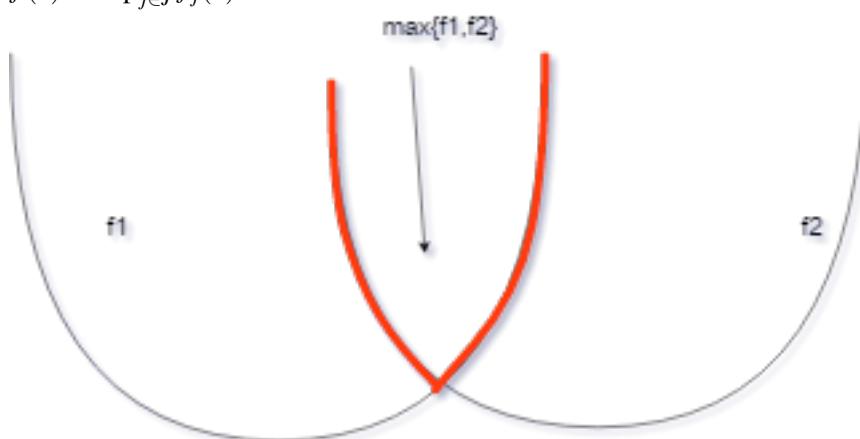
Take any $\alpha > 0$. $\alpha(x, t) = (\alpha x, \alpha t)$.

$\alpha \sigma_C(x) = \alpha \sigma_C(x) \leq \alpha t$. $\alpha(x, c) \in epi\sigma_C$



2.4 Operations Preserve Convexity of Functions

- Positive affine transformation
 $f_1, f_2, \dots, f_k \in \text{cvx} \mathbb{R}^n$
 $f = \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \dots + \alpha_k f_k$
- Supremum of functions. Let $\{f_i\}_{i \in I}$ be arbitrary family of functions. If $\exists x \sup_{j \in J} f_j(x) < \infty \Leftrightarrow f(x) = \sup_{j \in J} f_j(x)$



- Composition with linear map.
 $f \in \text{cvx} \mathbb{R}^n, A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ is a linear map. $f \circ A(x) = f(Ax) \in \text{cvx} \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned}f \circ A(x) &= f(A(\alpha x + (1 - \alpha)y)) \\&= f(A\alpha x + (1 - \alpha)Ay) \\&\leq \alpha f(Ax) + (1 - \alpha)f(Ay)\end{aligned}$$

3. Nonlinear Problem

Dans cette section ou se mêle symbolique et numérique pour modéliser et résoudre des problèmes complexes, l'accent est mis sur des questions un

3.1 Chaos

Prenons une pause dans l'apprentissage de nouvelles techniques et algorithmes informatiques pour un peu, et passer du temps en utilisant ce que nous avons appris jusqu'à présent pour enquêter sur quelque chose d'intéressant. Nous allons commencer avec quelque chose de familier: le simple pendule.

3.1.1 Pendule simple

Le pendule simple figure

3.1.2 Pendule à deux bras

3.1.3 Les mouvements d'un robot

3.2 Solution non linéaire d'équation algébrique

Qu'est ce que non-linéaire et qu'est ce que une équation algébrique

Une équation algébrique est un polynôme de la forme $P(x)$

$$\exp(-x) \sin(x) = \cos(x) \tag{3.1}$$

3.3 Transport optimal

C'est quoi le *transport optimal*? exemple simple..., le domaine du transport optimal est très

3.4 Le calcul des variations**3.5 Figure**

Treatments	Response 1	Response 2
Treatment 1	0.0003262	0.562
Treatment 2	0.0015681	0.910
Treatment 3	0.0009271	0.296

Table 3.1: Table caption

3.6 Annexe**3.6.1 Programmation Orientée Objet****3.6.2 Décorateurs**

Les décorateurs un mécanisme incontournable pour écrire de très bon code et purement lisible et portable

3.6.3 Optimisation du code

3.6.4 Cython

Cython (<http://www.cython.org/>) est un métalangage qui permet de combiner du code Python et des types de données C, pour concevoir des extensions compilables pour Python. Dans un module Cython, il est possible de définir des variables C directement dans le code Python et de définir des fonctions C qui prennent en paramètre des variables C ou des objets Python. Cython contrôle ensuite de manière transparente la génération de l'extension C, en transformant le module en code C par le biais des API C de Python. Toutes les fonctions Python du module sont alors automatiquement publiées. Le gain de temps dans la conception introduit par Cython est considérable : toute la mécanique habituellement mise en œuvre pour créer un module d'extension est entièrement gérée par Cython. Ainsi, la fonction max() du module calculs.c précédemment présentée devient :

Les fichiers Cython ont par convention l'extension pyx, en référence à l'ancien nom.

setup.py pour calculs.pyx

```
from distutils.core import setup
from distutils.extension import Extension
from Cython.Distutils import build_ext

extension = Extension("calculs", ["calculs.pyx"])

setup(name="calculs", ext_modules=[extension], cmdclass={'build_ext': build_ext})
```

3.6.5 Theano

Theano est une bibliothèque pour l'accélération du code lent en Python, très importante et intéressante elle offre une syntaxe très particulière.

3.7 Interface graphique

Quelle bibliothèque choisir: sous Python en à le choix entre différente, Tkinter, Gtk, Qt, wx et ftk et il existe encore d'autre bibliothques qui sont conçu pour le calcul et application scientifique éditer par Thought[...] dans cette section nous allons