УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Томица Дивнић

НЕКИ РЕЗУЛТАТИ О ЕКСТРЕМНИМ ВРЕДНОСТИМА РАНДИЋЕВОГ ИНДЕКСА НА ГРАФОВИМА

Докторска дисертација

Крагујевац, 2013.

ИДЕНТИФИКАЦИОНА СТРАНИЦА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Аутор
Име и презиме: Томица Дивнић
Датум и место рођења: 01. 01. 1969. Обреж
Садашње запослење: Професор у Средњој школи у Варварину
Докторска дисертација
Наслов: Неки резултати о екстремним вредностима Рандићевог индекса на графовима
Број страница: 104
Број слика: 36
Број библиографских података: 37
Установа и место где је рад израђен: Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
Научна област (УДК): Математика - комбинаторна оптимизација (51)
Ментор: Др Љиљана Павловић
Оцена и одбрана
Датум пријаве теме: 27.07.2011.
Број одлуке и датум прихватања докторске дисертације: 890/ II-1, 16.11.2011.
Комисија за оцену подобности теме и кандидата: Др Љиљана Павловић - ванредни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу Др Вера Ковачевић-Вујчић - редовни професор Факултета организационих наука у Београду Др Мирослав Петровић - редовни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу
Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације: Др Љиљана Павловић - ванредни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу Др Вера Ковачевић-Вујчић - редовни професор Факултета организационих наука у Београду Др Мирослав Петровић - редовни професор Државног универзитета у Новом Пазару
Датум одбране дисертације:

Предговор

Ова докторска дисертација је проистекла као резултат вишегодишње сарадње и рада под менторством др Љиљане Павловић, ванредног професора на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу.

Тема која се обрађује у докторској дисертацији, одређивање екстремних вредности Рандићевог индекса на простим графовима, је посебно интересантна и значајна јер проистиче из практичне потребе изучавања структуре молекула. Касније и само њено изучавање повезује је са другим математичким појмовима на графовима - матрицама. Оно на шта читалац треба посебно да обрати пажњу је то да се како до истих тако и до нових резултата долази на различите начине, различитим методама, што омогућава бољу повезаност математичких појмова и омогућава добијање још нових резултата.

Увек благовремено и кооперативно мишљење од стране ментора дало ми је посебан подстрек, жељу и амбицију да истрајем у истраживачком раду. Зато, овом приликом, највећу захвалност изказујем професорки др Љиљани Павловић. Такође, велику захвалност исказујем и многим члановима Института за математику и информатику Природно-математичког факултета у Крагујевцу на подршци и помоћи. Захваљујем се и академику Ивану Гутману који је први држао предавања на ПМФ-у у Крагујевцу на тему о Рандићевом индексу, те је тако мотивисао друге колеге и мене да се бавимо овом проблематиком.

Посебну подршку и несумњиво поверење сам добијао од своје породице, својих пријатеља и колега. Тим поводом им најсрдачније захваљујем.

Крагујевац, јануар 2013. Томица Дивнић

Ову докторску дисертацију посвећујем ђацима моје школе, Средње школе у Варварину, са жељом да им буде инспирација и тежња ка сличним циљевима.

Порука: Математику чини скуп појмова (дефиниција, чињеница) и скуп тврђења (веза међу појмовима). Често се питамо: *како се решава задатак из математике?* Прво треба да знамо: ако је задатак (проблем) постављен, *то постоји начин да се он реши!* Али како?

Задатак читамо пажљиво (полако) тако да сваку реч (свако слово) схватимо у потпуном значењу. Разликујемо дате податке од задатог циља. Анализирамо дате податке и све што о њима знамо и са њима можемо да радимо. Када добро схватимо шта се у задатку даје и шта све то шире значи, усредсредимо се на циљ задатка - крајњи резултат. Често и крајњи резултат треба анализирати и посматрати га у неком лакшем препознатљивијем облику. Задатак решавамо тако што помоћу датих података и неких других општих тврђења (којих се у датом моменту треба сетити) пишемо логички очигледан след еквивалентних закључака.

На крају још једном (или више пута) проверимо исправност решења.

Томица Дивнић

Садржај

Предговор **1**

1 Увод **6**

2 Општи део - основни појмови, дефиниције и преглед резултата **10**
- 2.1 Графови - основни појмови и дефиниције 10
- 2.2 Дефиниција Рандићевог индекса и преглед резултата 12
- 2.3 Основни појмови конвексне анализе и математичког програмирања 14

3 Математички модели и методе **18**
- 3.1 Математички модели 18
- 3.2 Математичке методе 22
  - 3.2.1 Одређивање минималне вредности Рандићевог индекса применом методе линеарног програмирања 23
  - 3.2.2 Одређивање минималне вредности Рандићевог индекса применом квадратног програмирања 25

4 Максимална вредност Рандићевог индекса **34**

5 Минимална вредност Рандићевог индекса за $k \geq \frac{n}{2}$ **37**
- 5.1 Хипотезе и опис проблема 37
- 5.2 Први случај: $n \equiv 0(mod\, 4)$, или $n \equiv 2(mod\, 4)$ и k непарно 41
- 5.3 Други случај: n је непаран број 45
- 5.4 Трећи случај: $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број 50

6 Минимална вредност Рандићевог индекса за $k \leq \frac{n}{2}$ **56**

7 Уопштења неких резултата о екстремним вредностима Рандићевог индекса на графовима **67**
- 7.1 Уопштења резултата у случају када је $k \geq \frac{n}{2}$ 68
- 7.2 Случај када су k, m и n непарни бројеви 73
  - 7.2.1 Максимална вредност функције γ_1 када је $n_p = 1$ 78
  - 7.2.2 Максимална вредност функције γ_2 85
  - 7.2.3 Горња граница функције γ_1 када је $n_p \geq 2$ 87
  - 7.2.4 Докази теорема 89

7.3 Уопштења резултата у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$ 96

Додатак **98**

Литература **100**

Биографија **103**

Глава 1

Увод

Налажење најбољег, оптималног решења у било којој ситуацији је свакодневни циљ сваке особе без обзира чиме се бави. Област математике која се бави проблемима оптимизације, под одређеним условима, назива се *математичко програмирање*. Проблем математичког програмирања је, у најкраћим цртама, одређивање тачке у неком векторском простору која задовољава нека ограничења, а у којој дата функција постиже екстремну вредност. Једна од подобласти математичког програмирања је дискретно програмирање односно комбинаторна оптимизација. У комбинаторној оптимизацији тражи се екстремна вредност неке функције дефинисане на коначном или пребројиво бесконачном скупу. Као посебно важни делови комбинаторне оптимизације су целобројно програмирање и оптимизација на графовима. Тема ове дисертације је управо један проблем оптимизације на графовима, то јест одређивање екстремних вредности Рандићевог индекса на простим графовима. Прости графови су графови без двоструких грана, без петљи и без усмерених грана.

Граф, као модел распореда елемената неког скупа и постојећих веза између њих, је незаобилазан појам у свим областима људског истраживања. О томе говоре многи научни радови, монографије, књиге и друго. Било који молекул се може представити помоћу графа. Управо, изучавајући молекуле алкана, Milan Randić схвата везу између неких физичко-хемијских особина и саме структуре молекула, односно веза у њима. Посматрано шире, структура графова је описивана на више начина (нпр. појмом просечна даљина, хроматским бројем и друго), а посебну карактеристику структуре даје такозвани Рандићев индекс (индекс повезаности, индекс гранања). Постоји коресподенција између Рандићевог индекса и неких физичко–хемијских особина алкана, као што су нпр. тачка кључања, тачка мржњења и друго.

Рандићев индекс неког графа представља збир тежина свих грана графа. Тежина произвољне гране графа може се дефинисати на више начина, а овде ће то бити реципрочна вредност квадратног корена из производа степена чворова које спаја та грана. Предмет ове дисертације је да се на скупу простих графова са n чворова $G(k,n)$ и минималним степеном чворова једнаким k, одреди минимална (и максимална) вредност тог индекса као и графови на којима се она постиже.

Мада је Milan Randić дефинисао овај индекс 1975. године [35], највећи број резултата је из последњих двадесетак година. Овим истраживањима су се бавили, поред америчких (хемичар М. Рандић је радио на Tufts универзитету у Medford-у, држава Massachusetts), многи европски и кинески истраживачи. Посебно се истиче канадски научник Pierre Hansen [1, 2, 3, 6, 7, 17, 18, 19]. Наиме, поред тога што се међу првима бави овом проблематиком, он је са G.Caporossi -јем 2000. године направио систем AutoGraphix [7], који је од велике помоћи за стварање хипотеза о екстремним вредностима. На крају поменућемо нашег академика професора Ивана Гутмана који је објавио велики број радова (нпр. [16, 5, 6, 23, 28]) и монографија [15, 23] о Рандићевом индексу. Такође, неколико књига је посвећено овом тополошком индексу [20, 21, 22], као и велики број докторских теза. Напоменимо још да постоји веза између Рандићевог индекса и сопствених вредности *Laplace*-ове матрице придружене графу.

Све хипотезе које се односе на екстремне вредности Рандићевог индекса на простим графовима су у потпуности решене. У раду ће бити представљени сви важнији докази, а сама дисертација садржи седам глава и додатак.

Прва глава, као што се види, је уводног карактера. У њој се утврђују место и значај научних истраживања у вези са темом докторске дисертације. Такође, дају се и уводна објашњења наредних глава. Посебно, на крају ове главе, се истиче допринос аутора докторске дисетрације научним истраживањима.

У другој глави се на почетку даје преглед основних појмова из теорије графова који су неопходни за даљи рад. Овде се износи и сама дефиниција Рандићевог индекса на простим графовима произвољног реда n. У најкраћем је изнесен преглед резултата и начин доказивања. У последњем делу ове главе дати су најосновнији појмови из конвексне анализе, која је теоријска основа за велики део области математичког програмирања. Такође су изнесене и најважније дефиниције и идеје математичког програмирања на које се заснивају многи докази у наредним главама.

Трећа глава на првом месту говори о математичким моделима, односно описима самих графова које ћемо касније да користимо. Наведени су различити модели истог скупа графова. Разлог томе је управо то, што се до разних доказа долази на основу различитих модела. За доказивање различитих тврђења коришћено је и више метода: графовска метода, методе линеарног и квадратног програмирања и друге. У овој глави је, поред изношења ових метода, дат и приказ неких резултата. До првих резултата, одређивање максималне вредности Рандићевог индекса на простим графовима [14] , одређивање минимума Рандићевог индекса за графове минималног степена чворова један, два, па онда и три долази се, прво, графовском техником [4, 10], а затим и линеарним програмирањем [28, 30, 25]. Управо један од тих почетних резултата, одређивање минимума Рандићевог индекса на простим графовима без изолованих чворова је, уз извесне промене, и представљен у овој глави. Овај доказ је спроведен методом линеарног програмирања. Од посебне важности је и резултат који се налази у раду [33] и који се такође износи у овој глави. У њему се први пут за овај проблем користи идеја квадратног програмирања.

Четврта глава говори о максималној вредности Рандићевог индекса и заснива се на радовима [14] и [28]. Максимална вредност на скупу простих графова реда n

је $\frac{n}{2}$ и добија се на било ком регуларном графу, који није нултог степена регуларности, из тог скупа.

У петој глави су посебно важни резултати јер су обрађени графови са n чворова минималног степена чворова k при чему је $k \geq \frac{n}{2}$. Резултати у овој глави се заснивају на раду [27]. Минимална вредност Рандићевог индекса зависи, поред тога што је $k \geq \frac{n}{2}$, и од односа бројева k и n. До резултата се долази у више случаја: 1) $n \equiv 0(mod\,4)$, или је $n \equiv 2(mod\,4)$ и k је непаран број; 2) n је непаран број; 3) $n \equiv 2(mod\,4)$ и k је паран број. B.Liu и J. Liu су решили случајеве 1) и 2) (слично као у радовима [31, 33]), а аутор дисертације, заједно са својим ментором Lj. Pavlović и M. Stojanović, суштински поједностављују поменуте резултате случајева 1) и 2) и решавају најтежи случај 3). Управо ти поједностављени докази ће бити изнесени у овој глави.

Одређивање минималне вредности Рандићевог индекса на простим графовима реда n минималног степена чворова k, где је $k \leq \frac{n}{2}$, представљено је у шестој глави и заснива се на раду [11]. Добијеним резултатом је коначно доказана хипотеза која је постављена први пут у раду [10], а затим прецизније у [1] и на крају у [27]. До тог резултата је било очигледно тешко доћи с обзиром да је последњи доказан. Тиме се, заједно са петом главом, даје у потпуности решење проблема налажења минималне вредности Рандићевог индекса на посматраном скупу графова. *Сви претходно добијени резултати о минималној вредности Рандићевог индекса могу да се добију као посебни случајеви резултата изнесених у ове две главе, а који се заснивају на радовима* [27] *и* [11].

Седма глава садржи уопштења већине резултата претходне две главе. Ови резултати се заснивају на радовима [27, 11, 12]. Испоставља се да је можда и најтежи доказ, у читавом налажењу екстремних вредности и екстремалних графова (графова на којима се те вредности постижу), управо доказ једног уопштења [12]. Наиме, треба одредити минималну вредност Рандићевог индекса и графове на којима се та вредност остварује, на скупу графова када је: укупан број чворова n непаран број, када је минимални степен чворова $k \geq \frac{n}{2}$ непаран број и када је максимални степен чворова $m < n$ такође непаран број. Како би се нашла одговарајућа екстремна вредност која је остварива на неком графу овај доказ се у многоме разликује од доказа у петој глави. Као што је из теорије графова познато, укупан број чворова непарног степена у графу је паран. Ово тврђење у многоме компликује доказ под одређеним условима.

У додатку, на крају докторске дисертације, су на енглеском језику укратко сумирани сви претходно приказани резултати.

Мада је већ поменуто, најважнији допринос аутора у овој дисертацији огледа се у следећим резултатима:

- одређивање минималне вредности Рандићевог индекса на скупу простих графова реда n без изолованих чворова [11, 12, 27];

- спровођење квадратног програмирања у случају $k \leq \frac{n}{2}$ и $n_k \geq n - k$ као што је у раду [33];

- стварање разних модела графова како би се проблем сагледао са више страна

[11, 12];

- креативност у поједностављењу постојећих резултата и стварању нових и повезивању више резултата у један [27];
- проналажење нове технике доказа за случај $k \leq \frac{n}{2}$ на основу рада [11];
- уопштење претходних резултата сагледавањем посебних ситуација приликом неких уопштења [11, 12, 27].

Глава 2

Општи део - основни појмови, дефиниције и преглед резултата

У првом делу овог поглавља наведени су основни појмови и дефиниције из теорије графова који се користе у даљем раду [9]. Затим је дефинисан сам појам Рандићевог индекса на графовима и извршен преглед резултата. На крају су наведени основни појмови и теореме конвексне анализе и математичког програмирања [36].

2.1 Графови - основни појмови и дефиниције

До пре неколико деценија појам графа је најчешће тумачен као слика одређеног проблема. Данас, граф представља један од основних математичких појмова. Велики број књига објашњава појмове из теорије графова, а овде ће бити наведени само неопходни појмови за даљи рад.

