

## 25

## Symbolic Computation in SymPy

## 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



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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

## 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。

**a** 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。**b** 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。

**c** 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  $x_1, x_2 = \text{symbols}('x_1 x_2')$ 。

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 = sympy.symbols('k', integer=True)` 这一句定义符号变量  $k$ ，并假定  $k$  为整数。`z = sympy.symbols('z', real=True)` 定义了符号变量  $z$ ，并假定  $z$  为实数。

**d** 定义了  $x^2 - y^2$ 。**e** 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  $x^2 - y^2$ 。

```
a from sympy import symbols, factor
# 从sympy中导入symbols, factor
b from sympy import init_printing
init_printing("mathjax")

c x, y = symbols('x y')
# 用sympy.symbols (简做symbols) 定义x和y两个符号变量
d f = x**2 - y**2
e f_factored= factor(f)
```

图 1. 因式分解

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

## 替换

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

**c** 用符号  $y$  替代符号  $x$ ，符号表达式变为  $y^3 + y^2 + y + 1$ 。

**d** 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.symbols 将字符串转化为符号表达式

## 特殊符号数值

SymPy 还可以定义特殊符号数值，表 1 给出几个例子。比如，`sympy.symbols()` 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
<code>from sympy import sympify</code> <code>sympify(2).is_integer</code> <code>sympify(2).is_real</code>	True True
<code>from sympy import Rational</code> <code>Rational(1, 2)</code>	$\frac{1}{2}$
<code>from sympy import sqrt</code> <code>1 / (sqrt(2) + 1)</code>	$\frac{1}{1+\sqrt{2}}$
<code>from sympy import pi</code> <code>expr = pi ** 2</code>	$\pi^2$
<code>from sympy import exp</code> <code>exp(2)</code>	$e^2$
<code>from sympy import factorial</code> <code>factorial(5)</code>	5!
<code>from sympy import binomial</code> <code>binomial(5, 4)</code>	$C_5^4 = 5$
<code>from sympy import gamma</code> <code>gamma(5)</code>	$\Gamma(5) = (5-1)! = 4 \times 3 \times 2 \times 1 = 24$

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](mailto: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`。

表 2. 用 `sympy.Interval()` 定义区间

代码	结果
<code>from sympy import Interval, oo Interval(0, 1, left_open=False, right_open=False)</code>	<code>[0, 1]</code>
<code>from sympy import Interval, oo Interval(0, 1, left_open=True, right_open=True)</code>	<code>(0, 0)</code>
<code>from sympy import Interval, oo Interval(0, 1, left_open=False, right_open=True) # Interval.Ropen(0, 1)</code>	<code>[0, 1)</code>
<code>from sympy import Interval, oo Interval(0, 1, left_open=True, right_open=False) # Interval.Lopen(0, 1)</code>	<code>(0, 1]</code>
<code>from sympy import Interval, oo Interval(0, oo, left_open=False, right_open=True)</code>	<code>[0, ∞)</code>
<code>from sympy import Interval, oo Interval(-oo, 0, left_open=True, right_open=True)</code>	<code>(-∞, 0)</code>
<code>from sympy import Interval, S Interval(0, 1).complement(S.Reals)</code>	<code>(-∞, 0) ∪ (1, ∞)</code>

## 求解等式

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

c 定义等式  $ax^2 + bx + c = 0$ 。d 求解等式结果为  $\left[ \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \right]$ 。

```

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
c equation_2 = Eq(a*x**2 + b*x + c, 0)
d 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
b 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')

c 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

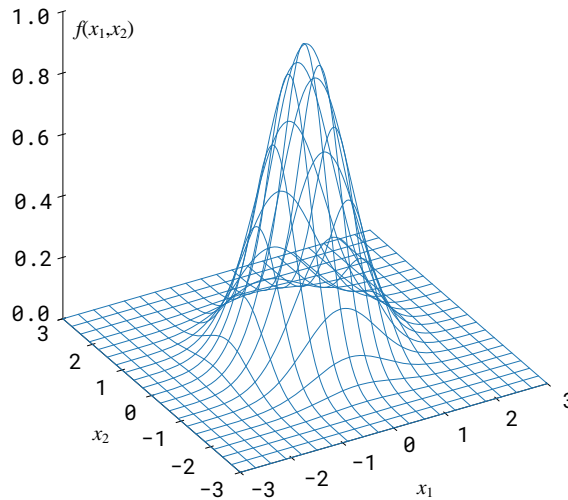


图 5. 二元高斯函数曲面

## 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。

**a** 从 `sympy` 导入 `Matrix` 函数。

**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。

**c** 定义列向量 `a`。

