

**GRAFOVI  
OPTIMIZACIJA  
HEMIJA  
RAČUNARSTVO**

**Zapisi o radu jednog naučnog projekta**

Urednici:

D. Cvetković, T. Davidović, I. Gutman, V. Kovačević–Vujčić

*Akadska misao*

Beograd, 2012.

D. Cvetković, T. Davidović, I. Gutman, V. Kovačević-Vujčić

**GRAFOVI, OPTIMIZACIJA, HEMIJA, RAČUNARSTVO**  
**-Zapisi o radu jednog naučnog projekta-**

Izdaje i štampa  
AKADEMSKA MISAO, Beograd

Tiraž  
150 primeraka

ISBN 978-86-7466-447-6

# **GRAFOVI, OPTIMIZACIJA, HEMIJA, RAČUNARSTVO:**

**Zapisi o radu jednog naučnog projekta**



# Sadržaj

<b>Predgovor</b>	<b>vii</b>
<b>1. Projekti 144015G i 174033</b>	<b>1</b>
1.1. Predistorija . . . . .	2
1.2. Obrazloženje projekta 144015G . . . . .	4
1.3. Obrazloženje projekta 174033 . . . . .	6
1.4. Učesnici . . . . .	13
1.5. Recenzije predloga projekta . . . . .	17
1.6. Sajt projekta . . . . .	28
<b>2. Jubileji</b>	<b>29</b>
2.1. Akademik Dragoš Cvetković . . . . .	30
2.2. Akademik Ivan Gutman . . . . .	31
2.2.1. Dopuna biografije . . . . .	31
2.2.2. Dopuna spiska naučnih radova . . . . .	32
2.2.3. Pismo akademika Ivana Gutmana povodom njegovog statusa na projektu . . . . .	39
2.3. Slobodan K. Simić . . . . .	41
2.3.1. Dopuna biografije . . . . .	41
2.3.2. Dopuna spiska knjiga . . . . .	41
2.3.3. Dopuna spiska naučnih radova . . . . .	41
2.4. Vera Kovačević-Vujčić . . . . .	46
2.4.1. Dopuna biografije . . . . .	46
2.4.2. Dopuna spiska objavljenih radova . . . . .	46
2.5. Miroslav Petrović . . . . .	49
2.5.1. Dopuna biografije . . . . .	49
2.5.2. Dopuna spiska naučnih radova . . . . .	49
2.6. Mirjana Čangalović . . . . .	50
2.6.1. Biografija . . . . .	50
2.6.2. Spisak knjiga . . . . .	52
2.6.3. Spisak naučnih radova . . . . .	53

---

<b>3. Inostrani učesnici projekta</b>	<b>61</b>
3.1. Willem H. Haemers . . . . .	62
3.1.1. Biography . . . . .	62
3.1.2. Publications . . . . .	63
3.1.3. Editorial . . . . .	70
3.2. Alain Hertz . . . . .	72
3.2.1. Biography . . . . .	72
3.2.2. Selected bibliography . . . . .	75
3.3. Nicolas Trotignon . . . . .	79
3.3.1. Biography . . . . .	79
3.3.2. Articles in journals . . . . .	79
<b>4. Rad sa mladim istraživačima</b>	<b>83</b>
4.1. Doktorske disertacije 2008 - 2012 . . . . .	84
4.2. Program za doktorante sa projekta . . . . .	86
4.3. Doktorski kursevi iz oblasti algoritama, kombinatorike i op- timizacije . . . . .	88
4.3.1. Motivacija . . . . .	88
4.3.2. Opis kurseva . . . . .	89
4.4. Intenzivni doktorski kurs za spektralnu teoriju grafova i primene	94
4.5. Aleksandar Ilić . . . . .	95
4.5.1. Biografija . . . . .	95
4.5.2. Spisak radova . . . . .	97
<b>5. Specijalni rezultati rada projekta</b>	<b>103</b>
5.1. Međunarodna saradnja . . . . .	104
5.2. Organizacija naučnih skupova . . . . .	112
5.3. Editorski rad . . . . .	116
<b>6. Odabrani rezultati članova projekta</b>	<b>121</b>

# P R E D G O V O R

Urednici ove knjige, učesnici naučnog projekta “*Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i računarstvu*”, procenili su da je u ovom trenutku svrsishodno da budu zabeležene neke pažnje vredne stručne aktivnosti projekta i pojedinaca u projektu. Ovom knjigom se dopunjuje materijal o projektu objavljen u knjizi:

*Grafovi, optimizacija, hemija: Zapisi o radu jednog naučnog projekta*, Cvetković D., Gutman I., Kovačević-Vujčić V. (redaktori), Akademska misao, Beograd, 2007.