Дефиниција 2.1. *Граф G је уређен пар (V, E) где је V коначан непразан скуп елемената који се називају чворови графа, а E скуп двочланих подскупова скупа V који се називају гране графа Г.*

Овако дефинисан граф је коначан, неоријентисан, без петљи и вишеструких грана и називамо га *простим* графом. Број чворова графа G зове се *ред графа* и означава са n. Број грана графа G означава се са m. Чворове графа најчешће означавамо са u и v, а грану која спаја чворове u и v са uv. У том случају за чворове u и v кажемо да су *суседни*. Такође кажемо да је грана uv инцидентна чворовима u и v. Скуп свих чворова графа G који су суседни чвору u означава се са $N(u)$ и зове се *суседство* чвора u. За све гране графа G које су инцидентне истом чвору кажемо да су *суседне гране*.

Дефиниција 2.2. *Укупан број грана које су са чвором u инцидентне називамо степен чвора u и означавамо са $d(u)$.*

Ако је $V = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ скуп чворова графа $G = (V, E)$, тада ћемо са $d_1, d_2, \dots, d_n$ редом означити степене чворова. *Минималан* и *максималан степен* графа G, које означавамо редом са $\delta(G)$ и $\Delta(G)$, дефинишу се на следећи начин: $\delta(G) = min\{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$ и $\Delta(G) = max\{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$.

Ако саберемо све степене чворова графа добијамо двоструки број грана, јер свака грана доприноси суми степена чворова два пута: по једанпут за сваки чвор гране. Дакле, важи једнакост:

$$(*) \qquad d_1 + d_2 + \cdots + d_n = 2m$$

Елементарно знање нам казује, да само када се сабере паран број непарних бројева добија се паран број, а парни сабирци не мењају парност. Истакнимо тврђење које следи из претходне једнакости:

Теорема 2.1. *Број чворова непарног степена у сваком графу је паран.*

Дефиниција 2.3. *За граф $H = (V_1, E_1)$ за који важи $V_1 \subseteq V$ и $E_1 \subseteq E$ кажемо да је подграф графа $G = (V, E)$.*

Граф H је *индуковани подграф* графа G ако скуп E_1 садржи све гране из E које повезују чворове из скупа V_1. Са $G - u$ ћемо означити граф који се добија из графа G уклањањем чвора $u \in V(G)$ и свих грана инцидентних са u. Слично са $G - uv$ означавамо граф који се добија од графа G брисањем гране uv.

Дефиниција 2.4. *Граф G је повезан ако за било која два чвора u и v постоји низ чворова $u = u_1, u_2, \ldots, u_k = v$ $(2 \leq k \leq n)$, при чему су било која два узастопна члана низа суседни чворови. У супротном кажемо да је граф неповезан.*

Неповезан граф се састоји од два или више повезаних подграфова које називамо *компоненте графа*.

Дефиниција 2.5. *Ако су сви чворови графа G степена r, тада се граф G зове регуларан граф степена r.*

Из једнакости $(*)$ видимо да за регуларне графове степена r важи $n \cdot r = 2m$ т.ј. $m = \frac{n \cdot r}{2}$ те бар један од бројева n - ред графа или r - степен регуларности морају бити парни.

Дефиниција 2.6. *Граф чија су свака два чвора суседна зове се комплетан граф.*

Комплетан граф са n чворова, кога означавамо са K_n, је регуларан граф степена $r = n - 1$ и он има $m = \frac{n \cdot (n-1)}{2} = \binom{n}{2}$ грана.

Дефиниција 2.7. *Бипартитан граф је граф чији се скуп чворова може разбити на два дисјунктна скупа при чему свака грана спаја чвор првог скупа са чвором другог скупа.*

Комплетан бипартитан граф је бипартитан граф код кога је сваки чвор првог скупа суседан са сваким чвором другог скупа. Ако је у првом скупу r, а у другом s чворова са $K_{r,s}$ ћемо означити комплетан бипартитан граф. Када је $r = 1$ то комплетан бипартитан граф $K_{1,n-1}$ називамо *звезда* и обележавамо са S_n. Са $K^*_{r,s}$ ћемо означити граф који настаје од комплетно бипартитног графа $K_{r,s}$ повезивањем свих чворова у делу који има r чворова.

Дефиниција 2.8. *Комплемент графа G је граф $\bar{G}$ који има исте чворове као граф G, при чему су два чвора суседна у $\bar{G}$ ако и само ако ти чворови нису суседни у G.*

Граф се боји на тај начин што се сваком чвору придружи нека боја, тј. сваки чвор се боји једном бојом. Граф је *правилно* обојен ако су свака два суседна чвора обојена различитим бојама. Ако граф може да се правилно обоји а да се притом употреби k или мање од k боја, граф је *к-обојив*.

Дефиниција 2.9. *Хроматски број $\gamma(G)$ графа G је једнак k, ако је граф k-обојив а није $(k-1)$-обојив.*

Ако је $\gamma(G) = k$, каже се да је граф G *k-хроматски*. За $k = 2$ граф се назива *бихроматски* и он је тада *бипартитни*.

Тежински граф је граф у којем је свакој грани додељен неки број. Другим речима, графу $G = (V, E)$ придружено је пресликавање $\omega : E \mapsto \mathbb{R}$ које свакој грани $uv \in E$ додељује број $\omega(uv)$ као тежину. Функцију ω називамо *тежинска функција* графа.

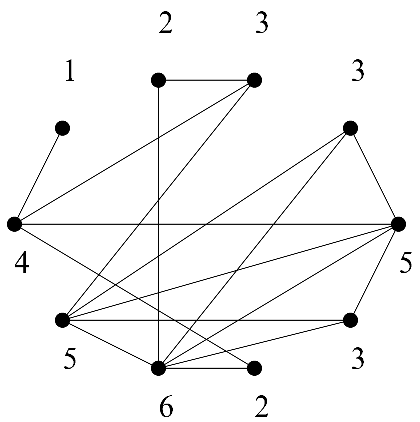
Дефиниција 2.10. *Граф $G = (V, E)$ на коме је дефинисана тежинска функција $\omega : E \mapsto \mathbb{R}$ се назива мрежа.*

2.2 Дефиниција Рандићевог индекса и преглед резултата

Изучавајући физичко-хемијске особине алкана, Milan Randić је 1975. године [35] дефинисао индекс (касније познат под његовим именом Рандићев индекс) на простим графовима, односно графовима без двоструких грана и петљи. Тај индекс је једнак збиру тежина свих грана. Тежина неке гране једнака је реципрочној вредности квадратног корена производа степена крајњих чворова те гране.

Дефиниција 2.11. *Нека је G прост граф и E скуп грана графа G. Рандићев индекс $R(G)$ графа G је: $R(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u)d(v)}}$, при чему сума иде преко свих грана uv графа G.*

Као **пример** израчунавања вредности Рандићевог индекса узећемо граф G_1 са слике 2.1. Приметимо да: по једна грана повезује чворове степена 1 и 4, 2 и 3, 2 и 4, 3 и 4, 4 и 5, 5 и 5; по две гране повезују чворове степена 2 и 6, 3 и 6, 5 и 6 и пет грана је инцидентно чворовима степена 3 и 5. Конкретно, вредност Рандићевог индекса графа G_1 биће: $R(G_1) = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 4}} + \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 3}} + \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 4}} + \frac{1}{\sqrt{3 \cdot 4}} + \frac{1}{\sqrt{4 \cdot 5}} + \frac{1}{\sqrt{5 \cdot 5}} + \frac{2}{\sqrt{2 \cdot 6}} + \frac{2}{\sqrt{3 \cdot 6}} + \frac{2}{\sqrt{5 \cdot 6}} + \frac{5}{\sqrt{3 \cdot 5}} = 4,6789.$

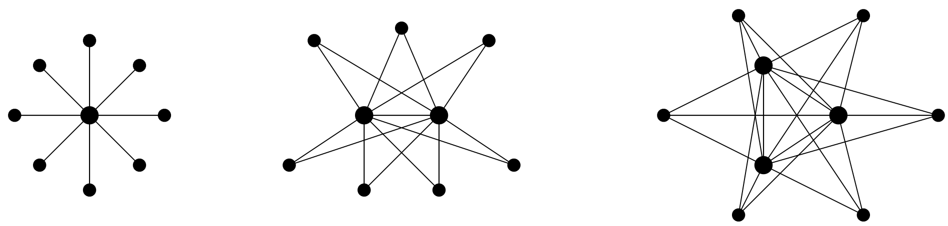


Слика 2.1. Граф G_1

Прво су се Рандићевим индексом бавили хемичари. Три књиге су посвећене овом индексу [20, 21, 22]. Касније је привукао пажњу математичара. Данас, поред поменуте три књиге, постоји и више монографија о Рандићевом индексу [15, 23]. Преко 2000 радова је, такође, посвећено овом индексу. Велики број научника се бави питањима екстремних вредности Рандићевог индекса [4, 5, 7, 8, 14, 16], а такође је важно одредити и графове на којима се те екстремне вредности постижу. До максималне вредности Рандићевог индекса се релативно лако долази [14, 28]; то су одговарајући регуларни графови. B.Bollobas и P.Erdos [4] су поставили питање налажења минималних вредности Рандићевог индекса на простим графовима са n чворова, при чему је дат минималан степен чворова k. Исто питање наглашава и S. Fajtlowitcz [14].

B. Bollobos и P. Erdos решавају проблем када је $k = 1$ [4]; одговарајући граф је звезда S_n. За $k = 2$ решење је дато у [10] и одговарајући граф је $K^*_{2,n-2}$. Оба ова случаја су решена анализом саме структуре графа, тзв. графовском техником или граф–теоретским приступом. За $k = 1$ и $k = 2$, применом линеарног програмирања, проблем решавају Lj. Pavlović и I. Gutman [28, 30], а затим, за $k = 3$, X. Li и Y. Shi [25]. У раду [31] Lj. Pavlović долази до резултата за $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, односно у раду [33] Lj. Pavlović и T. Divnić за $k \leq \frac{n}{2}$ и $n_k \geq n - k$, где је n_k број чворова степена k. За добијање ових резултата први пут се користи метода квадратног програмирања. Последњи случај, $k \leq \frac{n}{2}$ и $n_k \geq n - k$, Lj. Pavlović решава и применом линеарног програмирања [32].

На слици 2.2. представљени су графови реда $n = 9$ на којима се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, ако је минимални степен чворова $k = 1$ (звезда граф), $k = 2$ (граф $K^*_{2,7}$) и $k = 3$ (граф $K^*_{3,6}$).



Слика 2.2. Графови: S_9, $K^*_{2,7}$ и $K^*_{3,6}$.

X.Li, B. Liu и J. Liu, сматрајући да су решили проблем, објављују 2010. године добијене резултате у European Journal of Operational Research [24]. Lj. Pavlović уочава недостатке доказа и шаље коментар у исти часопис [34]. Проблем и даље остаје отворен.

Након више од десет година проблем је на крају у потпуности решен. У раду [11] T. Divnić и Lj. Pavlović решавају случај за $k \leq \frac{n}{2}$, а у раду [27] B. Liu, Lj.

Pavlović, T. Divnić, J. Liu и M. Stojanović за случај $k \geq \frac{n}{2}$.

Такође су извршена и уопштења резултата када се степен било ког чвора графа налази на интервалу $[k, m]$ где је m највећи степен чворова у графу $[27, 11, 12]$.

На крају треба нагласити и то да су извршена и уопштења дефиниције Рандићевог индекса, као и да настају нове класе индекса налик овом индексу. Наведимо конкретно да су, инспирисани Рандићевим индексом, B. Furtula и D. Vukičević увели нову класу тополошких индекса коју су назвали класом *геометријско–аритметичког индекса* [37]. Аутор ове дисертације, Lj. Pavlović и M. Milivojević су, применом линеарног програмирања, дошли до одређених резултата одређивања екстремних вредности и екстремалних графова и на овој класи индекса [13].

2.3 Основни појмови конвексне анализе и математичког програмирања

Дефиниција 2.12. *Скуп $C \subseteq \mathbb{R}^n$ је конвексан скуп ако и само ако за сваки $x, y \in C$ и $\lambda \in [0, 1]$ важи $\lambda x + (1 - \lambda)y \in C$.*

Дефиниција 2.13. *Нека је $C \subseteq \mathbb{R}^n$ конвексан скуп. Функција $f : C \mapsto \mathbb{R}$ је конвексна фунцкија на C ако и само ако за сваки $x, y \in C$ и сваки $\lambda \in [0, 1]$ важи $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$. Функција $g : C \mapsto \mathbb{R}$ је конкавна на C ако и само ако је функција $-g$ конвексна на C.*

Линеарна функција $y = ax + b$ је и конвексна и конкавна. Квадратна функција $y = x^2 + bx + c$, сложена функција претходних и многе друге функције су конвексне или конкавне.

Област *математичко програмирање* се бави одређивањем тачке неког скупа која задовољава одређене услове (ограничења), а у којој дата функција постиже екстремну вредност. Конкретно, разматрамо проблем (P) минимизације функције $\varphi : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ на скупу $X = \{x \in \mathbb{R}^n |\ f_i(x) \leq 0,\ i = 1, 2, \ldots, m\}$. Скуп X назива се скуп допустивих тачака или *допустиви скуп*; функције $f_i(x),\ i = 1, 2, \ldots, m$ зову се *функције ограничења*, док се функција $\varphi(x)$ назива *функција циља*. Видимо да су сва ограничења допустивог скупа неједнакости. То је могуће увек постићи превођењем било које једнакости у две супротне неједнакости.

Дефиниција 2.14. *Тачка $x^* \in X$ је оптимална (минимална) тачка проблема (P) ако и само ако је $\varphi(x^*) \leq \varphi(x)$ за свако $x \in X$.*

Оптимална тачка се још назива и *глобални оптимум*. Проблем максимизације функције $\varphi : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ на скупу X своди се на проблем минимизације увођењем функције $\psi(x) = -\varphi(x)$ на истом скупу.

Ако су функције $\varphi(x)$ и $f_i(x)$, за $i = 1, 2, \ldots, m$, конвексне функције тада проблем:

$$\min_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f_i(x) \le 0,\ \ 1 \le i \le m\},$$

називамо проблем конвексног програмирања. Када су функције $\varphi(x)$ и $f_i(x)$, за $i = 1, 2, \ldots, m$, линеарне (квадратне) говоримо о линеарном (квадратном) програмирању. Уколико је наметнут услов целобројности говоримо о целобројном програмирању. Проблем линеарног програмирања можемо записати у облику ($a_i, c \in \mathbb{R}^n$ и $b_i \in \mathbb{R}$)[1]:

$$\min_{x \in X} c^T x,$$

$$X = \{x \in R^n \mid a_i^T x - b_i \le 0,\ \ 1 \le i \le m\}.$$

Често се у пракси срећемо са проблемом у коме су само ограничења линеарна, а кога можемо записати у облику ($a_i, c_j \in \mathbb{R}^n$ и $b_i, d_j \in \mathbb{R}$):

$$\min_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \le 0,\ c_j^T x - d_j = 0,\ \ 1 \le i \le m,\ 1 \le j \le k\},$$

или у једноставнијем запису ($a_i \in \mathbb{R}^n$ и $b_i \in \mathbb{R}$):

$$\min_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \le 0,\ \ 1 \le i \le m\ \}.$$

Постоји велики број теорема (најпознатије су Kuhn–Tucker -ове теореме) које дају потребне и довољне услове за налажење оптималних тачака поменутих проблема. Наведимо неке од њих.