```
a from sympy import Matrix
# 定义矩阵
b A = Matrix([[1, 2, 3], [3, 2, 1]])
# 定义列向量
c a = Matrix([1, 2, 3])
```

图 6. 用 `sympy.matrix()` 定义矩阵

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

```
b from sympy import Matrix, symbols
A = Matrix(2, 2, symbols('a:d'))
```

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。

**a** 和 **b** 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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

- c 和 d 给出两种矩阵逆运算符。
- e 将符号矩阵转化为浮点数 NumPy 数组。
- f 计算矩阵  $Q$  的逆，结果为  $\frac{1}{ad-bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$ 。
- g 计算矩阵  $Q$  的行列式，结果为  $ad-bc$ 。
- h 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
b A @ B # 矩阵乘法

Matrix_2x2 = Matrix([[1.25, -0.75],
                      [-0.75, 1.25]])

c 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
e np.array(Matrix_2x2).astype(np.float64)

a, b, c, d = symbols('a b c d')
Q = Matrix([[a, b],
            [c, d]])

f Q.inv() # 矩阵逆
g Q.det() # 行列式
h 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  $2 \times 2$  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>

本书配套视频课程均发布在 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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

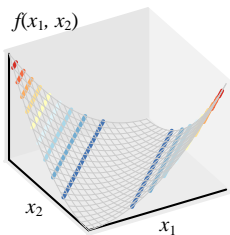
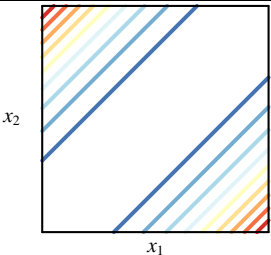
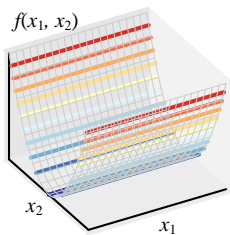
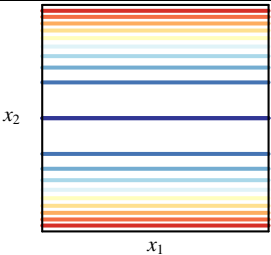
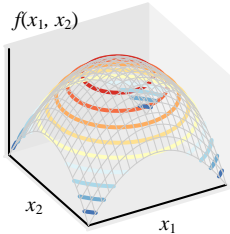
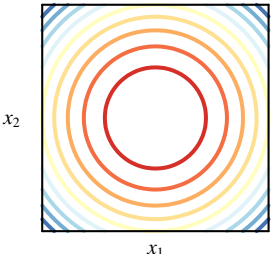
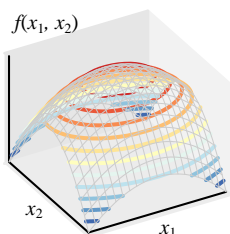
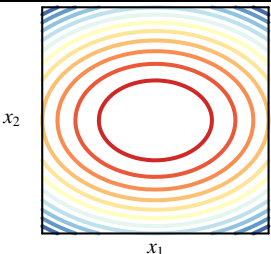
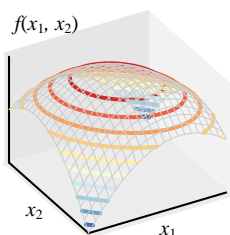
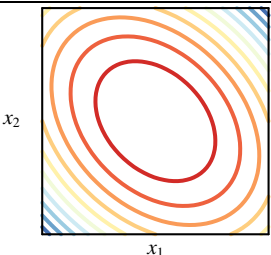
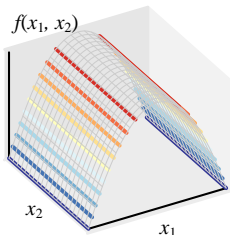
