Projekt nr 20 – przedmiot Grafy I sieci

Autor: Paulina Gayny

Opis problemu: bezpieczne składowanie substancji chemicznych, z których niektóre nie mogą ze sobą sąsiadować.

Problem ten można zredukować to problemu znalezienia "małej" (mniejszej niż liczba wszystkich substancji) liczby kolorów potrzebnych do pokolorowania grafu.

Za wierzchołki przyjmiemy substancje chemiczne, połączenie krawędziowe między dwoma wierzchołkami oznaczać będzie, że te dwie substancje nie mogą mieć ze sobą styczności. Należy pokolorować graf w ten sposób, żeby każdy wierzchołek otrzymał swój kolor i żeby żadne dwa sąsiadujące ze sobą wierzchołki nie miały tego samego koloru.

Znaleziona liczba kolorów którą można już pokolorować graf będzie liczbą grup substancji, na jakie należy podzielić substancje chemiczne w celu ich składowania (np. w osobnych częściach magazynu). Otrzymane wierzchołki o tym samym kolorze to odpowiednie substancje chemiczne, które mogą ze sobą sąsiadować.

Uwaga: Znalezione grupy tych substancji powinny być składowane osobno względem siebie, przy poziomie zadbania o odpowiednie warunki przechowywania między dwoma wybranymi grupami substancji co najmniej tak wysokim jak wymagają tego wymagane warunki przechowywania pary dwóch najbardziej niebezpiecznych względem siebie, najłatwiej oddziałujących, wymagających najbardziej sprzecznych ze sobą warunków przechowywania itp., substancji chemicznych.

Nie rozważamy problemu różnego poziomu zagrożenia i wymaganej hermetyczności dla konkretnych substancji chemicznych.

W mojej interpretacji możliwe jest jedynie określenie, czy dwie substancje mogą być przetrzymywane blisko siebie, przy prawdopodobnej możliwości styczności cząsteczek ze sobą, czy też nie - jest to wybór zerojedynkowy.

Nie rozważamy też liczby chromatycznej grafu, szukamy jakiegoś dość dobrego, niekoniecznie najlepszego rozwiązania.

Otrzymujemy: liczbę grup na jakie należy podzielić substancje oraz skład tych grup. Ustalenie k - kolorowalności grafu.

Założenia:

- graf jest grafem prostym, ponieważ:
- nie ma pętli, ponieważ zakładamy, że substancja chemiczna nie stwarza zagrożenia dla samej siebie
- nie ma krawędzi wielokrotnych, ponieważ nie ma powodu, żeby były zakładamy że substancja może lub nie może sąsiadować ze sobą, czyli krawędzi nie ma, lub jest jedna (oznaczająca że te dwie substancje nie mogą ze sobą sąsiadować).
- graf jest spójny wynika z tego na przykład to, że rozważamy tylko obiekty z których każdy ma co najmniej jedną substancję z którą nie może sąsiadować
- graf jest nieskierowany, ponieważ jeżeli subtancje chemiczne nie mogą być razem przechowywane to jest to relacja symetryczna
- graf nie jest pełny, ponieważ w przypadku gdy każde 2 wierzchołki łączy krawędź odpowiedź na zadany problem jest trywialna - liczba grup wynosi wtedy tyle co liczba wierzchołków; każdą substancję chemiczną należy składować osobno.

Użyty język programowania: Python

Użyte materiały:

lista sąsiedztwa:

https://www.algotree.org/algorithms/data_structures/graph_as_adjacency_list_python/

https://www.programiz.com/dsa/graph-adjacency-list

https://www.geeksforgeeks.org/graph-and-its-representations/

Użyty algorytm: Zachłanny algorytm kolorowania wierzchołków (pokazany na wykładzie)

Legenda:

- wierzchołek substancja chemiczna
- graf zaimplementowany jako słownik defaultdict, kluczami są nazwy substancji a wartościami listy sąsiadujących z nimi wierzchołków
- liczba wierzchołków V liczba wszystkich substancje chemiczne wprowadzonych do programu
- krawędź między dwoma wierzchołkami oznaczenie, że substancje chemiczne symbolizowane przez te wierzchołki nie mogą ze sobą sąsiadować
- ❖ zbiór krawędzi E wszystkie relacje między wierzchołkami
- kolor oznacza grupę, do której zostaje przydzielona substancja chemiczna
- ❖ zbiór dostępnych kolorów C zbiór kolorów w postaci liczbowej dostępnych dla algorytmu
- zbiór przypisanych kolorów zbiór kolorów przypisanych jako wartości w słowniku defaultdict dla kluczów będących nazwami substancji
- zbiór grup implementacja słownika defaultdict przypisania kolejnym grupom (kolorom) wszystkich nazw substancji do nich należących w celu ładnego wyświetlenia i uprządowania otrzymanych danych

Przykładowe użycie programu:

Wejście programu - co musi podać użytkownik: nazwa substancji chemicznej [SPACJA] nazwa substancji z którą nie może sąsiadować [SPACJA] nazwa kolejnej substancji z którą nie może sąsiadować [SPACJA] (i tak dalej)

Kolejne podawane substancje których nie mogą sąsiadować podajemy rozdzielane są średnikiem ";"

Przykładowe polecenie:

input_testowy = "amoniak cyjanek kadm ; kadm rtęć ołów ; formalina rtęć nikotyna jod strychnina ; nikotyna jod brom\n"

graf = Graf_substancji(input_testowy)

#graf.Narysuj_graf() (należy odkomentować w celu narysowania grafu)

graf.Kolorowanie grafu()

Zapis ten oznacza że amoniak nie może sąsiadować z cyjankiem i kadmem, kadm z rtęcią i ołowiem, formalina z rtęcią, nikotyną, jodem i strychniną, a nikotyna z jodem i bromem

Otrzymane dane służą do stworzenia grafu o V wierzchołkach, każdy wierzchołek ma przypisaną listę sąsiedztwa Ai, i = 0, 1, 2, ..., n gdzie n + 1 to liczba wszystkich wierzchołków -> implementacja słownikowa

zbiór C wszystkich dostępnych kolorów jest tworzony automatycznie, bez kontroli użytkownika, ponieważ zakładamy zgodnie z tw. 10 z wykładu że graf prosty o największym stopniu wierzchołka S jest (S + 1) - kolorowalny; i taki rozmiarowo zbiór dostępnych kolorów (w postaci liczbowej) tworzymy. Dzięki temu mamy na pewno tylko kolorów żeby nam ich starczyło, chociaż oczywiście możliwe że ich wszystkich nie wykorzystamy.

Co zwrócił program:

Graf jest 5 - kolorowalny. Podział substancji nie mogących ze sobą sąsiadować na 5 grup (kolorów) tak by można było je bezpiecznie składować:

```
grupa 0 ['amoniak', 'rtęć', 'brom']
grupa 1 ['cyjanek', 'ołów', 'formalina']
grupa 2 ['kadm', 'nikotyna']
grupa 3 ['jod']
grupa 4 ['strychnina']
```

Możliwe że znalezione rozwiązanie przypisania grup/kolorów nazwom substancji nie jest optymalne czy najlepsze, ale jest poprawne.