Теорема 2.2. *(Теорема 2.4.3 у* [36]*.) Нека је у проблему*

$$\max_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \ge 0,\ \ 1 \le i \le m\ \},$$

функција $\varphi(x)$ конкавна и диференцијабилна. Допустива тачка $x_0 \in X$ је оптимална (максимална) тачка проблема ако и само ако постоје ненегативни бројеви λ_i, за $1 \le i \le m$, такви да је[2]*:*

$$\nabla \varphi(x_0) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i = 0,$$

$$\lambda_i (a_i^T x_0 - b_i) = 0,\ \ 1 \le i \le m.$$

[1]Вектор $x \in \mathbb{R}^n$, тј. $x = (x_1, \ldots, x_n)$, се често у математичком програмирању представља у матричном облику $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$, односно $x^T = [\ x_1\ \ldots\ x_n\ ]$.

[2]За дату функцију $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ градијент функције $f(x)$ је $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)$.

Приметимо да је у претходној теореми наведен проблем максимизације (што ће и на даље бити) и да је функција циља конкавна. Разлог томе је што у дисертацији управо разматрамо овакве проблеме. Наведимо даље, одговарајућу теорему када су нека ограничења једнакости.

Теорема 2.3. *Нека је у проблему*

$$\max_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \geq 0,\ c_j^T x - d_j = 0,\ \ 1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq k\},$$

функција $\varphi(x)$ конкавна и диференцијабилна. Допустива тачка $x_0 \in X$ је оптимална (максимална) тачка проблема ако и само ако постоје ненегативни бројеви λ_i, за $1 \leq i \leq m$, и реални бројеви μ_j, за $1 \leq j \leq k$, такви да је:

$$\nabla\varphi(x_0) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^{k} \mu_j c_j = 0,$$

$$\lambda_i(a_i^T x_0 - b_i) = 0,\ \ 1 \leq i \leq m.$$

Наведимо сада и две важне дефиниције математичког програмирања.

Дефиниција 2.15. *Нека је дат проблем*

$$\max_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \geq 0,\ c_j^T x - d_j = 0,\ \ 1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq k\}.$$

За ненегативне бројеве λ_i, $1 \leq i \leq m$, и реалне бројеве μ_j, $1 \leq j \leq k$, функција

$$\psi(x) = \varphi(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(a_i^T x - b_i) + \sum_{j=1}^{k} \mu_j(c_j^T x - d_j)$$

се назива $Lagrange$ -ова функција датог проблема.

Дефиниција 2.16. *Допустиву тачку x^* проблема*

$$\max_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \geq 0,\ \ 1 \leq i \leq m\ \},$$

називамо стационарном тачком ако и само ако задовољава такозване $Kuhn–Tucker$ -ове услове, тј. постоје ненегативни бројеви λ_i, за $1 \leq i \leq m$, такви да је:

$$\nabla\varphi(x_0) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i = 0,$$

$$\lambda_i(a_i^T x_0 - b_i) = 0,\ \ 1 \leq i \leq m.$$

Поред наведених теорема које се користе у конвексном (конкавном) случају навешћемо и следећу теорему која се заснива на тзв. условима регуларности.

Теорема 2.4. *(Теорема 37.1 у* [26]*) Нека је дат проблем*

$$\max_{x \in X} \varphi(x),$$

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \geq 0,\ c_j^T x - d_j = 0,\ \ 1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq k\},$$

где је $\varphi(x)$ *диференцијабилна функција. Потребан услов да допустива регуларна тачка* $x_0 \in X$ *буде оптимална (максимална) тачка датог проблема је да постоје ненегативни бројеви* λ_i*, за* $1 \leq i \leq m$*, и реални бројеви* μ_j*, за* $1 \leq j \leq k$*, такви да је:*

$$\nabla \psi(x) = \nabla \varphi(x_0) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^{k} \mu_j c_j = 0,$$

$$\lambda_i (a_i^T x_0 - b_i) = 0,\ \ 1 \leq i \leq m.$$

О условима регуларности говоре многа тврђења, а пошто су у претходној теореми ограничења линеарна, навешћемо одговарајуће.

Лема 2.1. *(Видети 38.4 у* [26]*) Нека је дефинисан скуп*

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i^T x - b_i \geq 0,\ c_j^T x - d_j = 0,\ \ 1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq k\}.$$

Ако постоји тачка $\bar{x} \in X$ *таква да је* $a_i^T \bar{x} - b_i > 0$ *и* $c_j^T \bar{x} - d_j = 0$*, за* $1 \leq i \leq m$ *и* $1 \leq j \leq k$*, тада је свака тачка* $x \in X$ *регуларна.*

Глава 3

Математички модели и методе

У овом делу проблему налажења екстремних вредности Рандићевог индекса на графовима дајемо математичке описе, односно моделе које ћемо касније користити. Првенствено ћемо се бавити проблемом одређивања минималне вредности Рандићевог индекса, с обзиром да је (показаће се) одређивање максималне вредности доста лакше. Сам проблем који су B.Bollobas и P.Erdos поставили је веома тежак, те се у почетку појављују само делимични резултати. Такође, примењује се и више метода. Ради илустрације различитих метода овде ће бити дати и неки од почетних резултата.

3.1 Математички модели

Поновимо задатак (проблем) који су поставили B.Bollobas и P.Erdos [4]: **одредити минималну вредност Рандићевог индекса на скупу простих графова са n чворова, при чему је минимални степен чворова k.** Означимо са $G(k,n)$ скуп простих графова са n чворова чији је минимални степен чворова k. Било који чвор простог графа са n чворова може бити повезан са највише $n-1$ чворова. Значи, степен било ког чвора графа $G \in G(k,n)$ је цео број из интервала $[k, n-1]$. Нека је $x_{i,j}$ број грана које повезују чворове степена i и j $(k \leq i \leq j \leq n-1)$. Очигледно је $x_{j,i} = x_{i,j}$. Сада, Рандићев индекс графа $G \in G(k,n)$ можемо представити у следећем облику:

$$R(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u)d(v)}} = \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}.$$

Нека са $n_k, n_{k+1}, \ldots, n_{n-1}$ означимо број чворова степена $k, k+1, \ldots, n-1$, респективно. Важи једнакост: $n_k + n_{k+1} + n_{k+2} + \cdots + n_{n-1} = n$. Из сваког чвора степена i излази i грана. Према томе, укупан број грана које повезују чворове степена i са чворовима било ког другог степена j $(k \leq j \leq n-1)$ једнак је in_i. Међу тим гранама, гране које повезују чворове истог степена i се рачунају дупло, па важи: $x_{k,i} + x_{k+1,i} + \cdots + 2x_{i,i} + \cdots + x_{i,n-1} = in_i$. Конкретно, за гране које повезују чворове степена k важи: $2x_{k,k} + x_{k,k+1} + x_{k,k+2} + \cdots + x_{k,n-1} = kn_k$. Слично, за гране које

повезују чворове степена $k+1$ важи: $x_{k,k+1}+2x_{k+1,k+1}+x_{k+1,k+2}+\cdots+x_{k+1,n-1}=(k+1)n_{k+1}$. Наставимо ли тако даље, за гране које повезују чворове степена $n-1$ важиће: $x_{k,n-1}+x_{k+1,n-1}+x_{k+2,n-1}+\cdots+2x_{n-1,n-1}=(n-1)n_{n-1}$. Поред ових једнакости испуњене су и неке неједнакости за произвољан граф $G\in G(k,n)$. Број грана $x_{i,j}$, које повезују чворове степена i и j, није већи од производа броја чворова n_i степена i и броја чворова n_j степена j: $x_{i,j}\leq n_in_j$, за $k\leq i\leq n-1$ и $i<j\leq n-1$.
Број грана $x_{i,i}$, које повезују чворове истог степена, није већи од $\frac{n_i(n_i-1)}{2}$, тј. $x_{i,i}\leq\binom{n_i}{2}$, за $k\leq i\leq n-1$.

На основу свега претходно реченог, проблем (P) одређивања минимума $\min\{R(G):G\in G(k,n)\}$ можемо математички представити у следећем облику:

$$\min\sum_{k\leq i\leq j\leq n-1}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$$

при чему важи:

$$(1)\qquad \begin{array}{rcl}
2x_{k,k}+x_{k,k+1}+x_{k,k+2}+\cdots+x_{k,n-1} &=& kn_k,\\
x_{k,k+1}+2x_{k+1,k+1}+x_{k+1,k+2}+\cdots+x_{k+1,n-1} &=& (k+1)n_{k+1},\\
x_{k,k+2}+x_{k+1,k+2}+2x_{k+2,k+2}+\cdots+x_{k+2,n-1} &=& (k+2)n_{k+2},\\
\multicolumn{3}{c}{\dotfill}\\
x_{k,n-1}+x_{k+1,n-1}+x_{k+2,n-1}+\cdots+2x_{n-1,n-1} &=& (n-1)n_{n-1},
\end{array}$$

$$(2)\qquad n_k+n_{k+1}+\ldots,n_{n-1}=n,$$

$$(3)\qquad x_{i,j}\leq n_in_j,\ \text{ за }\ k\leq i<j\leq n-1,$$

$$(4)\qquad x_{i,i}\leq\binom{n_i}{2},\ \text{ за }\ k\leq i\leq n-1,$$

$$(5)\qquad x_{i,j},n_i\ \text{су ненегативни цели бројеви за}\ \ k\leq i\leq n-1.$$

Неједнакости (3) и (4) су квадратне, те је проблем (P) *проблем квадратног програмирања.*

На основу једнакости (1) и (2), Рандићев индекс $R(G)=\sum_{k\leq i\leq j\leq n-1}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$ можемо представити и у следећем облику:

$$(6)\qquad R(G)=\frac{n}{2}-\frac{1}{2}\sum_{k\leq i\leq j\leq n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2x_{i,j}.$$

Наиме, када се прва једнакост у (1) подели са k, друга са $k+1$, трећа са $k+2$ и тако даље, последња са $n-1$, добија се:

$$\begin{array}{rcl}
\frac{2}{k}x_{k,k}+\frac{1}{k}x_{k,k+1}+\frac{1}{k}x_{k,k+2}+\ldots+\frac{1}{k}x_{k,n-1} &=& n_k,\\
\frac{1}{k+1}x_{k,k+1}+\frac{2}{k+1}x_{k+1,k+1}+\frac{1}{k+1}x_{k+1,k+2}+\ldots+\frac{1}{k+1}x_{k+1,n-1} &=& n_{k+1},\\
\frac{1}{k+2}x_{k,k+2}+\frac{1}{k+2}x_{k+1,k+2}+\frac{2}{k+2}x_{k+2,k+2}+\ldots+\frac{1}{k+2}x_{k+2,n-1} &=& n_{k+2},\\
\multicolumn{3}{c}{\dotfill}\\
\frac{1}{n-1}x_{k,n-1}+\frac{1}{n-1}x_{k+1,n-1}+\frac{1}{n-1}x_{k+2,n-1}+\ldots+\frac{2}{n-1}x_{n-1,n-1} &=& n_{n-1}.
\end{array}$$

Након пажљивог сабирања ових једнакости (сабирке са леве стране са истим индексима узимати заједно) резултат можемо видети у краћем облику:

$$\sum_{k\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j}=n_k+n_{k+1}+n_{k+2}+\cdots+n_{n-1}=n,$$

на основу (2). Сада, помоћу овог резултата, лако долазимо до наведеног облика:

$$\begin{aligned} R(G) &= \sum_{k\le i\le j\le n-1}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}=\frac{1}{2}\sum_{k\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}-\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2\right)x_{i,j}\\ &= \frac{1}{2}\sum_{k\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j}-\frac{1}{2}\sum_{k\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2x_{i,j}\\ &= \frac{n}{2}-\frac{1}{2}\sum_{k\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2x_{i,j}. \end{aligned}$$

Дефинишимо сада нову функцију:

$$\gamma=\sum_{k\le i<j\le n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2x_{i,j}. \tag{7}$$

Видимо да се проблем (P) минимизације може преформулисати у проблем (P_1) максимизације γ функције:

$$\max\sum_{k\le i<j\le n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2x_{i,j}$$

при чему важи:

$$\begin{array}{ccccccccc} 2x_{k,k} &+& x_{k,k+1} &+& x_{k,k+2} &+\cdots+& x_{k,n-1} &=& kn_k,\\ x_{k,k+1} &+& 2x_{k+1,k+1} &+& x_{k+1,k+2} &+\cdots+& x_{k+1,n-1} &=& (k+1)n_{k+1},\\ x_{k,k+2} &+& x_{k+1,k+2} &+& 2x_{k+2,k+2} &+\cdots+& x_{k+2,n-1} &=& (k+2)n_{k+2},\\ \cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots\\ x_{k,n-1} &+& x_{k+1,n-1} &+& x_{k+2,n-1} &+\cdots+& 2x_{n-1,n-1} &=& (n-1)n_{n-1}, \end{array} \tag{1}$$

$$n_k+n_{k+1}+\ldots,n_{n-1}=n, \tag{2}$$

$$x_{i,j}\le n_in_j,\ \text{ за }\ k\le i<j\le n-1, \tag{3}$$

$$x_{i,i}\le\binom{n_i}{2},\ \text{ за }\ k\le i\le n-1, \tag{4}$$

$$x_{i,j},n_i \text{ су ненегативни цели бројеви за }\ k\le i\le j\le n-1. \tag{5}$$

За одређивање екстремних вредности Рандићевог индекса на посматраном скупу графова под одређеним условима и претходно дефинисан проблем (P_1) ћемо преформулисати у нови облик. Нека је:

$$(8)\qquad \begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \le i < n-1,\ i < j \le n-1, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \le i \le n-1. \end{array}$$

Чворови степена $n-1$ су суседни свим осталим чворовима. Пошто су сви чворови повезани са произвољним чвором степена $n-1$ то је $x_{i,n-1} = n_i n_{n-1}$, за $k \le i < n-1$, односно $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2}$. Тада је, на основу (8), $y_{i,n-1} = 0$ за $k \le i \le n-1$ и, такође, $n_{n-1} \le k$ (или је најмања вредност степена у графу већа од k). Извршимо замену $x_{i,j}$ и $x_{i,i}$ из (8) у функцији γ и једнакостима (1). Функција γ се очигледно може раздвојити у два дела, те ћемо тражити максимум у следећем облику:

$$\max \sum_{k \le i < j \le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j - \sum_{k \le i < j \le n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 y_{i,j}$$

За $k \le i \le n-1$ произвољна једнакост из (1)

$$x_{k,i} + x_{k+1,i} + \cdots + 2x_{i,i} + \cdots + x_{i,n-1} = i n_i,$$

после замене променљивих из (8) постаје:

$$n_k n_i - y_{k,i} + n_{k+1} n_i - y_{k+1,i} + \cdots + 2\left(\binom{n_i}{2} - y_{i,i} \right) + \cdots + n_i n_{n-1} - y_{i,n-1} = i n_i.$$