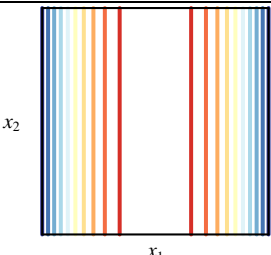


矩阵  $A_{2 \times 2}$  是负定，意味着  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  是个开口朝下的抛物面。除了  $(0, 0)$ ， $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  均小于 0。 $(0, 0)$  为最大值，图中箭头都指向  $(0, 0)$ 。

矩阵  $A_{2 \times 2}$  是半负定，意味着  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  是个开口朝下的山脊面。除了  $(0, 0)$ ， $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  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  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  是个马鞍面， $(0, 0)$  为鞍点。 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T @ A_{2 \times 2} @ \mathbf{x}$  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	$A = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$		
正定	$A = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 2 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$		
正定	$A = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = 1.5x_1^2 + x_1x_2 + 1.5x_2^2$		
半正定	$A = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 0 \end{bmatrix}$ $f(x_1, x_2) = x_1^2$		

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

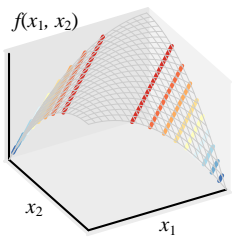
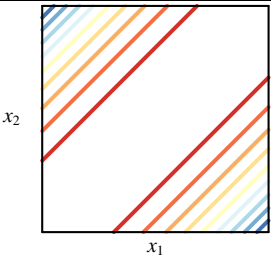
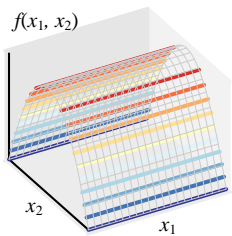
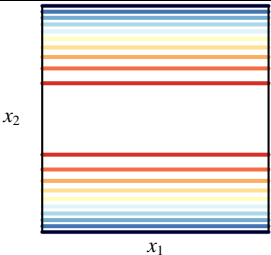
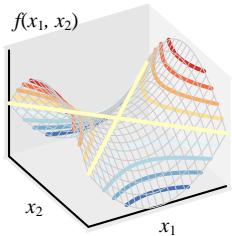
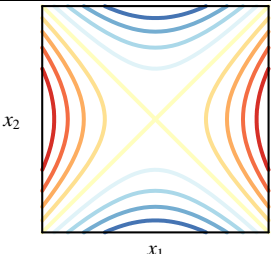
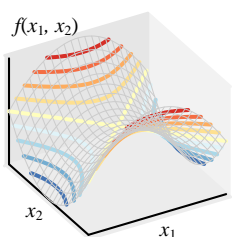
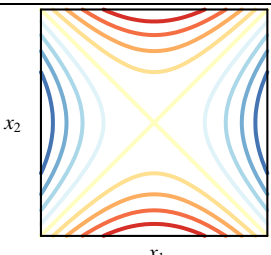
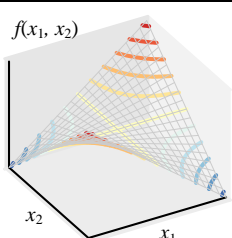
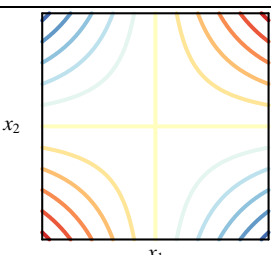
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

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

