

Symbolic Computation in SymPy

25 SymPy 符号运算

SymPy 是一个 Python 的符号数学计算库



等式仅仅是数学中无聊至极的那部分; 我努力从几何角度观察万物。

Equations are just the boring part of mathematics. I attempt to see things in terms of geometry.

— 斯蒂芬·霍金 (Stephen Hawking) | 英国理论物理学家和宇宙学家 | 1942 ~ 2018



- sympy.abc import x 定义符号变量 x
- sympy.abc() 引入符号变量
- sympy.collect() 合并同类项
- sympy.cos() 符号运算中余弦
- sympy.diff() 求解符号导数和偏导解析式
- sympy.Eq() 定义符号等式
- sympy.evalf() 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- sympy.exp() 符号自然指数
- sympy.expand() 展开代数式
- sympy.factor() 对代数式进行因式分解
- sympy.integrate() 符号积分
- sympy.is decreasing() 判断符号函数的单调性
- sympy.lambdify() 将符号表达式转化为函数
- sympy.limit() 求解极限
- sympy.Matrix() 构造符号函数矩阵
- sympy.plot implicit()绘制隐函数方程
- sympy.plot3d() 绘制函数的三维曲面
- sympy.series() 求解泰勒展开级数符号式
- sympy.simplify() 简化代数式
- sympy.sin() 符号运算中正弦
- sympy.solve() 求解符号方程组
- sympy.solve linear system() 求解含有符号变量的线型方程组
- sympy.symbols() 创建符号变量
- sympy.sympify() 化简符号函数表达式
- sympy.utilities.lambdify.lambdify() 将符号代数式转化为函数



25.1 什么是 SymPy?

SymPy 是一个基于 Python 的符号数学库,它可以执行代数运算、解方程、微积分、离散数学以及其他数学操作。与 NumPy、Pandas 等科学计算库不同,SymPy 主要关注的是符号计算而不是数值计算。具体来说,SymPy 可以处理未知变量和数学符号,而不仅仅是数值,这在一些数学研究和工程应用中非常有用。

本章主要介绍 SymPy 中代数、线性代数运算。此外,SymPy 还可以进行微积分运算,比如极限、导数、偏导数、泰勒展开、积分等。这部分内容需要一定的数学分析知识,我们将会在鸢尾花书《数学要素》一册展开讲解。

25.2 代数

因式分解

图 1 所示为利用 SymPy 完成因式分解。

- ³从 sympy 导入 symbols 和 factor,其中 symbols 用来定义符号变量,factor 用来完成因式分解。
 ⁵这两句的作用是将 SymPy 库中的数学符号以美观的形式打印出来。
- © 定义了 x 和 y 两个符号变量。symbols 还可以定义带下角标的变量,比如 x1, x2 =symbols(' $x1 \times 2$ ')。

也可以用 from sympy.abc import x, y 的形式定义符号变量。

此外,用 sympy.symbols() 定义变量时还可以提出符号的假设条件。比如, $k = \text{sympy.symbols('k', integer=True)}}$ 这一句定义符号变量 k,并假定 k 为整数。 $z = \text{sympy.symbols('z', real=True)}}$ 定义了符号变量 z,并假定 z 为实数。

①定义了 $x^2 - y^2$ 。 ②对 $x^2 - y^2$ 进行因式分解,结果为 (x - y)(x + y) 。反过来,可以用 sympy.expand() 展开 (x - y)(x + y) ,结果为 $x^2 - y^2$ 。

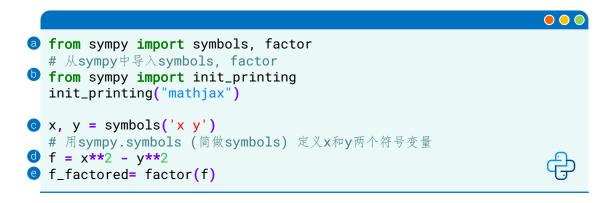


图 1. 因式分解

替换

图 2 中 定义字符串, 净将字符串转化为符号表达式 $x^3 + x^2 + x + 1$ 。

- ◎ 用符号 y 替代符号 x,符号表达式变为 y³ + y² + y + 1。
- ●用 0 替代 x, 结果为 1。

```
from sympy import symbols, sympify x, y = symbols('x y')
a str_expression = 'x**3 + x**2 + x + 1'
# 将字符串转化为符号表达式
b str_2_sym = sympify(str_expression)
# 将符号x替换为y
c str_2_sym.subs(x, y)
# 将符号x替换为0
d str_2_sym.subs(x, 0)
```