Када се прегрупишу променљиве, добија се:

$$y_{k,i} + y_{k+1,i} + \cdots + 2y_{i,i} + \cdots + y_{i,n-1} = n_i(n_k + n_{k+1} + \cdots + n_i - 1 + \cdots + n_{n-1} - i),$$

односно, ако искористимо једнакост (2), биће:

$$y_{k,i} + y_{k+1,i} + \cdots + 2y_{i,i} + \cdots + y_{i,n-1} = (n-i-1)n_i.$$

Из система једнакости (1) сада добијамо нове једнакости:

$$(1')\qquad \begin{array}{llllll} 2y_{k,k} + & y_{k,k+1} + & y_{k,k+2} & + \cdots + & y_{k,n-2} & = (n-k-1)n_k, \\ y_{k,k+1} + & 2y_{k+1,k+1} + & y_{k+1,k+2} & + \cdots + & y_{k+1,n-2} & = (n-k-2)n_{k+1}, \\ y_{k,k+2} + & y_{k+1,k+2} + & 2y_{k+2,k+2} & + \cdots + & y_{k+2,n-2} & = (n-k-3)n_{k+2}, \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ y_{k,n-2} + & y_{k+1,n-2} + & y_{k+2,n-2} & + \cdots + & 2y_{n-2,n-2} & = n_{n-2}, \end{array}$$

Значи, математички опис почетног проблема можемо видети и у следећем облику (P_2):

$$\max \sum_{k \le i < j \le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j - \sum_{k \le i < j \le n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 y_{i,j}$$

при чему важи:

$$(1') \quad \begin{array}{llllll} 2y_{k,k} + & y_{k,k+1} & + \ y_{k,k+2} & + \cdots + & y_{k,n-2} & = (n-k-1)n_k, \\ y_{k,k+1} & + 2y_{k+1,k+1} & + \ y_{k+1,k+2} & + \cdots + & y_{k+1,n-2} & = (n-k-2)n_{k+1}, \\ y_{k,k+2} + & y_{k+1,k+2} & + 2y_{k+2,k+2} & + \cdots + & y_{k+2,n-2} & = (n-k-3)n_{k+2}, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{k,n-2} + & y_{k+1,n-2} & + \ y_{k+2,n-2} & + \cdots + & 2y_{n-2,n-2} & = n_{n-2}, \end{array}$$

$$(2) \qquad n_k + n_{k+1} + n_{k+2} + \cdots + n_{n-1} = n,$$

$$(9) \qquad n_i \geq 0, \qquad \text{за} \quad k \leq i \leq n-1,$$

$$(10) \qquad y_{i,j} \geq 0, \qquad \text{за} \quad k \leq i \leq j \leq n-2,$$

$$(11) \qquad n_{n-1} \leq k,$$

$$(5') \qquad y_{i,j},\ n_i \quad \text{су цели бројеви за} \quad k \leq i \leq j \leq n-1.$$

Поред различитих математичких описа структуре графова као идеја, за налажење екстремних вредности Рандићевог индекса, коришћена је и промена броја грана или броја чворова на графу, те самим тим промена модела графа. О томе ће бити више речи касније у тзв. графовској методи за налажење екстремних вредности.

3.2 Математичке методе

За одређивање екстремних вредности Рандићевог индекса на простим графовима коришћене су различите методе. Почетни резултати: одређивање максималне вредности Рандићевог индекса, одређивање минимума Рандићевог индекса графова минималног степена чворова $k = 1$, касније и $k = 2$, прво су добијени тзв. графовском техником. Једна идеја графовске технике је избацивање једног чвора u и упоређивање првобитне вредности Рандићевог индекса $R(G)$ и новонастале вредности $R(G-u)$. Такође, изостављање једне гране uv доводи до промене вредности Рандићевог индекса графа G променом тежина осталих грана. Овде наводимо тврђење која се користи у доказима за налажење минимума Рандићевог индекса на графовима минималног степена чворова $k = 1$ [4], касније и $k = 2$ [10].

Лема 3.1. *Ако је uv грана максималне тежине графа G, тада је:* $R(G-uv) < R(G)$.

У графовску технику можемо сврстати и замену тежина неких грана не већом (не мањом) тежином других грана. Ова идеја ће бити од користи у једном од најважнијих доказа везаних за тему којом се бавимо: одредити минималну вредност Рандићевог индекса на простим графовима са n чворова, при чему је минимални степен чворова $k \leq \frac{n}{2}$.

Поред графовске технике као идеје за налажење екстремних вредности Рандићевог индекса коришћене су и метода линеарног и метода квадратног програмирања. Поред упознавања са овим методама у овом делу ће бити презентовани и одговарајући докази где су те методе у почетку коришћене.

3.2.1 Одређивање минималне вредности Рандићевог индекса применом методе линеарног програмирања

Један од првих резултата одређивања екстремних вредности Рандићевог индекса на графовима је *налажење минимума Рандићевог индекса* на графовима са n чворова без изолованих чворова. Степен било ког чвора је најмање 1. Важи тврђење:

Теорема 3.1. [28] *Међу графовима са истим бројем чворова n и без изолованих чворова звезда S_n има најмању вредност Рандићевог индекса.*

До овог резултата прво долазе B. Bollobas и P Erdos [4], а затими Lj. Pavlović и I. Gutman применом линеарне методе [28]. Овде ће бити спроведен доказ који се базира на линеарном програмирању, а који има сличности али и разлике са доказом који је дат у [28].

Звезда S_n има $n-1$ грану и све гране повезују један чвор степена $n-1$ са осталих $n-1$ чворова степена 1. Тежина било које гране је $\frac{1}{\sqrt{1(n-1)}} = \frac{1}{\sqrt{n-1}}$. Пошто грана има $n-1$ то лако долазимо до вредности Рандићевог индекса: $R(S_n) = \frac{n-1}{\sqrt{n-1}} = \sqrt{n-1}$. Покажимо да је ово и најмања вредност Рандићевог индекса која се добија на графовима са n неизолованих чворова.

Доказ. Очигледно је $n \geq 2$ (када би било $n = 1$ то би био изолован чвор). На било ком графу G са n чворова без изолованих чворова важе једнакости:

$$(1^*)\qquad \begin{array}{ccccccccc} 2x_{1,1} & + & x_{1,2} & + & x_{1,3} & +\cdots+ & x_{1,n-1} & = & n_1, \\ x_{1,2} & + & 2x_{2,2} & + & x_{2,3} & +\cdots+ & x_{2,n-1} & = & 2n_2, \\ x_{1,3} & + & x_{2,3} & + & 2x_{3,3} & +\cdots+ & x_{3,n-1} & = & 3n_3, \\ \multicolumn{9}{c}{\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots} \\ \multicolumn{9}{c}{x_{1,n-1} + x_{2,n-1} + x_{3,n-1} + \cdots + 2x_{n-1,n-1} = (n-1)n_{n-1},} \end{array}$$

и

$$(2^*)\qquad n_1 + n_2 + n_3 + \cdots + n_{n-1} = n.$$

За $n = 2$ граф са два чвора, пошто не могу бити изоловани, има једну грану. Тај граф можемо тумачити као звезда граф $S_2 = K_{1,1}$ те тврђење очигледно важи. За $n = 3$, пошто нема изолованих чворова, то постоје два различита графа. Први је звезда S_3 чији је Рандићев индекс $R(S_3) = \sqrt{2}$. Други граф G_2 је тзв. троугао чије све три гране имају тежину $\frac{1}{\sqrt{2\cdot 2}} = \frac{1}{2}$ те је вредност Рандићевог индекса $R(G_2) = \frac{3}{2}$. Очигледно је $R(S_3) < R(G_2)$ те је тврђење испуњено. Нека је даље $n \geq 4$.

За фиксирану вредност броја чворова n у једначинама (1^*) и (2^*) су $x_{i,j}$ и n_i, за $1 \leq i \leq j \leq n-1$, непознате које можемо тумачити и као променљиве приликом одређивања екстремне вредности Рандићевог индекса. Све ове једнакости су линеарне по поменутим променљивима. У једнакостима (1^*), када прву једначину препишемо, другу поделимо са 2, трећу са 3 и тако даље, а последњу са $n-1$, добија се:

$$\begin{array}{ccccccccccc}
2x_{1,1} & + & x_{1,2} & + & x_{1,3} & +\cdots+ & x_{1,n-1} & = & n_1, \\
\frac{1}{2}x_{1,2} & + & \frac{1}{2}2x_{2,2} & + & \frac{1}{2}x_{2,3} & +\cdots+ & \frac{1}{2}x_{2,n-1} & = & n_2, \\
\frac{1}{3}x_{1,3} & + & \frac{1}{3}x_{2,3} & + & \frac{1}{3}2x_{3,3} & +\cdots+ & \frac{1}{3}x_{3,n-1} & = & n_3, \\
\multicolumn{9}{c}{\dotfill} \\
\frac{1}{n-1}x_{1,n-1} & + & \frac{1}{n-1}x_{2,n-1} & + & \frac{1}{n-1}x_{3,n-1} & +\cdots+ & \frac{1}{n-1}2x_{n-1,n-1} & = & n_{n-1}.
\end{array}$$

Пажљивим сабирањем ових једнакости (сабирке са леве стране са истим индексима узимати заједно), и применом једнакости (2^*), долазимо до облика:

$$\sum_{1\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j} = n_1+n_2+n_3+\cdots+n_{n-1} = n.$$

Из суме можемо издвојити сабирак

$$n = \sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j} + \left(\frac{1}{1}+\frac{1}{n-1}\right)x_{1,n-1}.$$

Прва сума ће имати све сабирке за $1\le i\le j\le n-1$, сем када је $i=1$ и $j=n-1$. Даље ће бити:

$$\frac{n}{n-1}x_{1,n-1} = n - \sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j},$$

и после множења са $\frac{n-1}{n}$, добија се вредност за $x_{1,n-1}$:

$$x_{1,n-1} = n-1-\frac{n-1}{n}\sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j}.$$

Израчунајмо сада вредност Рандићевог индекса графа G.

$$\begin{aligned}
R(G) &= \sum_{1\le i\le j\le n-1}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}} = \sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}} + \frac{x_{1,n-1}}{\sqrt{1(n-1)}} \\
&= \sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}} + \frac{n-1}{\sqrt{n-1}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\frac{n-1}{n}\sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)x_{i,j} \\
&= \sqrt{n-1} + \sum_{(i,j)\neq(1,n-1)}\left(\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)\right)x_{i,j}.
\end{aligned}$$

С обзиром да је за $i=1$ и $j=n-1$

$$\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right) = \frac{1}{\sqrt{1(n-1)}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{1}+\frac{1}{n-1}\right) = 0,$$

на крају, ипак, можемо писати:

$$R(G) = \sqrt{n-1} + \sum_{1\le i\le j\le n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)\right)x_{i,j}.$$

Покажимо да је за $1 \leq i \leq j \leq n-1$ израз $\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)$ позитиван, сем за $i = 1 \wedge j = n-1$. Приметимо прво да за посматране услове $1 \leq i \leq j \leq n-1$ важи $\frac{1}{n-1} \leq \frac{i}{j} \leq 1$, односно $\frac{1}{\sqrt{n-1}} \leq \sqrt{\frac{i}{j}} \leq 1$. Функција $f(x) = x + \frac{1}{x}$ има први извод $f'(x) = 1 - \frac{1}{x^2} < 0$, за $\frac{1}{\sqrt{n-1}} \leq x < 1$, те је опадајућа. Максималну вредност постиже на почетак интервала за $x = \frac{1}{\sqrt{n-1}}$. Дакле, израз $\sqrt{\frac{i}{j}} + \sqrt{\frac{j}{i}}$ постиже максималну вредност када је $\sqrt{\frac{i}{j}} = \frac{1}{\sqrt{n-1}}$ и важи: $\sqrt{\frac{i}{j}} + \sqrt{\frac{j}{i}} \leq \frac{1}{\sqrt{n-1}} + \sqrt{n-1} = \frac{1+n-1}{\sqrt{n-1}} = \frac{n}{\sqrt{n-1}}$. Последњи резултат можемо трансформисати у облик $\frac{i+j}{\sqrt{ij}} \leq \frac{n}{\sqrt{n-1}}$, тј. $\frac{\sqrt{n-1}}{n}\frac{i+j}{ij} \leq \frac{1}{\sqrt{ij}}$ и коначно је $\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right) \geq 0$. Једнакост се, као што смо видели, постиже за $\sqrt{\frac{i}{j}} = \frac{1}{\sqrt{n-1}}$, а иначе је увек строга неједнакост. Значи, за $i = 1$ и $j = n-1$ је $\left[\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)\right] x_{i,j} = 0 \cdot x_{i,j} = 0$, док ће за било које друго $x_{i,j} > 0$, за $1 \leq i \leq j \leq n-1$, вредност сабирка у збиру за Рандићев индекс бити позитивна, тј. $\left[\frac{1}{\sqrt{ij}} - \frac{\sqrt{n-1}}{n}\left(\frac{1}{i}+\frac{1}{j}\right)\right] x_{i,j} > 0$. Овим је очигледно да се минимална вредност Рандићевог индекса постиже само у случају када је $i = 1$ и $j = n-1$, а то је управо $\sqrt{n-1}$. Видели смо да се та вредност постиже на звезда графу, чиме је теорема доказана. □

3.2.2 Одређивање минималне вредности Рандићевог индекса применом квадратног програмирања

Као што је поменуто, први резултати о екстремним вредностима Рандићевог индекса на графовима добијени су графовском техником и линеарним програмирањем. Након вишегодишњег застоја долази се до једног од важнијих доказа *методом квадратног програмирања.* Наиме, решава се случај одређивања минималне вредности Рандићевог индекса када је $k \leq \frac{n}{2}$ и $n_k \geq n-k$ [33]. Нека је $n_k = n-k+t$, где се t очигледно налази на интервалу $0 \leq t \leq k$. Проблем можемо описати на следећи начин:

$$\min \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$$

при чему, уз $n_k = n-k+t$, важи:

$$(1)\qquad \begin{array}{rcl} 2x_{k,k} + x_{k,k+1} + x_{k,k+2} + \cdots + x_{k,n-1} &=& kn_k, \\ x_{k,k+1} + 2x_{k+1,k+1} + x_{k+1,k+2} + \cdots + x_{k+1,n-1} &=& (k+1)n_{k+1}, \\ x_{k,k+2} + x_{k+1,k+2} + 2x_{k+2,k+2} + \cdots + x_{k+2,n-1} &=& (k+2)n_{k+2}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots && \\ x_{k,n-1} + x_{k+1,n-1} + x_{k+2,n-1} + \cdots + 2x_{n-1,n-1} &=& (n-1)n_{n-1}, \end{array}$$

$$(2)\qquad n_k + n_{k+1} + \ldots, n_{n-1} = n,$$

$$(3)\qquad x_{i,j} \leq n_i n_j, \ \text{ за } \ k \leq i < j \leq n-1,$$

$$(4) \qquad x_{i,i} \leq \binom{n_i}{2}, \quad \text{за} \quad k \leq i \leq n-1.$$

Решићемо проблем за произвољну, фиксирану вредност t. Самим тим ће и n_k имати фиксирану вредност. Касније ћемо одредити екстремну вредност Рандићевог индекса за било које t за које важи $0 \leq t \leq k$. Важи теорема:

Теорема 3.2. [33] *Нека је $G(k,n)$ скуп простих графова са n чворова и нека је минимални степен чворова k. Ако је број чворова степена k једнак $n_k = n-k+t$, $k \leq \frac{n}{2}$, $0 \leq t \leq k$, и t и $n-k$ нису истовремено непаран и паран број, тада је минимална вредност Рандићевог индекса на скупу $G(k,n)$:*

$$R^*_{n-k+t} = \frac{(n-k+t)t}{2k} + \frac{(k-t)(n-k+t)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{(k-t)(k-t-1)}{2(n-1)}$$

Ова вредност се постиже на графовима за које је: $n^*_{n-1} = k-t$, $n^*_{k+1} = n^*_{k+2} = \cdots = n^*_{n-2} = 0$, $x^*_{k,k} = (n-k+t)t/2$, $x^*_{k,n-1} = (k-t)(n-k+t)$, $x^*_{n-1,n-1} = (k-t)(k-t-1)/2$ и сви остали $x^*_{i,j}$ и $x^*_{i,i}$ су једнаки 0.

