给graph初学者: 用networkx学习图论

hawksoft

networkx是一个操作图(graph)的python包。事实上它被称为复杂网络计算包,这也是她的名字networkx的来历。但网络是从实际应用来说的,初学者看到网络可能只会想到计算机网络,实际上这只是其中的的一种。以后大家会明白,大量的问题都可以表示为网络,如社交网络,分子结构等,而网络的数学基础就是图。

因此,作为图论初学者通过使用该包,不仅可以对抽象的知识能有具体的体验,更重要的是当前的图模型应用很广,越早介入,对将来的学习越有好处。

作为入门,可以按照下面的路线进行:

- 安装和使用
- 创建图
- 绘图
- 熟悉图的属性
- 使用图上的算法

0 安装

最好使用最新的python版本,或者至少在3.5以上。 执行下面命令安装networkx包:

```
1 pip install networkx
```

安装完成后,在模块的前面,按下述语句导入包就可以使用了:

```
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt
```

第2句导入的是pyplot,我们后面需要用该包来绘制图,所以一并导入。

1 创建图

- 按照面向对象的思想,图本身就是一个对象,所以针对两种不同的图(无向图和有向图),networkx提供了两个class,分别是Graph和DiGraph。
- 图由点和边构成,所以Graph对象提供了两个方法,一个用于向图中添加节点,一个用于向图中添加边。为了一次添加多个节点(边),这些方法的参数是列表.
- 图中可以删除节点,删除边。这些都有对应的方法。

看下面的代码:

```
import networkx as nx
g = nx.Graph()
g.add_nodes_from([0,1,2,3])
g.add_edges_from([(0,1),(1,2),(2,3)])
```

如果是有向图,只需改变第一句,其它操作完全相同。

看下面的代码:

```
import networkx as nx
g = nx.DiGraph()
g.add_nodes_from([0,1,2,3])
g.add_edges_from([(0,1),(1,2),(2,3)])
```

2 绘图

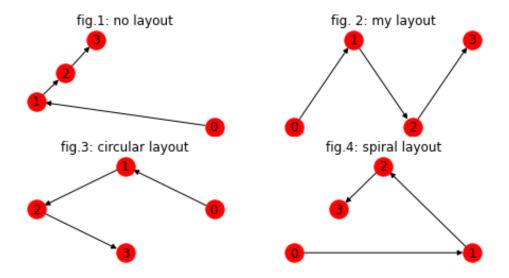
借助于pyplot, networkx可以很方便地把定义的graph绘制出来, 感觉更直观, 尤其对于初学者。

networkx提供了一个绘图的函数draw,该函数参数很多,但最关键是第二个,确定每个节点的坐标。当节点的坐标定了,边也就定了,图形当然就定了。这个称为布局(layout),它实际是一个字典对象,每一个key对应一个节点,其value是该节点在绘图时的坐标(x,y)。注意在pyplot坐标系统中,(0,0)位于左下角,x坐标向右增长,y坐标向上增长。

另外,networkx也提供了一些布局。这些布局是以函数的形式提供的,只要把图对象带入该函数,该函数的返回布局字典。

看下面代码:

```
fig=plt.figure(figsize=(8,4))
                                 # 设置绘图区域的大小
 2
                                 #将绘图区域分为2行2列, 共4个区域, 这里在第1个区域绘图
 3
   ax1=fig.add subplot(2,2,1)
4
   ax1.set_title('fig.1: no layout')
 5
   nx.draw(g, with_labels=True, node_color='red')
 6
   ax2=fig.add_subplot(2,2,2)
                                #将绘图区域分为2行2列,共4个区域,这里在第2个区域绘图
 7
   ax2.set_title('fig. 2: my layout')
 8
9
   pos = \{0:(0,0),1:(1,5),2:(2,0),3:(3,5)\}
10
   nx.draw(g, pos,with_labels=True, node_color='red')
11
                                  #将绘图区域分为2行2列,共4个区域,这里在第3个区域绘图
12
   ax3=fig.add_subplot(2,2,3)
   ax3.set_title('fig.3: circular layout')
13
    pos = nx.layout.circular_layout(g)
14
   nx.draw(g,pos ,with_labels=True, node_color='red')
15
16
                                  #将绘图区域分为2行2列, 共4个区域, 这里在第4个区域绘图
   ax4=fig.add_subplot(2,2,4)
17
   ax4.set_title('fig.4: spiral layout')
18
   pos = nx.layout.planar layout(g)
19
   nx.draw(g,pos ,with_labels=True, node_color='red')
20
   plt.show()
21
```



解释如下:

