**Наставно-научном већу**
**Математичког факултета**
**Универзитета у Београду**

Одлуком Наставно–научног већа Математичког факултета у Београду донетом на седници одржаној 14.2.2014. именовани смо у комисију за преглед и оцену рукописа ***Спектрално препознавање графова и мрежа,*** који је предат као докторска дисертација кандидата **Ирене Јовановић**. Након прегледа рукописа подносимо следећи

# И З В Е Ш Т А Ј

## 1 Биографија кандидата

Ирена Јовановић је рођена у Краљеву 1981. године, где је као носилац Вукове дипломе завршила основну школу, а потом са одличним успехом и гимназију природно-математичког усмерења. Математички факултет Универзитета у Београду, одсек за нумеричку математику и оптимизацију, уписала је 2000. године, а звање дипломирани математичар стекла 2006. године. Годину дана касније, на истом одсеку, одбранила је мастер тезу под називом *Једначина провођења топлоте са концентрисаним капацитетом*. Докторске студије на Математичком факултету у Београду уписала је 2009. године.

Кандидаткиња је до 2008. године обављала послове *SQL developer*-а у *Fadata, doo.*, одељење у Србији, а потом је као тестни инжењер радила на пројектима за мобилну телефонију Србије у *DIV Inženjering*, Србија у сарадњи са *Sitronics, CZ Republic*. Тренутно је запослена на Рачунарском факултету Универзитета Унион у Београду. У звању асистента на Рачунарском факултету држала је вежбе из следећих курсева: *Линеарна алгебра, Дискретна математика 1 и 2, Математичка анализа, Вероватноћа и статистика, Теорија алгоритама, језика и аутомата и Напредна математичка анализа.* Редовно учествује у припреми пријемног испита на овом факултету, као и на одржавању припремне наставе за полагање истог из математике и информатике.

## 2 Тема и садржај рукописа

Тема рукописа припада спектралној теорији графова. Спектрална теорија графова је математичка теорија која графове проучава помоћу сопствених вредности и сопствених вектора матрица које су им придружене, и последњих деценија бележи интензиван и континуиран развој.

Није могуће утврдити када су тачно људи почели да користе дијаграме, које данас називамо графовима, за сликовит опис проблема, али је извесно да их сусрећемо у разним научним дисциплинама. Главни разлог бројних примена се пре свега налази у јасној геометријској поруци коју граф садржи. Међутим, моделовање великих структура, као што су друштвене мреже или интернет, уз помоћ графова резултира непрегледним и несугестивним цртежима из којих није могуће добити неке корисне информације. Уз то, бројни примери коспектралних графова, побијају хипотезу о карактеризацији графа помоћу спектра постављену у зачетку развоја спектралне теорије графова, и стога питање о генералној ефикасности спектралне теорије графова остаје отворено. Због тога се природно намећу проблеми *спектралног препознавања графова*, који подразумевају препознавање графова у целини или неких њихових делова, било на тачан или приближан начин. У проблеме спектралног препознавања графова убрајамо: карактеризацију графа са датим спектром, тачну или приближну конструкцију графа са задатим спектром, сличност графова и графовске пертурбације.

Проблеми спектралног препознавања су од значаја у математици, али је посебно важна њихова примена у рачунарству. У рукопису су разматрани проблем сличности графова, као и проблем карактеризације диграфа са задатим спектром. У зависности од тога да ли су поредбени графови са истим или различитим бројем чворова, сличност графова се установљава разматрањем њиховог спектралног растојања, односно израчунавањем мера сличности које су придружене чворовима графа, а које могу и не морају да буду спектрално засноване.

Рукопис се састоји из четири поглавља, списка литературе и три додатка (прилога), укупног обима IX+155 страница.

Прво поглавље је уводног карактера, и садржи преглед основних појмова, дефиниција и постојећих резултата спектралне теорије графова који се користе у наредним поглављима рукописа. Укратко је описана мотивација за отварање истраживања ове врсте.