Напомена: Ако је t непаран и $n-k$ паран број, то $x^*_{k,k}$ нису цели бројеви па решење не би било графовско. У том случају би R^*_{n-k+t} представљало доњу границу минималних вредности Рандићевог индекса.

Приметимо такође, да је за $t = k$ број чворова n_k степена k једнак n. У том случају је број грана графа $\frac{nk}{2}$, те је вредност Рандићевог индекса, после дељења са $\sqrt{kk}$, једнака $\frac{n}{2}$. Овај резултат се поклапа са вредношћу функције R^*_{n-k+t} када је $t = k$. На даље можемо сматрати да је $t < k$.

Како бисмо дошли до доказа, проблем ћемо посматрати у раније изведеном облику (P_2) са малом променом. Нови проблем (P_2') можемо записати у облику:

$$\max \gamma = \max \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j - \sum_{k \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 y_{i,j}$$

при чему, уз $n_k = n-k+t$, важи:

$$(1') \qquad \begin{array}{l} 2y_{k,k} + y_{k,k+1} + y_{k,k+2} + \cdots + y_{k,n-2} = (n-k-1)n_k, \\ y_{k,k+1} + 2y_{k+1,k+1} + y_{k+1,k+2} + \cdots + y_{k+1,n-2} = (n-k-2)n_{k+1}, \\ y_{k,k+2} + y_{k+1,k+2} + 2y_{k+2,k+2} + \cdots + y_{k+2,n-2} = (n-k-3)n_{k+2}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ y_{k,n-2} + y_{k+1,n-2} + y_{k+2,n-2} + \cdots + 2y_{n-2,n-2} = n_{n-2}, \end{array}$$

$$(2) \qquad n_k + n_{k+1} + n_{k+2} + \cdots + n_{n-1} = n,$$

$$(9) \qquad n_i \geq 0, \quad \text{за} \quad k+1 \leq i \leq n-1,$$

$$(10') \qquad y_{i,j} \geq 0, \quad \text{за} \quad k \leq i < j \leq n-2,$$

$$(10'') \qquad y_{i,i} \geq 0, \quad \text{за} \quad k \leq i \leq n-2.$$

Приметимо да су сва ограничења линеарна. Означимо произвољну допустиву тачку проблема (P_2'), односно тачку која задовољава услове $(1'), (2), (9), (10')$ и $(10'')$, са $\xi = (n_{k+1}, \ldots, n_{n-1},\ y_{k,k}, y_{k,k+1}, \ldots, y_{n-2,n-2})$. Одредимо једну тачку ξ_0 за коју важе једнакости и строге неједнакости. Пошто је $n_k = n - k + t$ то је $n_{k+1} + n_{k+2} + \cdots + n_{n-1} = k - t$ и нека су, рецимо, за $k+1 \leq i \leq n-1$, $n_i = \frac{k-t}{n-k-1}$. Тиме су испуњене једнакост (2) и неједнакости (9). Нека су даље, за $k \leq i \leq j \leq n-2$, $y_{i,j} = \frac{n-i-1}{n-k} n_i = \frac{n-i-1}{n-k} \frac{k-t}{n-k-1}$ чиме су испуњене све неједнакости и све једнакости. На основу леме 2.1. можемо закључити да су све допустиве тачке регуларне. Сада, за овај проблем, можемо применити теорему 2.4. На основу ове теореме, ако је регуларна тачка $\xi = (n_{k+1}, \ldots, n_{n-1}, y_{k,k}, y_{k,k+1}, \ldots, y_{n-2,n-2})$ локални максимум функције γ то постоје бројеви λ_0, μ_i, за $i = k, k+1, \ldots, n-2$, и ненегативни бројеви λ_i, за $i = k+1, k+2, \ldots, n-1$, $\mu_{i,j}$, за $k \leq i \leq n-2$ и $i < j \leq n-2$, и $\mu_{i,i}$, за $k \leq i \leq n-2$, такви да за Lagrange -ову функцију Ψ:

$$\begin{aligned}
\Psi &= \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j - \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 y_{i,j} \\
&- \sum_{i=k}^{n-2} \mu_i (y_{k,i} + \cdots + y_{i-1,i} + 2y_{i,i} + y_{i,i+1} + \cdots + y_{i,n-2} - (n-i-1) n_i) \\
&- \lambda_0 (n_k + \cdots + n_{n-1} - n) + \sum_{i=k+1}^{n-1} \lambda_i n_i + \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \mu_{i,j} y_{i,j} + \sum_{i=k}^{n-2} \mu_{i,i} y_{i,i}
\end{aligned}$$

важи:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \Psi}{\partial n_i} = 0, \text{ за } k+1 \leq i \leq n-2, \\
&\frac{\partial \Psi}{\partial n_{n-1}} = 0, \\
&\frac{\partial \Psi}{\partial y_{i,j}} = 0, \text{ за } k \leq i < j \leq n-2, \\
&\frac{\partial \Psi}{\partial y_{i,i}} = 0, \text{ за } k \leq i \leq n-2.
\end{aligned}$$

Конкретно, након одређивања парцијалних извода функције Ψ:

(12) за $k+1 \leq i \leq n-2$,

$$\sum_{j=k}^{j<i} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{i}} \right)^2 n_j + \sum_{i<j}^{j=n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_j - \lambda_0 + \lambda_i + (n-i-1)\mu_i = 0,$$

$$(13) \qquad \sum_{j=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_j - \lambda_0 + \lambda_{n-1} = 0, \text{ за } k+1 \leq i \leq n-2,$$

(14) $$-\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2-\mu_i-\mu_j+\mu_{i,j}=0,\ \text{за}\ k\le i<j\le n-2,$$

(15) $$-2\mu_i+\mu_{i,i}=0,\ \text{за}\ k\le i\le n-2,$$

и

(16) $$\lambda_i n_i=0,\ \text{за}\ k+1\le i\le n-1,$$

(17) $$\mu_{i,j}y_{i,j}=0,\ \text{за}\ k\le i\le n-2,\ i<j\le n-2,$$

(18) $$\mu_{i,i}y_{i,i}=0,\ \text{за}\ k\le i\le n-2.$$

Допустива тачка, за коју су испуњени Kuhn–Tucker -ови услови $(12)-(18)$, биће стационарна тачка проблема (P_2'). Када је $n_k=n-k+t$, показаћемо да је тачка ξ^*, за коју је $n_i^*=0,\ i=k+1,\ldots,n-2,\ n_{n-1}^*=k-t, y_{k,k}^*=\frac{(n-k+t)(n-k-1)}{2}$ и сви остали $y_{i,j}^*$ и $y_{i,i}^*$ једнаки 0, стационарна тачка проблема (P_2') и да је то глобални максимум функције γ на скупу свих стационарних тачака.

Како бисмо доказали *Теорему3.2.* прво ћемо доказати неколико лема.

Лема 3.2. *За сваку стационарну тачку проблема* (P_2') *важи:*

(19) $$y_{i,j}=0,\ \text{за}\ k\le i\le n-2,\ i<j\le n-2.$$

Доказ. С обзиром да су $\mu_{i,i}$, за $k\le i\le n-2$, ненегативни бројеви, то из (15) добијамо да је

(20) $$\mu_i=\frac{\mu_{i,i}}{2}\ge 0,\ \text{за}\ k\le i\le n-2.$$

Из (14), за $k\le i\le n-2,\ i<j\le n-2$, је

$$\mu_{i,j}=\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2+\mu_i+\mu_j>0.$$

На основу (17) и претходног резултата закључујемо да је:

$$0=\mu_{i,j}y_{i,j}=(\mu_i+\mu_j+\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2)y_{i,j}\ge 0,$$

те су $y_{i,j}=0$, за $k\le i\le n-2,\ i<j\le n-2$. □

Лема 3.3. *За сваку стационарну тачку проблема* (P_2') *важи:*

(21) $$\gamma=\frac{1}{2}\lambda_0(k-t)+\frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j.$$

Доказ. Посматрајмо функцију

$$\gamma = \sum_{k\le i<j\le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j - \sum_{k\le i<j\le n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 y_{i,j}$$

Друга сума у функцији γ је једнака нули на основу претходне леме. За функцију γ важи:

$$\begin{aligned}
\gamma &= \sum_{k\le i<j\le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k\le i\le n-1\\ k\le j\le n-1}} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j=k+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j + \frac{1}{2} \sum_{j=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_j n_{n-1} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i=k+1}^{n-2} \left(\sum_{j=k}^{j<i} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{i}}\right)^2 n_j + \sum_{i<j}^{j=n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j \right) n_i.
\end{aligned}$$

Приметимо да је из (12), за $k+1 \le i \le n-2$,

$$(12') \qquad \sum_{j=k}^{j<i} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{i}}\right)^2 n_j + \sum_{i<j}^{j=n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j = \lambda_0 - \lambda_i - (n-i-1)\mu_i,$$

а из (13) је

$$(13') \qquad \sum_{j=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_j = \lambda_0 - \lambda_{n-1}, \text{ за } k+1 \le i \le n-2.$$

После замене једнакости $(12')$ и $(13')$ у функцији γ, добићемо:

$$\begin{aligned}
\gamma &= \frac{1}{2} \sum_{j=k+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j + \frac{1}{2} \sum_{i=k+1}^{n-2} \left(\lambda_0 - \lambda_i - (n-i-1)\mu_i\right) n_i \\
&+ \frac{1}{2} \left(\lambda_0 - \lambda_{n-1}\right) n_{n-1} = \frac{1}{2} \sum_{j=k+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j \\
&+ \frac{1}{2} \left(\sum_{i=k+1}^{n-1} \lambda_0 n_i - \sum_{i=k+1}^{n-1} \lambda_i n_i - \sum_{i=k+1}^{n-2} (n-i-1)\mu_i n_i \right).
\end{aligned}$$

Из (15) је, за $k+1 \le i \le n-2$, $2\mu_i = \mu_{i,i}$ па је $2\mu_i y_{i,i} = \mu_{i,i} y_{i,i} = 0$, на основу (18). Сада, на основу $(1')$ и резултата претходне леме (19), за $k+1 \le i \le n-2$, биће:

$$\begin{aligned}
(n-i-1)\mu_i n_i &= \mu_i(y_{k,i} + \cdots + y_{i-1,i} + 2y_{i,i} + y_{i,i+1} + \cdots + y_{i,n-2}) \\
&= \mu_i(y_{k,i} + \cdots + y_{i-1,i} + y_{i,i+1} + \cdots + y_{i,n-2}) + 2\mu_i y_{i,i} = 0.
\end{aligned}$$

Последња сума у функцији γ је нула и, на основу (16), $\lambda_i n_i = 0$ за $k+1 \le i \le n-1$, па је и сума пре ње једнака нули. Сада лако, на основу (2) и то да је $n_k = n-k+t$, долазимо до резултата:

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{1}{2}\lambda_0(n-n_k) + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j \\ &= \frac{1}{2}\lambda_0(k-t) + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_k n_j.\end{aligned}$$ □

Лема 3.4. *Тачка ξ^*, за коју је $n_i^* = 0,\ i = k+1,\dots,n-2,\ n_{n-1}^* = k-t,\ y_{k,k}^* = \frac{(n-k+t)(n-k-1)}{2}$ и сви остали $y_{i,j}^*$ и $y_{i,i}^*$ једнаки 0, је стационарна тачка проблема (P_2').*

Доказ. Наведена тачка, укључујући $n_k = n-k+t$, испуњава услове $(1')$, (2), (9), $(10')$ и $(10'')$ те је допустива тачка. Покажимо да постоје бројеви: λ_0, μ_i, за $i = k, k+1, \dots, n-2$ и ненегативни бројеви: λ_i, за $i = k+1, k+2, \dots, n-1$, $\mu_{i,j}$, за $k \le i \le n-2,\ i < j \le n-2$ и $\mu_{i,i}$, за $k \le i \le n-2$ за које су испуњени услове $(12-18)$. Ставимо $\mu_i^* = \mu_{i,i}^* = 0$, за $k \le i \le n-2$, па из (14) добијамо ненегативне бројеве $\mu_{i,j}^* = (\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2$, за $k \le i \le n-2$, $i < j \le n-2$. Испуњени су услови (14), (15) и (18), а такође и услов (17) пошто је $\mu_{k,k} = 0$ и, сем $y_{k,k}^*$, сви остали $y_{i,j}^*$ и $y_{i,i}^*$ једнаки 0. Како је $n_{n-1}^* = k-t \ne 0$, мора бити $\lambda_{n-1}^* = 0$ према (16), па је из (13) $\lambda_0^* = (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2(n-k+t)$ и, за $k+1 \le i \le n-2$, из (12) биће:

$$\begin{aligned}\lambda_i^* &= \lambda_0^* - \sum_{j=k}^{j<i}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{i}}\right)^2 n_j^* - \sum_{i<j}^{j=n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j^* - (n-i-1)\mu_i^* \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(n-k+t) - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}}\right)^2(n-k+t) \\ &- \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(k-t) = -\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(k-t) \\ &+ \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k+t) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2(n-k+t)}{\sqrt{k}} - \frac{n-2k+2t}{\sqrt{n-1}} - \frac{n}{\sqrt{i}}\right) \ge 0\end{aligned}$$

Овим су испуњени сви услови. □

Лема 3.5. *Функција γ постиже максималну вредност, на скупу свих стационарних тачака, у тачки ξ^*.*

Доказ. Разматраћемо два случаја: када је максимални степен чворова $n-1$ и када је максимални степен чворова $m < n-1$.
Први случај: Максимални степен чворова је $n-1$. Тада је $n_{n-1} \ne 0$ и $\lambda_{n-1} = 0$, на основу (16). Из (13) је:

$$\lambda_0 = \sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_j, \tag{22}$$

и из (2), с обзиром да је $n_k = n - k + t$, је:

$$n_{n-1} = k - t - n_{k+1} - n_{k+2} - \cdots - n_{n-2}. \tag{23}$$

Када заменимо λ_0 из (22) и n_{n-1} из (23) у (21), добијамо:

$$\begin{aligned}
\gamma &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k(k-t) + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_j(k-t) \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j n_k + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k\left(k - t - \sum_{j=k+1}^{n-2} n_j\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k(k-t) + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (k-t)n_j \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\right) n_k n_j \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k(k-t) + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (k-t)n_j \\
&- \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_k n_j \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k(k-t) \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{n}{\sqrt{j}} + \frac{n-2k+2t}{\sqrt{n-1}} - \frac{2(n-k+t)}{\sqrt{k}}\right) n_j
\end{aligned}$$