Naš projekat predstavlja istraživački projekat iz oblasti matematike i finansira se od strane Ministarstva za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije. U njemu učestvuje 28 istraživača sa više fakulteta i instituta iz Beograda, Kragujevca i Niša. Koordinator projekta je Matematički institut SANU u Beogradu, a rukovodilac je naučni savetnik Slobodan Simić. Osnovne informacije o našem projektu mogu se naći u poglavlju “*Projekti 144015G i 174033*”.

Kao što se vidi iz spiska učesnika, u radu projekta učestvuju i mladi istraživači. Međutim, znatan prostor u knjizi posvećen je nekim od istraživača sa dugogodišnjim istraživačkim iskustvom i bogatim radnim rezultatima. Čitalac može da nađe njihove biografije, spiskove objavljenih naučnih radova i knjiga kao i druge informacije za koje smo smatrali da vrede da budu zabeležene.

Pravilima konkursa za naučne projekte u periodu 2011-2014. predviđena je mogućnost da projekti imaju inostrane članove. Projekat 174033 ima tri inostrana člana: W. Haemers, A. Hertz i N. Trotignon. Koristimo priliku da i njih ovde predstavimo.

Bitna komponenta uspešnosti svakog naučnog projekta je saradnja sa inostranim kolegama i naučnim institucijama. U ovoj knjizi daju se podaci o međunarodnoj saradnji učesnika našeg projekta.

Učesnici projekta su značajno angažovani u izdavanju naučnih časopisa. Zbog toga je jedan odeljak knjige posvećen prezentaciji takvih aktivnosti, a

posebno je opisano učešće članova našeg projekta u objavljivanju časopisa *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, Applicable Analysis and Discrete Mathematics, Filomat* i *Publ. inst. Math. (Beograd)*, koji se u ovom momentu nalaze na SCI odnosno SCIE listi.

Knjiga sadrži i druge tekstove, što se može videti u sadržaju.

Urednici su nastojali da se u knjigu uključe sve važnije činjenice o radu projekta. Tekstove za knjigu je pripremilo više članova projekta pri čemu je samo za neke od tekstova naznačeno autorstvo. Urednici su se trudili da u izvesnoj meri ujednače tekstove po tehničkim karakteristikama i da izbegnu ponavljanja.

Urednici izražavaju zahvalnost diplomiranom inženjeru Mariji Milojević koja je radila na tehničkoj pripremi knjige.

Beograd, novembra 2012.

Urednici knjige:

Akademik Dragoš Cvetković

Tatjana Davidović, viši naučni saradnik

Akademik Ivan Gutman

Profesor Vera Kovačević–Vujčić



# 1. Projekti 144015G i 174033

Tema ove knjige je rad projekta “*Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i računarstvu*”, koji se vodi pod evidencionim brojem 174033 i njegovog prethodnika sa sličnim imenom, a evidencionim brojem 144015G. Rad projekta se odvijao u periodu 2011-2012. a predviđeno je da projekat nastavi sa radom do 2014. godine. Projekat 144015G bio je finansiran od strane Ministarstva u periodu 2006-2010. U ovoj knjizi predstavljamo rad ovog projekta u periodu 2008-2010, dok je period 2006-2007. obrađen u knizi “*Grafovi, optimizacija, hemija*”.

U ovom delu knjige navodimo motive za formiranje projekta ovog tipa, opisujemo sadržaj istraživanja, dajemo spisak učesnika i ostale podatke relevantne za projekat.

U nastavku knjige, rezultati rada projekta dokumentovani su obimnim bibliografijama objavljenih naučnih radova i knjiga, kao i drugim materijalima. Međutim, detaljan stručni opis dobijenih matematičkih rezultata nije uključen u ovu knjigu.

## 1.1. Predistorija

Matematički institut SANU u Beogradu je u periodu 2002–2005. bio koordinator rada 13 projekata iz programa osnovnih istraživanja Ministarstva nauke Republike Srbije<sup>1</sup>. Među njima bio je i projekat br. 1389 "Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i transportu" kojim je rukovodio akademik Dragoš Cvetković.