```

# 导入包
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import symbols, lambdify, expand, simplify

# 定义可视化函数
a def visualize(xx1, xx2, f2_array):
    b     fig = plt.figure(figsize=(6,3))
    c     # 左子图, 三维
    ax = fig.add_subplot(1, 2, 1, projection='3d')

    d     ax.plot_wireframe(xx1, xx2, f2_array,
                           rstride=10, cstride=10,
                           color = [0.8,0.8,0.8],
                           linewidth = 0.25)

    e     ax.contour(xx1, xx2, f2_array,
                    levels = 12, cmap = 'RdYlBu_r')

    ax.set_xlabel('$x_1$'); ax.set_ylabel('$x_2$')
    ax.set_zlabel('$f(x_1, x_2)$')
    ax.set_proj_type('ortho')
    ax.set_xticks([]); ax.set_yticks([])
    ax.set_zticks([])
    ax.view_init(azim=-120, elev=30)
    ax.grid(False)
    ax.set_xlim(xx1.min(), xx1.max());
    ax.set_ylim(xx2.min(), xx2.max())

    f     # 右子图, 平面等高线
    g     ax = fig.add_subplot(1, 2, 2)
    ax.contour(xx1, xx2, f2_array,
               levels = 12, cmap = 'RdYlBu_r')

    ax.set_xlabel('$x_1$'); ax.set_ylabel('$x_2$')
    ax.set_xticks([]); ax.set_yticks([])
    ax.set_aspect('equal'); ax.grid(False)
    ax.set_xlim(xx1.min(), xx1.max());
    ax.set_ylim(xx2.min(), xx2.max())
    plt.tight_layout()

```

图 9. 定义可视化函数

```

# 生成数据
x1_array = np.linspace(-2,2,201)
x2_array = np.linspace(-2,2,201)

a xx1, xx2 = np.meshgrid(x1_array, x2_array)

# 定义二元函数
b def fcn(A, xx1, xx2):
c     x1,x2 = symbols('x1 x2')
d     x = np.array([[x1,x2]]).T
e     f_x = x.T@A@x
f     f_x = f_x[0][0]
g     print(simplify(expand(f_x)))
h
i     f_x_fcn = lambdify([x1,x2], f_x)
    ff_x = f_x_fcn(xx1,xx2)

    return ff_x

# 不定矩阵
j A = np.array([[0, 1],
                [1, 0]])

k f2_array = fcn(A, xx1, xx2)
l visualize(xx1,xx2,f2_array)

```

图 10. 可视化正定性，使用时配合前文代码

## 矩阵分解

图 11 完成符号矩阵  $A = \begin{bmatrix} a^2 & 2abc \\ 2abc & b^2 \end{bmatrix}$  的特征值和特征向量。

```

from sympy import Matrix, symbols
a, b, c, d = symbols('a b c d')
A = Matrix([[a**2, 2*a*b*c],
            [2*a*b*c, b**2]])