За $j \geq k$ је $\frac{1}{\sqrt{j}} \leq \frac{1}{\sqrt{k}}$ па је $\frac{n}{\sqrt{j}} + \frac{n-2k+2t}{\sqrt{n-1}} - \frac{2(n-k+t)}{\sqrt{k}} \leq \frac{n-2k+2t}{\sqrt{n-1}} - \frac{n-2k+2t}{\sqrt{k}} \leq 0$. Закључујемо да функција γ постиже максималну вредност за $n_j^* = 0$, $j = k+1, \ldots, n-2$ и $n_{n-1}^* = k - t$. Ова максимална вредност је:

$$\gamma^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k+t)(k-t).$$

Други случај: Максимални степен чворова је m, где је $k < m < n-1$. Тада је: $n_{n-1} = n_{n-2} = \cdots = n_{m+1} = 0$, $n_m \neq 0$ и $\lambda_m = 0$, на основу (16). У том случају последње једнакости у (12) биће:

$$\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_j - \lambda_0 + (n-m-1)\mu_m = 0. \tag{13''}$$

Пошто је $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} \neq 0$ то је $\mu_{m,m} = 0$ (на основу (18)) и $\mu_m = 0$ (на основу (15)). Поновимо доказ као у првом случају. Добиће се да је максимална вредност функције γ:

$$\gamma_m^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-k+t)(k-t)$$

и да се постиже за: $n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-1$, $n_m = k-t$, $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2}$ и сви остали $y_{i,j} = 0$. На крају, видимо да је:

$$\gamma_m^* < \gamma^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k+t)(k-t). \qquad \square$$

Лема 3.6. *Решење проблема (P_2') је γ^* и постиже се у тачки ξ^*.*

Доказ. Доказали смо да је γ^* максимална вредност функције γ која се постиже, на скупу свих стационарних тачака, у тачки ξ^*. На основу тога следи да је γ^* решење проблема (P_2') које се постиже у тачки ξ^*. Ако претпоставимо да постоји нека друга тачка $\overline{\xi}$ за коју функција γ постиже максималну вредност $\gamma(\overline{\xi}) > \gamma^*$, тада би $\overline{\xi}$ била стационарна тачка проблема (P_2') те би важело $\gamma^* \geq \gamma(\overline{\xi})$. $\square$

Доказ теореме 3.2. Сам доказ теореме следи на основу претходне леме 3.6. Видели смо да за тачку ξ^*, у којој се постиже максимална вредност функције γ и уједно минимална вредност Рандићевог индекса, важи: $n_i^* = 0$, $i = k+1, \ldots, n-2$, $n_{n-1}^* = k-t$, $y_{k,k}^* = \frac{(n-k+t)(n-k-1)}{2}$ и сви остали $y_{i,j}^*$ и $y_{i,i}^*$ једнаки 0. Сада применимо једнакости:

$$(8) \qquad \begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \leq i < n-1,\ i < j \leq n-1, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \leq i \leq n-1. \end{array}$$

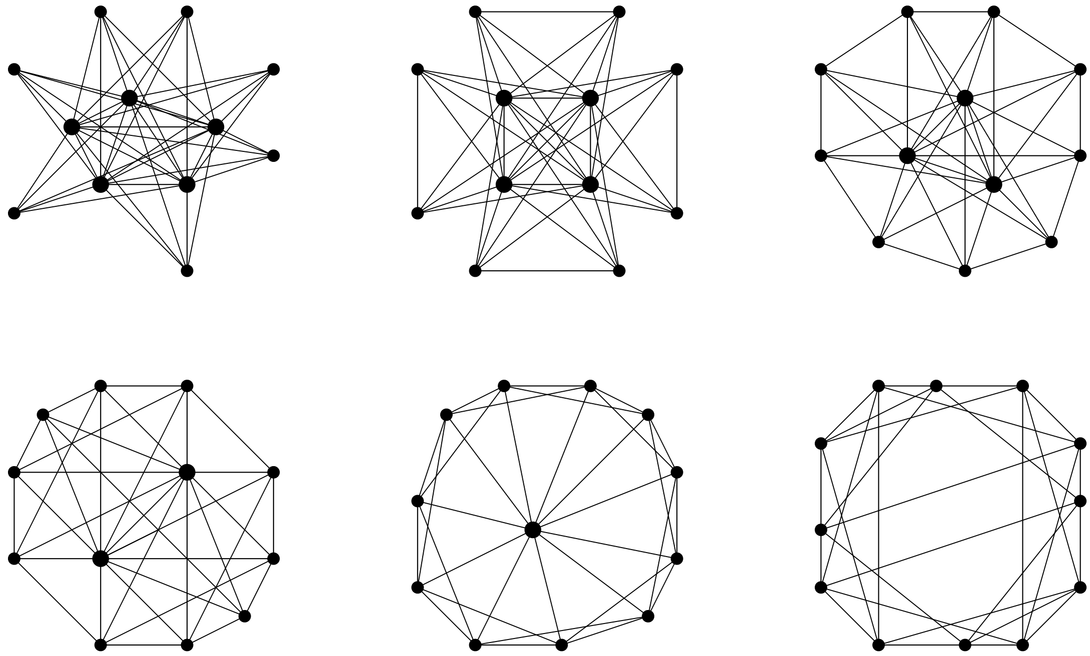
Добијамо да је: $x_{k,k}^* = \binom{n_k^*}{2} - y_{k,k}^* = \frac{(n-k+t)(n-k+t-1)}{2} - \frac{(n-k+t)(n-k-1)}{2} = \frac{(n-k+t)t}{2}$, $x_{k,n-1}^* = n_k^* n_{n-1}^* - y_{k,n-1}^* = (n-k+t)(k-t) - 0 = (k-t)(n-k+t)$ и $x_{n-1,n-1}^* = \binom{n_{n-1}^*}{2} - y_{n-1,n-1}^* = \frac{(k-t)(k-t-1)}{2} - 0 = \frac{(k-t)(k-t-1)}{2}$ и сви остали $x_{i,j}^*$ и $x_{i,i}^*$ једнаки 0. Сада можемо, на основу дефиниције Рандићевог индекса $R(G) = \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$, добити минималну вредност $R_{n-k+t}^* = \frac{(n-k+t)t}{2k} + \frac{(k-t)(n-k+t)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{(k-t)(k-t-1)}{2(n-1)}$, а можемо и на основу везе Рандићевог индекса са функцијом γ, $R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\gamma$ (из (6) и (8)). Несумњиво, а и лако се показује, да су резултати исти. $\square$

На слици 3.1 представљени су графови реда $n = 12$ на којима Рандићев индекс постиже минималну вредност, када је минимални степен чворова $k = 5$ и када параметар t узима вредности од 0 до 5.

Теорема 3.3. [33] *Нека је $G(k,n)$ скуп простих графова са n чворова и нека је минимални степен чворова k. Ако је $n_k \geq n-k$, $(k \leq n/2)$ тада је минимална вредност Рандићевог индекса на скупу $G(k,n)$:*

$$R^* = \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{k(k-1)}{2(n-1)}$$

Ова вредност се постиже на графу $K_{k,n-k}^*$, где је $n_k^* = n-k$, $n_{n-1}^* = k$, $n_{k+1}^* = n_{k+2}^* = \cdots = n_{n-2}^* = 0$, $x_{k,n-1}^* = k(n-k)$, $x_{n-1,n-1}^* = \frac{k(k-1)}{2}$ и сви остали $x_{i,j}^*$ су једнаки 0.



Слика 3.1. Екстремни графови за: $n = 12,\ k = 5$ и $t = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Доказ. Нађимо парцијални извод функције $R^*_{n-k+t} = \frac{(n-k+t)t}{2k} + \frac{(k-t)(n-k+t)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{(k-t)(k-t-1)}{2(n-1)}$ по t, за $0 \leq t \leq k$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial R^*_{n-k+t}}{\partial t} &= \frac{n-k+2t}{2k} + \frac{-n+2k-2t}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{-2k+2t+1}{2(n-1)} \\
&= \frac{n-2k+2t}{2k} + \frac{1}{2} - \frac{n-2k+2t}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{n-2k+2t}{2(n-1)} - \frac{1}{2} \\
&= \frac{n-2k+2t}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \geq 0.
\end{aligned}$$

Функција R^*_{n-k+t} је растућа на интервалу $[0, k]$ и постиже минималну вредност $R^* = \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{k(k-1)}{2(n-1)}$ за $t = 0$. $\square$

Глава 4

Максимална вредност Рандићевог индекса

Проблем одређивања максималне вредности Рандићевог индекса на простим графовима решава прво S. Fajtlowicz графовском методом у раду [14]. Затим и LJ. Pavlović и I. Gutman долазе до истог резултата методом линеарног програмирања [28]. У нешто измењеном облику биће презентован други резултат.

Разматрамо просте графове G са $n \geq 2$ чворова (граф са једним чвором нема гране и вредност Рандићевог индекса је нула). На основу дефиниције Рандићевог индекса $R(G) = \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$ важи:

Лема 4.1. *Ако је граф G састављен од компоненти $G_1, G_2, \ldots, G_p$, тада је $R(G) = R(G_1) + R(G_2) + \cdots + R(G_p)$.*

Доказ. Уколико је граф састављен од компоненти, сабирање тежина грана у свакој компоненти даје вредности Рандићевог индекса по компонентама. Укупан збир вредности Рандићевих индекса свих компоненти је уједно и збир тежина свих грана графа, т.ј. вредност Рандићевог индекса графа. □

Лема 4.2. *Ако је граф G реда n регуларан граф степена $r > 0$, тада је $R(G) = \frac{n}{2}$.*

Доказ. Знамо да регуларан граф G степена r има $m = \frac{n \cdot r}{2}$ грана. Свака грана има исту тежину $\frac{1}{\sqrt{rr}} = \frac{1}{r}$. По дефиницији видимо да је вредност Рандићевог индекса $R(G) = \frac{\frac{n \cdot r}{2}}{r} = \frac{n}{2}$. □

Видимо да на вредност Рандићевог индекса регуларног графа не утиче степен регуларности r. На исту вредност неће утицати ни ако је граф G састављен од регуларних компоненти. Степени регуларности ових компоненти могу бити и различити, али позитивни бројеви.

Лема 4.3. *Ако је граф G реда n састављен од регуларних компоненти ненултог степена, тада је $R(G) = \frac{n}{2}$.*

Доказ. Нека су компоненте графа G: $G_1, G_2, \ldots, G_p$ реда $n_1, n_2, \ldots, n_p$, респективно, при чему је $n_1 + n_2 + \cdots + n_p = n$. Вредности Рандићевог индекса компоненти $G_1, G_2, \ldots, G_p$, на основу претходне леме 4.2. су: $\frac{n_1}{2}, \frac{n_2}{2}, \ldots, \frac{n_p}{2}$, респективно. На основу леме 4.1., вредност Рандићевог индекса графа G је: $R(G) =$

$R(G_1) + R(G_2) + \cdots + R(G_p) = \frac{n_1}{2} + \frac{n_2}{2} + \cdots + \frac{n_p}{2} = \frac{n_1+n_2+\cdots+n_p}{2} = \frac{n}{2}$, што је и требало доказати. $\square$

Докажимо сада следеће тврђење:

Теорема 4.1. [28] *За било који граф G реда n је вредност Рандићевог индекса $R(G) \leq \frac{n}{2}$. Максимална вредност $\frac{n}{2}$ се постиже на графовима у којима су све компоненте ненултог степена регуларности.*

Доказ. Граф са два чвора може бити без гране или са једном граном. У првом случају је вредност Рандићевог индекса 0, а у другом $\frac{1}{\sqrt{1 \cdot 1}} = 1$. У другом случају је то регуларан граф степена 1 и вредност је такође $\frac{2}{2} = 1$. Теорема је испуњена. Нека је $n \geq 3$.

У почетку разматрајмо графове са n чворова без изолованих чворова. Значи, најнижи степен чворова је $k = 1$. Раније изведену вредност Рандићевог индекса,

$$R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}, \tag{6}$$

с обзиром да је $k = 1$, можемо записати у облику:

$$R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}. \tag{6*}$$

при чему су испуњени услови:

$$\begin{array}{ccccccccc} 2x_{1,1} & + & x_{1,2} & + & x_{1,3} & + \cdots + & x_{1,n-1} & = & n_1, \\ x_{1,2} & + & 2x_{2,2} & + & x_{2,3} & + \cdots + & x_{2,n-1} & = & 2n_2, \\ x_{1,3} & + & x_{2,3} & + & 2x_{3,3} & + \cdots + & x_{3,n-1} & = & 3n_3, \\ \multicolumn{9}{c}{\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots} \\ \multicolumn{9}{c}{x_{1,n-1} + x_{2,n-1} + x_{3,n-1} + \cdots + 2x_{n-1,n-1} = (n-1)n_{n-1},} \end{array} \tag{1*}$$

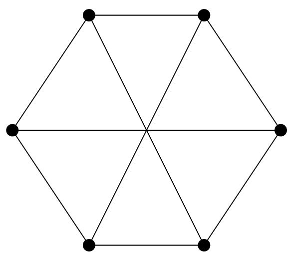
$$n_1 + n_2 + n_3 + \cdots + n_{n-1} = n. \tag{2*}$$

Очигледно, максимална вредност Рандићевог индекса графа G је $\frac{n}{2}$ ако и само ако је $x_{i,j} = 0$ за $1 \leq i < j \leq n-1$. Видимо да претходни резултат можемо исказати и следећим речима: Рандићев индекс графа G без изолованих чворова има максималну вредност ако и само ако граф G нема гране које повезују чворове различитог степена. Уочимо, такође, да вредности променљивих $x_{1,1}, x_{2,2}, \ldots, x_{n-1,n-1}$ нису у потпуности одређене. Претходни резултат можемо и овако формулисати: Рандићев индекс графа G без изолованих чворова има максималну вредност ако и само ако граф G садржи само гране које повезују чворове истог степена. Ово тврђење нам и указује на то да се максимална вредност постиже управо на графовима у којима су све компоненте ненултог степена регуларности.

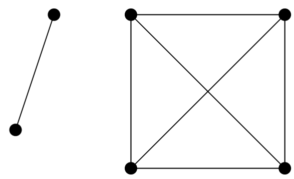
Као што је поменуто на почетку, разматрали смо графове са n чворова без изолованих чворова и добили да се максимална вредност Рандићевог индекса $\frac{n}{2}$

достиже на графовима у којима су све компоненте ненултог степена регуларности. Нека је, сада, G^1 граф са p изолованих чворова, где је $p > 0$. Нека је G^2 граф са $n - p$ чворова који настаје од графа G^1 брисањем свих изолованих чворова. Тада је граф G^2 без изолованих чворова па, на основу раније показаног, има вредност Рандићевог индекса $R(G^2) = \frac{n-p}{2} < \frac{n}{2}$. На основу леме 4.1., графови G^1 и G^2 имају једнаке вредности Рандићевог индекса. Закључујемо да вредност Рандићевог индекса било ког графа G реда n не може бити већа од $\frac{n}{2}$. Тиме је теорема у потпуности доказана. □

На сликама 4.1. и 4.2. видимо примере графова реда $n = 6$ на којима се постиже максимална вредност Рандићевог индекса.