Projekat su prilikom prijave na konkurs Ministarstva 2001. godine koncipirali akademik Dragoš Cvetković i profesor Vera Kovačević–Vujčić. Oni su procenili da je plodotvorno ujediniti u jednom projektu grupu istraživača koja se bavi teorijom grafova i grupu istraživača koja radi u oblasti optimizacije imajući u vidu niz okolnosti:

1. Istraživanja u oblasti teorije spektara grafova su imala već višedecenijsku tradiciju u Srbiji što se ogleda, na primer, u činjenici da je monografija [1] već davno postala standardna referenca za ovu oblast.
2. Delatnost akademika Ivana Gutmana na polju primene spektara i drugih grafovskih invarijanti u hemiji davala je već dugi niz godina dobre i brojne rezultate. U vreme prijave projekta bio je zapažen pregledni rad [2] o energiji grafa, jednoj spektralnoj invarijanti koja će narednih godina privući veliku pažnju matematičara širom sveta.
3. Postojala su zajednička istraživanja dve grupe istraživača i u ranijem periodu. Na primer, objavljena je monografija [3] o kombinatornoj optimizaciji koja se pokazala kao dodirna naučna oblast za dve grupe. Posebno se imalo u vidu da je u radu [4] došlo do markantne primene teorije spektara grafova u kombinatornoj optimizaciji: formulisan je novi model poznatog problema trgovačkog putnika u kome je jedan algebarski uslov u vezi druge najmanje sopstvene vrednosti Laplace-ove matrice grafa zamenio veliki broj linearnih ograničenja u standardnim modelima problema.
4. Profesor Slobodan Guberinić je objavio monografiju [5] u kojoj opisuje interesantne mogućnosti primene teorije grafova, specijalno bojenja grafova, u transportu.

---

<sup>1</sup>Ministarstvo za nauku Republike Srbije često je menjalo naziv, pa se u okviru knjige navodi pod raznim imenima, a ponekad i samo kao Ministarstvo.

## Reference

- [1] Cvetković D., Doob M., Sachs H., *Spectra of graphs - Theory and applications*, III revised and enlarged edition, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg – Leipzig, 1995.
- [2] Gutman, I., The energy of a graph: Old and new results, in: Betten, A., Kohnert, A., Laue, R., Wassermann, A., (eds.), *Algebraic Combinatorics and Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 2001, 196-211.
- [3] Cvetković, D., Čangalović, M., Dugošija, Đ., Kovačević-Vučjić, V., Simić, S., Vuleta, J., red. Cvetković, D., Kovačević-Vučjić, V., *Kombinatorska optimizacija, Matematička teorija i algoritmi*, Društvo operacionih istraživača Jugoslavije, Beograd, 1996.
- [4] Cvetković D., Čangalović M., Kovačević-Vučjić V., *Semidefinite programming methods for the symmetric traveling salesman problem*, Integer Programming and Combinatorial Optimization, Proc. 7th Int. IPCO Conf., Graz, Austria, June 1999, eds. Cornuejols, G., Burkard, R. E., Woeginger, G. J., Lecture Notes Comp. Sci. 1610, Springer, Berlin, 1999, 126-136.
- [5] Guberinić, S., *Optimalno upravljanje saobraćajem – Signalisana raskrsnica*, Društvo operacionih istraživača Jugoslavije, 2001, Beograd, XII+366.

Ovaj projekat nastavio je sa radom kao projekat br. 144015G pod nazivom "Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i tehničkim naukama", a sa istom koordinirajućom naučnom ustanovom, i u narednom projektnom ciklusu (2006–2010). Rukovodilac projekta bio je akademik Dragoš Cvetković.

Godine 2011. počeo je sa radom projekat 174033 "Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i računarstvu". Rukovodilac projekta je naučni savetnik Slobodan Simić.

Sledeća dva odeljka sadrže opis projekata 144015G i 174033.