图 2. 用 sympy.sympify 将字符串转化为符号表达式

特殊符号数值

SymPy 还可以定义定义特殊符号数值,表 1给出几个例子。比如,sympy.sympify() 将 2 转化为符号数值 2,然后进一步判断其是否为整数,是否为实数。再比如,from sympy import Rational; Rational(1, 2)这两句的结果为 $\frac{1}{2}$ 。想要知道表格中结果的浮点数形式,可以用.evalf(),比如 exp(2).evalf() 的结果为7.38905609893065。

表 1. 用 sympy 定义特殊符号数值

代码	结果
from sympy import sympify	True
<pre>sympify(2).is_integer sympify(2).is_real</pre>	True
<pre>from sympy import Rational Rational(1, 2)</pre>	$\frac{1}{2}$
<pre>from sympy import sqrt 1 / (sqrt(2) + 1)</pre>	$\frac{1}{1+\sqrt{2}}$
<pre>from sympy import pi expr = pi ** 2</pre>	π^2
<pre>from sympy import exp exp(2)</pre>	e ²
<pre>from sympy import factorial factorial(5)</pre>	5!
from sympy import binomial	$C_5^4 = 5$
binomial(5, 4)	
from sympy import gamma gamma(5)	$\Gamma(5) = (5-1)! = 4 \times 3 \times 2 \times 1 = 24$

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

区间

表 2 总结如何用 sympy.Interval() 定义各种区间,默认区间左闭、右闭。oo (两个小写英文字母 o) 代表正无穷。注意,大家自己在同一个 Jupyter Notebook 练习时,from sympy import Interval, oo 只需要导入一次,不需要重复导入。

此外,用 sympy.Interval() 定义的区间还可以进行集合运算,比如 Interval(0, 2) - Interval(0, 1) 结果为 (1, 2]。再比如,Interval(0, 1) + Interval(1, 2) 的结果为 [0, 2]。

利用.has() 还可以判断区间是否包含具体元素,比如先定义 intvl = Interval.Lopen(0, 1), 得到区间 (0, 1]。然后利用 intvl.has(0) 或 intvl.contains(0) 判断左开右闭区间是否包括元素 0, 结果为 False。

(b) and	/ I =
代码	结果
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	[0, 1]
<pre>Interval(0, 1, left_open=False, right_open=False)</pre>	
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	(0,0)
<pre>Interval(0, 1, left_open=True, right_open=True)</pre>	
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	[0, 1)
<pre>Interval(0, 1, left_open=False, right_open=True)</pre>	
# Interval.Ropen(0, 1)	
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	(0, 1]
<pre>Interval(0, 1, left_open=True, right_open=False)</pre>	
# Interval.Lopen(0, 1)	
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	$[0,\infty)$
<pre>Interval(0, oo, left_open=False, right_open=True)</pre>	
<pre>from sympy import Interval, oo</pre>	$(-\infty,0)$
<pre>Interval(-oo, 0, left_open=True, right_open=True)</pre>	
<pre>from sympy import Interval, S</pre>	$(-\infty,0) \cup (1,\infty)$
<pre>Interval(0, 1).complement(S.Reals)</pre>	

表 2. 用 sympy.Interval()定义区间

求解等式

图 3 代码介绍如何用 sympy.solve() 求解等式。 ⓐ 定义等式 $x^2 = 1$, ⓑ 求解等式结果为 [-1,1]。

```
from sympy import symbols, solve, Eq x = symbols('x') # 定义等式 x**2 = 1
a equation_1 = Eq(x**2, 1)
b solve(equation_1, x) a, b, c = symbols("a, b, c", real=True) # 定义等式 a*x**2+b*x = -c
equation_2 = Eq(a*x**2+b*x+c, 0)
solve(equation_2, x)
```