# 特征值
a A.eigenvals()
# 特征向量
b A.eigenvects()

```

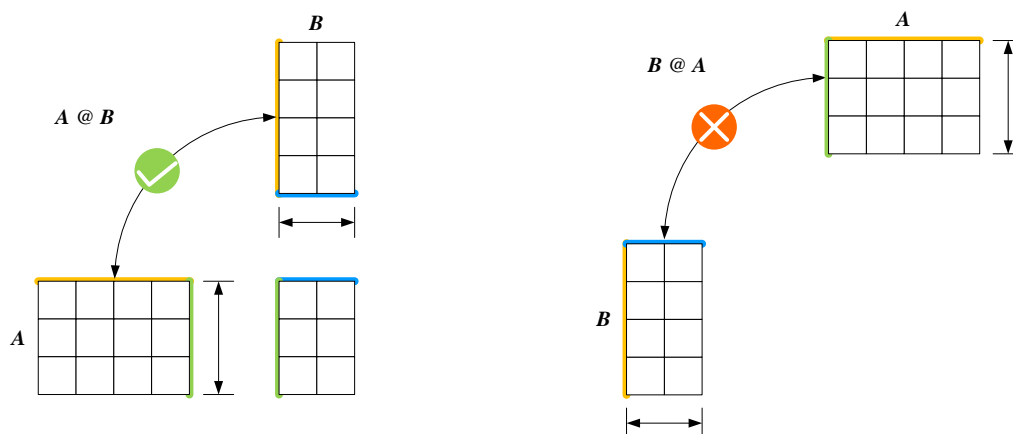
图 11. 用 sympy 完成符号矩阵的特征值分解

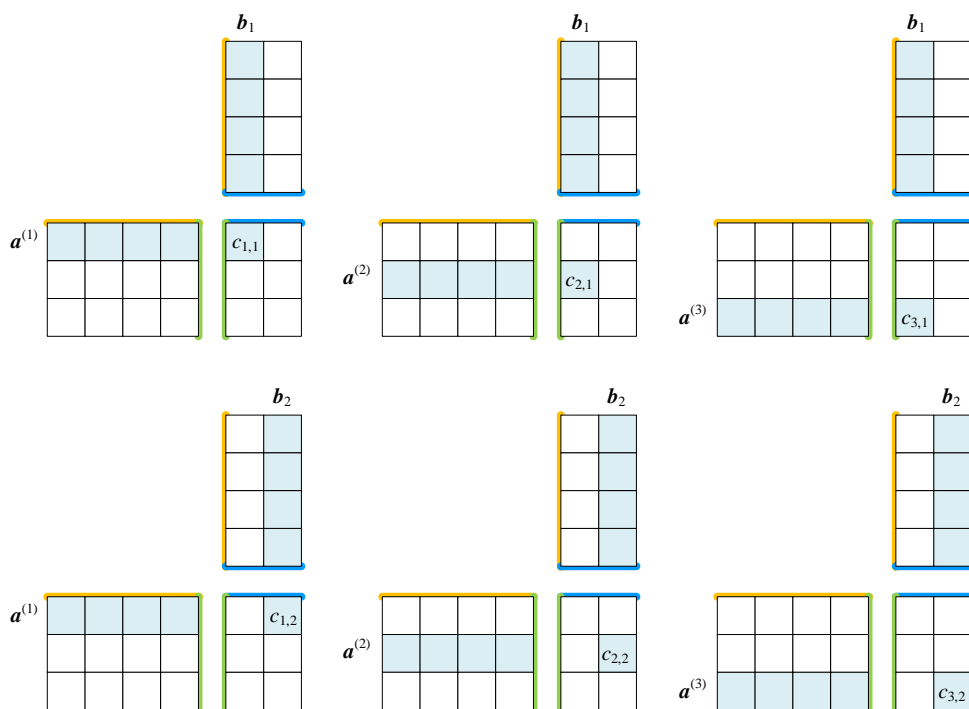
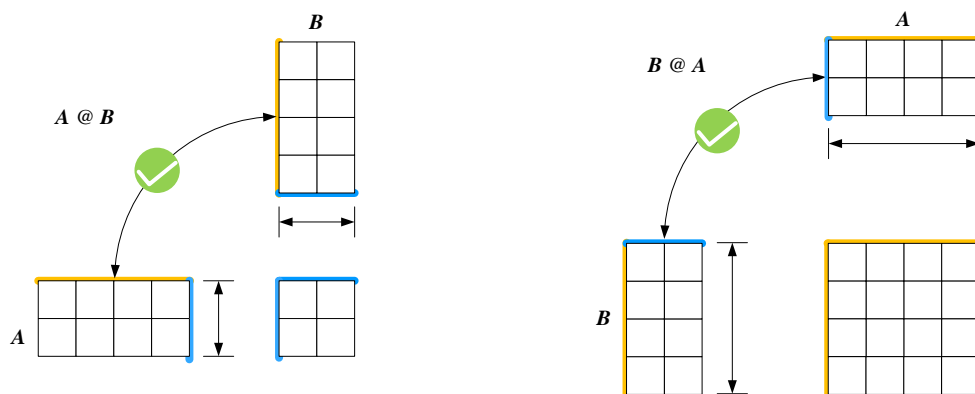
图 12 完成矩阵  $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$  的奇异值分解。 $U$  的结果为  $U = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/6 \\ 0 & \sqrt{6}/3 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/6 \end{bmatrix}$ ,  $S$  的结果为  $S = \begin{bmatrix} 1 & \\ & \sqrt{3} \end{bmatrix}$ ,  $V$  的结果为  $V = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$ 。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
a U, S, V = A.singular_value_decomposition()
```

图 12. 用 sympy 完成矩阵的奇异值分解

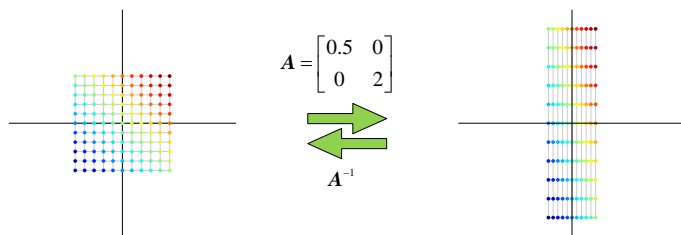
### 再聊聊矩阵乘法规则：尺寸匹配是前提

图 13. 矩阵乘法  $A @ B$  成立,  $B @ A$  不成立

图 14. 如何获得矩阵乘法  $A @ B$  的每个元素图 15. 矩阵乘法  $A @ B$  成立,  $B @ A$  成立; 但是, 一般情况,  $A @ B \neq B @ A$ 