Слика 4.1. Регуларан граф степена 3.



Слика 4.2. Граф $G = K_2 \bigcup K_4$.

Глава 5

Минимална вредност Рандићевог индекса за $k \geq \frac{n}{2}$

Проблем који су поставили B. Bollobas и P. Erdos [4], **одредити минималну вредност Рандићевог индекса на скупу простих графова са n чворова при чему је минимални степен чворова** k, поделићемо у два дела. У овој глави решићемо дати проблем у случају када је $k \geq \frac{n}{2}$, а решење у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$ биће дато у наредној глави.

5.1 Хипотезе и опис проблема

Као што смо раније имали, $G(k,n)$ означава скуп простих графова са n чворова чији је минимални степен чворова k. За $k=1$ проблем су решили B. Bollobas и P. Erdos [4]. Решавајући проблем за $k=2$, C. Delorme, O. Favaron и D. Rautenbach [10] постављају и прву претпоставку општег решења.

Хипотеза 5.1. [10] *Ако је граф G реда n и $\delta(G) \geq k$, тада је:*

$$R(G) \geq \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{k(k-1)}{2(n-1)},$$

при чему је једнакост испуњена ако и само ако је $G = K^*_{k,n-k}$.

Раније смо видели да је ова претпоставка потврђена у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$ и $n_k \geq n-k$ [33]. Међутим, испоставило се да у општем случају она не важи. Након што су G. Caporossi и P. Hansen направили систем AutoGraphix долази се до много тачнијих претпоставки у вези графова. M. Aouchiche и P. Hansen 2007. године у раду [1] износе списак хипотеза о Рандићевом индексу. Управо ту се налази и исправљена хипотеза у вези проблема који су поставили B.Bollobas и P.Erdos.

Нека је

$$k_n = \begin{cases} \frac{n+2}{2} & \text{за } n \equiv 0 (\text{mod } 4), \\ \frac{n+3}{2} & \text{за } n \equiv 1 (\text{mod } 4), \\ \frac{n+4}{2} & \text{за } n \equiv 2 (\text{mod } 4), \\ \frac{n+3}{2} & \text{за } n \equiv 3 (\text{mod } 4), \end{cases} \qquad p = \begin{cases} \frac{n-2}{2} & \text{за } n \equiv 2 (\text{mod } 4) \text{ и } k \text{ паран}, \\ \lceil \frac{n}{2} \rceil & \text{за } n \equiv 3 (\text{mod } 4), \\ \lfloor \frac{n}{2} \rfloor & \text{у осталим случајевима}, \end{cases}$$

и нека са $\mathcal{G}_{n,p,k}$ означимо фамилију комплемената графова који се састоји од $(n-k-1)$-регуларног графа од p чворова и $n-p$ изолованих чворова (слика 5.1.).

$G_{n,p,k}$ $\qquad$ $\overline{G}_{n,p,k}$

Слика 5.1. Граф из $\mathcal{G}_{n,p,k}$ и његов комплемент, за $n = 7, k = 5$, и $p = 4$.

Фамилију $\mathcal{G}_{n,p,k}$ можемо такође описати као фамилију графова са n чворова која настаје из комплетног графа K_n брисањем грана $(n-k-1)$-регуларног графа од p чворова.

Хипотеза 5.2. [1] *Ако је граф G реда n и $\delta(G) \geq k$, тада је:*

$$R(G) \geq \begin{cases} \frac{k(k-1)}{2(n-1)} + \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} & \text{за } k < k_n, \\ \frac{(n-p)(n-p-1)}{2(n-1)} + \frac{p(p+k-n)}{2k} + \frac{p(n-p)}{\sqrt{k(n-1)}} & \text{за } k_n \leq k \leq n-2, \end{cases}$$

где су k_n и p претходно дефинисани, при чему је испуњена једнакост ако и само ако је $G = K^*_{k,n-k}$ за $k < k_n$, и ако и само ако је $G \in \mathcal{G}_{n,p,k}$ (описано изнад) за $k \geq k_n$.

Видимо да се за $1 \leq k \leq \frac{n}{2}$ обе хипотезе поклапају, док су за $k > \frac{n}{2}$ различите. Оба израза доње границе за вредност Рандићевог индекса можемо трансформисати у нове облике. За први израз важи: $\frac{k(k-1)}{2(n-1)} + \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} = \frac{n}{2} - \frac{n}{2} + \frac{k(k-n+n-1)}{2(n-1)} + \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} = \frac{n}{2} - \frac{n}{2} + \frac{k}{2} - \frac{k(n-k)}{2(n-1)} + \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} = \frac{n}{2} - \frac{n-k}{2} + \frac{k(n-k)}{\sqrt{k(n-1)}} - \frac{k(n-k)}{2(n-1)} = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{k} - \frac{2}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{1}{n-1}\right)k(n-k) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 k(n-k)$. За други израз важи: $\frac{(n-p)(n-p-1)}{2(n-1)} + \frac{p(p+k-n)}{2k} + \frac{p(n-p)}{\sqrt{k(n-1)}} = \frac{n-p}{2} - \frac{(n-p)p}{2(n-1)} + \frac{p}{2} - \frac{p(n-p)}{2k} + \frac{p(n-p)}{\sqrt{k(n-1)}} = \frac{n-p+p}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{k} - \frac{2}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{1}{n-1}\right)p(n-p) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 p(n-p)$. Сада можемо претходну хипотезу (дату у [1]) исказати у новом облику.

Хипотеза 5.3. [27] *Ако је граф G реда n и $\delta(G) \geq k$, тада је:*

$$R(G) \geq \begin{cases} \frac{n}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 k(n-k) & \text{за } k \leq \frac{n}{2}, \\ \frac{n}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 p(n-p) & \text{за } \frac{n}{2} \leq k \leq n-2, \end{cases}$$

где је

$$p = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{за } n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 4); \quad \mathrm{n} \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k непаран}, \\ \lfloor \frac{n}{2} \rfloor \text{ или } \lceil \frac{n}{2} \rceil & \text{за } n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k паран}; \ \mathrm{n} \equiv 3(\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k паран}, \\ \lfloor \frac{n}{2} \rfloor & \text{за } n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k непаран}, \\ \frac{n-2}{2} \text{ или } \frac{n+2}{2} & \text{за } n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k паран}, \\ \lceil \frac{n}{2} \rceil & \text{за } n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4) \text{ и k непаран}. \end{cases}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G = K^*_{k,n-k}$, за $k \leq \frac{n}{2}$, и ако и само ако је $G \in \mathcal{G}_{n,p,k}$ (описано раније), за $k > \frac{n}{2}$.

Овде ће бити представљен доказ управо измењене хипотезе Aouchiche и Hansen за $\frac{n}{2} \leq k \leq n-2$. У доста поједностављеном облику методе квадратног програмирања коју смо раније видели (у трећој глави), доћи ћемо до оптималног решења у више случајева. Конкретно, проблем ћемо поделити у следећа три случаја: 1) $n \equiv 0(mod\ 4)$, или је $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k је непаран број; 2) n је непаран број; 3) $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k је паран број.

B. Liu и J. Liu доказују први и други случај слично као у радовима [31, 33], односно као у трећој глави. Заједно, LJ. Pavlović, M. Stojanović и аутор ове дисертације, долазе до оптималног решења у трећем (видеће се) најтежем случају. У поновном сагледавању резултата аутор ове дисертације и LJ. Pavlović поједностављују све претходне доказе и уместо доказа који је садржао 21 лему дају доказ који се базира на само пет лема.

Поновимо математички опис наведеног проблема, који смо дефинисали у трећој глави. Проблем P одређивања минимума $\min\{R(G) : G \in G(k,n)\}$ можемо представити у следећем облику:

$$\min \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$$

при чему, уз $\frac{n}{2} \leq k \leq n-2$, важи:

$$(1) \qquad \begin{array}{l} 2x_{k,k} + x_{k,k+1} + x_{k,k+2} + \cdots + x_{k,n-1} = kn_k, \\ x_{k,k+1} + 2x_{k+1,k+1} + x_{k+1,k+2} + \cdots + x_{k+1,n-1} = (k+1)n_{k+1}, \\ x_{k,k+2} + x_{k+1,k+2} + 2x_{k+2,k+2} + \cdots + x_{k+2,n-1} = (k+2)n_{k+2}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_{k,n-1} + x_{k+1,n-1} + x_{k+2,n-1} + \cdots + 2x_{n-1,n-1} = (n-1)n_{n-1}, \end{array}$$

$$(2) \qquad n_k + n_{k+1} + \ldots, n_{n-1} = n$$

$$x_{i,j} \leq n_i n_j, \text{ за } k \leq i < j \leq n-1, \tag{3}$$

$$x_{i,i} \leq \binom{n_i}{2}, \text{ за } k \leq i \leq n-1 \tag{4}$$

$$x_{i,j}, n_i \text{ ненегативни цели бројеви за } k \leq i \leq j \leq n-1. \tag{5}$$

Неједнакости (3) и (4) су квадратне, те је проблем P *проблем квадратног програмирања*.

Као што је раније наведено, на основу једнакости (1) и (2), Рандићев индекс $R(G) = \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$ можемо представити и у следећем облику:

$$R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}. \tag{6}$$

Сада дефинишимо нову функцију:

$$\gamma = \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}. \tag{7}$$

видимо да се проблем P минимизације може преформулисати у проблем максимизације γ функције уз иста ограничења.

И на крају, након увођења смена:

$$\begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \leq i < n-1,\ i < j \leq n-1, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \leq i \leq n-1. \end{array} \tag{8}$$

долазимо до новог описа проблема (означимо га са $\overline{P}$) у облику:

$$\max \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j - \sum_{k \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 y_{i,j}$$

при чему, уз $\frac{n}{2} \leq k \leq n-2$, важи:

$$\begin{array}{l} 2y_{k,k} + y_{k,k+1} + y_{k,k+2} + \cdots + y_{k,n-2} = (n-k-1)n_k, \\ y_{k,k+1} + 2y_{k+1,k+1} + y_{k+1,k+2} + \cdots + y_{k+1,n-2} = (n-k-2)n_{k+1}, \\ y_{k,k+2} + y_{k+1,k+2} + 2y_{k+2,k+2} + \cdots + y_{k+2,n-2} = (n-k-3)n_{k+2}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ y_{k,n-2} + y_{k+1,n-2} + y_{k+2,n-2} + \cdots + 2y_{n-2,n-2} = n_{n-2}, \end{array} \tag{1'}$$

$$n_k + n_{k+1} + n_{k+2} + \cdots + n_{n-1} = n, \tag{2}$$

$$n_i \geq 0, \qquad \text{за } k \leq i \leq n-1, \tag{9}$$

(10) $$y_{i,j} \geq 0, \qquad \text{за} \quad k \leq i \leq j \leq n-2,$$

(11) $$n_{n-1} \leq k,$$

(5′) $$y_{i,j},\ n_i \quad \text{су цели бројеви за} \ \ k \leq i \leq j \leq n-1.$$

Нека је $(n_k, n_{k+1}, \ldots, n_{n-1}, y_{k,k}, y_{k,k+1}, \ldots, y_{n-2,n-2})$ допустива тачка проблема $\overline{P}$; означимо је краће са Ω или (N, Y). Дефинишимо функције $\gamma_1 = \sum_{k \leq i < j \leq n-1}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2 n_i n_j$ и $\gamma_2 = -\sum_{k \leq i < j \leq n-2}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2 y_{i,j}$. Несумњиво важи да је $\max \gamma \leq \max \gamma_1 + \max \gamma_2$, а за све максималне вредности важе иста ограничења $(1'), (2), (9), (10), (11)$ и $(5')$. Лако је уочити да функција γ_2 не може бити позитивна. Такође, максимална вредност функције γ_2 може бити нула, т.ј. $\max \gamma_2 = 0$ када су сви $y_{i,j} = 0$ за $k \leq i \leq n-2$ и $i < j \leq n-2$ и остали $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$ за $k \leq i \leq n-2$. Приметимо да променљиве n_i испуњавају услове $(2), (9)$, (11) и $(5')$. На основу тога, а с обзиром да је $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$ за $k \leq i \leq n-2$, можемо закључити да постоји више екстремних тачака за функцију γ_2. Означимо са $N^* = (n_k^*, n_{k+1}^*, \ldots, n_{n-1}^*)$ оптималну тачку функције γ_1. Нека је $Y^* = (y_{k,k}^*, y_{k,k+1}^*, \ldots, y_{n-2,n-2}^*)$, где је $y_{i,j}^* = 0$ за $i \neq j$ и $y_{i,i}^* = \frac{(n-i-1)n_i^*}{2}$. Самим тим је Y^* оптимална тачка функције γ_2 ако су $y_{i,j}^*$ цели бројеви. Такође, (N^*, Y^*), коју можемо означити са Ω^*, ће бити оптимална тачка функције γ.

Закључили смо да тамо где функција γ_1 постиже максималну вредност, уколико функција γ_2 буде једнака нули, биће и максимална вредност функције γ. Значи, прво ћемо тражити максималну вредност функције γ_1. С обзиром на то, приметимо да за одређивање тачке N^* не треба узимати у обзир ограничења $(1')$ и (10), јер су за функцију γ_1 само ограничења (2), (9) и (11) битна. У овом случају, за $\frac{n}{2} \leq k \leq n-2$, и ограничење (11) није неопходно, а компликовало би доказивање, те ћемо и њега изоставити. У почетку ћемо ограничење $(5')$ изоставити, а питање целобројности ћемо разматрати на крају. Због тога ћемо често додавати нова ограничења.

Посебну важност при доказивању има теорема 2.2. (видети другу главу).

5.2 Први случај: $n \equiv 0(mod\ 4)$, или $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k непарно

Разматрамо проблем $\overline{P^1}$ максимизације функције γ_1:

$$\max \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j,$$

при чему важи:

(2) $$n_k + n_{k+1} + \cdots + n_{n-1} = n,$$

(9) $$n_i \geq 0 \ \text{ за } \ k \leq i \leq n-1.$$

Означимо са N допустиву тачку $(n_k, \ldots, n_{n-1})$ проблема $\overline{P^1}$ (очигледно такве тачке постоје). Показаћемо да је N_1^* оптимална тачка проблема $\overline{P^1}$, где је тачка N_1^* одређена са: $n_k = \frac{n}{2}, n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq n-2$, и $n_{n-1} = \frac{n}{2}$.

Лема 5.1. *Функција γ_1, за коју су испуњени услови (2) и (9), постиже максималну вредност $\frac{n^2}{4}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2$ у тачки $(\frac{n}{2}, 0, 0, \ldots, 0, \frac{n}{2})$.*

Доказ. Као што смо већ рекли, цео овај одељак је посвећен првом случају. Даље ћемо овај случај поделити у два подслучаја: први подслучај $(1a)$ $\Delta(G) = n-1$, и други подслучај $(1b)$ $\Delta(G) < n-1$.