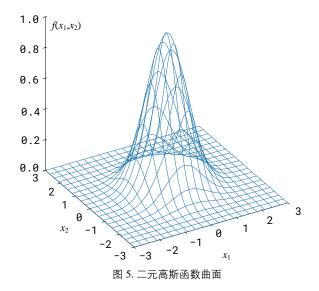
图 3. 用 sympy.solve() 求解等式

函数

图 4 代码用 sympy.lambdify() 将符号函数 $\exp(-x_1^2 - x_2^2)$ 转化为 Python 函数,从而可以进行数值运算。图 5 所示为代码绘制的二元高斯函数曲面。

```
from sympy import symbols, exp, lambdify
   import numpy as np
   import matplotlib.pyplot as plt
  x1, x2 = symbols('x1 x2')
  # 定义符号变量
a f_{gaussian_x1x2} = exp(-x1**2 - x2**2)
  # 将符号表达式转换为Python函数
f_gaussian_x1x2_fcn = lambdify([x1,x2],f_gaussian_x1x2)
  xx1,xx2 = np.meshgrid(np.linspace(-3,3,201),
                        np.linspace(-3,3,201))
  ff = f_gaussian_x1x2_fcn(xx1,xx2)
  # 可视化
  fig = plt.figure()
  ax = fig.add_subplot(projection='3d')
ax.plot_wireframe(xx1,xx2,ff,
                    rstride=10, cstride=10)
  ax.set_proj_type('ortho')
  ax.view_init(azim=-120, elev=30)
   ax.grid(False)
   ax.set_xlabel('x1')
  ax.set_ylabel('x2')
   ax.set_zlabel('f(x1,x2)')
  ax.set_xlim(-3,3)
  ax.set_ylim(-3,3)
  ax.set_zlim(0,1)
  ax.set_box_aspect(aspect = (1,1,1))
  fig.savefig('二元高斯函数.svg', format='svg')
```

图 4. 用 sympy.lambdify() 将符号表达式转化为 Python 函数



25.3 线性代数

NumPy 是 Python 科学计算中非常重要的一个库,它提供了快速、高效的多维数组对象及其操作方法,是众多其他科学计算库的基础。

矩阵

图 6 中代码用 sympy.Matrix() 定义矩阵、列向量。

- ③从 sympy 导入 Matrix 函数。
- $lue{b}$ 定义 2 行、3 列矩阵 A。函数 sympy.shape() 可以用来获取矩阵形状。举个例子,先用 from sympy import shape 导入 shape,然后 shape(A) 返回元组 (2,3) 即矩阵形状。A.T 可以完成矩阵转置。对矩阵 A 的索引和切片方法和 NumPy 数组一致。比如,A[0,0] 提取矩阵第 1 行、第 1 列元素。A[-1,-1] 提取矩阵最后一行、最后一列元素。A[0,:] 提取矩阵第一行,A.row(0) 也可以用来提取矩阵第 1 行。A[:,0] 提取矩阵第一列,A.col(0) 也可以提取矩阵第一列。

此外, $A.row_del(0)$ 可以用来删除第 1 行元素。 $A.row_insert()$ 可以用来在特定位置插入行向量。类似地, $A.col_del(0)$ 可以用来删除第 1 列元素。 $A.col_insert()$ 可以用来在特定位置插入列向量。

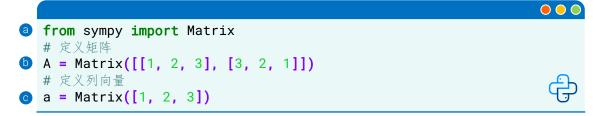


图 6. 用 sympy.matrix() 定义矩阵

图 7 定义的矩阵 A 为 $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ 。

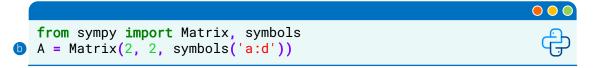


图 7. 用 sympy.matrix() 定义全符号矩阵

表 3 给出了几种产生特殊矩阵的方法。此外,A.is_symmetric() 判断矩阵 A 是否为对称阵,A.is_diagonal() 判断矩阵 A 是否为对角阵,A.is_lower 判断矩阵 A 是否为下三角,A.is_upper 判断矩阵 A 是否为上三角纠正,A.is_square 判断矩阵 A 是否为方阵,A.is_zero_matrix 判断矩阵 A 是否为全 0 矩阵,A.is_diagonalizable() 判断矩阵 A 是否可以对角化。A.is_positive_definite 判断矩阵 A 是否为正定。