У другом Поглављу је разматран проблем сличности графова истог реда. Сличност графова са једнаким бројем чворова испитује се израчунавањем спектралних растојања између њих. *Спектрално растојање* између два графа истог реда јесте Еуклидово, Менхетн, или неко друго растојање између низова њихових сопствених вредности, у односу на матрицу која је графовима придружена. У рукопису је разматрано Менхетн спектрално растојање графова у односу на матрицу суседства, Лапласову матрицу и ненегативну Лапласову матрицу. Уколико су два графа на растојању једнаком нула, то неопходно не значи да су изоморфни, већ такве графове сматрамо коспектралним, па спектрално растојање можемо да сматрамо мером сличности између графова истог реда. У том смислу, графови су *слични* ако је њихово спектрално растојање мало.

У Одељцима 2.2 и 2.3 другог Поглавља изложени су резултати општег карактера, који подразумевају релације којима се описује повезаност спектралног растојања са енергијом графа, релације за нека горња ограничења спектралног растојања, релације којима се карактерише однос спектралних растојања у односу на различите матрице - матрицу суседства, Лапласову матрицу и ненегативну Лапласову матрицу. Размотрена су спектрална растојања при неким графовским транформацијама, као што су уклањање чворова или грана графа, односно при извесним графовским операцијама, попут комплемента и НЕПС-а. У Одељку 2.4 је показано да спектрална растојања графова, у односу на произвољну матрицу, не зависе од њихових заједничких сопствених вредности. У Одељку 2.5 су израчуната спектрална растојања у односу на матрицу суседства графова који су најзаступљенији у литератури и чији је спектар познат. У Одељку 2.6 анализиране су хипотезе постављене за спектрално растојање графова у односу на матрицу суседства, и наведени контрапримери којима је једна од њих оповргнута. У Одељку 2.7 конструисано је седам фамилија графова истог реда специјално одређене структуре и међусобног односа. За графове представнике ових фамилија одређени су карактеристични полиноми, односно распоред сопствених вредности у монотоно уређеном спектру, на основу чега су израчуната спектрална растојања и процењени параметри који се на њих односе, у односу на све три, претходно споменуте матрице. Такође, израчуната су спектрална растојања у неким скуповима регуларних графова. Друго Поглавље је закључено идејним предлозима за модификацију интерактивног компјутерског програма *AutoGraphiX* на основу којих би се програмом третирали проблеми комбинаторне оптимизације који укључују два графа.

У Поглављу 3 разматран је проблем сличности графова различитог реда, заснован на израчунавању и поређењу мера сличности између њихових чворова. Поредбени графови у овом случају обично имају велики број чворова, и називају се *мрежама*, док се установљавање сличности између њих означава као *поравнавање мрежа*. Основне карактеристике и врсте мрежа, главни задатак у поравнавању мрежа, као и кратак приказ неких од најпопуларнијих алгоритама за глобално поравнавање, пре свега биолошких, мрежа дати су у Пододељцима 3.3.1 и 3.3.2. У Пододељку 3.3.3 дефинисана је нова мера сличности за чворове поредбених мрежа, а заснива се на разлици функција генератриса за бројеве разапињућих затворених шетњи у неизоморфним графлетима мрежа које се пореде. Бројеви разапињућих затворених шетњи у графлетима рачунати су према новопредложеној формули изложеној у Пододељку 3.2.2, а у чијој се основи налази принцип укључења-искључења. Формула је послужила за израчунавање броја затворених шетњи одређене дужине у изабраном чвору графа, и, на тај начин, за генерисање формула за бројеве затворених шетњи у одређеном чвору које су сличне постојећим формулама у којима су спектрални моменти изражени преко броја одређених подграфова разматраног графа. Поглавље је закључено анализом комплексности и теоријским поређењем постојећих и новопредложене мере сличности.

У четвртом поглављу разматране су спектрално-структуралне карактеристике диграфова у односу матрице $AA^T$, односно $A^TA$, где је A матрица суседства датог диграфа. Спектар диграфа у односу на ове матрице означен је као *ненегативни* или *N-спектар* диграфа. Наведене матрице придружене диграфу који моделује велике структуре података су под различитим називима још од раније присутне у литератури, а анализиране су у контексту проблема из домена рачунарских наука. Елементарни резултати који описују међусобну зависност промене N-спектра и структуре диграфа добијени по угледу на постојеће базичне резултате спектралне теорије (ди)графова изложени су у Одељцима 4.2 и 4.3. Дата је карактеризација матрице $AA^T$, односно $A^TA$, окарактерисани су повезани диграфови без парова чворова са заједничким предњим суседима и одређени су карактеристични полиноми неких диграфова представника ове фамилије диграфова. Одређен је N-спектрални радијус регуларног диграфа, а размотрен је и N-спектар диграфа при диграфовским трансформацијама, као што је уклањање гране или додавање висеће гране, и диграфовским операцијама попут комплемента и диграфа грана. У Одељку 4.4 уопштен је појам коспектралности мулти(ди)графова и за дате диграфове дефинисани су коспектрални (у односу на матрицу суседства) мултиграфови. Такође, дефинисане су нове диграфовске операције захваљујући којима су конструисани парови коспектралних диграфова и мултиграфова у односу на матрицу $AA^T$, односно $A^TA$ и ненегативну Лапласову матрицу, респективно.