## 1.2. Obrazloženje projekta 144015G

### Rezime

Predmet istraživanja su odabrane teme iz teorije grafova i matematičkog programiranja i neke njihove dodirne oblasti. Teorija grafova spada u prioritetne teme diskretne matematike, a matematičko programiranje u prioritetne teme numeričke matematike (operaciona istraživanja i optimizacija). Značajan deo istraživanja biće posvećen teoriji spektara grafova, linearnom i semidefinitnom programiranju. Objedinjujuća disciplina za teoriju grafova i matematičko programiranje je kombinatorna optimizacija u kojoj će pažnja biti posvećena interakcijama teorije spektara grafova i semidefinitnog programiranja. Obrađivaće se primene grafova i njihovih spektara u matematičkoj hemiji, računarstvu i drugim tehničkim disciplinama.

### Predmet, opis i značaj istraživanja

Istraživanja iz oblasti teorije spektara grafova uključivala bi sledeću tematiku:

1. Ekstremalni problemi sa najvećom sopstvenom vrednošću grafa,
2. Grafovi sa ograničenom drugom sopstvenom vrednošću,
3. Grafovi sa najmanjom sopstvenom vrednošću  $-2$ ,
4. Grafovi sa celobrojnim spektrom,
5. Proučavanje sopstvenih potprostora grafova, a posebno uglova grafova,
6. Tehnika zvezdanih komplemenata,
7. Hereditarne spektralne osobine grafova,
8. Proučavanje grafovskih invarijanti koje se koriste za opisivanje fizičko-hemijskih karakteristika organskih jedinjenja,
9. Proučavanje energije grafa i srodnih grafovskih invarijanti,
10. Istraživanja u teoriji grafova u vezi sa rastojanjem u grafu, Laplasovim i običnim spektrom grafova,
11. Spektralne osobine fulerena,
12. Razvoj i korišćenje odgovarajućeg softvera (paket newGRAPH).

Iz oblasti matematičkog programiranja planira se rad na sledećim problemima:

1. Numerička nestabilnost unutrašnjih metoda za linearno programiranje i implementacija stabilizacionih postupaka,
2. Egzaktne i heurističke metode za globalnu optimizaciju,
3. Unutrašnje metode za semidefinitno programiranje,
4. Stabilizacija metode težinskih najmanjih kvadrata.

U oblasti kombinatorne optimizacije posebna pažnja biće posvećena problemu trgovačkog putnika zbog njegove interesantnosti u teorijskim istraživanjima (nalazi se na listi 10 najpoznatijih nerešenih problema matematike) i značaja u primenama. Obrađivaće se posebno semidefinitna relaksacija problema trgovačkog putnika i metode grananja, ograničavanja i odsecanja zasnovane na semidefinitnoj relaksaciji. Metode grananja, ograničavanja i odsecanja biće primenjene i u transportu pri tretiranju optimizacije upravljanja saobraćajem na signalisanim raskrsnicama. Značajna pažnja će se posvetiti metaheuristikama, a posebno metodi promenljivih okolina i genetskim algoritmima kao i primenama metaheuristika i spektralnih tehnika na probleme paralelizacije računarskih procesa.

Koristiće se dekompozicione teoreme za grafove u cilju dobijanja polinomijalnih algoritama za nalaženje dimenzije najveće klike ili stabilnog skupa ili za određivanje hromatskog broja grafa. Iako su ovi problemi NP-kompletni u opštem slučaju, dokazano je, na primer, za perfektne grafove da se oni mogu rešiti u polinomijalnom vremenu uz korišćenje elipsoidnog algoritma. Od interesa je da se ispita da li se ovi optimizacioni problemi za perfektne grafove mogu rešiti pravim kombinatornim algoritmima u polinomijalnom vremenu.

Planirana istraživanja predstavljaju prirodan nastavak uspešnih više-decenijskih istraživanja i međunarodne saradnje. Specijalno, delatnost ove grupe istraživača bila je objedinjena u periodu 2001–2005. u okviru projekta osnovnih istraživanja br. 1389, "Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i transportu" koji je bio finansiran od strane odgovarajućeg ministarstva Republike Srbije. Očekuje se uspešan nastavak objavljivanja naučnih monografija u inostranstvu, organizovanja međunarodnih skupova, predavanja po pozivu na međunarodnim skupovima, studentskih boravaka u inostranstvu po pozivu i drugih aktivnosti, dobrim delom finansijski pokrivenih od stranih partnera.