表 3. 用 sympy	函数产生特殊矩阵
--------------	----------

矩阵类型	代码	结果
单位矩阵	<pre>from sympy import eye A = eye(3)</pre>	$ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} $
全0矩阵	<pre>from sympy import zeros A = zeros(3, 3)</pre>	$ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} $
全1矩阵	<pre>from sympy import ones A = ones(3, 3)</pre>	$ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} $
对角方阵	<pre>from sympy import diag A = diag(1, 2, 3)</pre>	$ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} $
上三角矩阵	<pre>from sympy import ones A = ones(3) A.upper_triangular()</pre>	$ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} $
下三角矩阵	<pre>from sympy import ones A = ones(3) A.lower_triangular()</pre>	$ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} $

运算

图8代码给出矩阵相关的常用运算。

³ 和 [₺] 给出两种矩阵乘法运算符,建议大家使用 @ , 和 NumPy 矩阵乘法符号保持一致。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

- ◎和◎给出两种矩阵逆运算符。
- 将符号矩阵转化为浮点数 NumPy 数组。
- ① 计算矩阵 Q 的逆,结果为 $\frac{1}{ad-bc}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$ 。
- \bigcirc 计算矩阵 \bigcirc 的行列式,结果为 ad-bc。
- $^{\text{l}}$ 计算矩阵 Q 的迹,结果为 a+d。

```
from sympy import Matrix, symbols
  A = Matrix([[1, 3], [-2, 3]])
  B = Matrix([[0, 3], [0, 7]])
  A.T
      # 矩阵转置
  A + B # 加法
  A - B # 减法
  3*A # 标量乘矩阵
  A.multiply_elementwise(B) # 逐项积
a A * B # 矩阵乘法
♠ A @ B # 矩阵乘法
  Matrix_2x2 = Matrix([[1.25, -0.75],
                      [-0.75, 1.25]
Matrix_2x2**-1
                 # 矩阵逆
d Matrix_2x2.inv() # 矩阵逆
  # 将符号矩阵转化为浮点数numpy数组

    np.array(Matrix_2x2).astype(np.float64)
  a, b, c, d = symbols('a b c d')
  Q = Matrix([[a, b],
              [c, d]])
            # 矩阵逆
① Q.inv()
0 Q.det()
           # 行列式
f Q.trace() # 迹
```

图 8. 用 sympy 中常见矩阵运算

正定性

正定性是线性代数、优化方法、机器学习重要的数学概念。下面我们用一个 2×2 矩阵 $A_{2\times 2}$ 介绍正定性。

矩阵 $A_{2\times 2}$ 是正定,意味着 $f(x) = x^{T}$ @ $A_{2\times 2}$ @ x 是个开口朝上的抛物面,形状像是碗。除了 (0,0), $f(x) = x^{T}$ @ $A_{2\times 2}$ @ x 均大于 0。(0,0) 为最小值,图中箭头都背离 (0,0)。

矩阵 $A_{2\times 2}$ 是半正定,意味着 $f(x) = x^{T} @ A_{2\times 2} @ x$ 是个开口朝上的山谷面。除了 (0,0), $f(x) = x^{T} @ A_{2\times 2} @ x$ 均大于等于 0。山谷的谷底都是极小值,图中箭头都背离谷底所在直线。

```
本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com
```

矩阵 $A_{2\times 2}$ 是负定,意味着 $f(x) = x^T @ A_{2\times 2} @ x$ 是个开口朝下的抛物面。除了 (0,0), $f(x) = x^T @ A_{2\times 2}$ @ x 均小于 0。(0,0) 为最大值,图中箭头都指向 (0,0)。