Списак литературе састоји се од 95 библиографских јединица, од којих су њих осам самоцитати.

У Прилогу А дат је кратак опис компјутерског програма *SDCalc* који је написан у програмском језику C++, а намењен је израчунавању спектралних растојања између парова графова истог реда. Приказана је структура улазног фајла који представља резулатат покретања и извршавања скупа процедура *Nauty*, затим структура излазног фајла, а наведени су и делови кода који се односе на израчунавање и сортирање спектралних растојања.

У Прилогу В дат је табеларни приказ спектралних растојања графова малог реда израчунатих уз помоћ програма *SDCalc* у односу на матрицу суседства, Лапласову и ненегативну Лапласову матрицу. Сумирани су нумерички подаци који се односе на спектрална растојања свих графова до реда 8, спектрална растојања повезаних регуларних графова, повезаних бипартитних графова и стабала до реда 11, и напослетку нумерички подаци који карактеришу однос спектралног растојања и енергије графа у односу на Лапласову и ненегативну Лапласову матрицу за све графове до реда 8, повезане регуларне графове, повезане бипартитне графове и стабла до реда 11. Ови резултати су послужили за генерисање хипотеза наведних у Поглављу 2 рукописа.

У Прилогу С сумиране су формуле за бројеве разапињућих затворених шетњи у графлетима до реда пет. Израчунавања су вршена према формули за бројеве разапињућих затворених шетњи где је принцип укључења-искључења примењен на бројање затворених шетњи у графлетима разматраног графа, односно према формули за бројеве разапињућих затворених шетњи у чијој су основи бројеви разапињућих затворених шетњи у графлетима разматраног графа. Изложене су алгебарске формуле за бројеве разапињућих затворених шетњи у графлетима до реда четири. Наведени су и нумерички резултати за тежине графлета одређених типова који су коришћени при разматрању мера сличности чворова поредбених мрежа.

## 3 Научне методе које су коришћене

Теоријски резултати изложени у рукопису добијени су коришћењем алгебарског апарата теорије (ди)графова, линеарне алгебре и комбинаторним резоновањем.

Рукопис поред теоријских садржи и емпиријске резултате добијене приближним израчунавањем и коришћењем рачунара. Постојеће технике у програмирању и методе нумеричке анализе употребљене су при конструисању програма за израчунавање спектра и спектралних растојања графова. За одређивање графова и анализирање промена у њиховој структури и спектру коришћени су софтвери и експертски системи специјализовани за примене у спектралној теорији графова, пре свега *NewGraph* и *Nauty*. Формуле за бројеве разапињућих затворених шетњи у графлетима одређеног типа одређене су уз помоћ математичког софтвера *Wolfram Mathematica*.

## 4 Научни допринос кандидата

Кандидат је добио низ значајних резултата у вези са спектралним растојањем графова (Поглавље 2), поравнањем мрежа (Поглавље 3) и спектралним карактеризацијама диграфова (Поглавље 4).