## Planirani rezultati rada projekta

Sva planirana istraživanja imaju originalan karakter, što će biti verifikovano objavljivanjem u odgovarajućim uglednim publikacijama uključujući naučne monografije kod renomiranih inostranih izdavača. Glavni cilj je publikovanje većeg broja kvalitetnih radova i izvesnog broja monografija. Očekuje se da se time održi visoka međunarodna pozicija grupe istraživača koja se bavi teorijom spektara grafova i primenama u matematičkoj hemiji. Potvrdiće se visok kvalitet istraživanja iz matematičkog programiranja. Negovaće se međunarodna saradnja uključivanjem inostranih koautora u obradu pojedinih tema. Vodiće se računa o primenljivosti rezultata čemu će doprineti razvoj algoritama i pratećeg softvera.

## 1.3. Obrazloženje projekta 174033

### Rezime

Predmet istraživanja su odabrane teme iz teorije grafova i matematičkog programiranja i neke njihove dodirne oblasti. Značajan deo istraživanja biće posvećen teoriji spektara grafova, strukturnoj teoriji grafova, nelinearnom programiranju i globalnoj optimizaciji. Objedinjujuća disciplina za teoriju grafova i matematičko programiranje je kombinatorna optimizacija u kojoj će pažnja biti posvećena interakcijama teorije spektara grafova i semidefinitnog programiranja. Obrađivaće se primene grafova i njihovih spektara u matematičkoj hemiji, računarstvu i drugim tehničkim disciplinama. Primene u hemiji uključuju proučavanje matematičkih osobina molekulskih strukturnih deskriptora, naročito onih zasnovanih na spektrima i metrici grafova. Primene u računarstvu odnose se na strukturu i pretraživanje interneta, multiprocesorske mreže i kvantno računarstvo. U svim oblastima značajna pažnja se posvećuje konstrukciji algoritama i proučavanju njihove kompleksnosti. U istraživanjima značajnu ulogu igra razvoj i korišćenje specijalizovanog softvera tako da projekat ima teorijsko–eksperimentalne karakteristike. Projekat ima oko 30 istraživača i predstavlja nastavak sličnih naučnih projekata iz nekoliko prethodnih decenija. Značajna pažnja posvećuje se radu sa doktorskim studentima kojih ima jedanaest<sup>2</sup> u timu istraživača.

Ključne reči: teorija grafova, matematičko programiranje, spektri grafova, teorijska hemija, računarstvo

---

<sup>2</sup>Ovo je stanje u vreme prijave projekta, tj. krajem 2010. godine.

## Opis istraživanja

Planirana istraživanja predstavljaju prirodan nastavak uspešnih više-decenijskih istraživanja i međunarodne saradnje. Specijalno, delatnost ove grupe istraživača je bila objedinjena u periodu 2001–2005. u okviru projekta osnovnih istraživanja br. 1389, "Teorija grafova i matematičko programiranje sa primenama u hemiji i transportu" koji je bio finansiran od strane odgovarajućeg ministarstva Republike Srbije. U periodu 2006–2010. istraživanja su nastavljena u okviru projekta osnovnih istraživanja br. 144015G, "Teorija grafova i matematičko programiranje u hemiji i tehničkim naukama" (<http://www.mi.sanu.ac.rs/projects/project144015.htm>)

Naša istraživačka grupa je u prošlosti objavila i sledeće monografije na kojima se u dobroj meri zasnivaju i današnja istraživanja:

- Cvetković D., Doob M., Gutman I., Torgašev A., *Recent Results in the Theory of Graph Spectra*, North-Holland, Amsterdam, 1988.
- Cvetković D., Doob M., Sachs H., *Spectra of Graphs, Theory and Application*, 3rd edition, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg–Leipzig, 1995.
- Cvetković D., Rowlinson P., Simić S. K., *Eigenspaces of Graphs*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- Cvetković D., Rowlinson P., Simić S., *Spectral generalizations of line graphs: On graphs with least eigenvalue  $-2$* , Cambridge University Press, Cambridge, 2004.

U okviru rada projekta obrađivaće se sledeće istraživačke oblasti (pot-projekti) koje se međusobno prepliću:

1. Spektralna teorija grafova (rukovodilac S. Simić),
2. Hemijska teorija grafova (rukovodilac I. Gutman),
3. Matematičko programiranje (rukovodilac V. Vujčić),
4. Strukturna teorija grafova i algoritmi (rukovodilac K. Vušković),
5. Spektri grafova u računarstvu (rukovodilac D. Stevanović).