### 几何视角看矩阵乘法

看似枯燥无味、单调呆板的矩阵乘法实际上多姿多彩、妙趣横生。《矩阵力量》一册将为大家展现一个生机勃勃的矩阵乘法世界。本章最后从几何角度举几个例子和大家简单聊聊矩阵乘法。



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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

图 16. 平面缩放

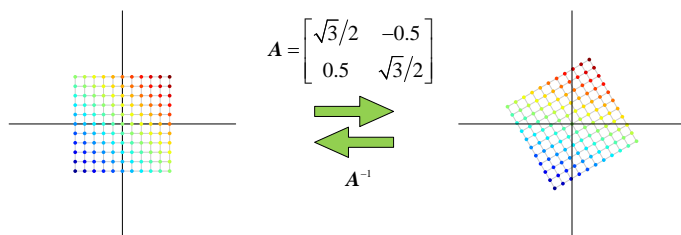


图 17. 平面旋转

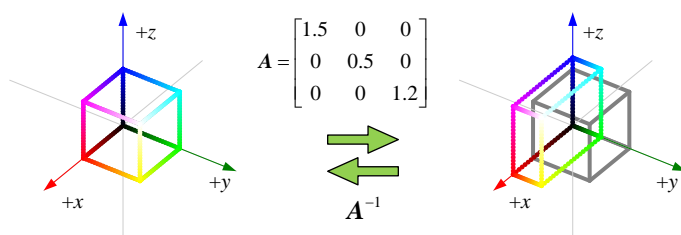


图 18. 三维缩放

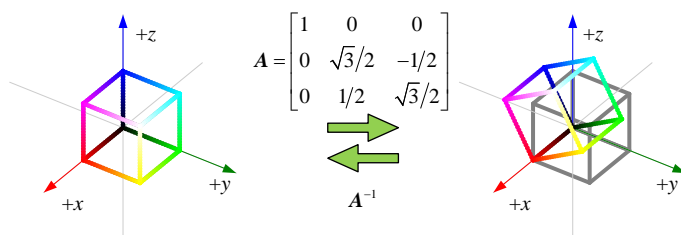


图 19. 三维旋转

请大家利用 SymPy 自行计算中图 16 ~ 图 19 逆矩阵具体值。

简单来说，如果逆矩阵不存在说明几何变换不可逆。请大家试着用 SymPy 计算图 20 和图 21 两个矩阵的逆，看看是否会报错。

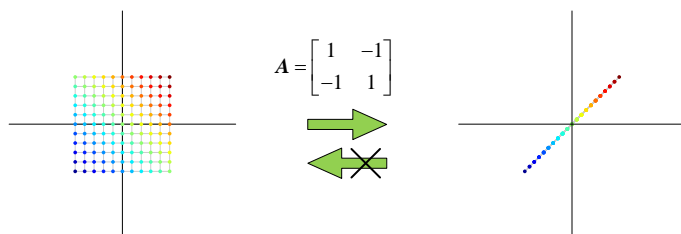


图 20. 平面投影，不可逆



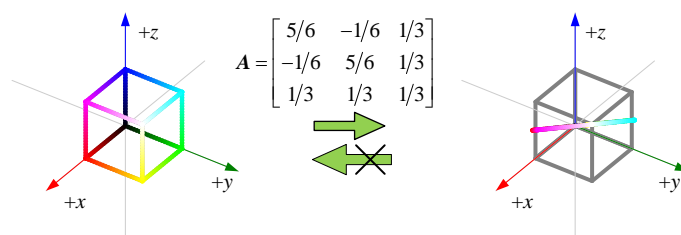
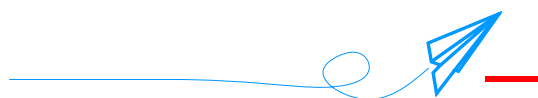


图 21. 三维投影，不可逆

这些几何变换(旋转、缩放、投影)用途极为广泛，比如计算机视觉、机器人运动。在鸢尾花书中，大家会发现这些几何变换还帮助我们理解特征值分解、奇异值分解、随机数模拟、协方差矩阵、多元高斯分布、主成分分析等等。



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。