Оригинални научни допринос аутора представљају следећи резултати:

**Поглавље 2**:

Тврђења 2.3.4, 2.3.8, 2.3.9 и 2.3.10 kоја карактеришу спектрално растојање графова при одређеним графовским операцијама, Леме 2.3.1 и 2.3.2, Последице 2.3.1 и 2.3.2, и Тврђење 2.3.2 у којима је описана промена спектралног растојања графова при неким графовским трансформацијама, Тврђења 2.2.1 и 2.3.3, Лема 2.3.3, и Тврђења 2.3.5, 2.3.6 и 2.3.7 где су дати резултати који се односе на спектрална растојања која укључују регуларне графове, Теорема 2.4.1, као и пратеће Тврђење 2.4.1, Последица 2.4.1 и Теорема 2.4.2, где је показано да спектрално растојање графова не зависи од њихових заједничких сопствених вредности, примери којима је побијена Хипотеза 2.6.1 о спектралном растојању два графа у односу на матрицу суседства, Тврђење 2.6.1 којим је показано да спектрално растојање у односу на Лапласову матрицу између два графа из скупа повезаних регуларних графова чије сопствене вредности у односу на матрицу суседства нису мање од -2 није веће од спектралног растојања контуре и комплетног графа у односу на Лапласову матрицу, Теореме 2.7.1-2.7.6 и Тврђења 2.7.1-2.7.3 у којима су одређени карактеристични полиноми, распоред сопствених вредности у спектру, израчуната спектрална растојања и оцењени параметри спектралног растојања графова из специјално конструисаних скупова графова, међу којима посебно издвајамо Теорему 2.7.3 чији је доказ базиран на функцији генератриси за бројеве затворених шетњи.

**Поглавље 3**:

Теорема 3.2.1 и Тврђење 3.2.1 и Додатак C којим су дате формуле за израчунавање броја разапињућих затворених шетњи одређене дужине у изабраном чвору графа (односно у кореном графу), Теорема 3.2.2 којом се одређује број затворених шетњи одређене дужине у изабраном чвору графа помоћу броја разапињућих затворених шетњи дате дужине у неизоморфним графлетима разматраног графа, Тврђење 3.2.2 за број контура одређене дужине у изабраном чвору графа у зависности од броја разапињућих затворених шетњи у графлетима одређеног типа, Теорема 3.3.1 којом је уведена нова мера сличности за чворове поредбених мрежа базирана на разлици функција генератриса за бројеве разапињућих затворених шетњи у неизоморфним графлетима разматраних мрежа, анализа комплексности прве фазе рада неких од постојећих и алгоритма који би се заснивао на новопредложеној мери сличности.

**Поглавље 4**:

Лема 4.2.3 којом се одређује ненегативни или N-спектрални радијус регуларног диграфа, Тврђења 4.2.2 и 4.2.3 којим се карактеришу повезани диграфови без парова чворова са заједничким предњим суседима, Тврђење 4.3.1 којим је одређен N-спектар комплемента регуларног диграфа, Теорема 4.3.1 којом се описује преплитање N-сопствених вредности диграфова, Теореме 4.3.2 и 4.3.3 у којима је дат N-карактеристични полином диграфа који је од датог диграфа добијен додавањем висеће гране, Тврђење 4.3.2 којим је одређен N-спектар диграфа грана регуларног диграфа, Теореме 4.4.1-4.4.5 које дају неопходне и довољне услове за егзистенцију мултиграфа који је Q-N-коспектралан са посебно одређеним диграфом (где је Q ненегативна Лапласова матрица).

Ту спадају такође рачунски резултати и формуле у **Додацима А**, **B** и **C**.

# 5 Референце које су генерисане у току рада на рукопису

Део резултата презентованих у рукопису објављен је у:

- два коауторска рада у часописима са SCI листе,
- једном коауторском раду у домаћем часопису,
- једном самосталном раду аутора у зборнику конференцијских радова,
- једном самосталном раду аутора прихваћеном за објављивање (УМ 13-338) у часопису са SCI листе.

Преостали резултати (два рукописа) упућени су часописима са SCI листе и у овом тренутку се налазе на рецензији. Списак поменутих и осталих радова кандидата налази се у прилогу овог извештаја.

## 6 Закључак

Рукопис ***Спектрално препознавање графова и мрежа*** садржи вредан научни допринос у области спектралне теорије графова. У њему су разматрани проблем сличности графова и проблем карактеризације диграфа са задатим спектром, који су део општијег проблема спектралног препознавања графова. За добијање презентованих резултата коришћен је алгебарски апарат спектралне теорије графова, линеарна алгебра и комбинаторно резоновање, а део резултата је добијен коришћењем рачунара. Рукопис је врло садржајан, а презентовани резултати се налазе у четири публикована рада, једном раду прихваћеном за публиковање и два рукописа која се налазе на рецензији у референтним часописима. Констатујемо да је реализована велика већина циљева наведених приликом предлагања теме уз добијање додатних резултата.