矩阵 $A_{2\times 2}$ 是半负定,意味着 $f(x) = x^{T}$ @ $A_{2\times 2}$ @ x 是个开口朝下的山脊面。除了 (0,0), $f(x) = x^{T}$ @ $A_{2\times 2}$ @ x 均小于等于 0。山脊的顶端都是极大值,图中箭头指向山脊顶端所在直线。

矩阵 $A_{2\times 2}$ 不定,意味着 $f(x) = x^T @ A_{2\times 2} @ x$ 是个马鞍面,(0,0) 为鞍点。 $f(x) = x^T @ A_{2\times 2} @ x$ 符号不定。图中有些箭头背离 (0,0),有些指向 (0,0)。

正定性	矩阵 A 和函数	三维可视化	二维可视化
正定	$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
正定	$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
正定	$A = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = 1.5x_1^2 + x_1x_2 + 1.5x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
半正定	$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

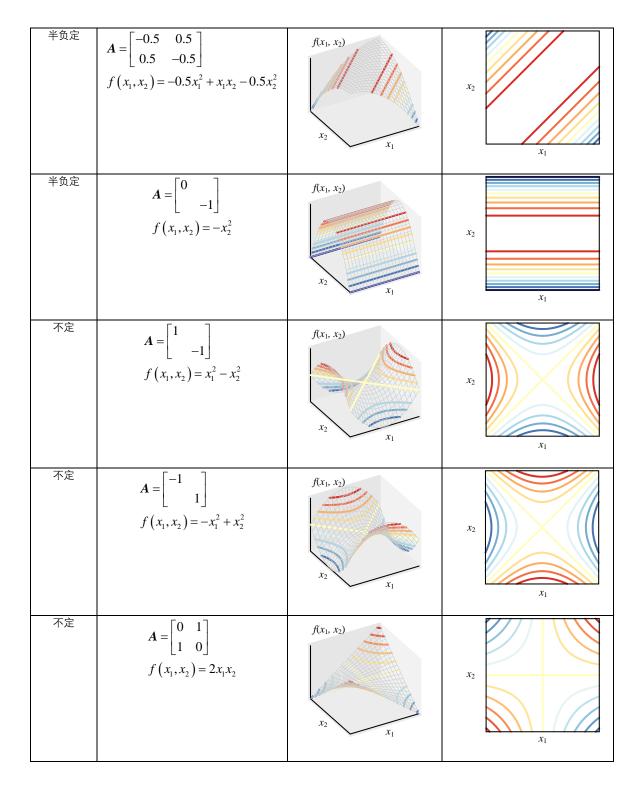
代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

半正定	$A = \begin{bmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = 0.5x_1^2 - x_1x_2 + 0.5x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
半正定	$A = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
负定	$A = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = -x_1^2 - x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
负定	$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = -x_1^2 - 2x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
负定	$A = \begin{bmatrix} -1.5 & -0.5 \\ -0.5 & -1.5 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = -1.5x_1^2 - x_1x_2 - 1.5x_2^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1
半负定	$A = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = -x_1^2$	$f(x_1, x_2)$ x_2 x_1	x_2 x_1

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

成队归用于八字面版社所有,唱勿简用,引用谓注明面风。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套徽课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com



矩阵分解

2abc图9完成符号矩阵 A= 的特征值和特征向量。 b^2 2abc

图 9. 用 sympy 完成符号矩阵的特征值分解

图 10 完成矩阵
$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$
 的奇异值分解。 U 的结果为 $U = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/6 \\ 0 & \sqrt{6}/3 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/6 \end{bmatrix}$, S 的结果为

$$S = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{bmatrix}$$
, V 的结果为 $V = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$ 。请大家分别计算 V .T @ V , V @ V .T, U .T @ U .

```
from sympy import Matrix
A = Matrix([[0, 1],[1, 1],[1, 0]])
# 奇异值分解

U, S, V = A.singular_value_decomposition()
```

图 10. 用 sympy 完成矩阵的奇异值分解

请大家注意,SymPy 目前很多功能还不够完善。大家想要处理更为复杂的符号运算,建议使用 Mathematica 或 MATLAB Symbolic Math Toolbox。