- 对同一个图对象, 我绘制了四个图, 布局各不相同
- fig1 没有布局参数,所以networkx使用默认布局
- fig2 提供了自己的布局
- fig3和fig4使用了networkx提供的布局函数。

draw函数还有其它参数,可以自己慢慢去体会。

3 图的属性

在一个图中,如节点数目,边的数目,节点的度,这些称为图的属性。

按照面向对象的思路,这些通过Graph对象的属性和方法来获得。

看代码:

```
1print(g.nodes)#列出图中节点,结构为列表2print(g.nodes())3print(g.edges)# 边的列表4print(g.degree)# 节点度的列表5print(nx.degree_histogram(g))# 节点度的值的分布,叫做直方图6print(g.number_of_nodes())7print(g.number_of_edges())
```

```
1 [0, 1, 2, 3]

2 [0, 1, 2, 3]

3 [(0, 1), (1, 2), (2, 3)]

4 [(0, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 1)]

5 [0, 2, 2]

6 4

7 3
```

看每一个属性的名字, 应该很好猜。

说句题外话,networkx真的很贴心。看上面代码的1和2行,都是列出图中的节点,但1用的对象属性nodes,而2用的是对象的方法nodes()。不知你们有没有这样的困惑,在使用对象时,我们经常不知道某一个名字是属性还是方法,也就是说不知道后面要不要写括号。对此,在nerworkx中,每一个属性都有同名方法,所以就避免了这个困惑,是不是很体贴,最起码比sympy好得多。

下面代码验证握手定理: (所有边的度数之和等于边的数目的2倍)

```
1  sum_deg = 0
2  for i in g.degree:
3    sum_deg = sum_deg + i[1]
4  print(sum_deg == g.number_of_edges() * 2)
```

```
1 True
```

4图上的算法

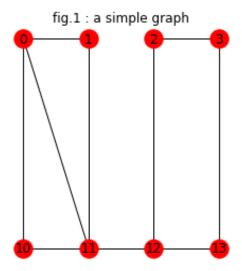
入门之后,你的回报就来了,最大的回报就是我们学习过或将要学习的大量与图相关的算法,这里都以函数或方法 的形式提供给你了。

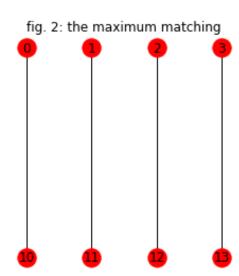
下面代码,以我们课堂上提到的最大匹配问题举例,主要功能是:

- 创建图g
- 求g的最大匹配match
- 绘出g和match的图

```
1
    import networkx as nx
 2
    import matplotlib.pyplot as plt
 3
   # 创建图g
 4
    g = nx.Graph()
 5
    g.add_nodes_from([0,1,2,3,10,11,12,13])
 6
7
    g.add_edges_from([(0,10),(0,11),(1,11),(2,12),(3,13),(0,1),(13,10),(2,3)])
 8
9
    #求最大匹配
    match = nx.max_weight_matching(g)
10
11
    g_match = nx.Graph()
    for kk, vv in match:
12
13
        g_match.add_edge(kk,vv)
14
    # 创建布局,注意两个图都使用这个布局,便于对比
15
16
    pos = \{0: (0, 5), 1: (1, 5), 2: (2, 5), 3: (3, 5), 10: (0, 0), 11: (1, 0), 12: (2, 0), 13:
    (3, 0)
17
    # 绘图
18
19
    fig=plt.figure(figsize=(8,4))
20
21
    ax1=fig.add_subplot(1,2,1)
22
   nx.draw(g, pos, with_labels=True, node_color='red')
23
    ax1.set_title('fig.1 : a simple graph')
```

```
24
25  ax2=fig.add_subplot(1,2,2)
26  nx.draw(g_match,pos, with_labels=True, node_color='red')
27  ax2.set_title('fig. 2: the maximum matching')
28
29  plt.show()
```





为了保证上面代码的可读性,第16行直接给出了布局字典,它其实是下面布局函数的调用结果。

```
def myLayout(g):
 1
 2
        pos = []
        for i in g.nodes:
 3
            if i>=10:
 4
 5
                 pos.append((i-10,0))
 6
             else:
 7
                 pos.append((i,5))
        pos = dict(zip(g.nodes,pos))
 8
9
        print(pos)
10
    myLayout(g)
11
```

```
1 | {0: (0, 5), 1: (1, 5), 2: (2, 5), 3: (3, 5), 10: (0, 0), 11: (1, 0), 12: (2, 0), 13: (3, 0)}
```