Имајући у виду наведено, предлажемо Наставно - научном већу Математичког факултета да **поменути рукопис прихвати као докторску дисертацију и одреди комисију за јавну одбрану.**

Београд, 28.9.2014.

Чланови комисије:

___________________________________

др Зоран Станић (ментор), доцент
Математичког факултета у Београду

___________________________________

академик Драгош Цветковић,
Математички институт САНУ

___________________________________

др Бошко Јовановић, редовни професор
Математичког факултета у Београду

## Додатак

### Д. 1 Мастер рад

Ирена М. Јовановић: *Једначина провођења топлоте са концентрисаним капацитетом,* одбрањен на Математичком факултету Универзитета у Београду 2007. године (ментор: проф. др Бошко Јовановић).

### Д. 2 Остали научни радови

[1] Jovanović I.M., *Some results on spectral distances of graphs*, у процесу рецензије.

[2] Jovanović I.M., *Non-negative spectrum of a digraph*, у процесу рецензије.

[3] Jovanović I.M., *Self-returning walks and graphlets*, прихваћен за публиковање у Utilitas Mathematica, UM 13-338.

[4] Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs based on their different matrix representations*, Filomat, 28 (2014), No. 4, 723-734.

[5] Cvetković D., Jovanović I.M, *Network alignment using self-returning walks*, Bull. Acad. Serbe Sci. Arts, Cl. Sci. Math. Natur., Sci. Math, 145 (2013), No. 38, 45-63.

[6] Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs*, Linear Algebra and its Appl. 436 (2012) 1425-1435.

[7] Jovanović I., *Network alignment algorithms*, Proc. XXXIX Symp. Operat. Res. SYMOPIS 2012, 225-228.

[8] Gegovska Zajkova S., Jovanović B., Jovanović I., *On the numerical solution of a Transmission Eigenvalue Problem*, Lect. Notes Comput. Sci. 5434, (2009), 289-296 (Zbl 1208.65129).

[9] Jovanović B., Jovanović I., *Heat equation with concentrated capacity and constant coefficients*, IPSI BgD Transactions on Advanced Research, 3 (2007), No 2, 26-29.

### Д. 3 Учешћа и саопштења на научним скуповима и семинарима

- Seminar for Computer Science and Applied Mathematics, Mathematical Institute of the Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, октобар 2013, *AutoGraphiX System – main characteristics and results*, аутор: Ирена М. Јовановић.
- Seminar for Computer Science and Applied Mathematics, Mathematical Institute of the Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, мај 2011, *Spectral distances of graphs*, аутор: Ирена М. Јовановић.
- Fourth Conference on Numerical Analysis and Applications, Lozenetz, Bulgaria, June 2008, *About a spectral problem containing Dirac distribution*, аутори: Бошко Јовановић, Ирена Јовановић.

## Д. 4 Учешћа на пројектима фундаменталних и интердисциплинарних истраживања Министарства Републике Србије

- Implementation of the European regulative in heating and cooling of buildings No. NPEE 283011, 2006—2007.
- Graph theory and mathematical programming with applications in chemistry and engineering, No. 144015G, 2010.
- Graph theory and mathematical programming with applications to chemistry and computer science, No. 174033, 2011—
- Nano-scale Opto-electronic Systems – Towards its application, No. III45003, 2011—

## Д. 5 Учешћа на математичким радионицама

- *Mathematical Modelling Week*, TEMPUS project, Faculty of Mathematics, University of Novi Sad, Serbia, 2005.
- TEMPUS project **–** OTIMIZATION, *SEE Doctoral Studies in Mathematical Sciences, 2009-2011,* Faculty of Mathematics, University of Belgrade, Serbia, 2011.
- *Graph Spectra and Applications*, DAAD Project, Center of Excellence for Applications of Mathematics, Faculty of Science and Mathematics, University of Niš, Serbia, 2012.
- The 99$^{th}$ *European Study Group with Industry*, Department of Mathematics and Informatics, Faculty of Sciences, Novi Sad, 2014.
- The European Summer School for Visual Mathematics and Education in the TEMPUS project Visuality & Mathematics: Experiential Education of Mathematics through Visual Arts, Sciences and Playful Activities, Metropolitan University, Belgrade, 2014.