Подслучај $1a$. Из једнакости (2) добијамо да је $n_{n-1} = n - \sum_{j=k}^{n-2} n_j$. За функцију γ_1 важе трансформације:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \sum_{k\leq i<j\leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j \\
&= \sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j + \sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i n_{n-1} \\
&= \sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j + \sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i \left(n - \sum_{j=k}^{n-2} n_j\right) \\
&= n\sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i^2 \\
&+ \sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\right) n_i n_j \\
&= n\sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i^2 \\
&- \sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) \\
&- \sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i n_j \\
&= n\sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \sum_{i=k}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i^2 \\
&- 2\sum_{k\leq i<j\leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i n_j.
\end{aligned}$$

Коначно долазимо до једног погодног облика функције γ_1:

$$\gamma_1 = -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i, \tag{12}$$

из ког се јасно види да важи неједнакост:

$$\gamma_1 \leq -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i,$$

пошто је $(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}) \leq (\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}})$ за $k \leq i \leq n-2$. Ако уведемо смену $x = \sum_{i=k}^{n-2}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}})n_i$, важиће неједнакост:

$$\gamma_1 \leq -x^2 + nx\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right).$$

Нова функција $g(x) = -x^2+nx\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)$ може се представити у облику: $g(x) = -x^2+nx\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)-\frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2+\frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 = \frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(x-\frac{n}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)^2$. Ова функција очигледно има максималну вредност за $x = \frac{n}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)$, што је могуће за $n_k = \frac{n}{2},\ n_{k+1} = ... = n_{n-2} = 0$. Функција γ_1 може достићи максималну вредност функције $g(x)$ за $n_k = \frac{n}{2},\ n_{k+1} = ... = n_{n-2} = 0$ и $n_{n-1} = \frac{n}{2}$ при чему су испуњени услови (2) и (9). Ова максимална вредност γ_1^* функције γ_1 је:

$$\gamma_1^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\frac{n^2}{4}.$$

Подслучај $1b$. Нека је највиши степен чворова $m = \Delta(G) \leq n-1$. У том случају, понављајући сличан доказ као у подслучају $1a$, долазимо до сличног резултата. Максимална вредност функције γ_1 је:

$$\gamma_1^m = \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{n^2}{4}.$$

Ова вредност се постиже у тачки за коју је: $n_k = \frac{n}{2},\ n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq m-1$, и $n_m = \frac{n}{2}$.

Пошто је $\gamma_1^* > \gamma_1^m$, у овом случају можемо закључити да је γ_1^* максимална вредност која се постиже у тачки $N_1^* = (\frac{n}{2}, 0, 0, \ldots, 0, \frac{n}{2})$ на скупу свих допустивих тачака. $\square$

Показали смо да функција γ_1 постиже максималну вредност у тачки N_1^*. Даљим разматрањем видимо да γ_2 постиже максималну вредност, која је једнака 0, у тачки Y_1^* која је дефинисана са $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n}{4}$ и сви остали $y_{i,j} = 0$. Све вредности променљивих, $n_k, n_{k+1}, \ldots, n_{n-1}, y_{k,k}, y_{k,k+1}, \ldots, y_{n-2,n-2}$, су цели ненегативни бројеви (с обзиром да посматрамо случај:$n \equiv 0(mod\ 4)$, или $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k непарно). Помоћу веза

$$(8) \qquad \begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \leq i < n-1,\ i < j \leq n-1, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \leq i \leq n-1, \end{array}$$

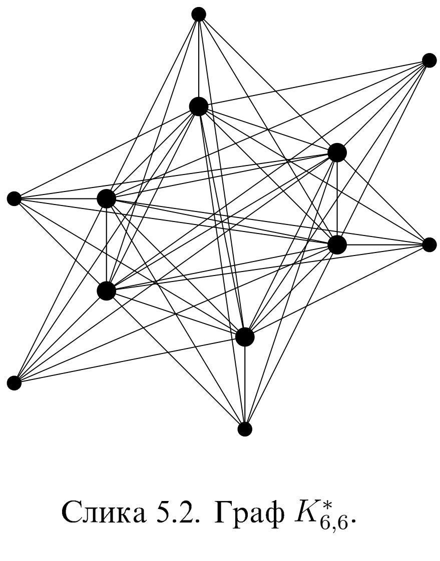
сада можемо добити и вредности почетних променљивих. Уз $n_k = n_{n-1} = \frac{n}{2}$ и остали $n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq n-2$, биће (с обзиром да је $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n}{4}$ и сви остали $y_{i,j} = 0$): $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)n}{4} = \frac{n(n-2)}{8} - \frac{(n-k-1)n}{4} = \frac{n(2k-n)}{8}, x_{k,n-1} = \frac{n}{2}\frac{n}{2} - 0 = \frac{n^2}{4}$, $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2} - y_{n-1,n-1} = \frac{n_{n-1}(n_{n-1}-1)}{2} - 0 = \frac{n(n-2)}{8}$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ једнаки нули. Све ове вредности су цели ненегативни бројеви те можемо закључити да се за њих остварује минимална вредност Рандићевог индекса на посматраном скупу графова $G(k,n)$ у случају: $k \geq \frac{n}{2}$ и $n \equiv 0(mod\ 4)$, или $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k непаран број. У том случају је $p = \frac{n}{2}$ те је минимална вредност Рандићевог индекса $R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n^2}{4} = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 p(n-p)$ која се постиже на било ком графу $G \in \mathcal{G}_{n,p,k}$, односно $G \in \mathcal{G}_{n,n/2,k}$. На крају, претходна разматрања можемо формулисати у облику теореме.

Теорема 5.1. *Ако је* $n \equiv 0(\mathrm{mod}\ 4)$*, или ако је* $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ *и* k *непаран број, и ако* $G \in G(k,n)$*, тада је*

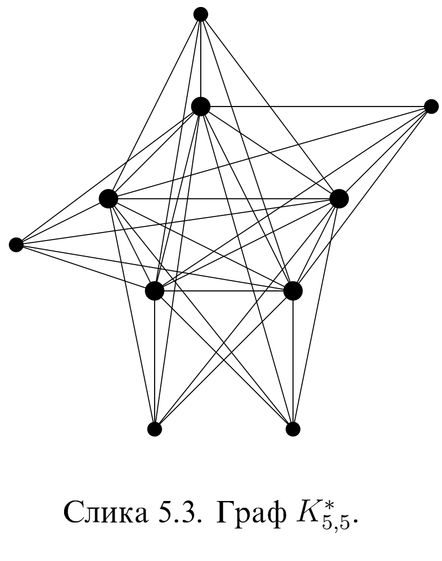
$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{n^2}{8}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2.$$

Ова вредност се постиже на било ком графу $G \in \mathcal{G}_{n,n/2,k}$ *за који је* $n_k = n_{n-1} = n/2, x_{k,k} = n(2k-n)/8, x_{k,n-1} = n^2/4, x_{n-1,n-1} = n(n-2)/8$*, и сви остали* $x_{i,j}, x_{i,i}$ *и* n_i *су једнаки 0.*

На слици 5.2. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{12,6,6}$, то јест граф $K^*_{6,6}$, где је $n_6 = n_{11} = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,11} = 36$ и $x_{11,11} = 15$.



Слика 5.2. Граф $K^*_{6,6}$.



Слика 5.3. Граф $K^*_{5,5}$.

На слици 5.3. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{10,5,5}$, то јест граф $K^*_{5,5}$, где је $n_5 = n_9 = 5, x_{5,5} = 0, x_{5,9} = 25$ и $x_{9,9} = 10$.

5.3 Други случај: n је непаран број

На основу једнакости (12) дефинишимо нову функцију $\bar{\gamma}_1$ са $\bar{\gamma}_1(n_k, ..., n_{n-2}) = -\left(\sum_{i=k}^{n-2}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i$. Нека је, даље, скуп $X = \{(n_k, ..., n_{n-1}) \mid n_k + ... + n_{n-1} = n\}$. Тада је $\gamma_1(n_k, ..., n_{n-1}) = \bar{\gamma}_1(n_k, ..., n_{n-2})$ за $(n_k, ..., n_{n-1}) \in X$. Функција $\bar{\gamma}_1$ је конкавна на $\mathbb{R}^{n-k-1}$ пошто је први израз композиција квадратне и линеарне функције (са негативним предзнаком), а други израз линеарна функција. Разматраћемо функцију $\bar{\gamma}_1$ уместо функције γ_1. При томе, тачки $(n_k, ..., n_{n-2}) \in \mathbb{R}^{n-k-1}$, на основу једнакости (2), одговара тачка $(n_k, ..., n_{n-2}, n - \sum_{j=k}^{n-2} n_j) \in \mathbb{R}^{n-k}$ скупа X.

Разликујемо два подслучаја: први подслучај $(2a)$ када је највиши степен чворова у графу $\Delta(G) = n-1$, и други подслучај $(2b)$ када је $\Delta(G) < n-1$. Даље, поделићемо први подслучај $(2a)$ у два нова подслучаја: први $(2a_1)$ када је $n_k \leq (n-1)/2$, и други $(2a_2)$ када је $n_k \geq (n+1)/2$.

Подслучај $2a_1$. У овом подслучају је n непаран број и $n_k \leq \frac{n-1}{2}$. Разматрамо проблем $\overline{P_{a_1}^2}$:

$$\max -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i,$$

при чему важи

$$-n_k + \frac{n-1}{2} \geq 0, \tag{13}$$

$$n_i \geq 0, \text{ за } k \leq i \leq n-2. \tag{14}$$

Означимо са N допустиву тачку $(n_k, \ldots, n_{n-2})$ проблема $\overline{P_{a_1}^2}$ (очигледно таквих тачака има; нпр. за $n_k = 0$). Пошто је функција $\bar{\gamma}_1$ конкавна (а неспорно и диференцијабилна), можемо применити Kuhn–Tucker -ову теорему 2.2. на проблем $\overline{P_{a_1}^2}$. По тој теореми, допустива тачка N је тачка максимума проблема $\overline{P_{a_1}^2}$ ако постоје ненегативни бројеви μ_0, λ_i за $k \leq i \leq n-2$, такви да за функцију Ψ дефинисану са

$$\begin{aligned}\Psi &= \bar{\gamma}_1 + \mu_0\left(-n_k + \frac{n-1}{2}\right) + \sum_{i=k}^{n-2}\lambda_i n_i = -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 \\ &+ n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i + \mu_0\left(-n_k + \frac{n-1}{2}\right) + \sum_{i=k}^{n-2}\lambda_i n_i\end{aligned}$$

важи $\partial\Psi/\partial n_i = 0$ за $k \leq i \leq n-2$, односно:

(15)

$$-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_j + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \mu_0 + \lambda_k = 0,$$

$$(16)\quad -2\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_j+n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2+\lambda_i=0,$$

$$\text{за}\ \ k+1\le i\le n-2,$$

и

$$(17)\qquad \mu_0\left(-n_k+\frac{n-1}{2}\right)=0,$$

$$(18)\qquad \lambda_i n_i=0\ \ \text{за}\ \ \ k\le i\le n-2.$$

Докажимо прво неколико помоћних тврђења.

Лема 5.2. *Тачка* $\overline{N}^*_{2a_1}$ *одређена са* $(\frac{n-1}{2},0,\dots,0)$ *је тачка максимума проблема* $\overline{P^2_{a_1}}$.

Доказ. За ову тачку су испуњени услови (13) и (14) те је она допустива тачка. Из (18), пошто је $n_k=\frac{n-1}{2}\neq 0$, видимо да је $\lambda^*_k=0$ и самим тим се из (15) добија:

$$\begin{aligned}
\mu^*_0 &= -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\frac{n-1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2.
\end{aligned}$$

Такође из (16), за $k+1\le i\le n-2$, важи:

$$\begin{aligned}
\lambda^*_i &= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\frac{n-1}{2}-n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{n-1}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right).
\end{aligned}$$

Функција $\frac{1}{\sqrt{i}}$ је опадајућа, а лако се показује да је и функција $(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}})$ такође опадајућа, те важи:

$$\begin{aligned}
\frac{n-1}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{1}{\sqrt{n-1}} &\ge \frac{n-1}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{k+1}}+\frac{1}{\sqrt{n-1}}\\
&= (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\\
&= (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}}\right)\\
&\ge (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-(n-k-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\\
&= (k+1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\ge 0,
\end{aligned}$$

Видимо да су $\mu_0^* \geq 0$ и $\lambda_i^* \geq 0$, за $k+1 \leq i \leq n-2$. Собзиром да допустива тачка $\overline{N}^*_{2a_1}$ испуњава Kuhn–Tucker -ове услове она је и тачка максимума проблема $\overline{P^2_{a_1}}$, што је и требало доказати. $\square$

Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$, а самим тим и функције γ_1, на X (у ознаци $\bar{\gamma}_1^*$) ће бити:

$$\begin{aligned}
\bar{\gamma}_1^* &= -\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_k\right)^2 + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(-\left(\frac{n-1}{2}\right)^2 + n\frac{n-1}{2}\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n^2-1}{4},
\end{aligned}$$

и она се постиже у тачки $N^*_{2a_1} \in X$ одређеној са $(\frac{n-1}{2}, 0, ..., 0, \frac{n+1}{2})$.

Подслучај $2a_2$. У овом подслучају је n непаран број и $n_k \geq (n+1)/2$. Разматрамо проблем $\overline{P^2_{a_2}}$:

$$\max -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i,$$

при чему важи

$$n_k - \frac{n+1}{2} \geq 0, \tag{19}$$

$$n_i \geq 0, \ \text{ за } \ k+1 \leq i \leq n-2. \tag{14}$$

Ако је $n_k \geq \frac{n+1}{2}$ и $n_i \geq 0,$ за $k+1 \leq i \leq n-2$, тада је $x = \sum_{i=k}^{n-2}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})n_i \geq (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})\frac{n+1}{2} > (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})\frac{n}{2}$. У првом случају упоређивали смо функцију $\gamma_1 = \bar{\gamma}_1$ са функцијом $g(x) = -x^2 + nx\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)$. И сада ћемо слично доћи до максималне вредности. Функција $g(x)$, која је једнака $g(x) = \frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(x - \frac{n}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)^2$, под условом да је $x \geq (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})\frac{n+1}{2}$, постиже максималну вредност у тачки $x^* = (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})\frac{n+1}{2}$. Ова тачка x^* се добија за $n_k = \frac{n+1}{2}, n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq n-2$. Пошто је $\gamma_1 = \bar{\gamma}_1 \leq g$ на X, и $\bar{\gamma}_1(x^*) = g(x^*)$, видимо да и функција γ_1 постиже максималну вредност $\bar{\gamma}_1^*$ у тачки $N^*_{2a_2}$ која је одређена са $n_k = \frac{n+1}{2},\ n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq n-2$ и $n_{n-1} = \frac{n-1}{2}$. Тиме смо доказали тврђење:

Лема 5.3. *Функција γ_1, за коју важе услови (2),(9)и (19), постиже максималну вредност*

$$\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n^2-1}{4},$$

у тачки $N^*_{2a_2} \in X$ одређеној са $(\frac{n+1}{2}, 0, ..., 0, \frac{n-1}{2})$.

Засад смо обрадили случај када је највећи степен чворова $\Delta(G) = n-1$, и добили јединствену максималну вредност функције γ_1.

Подслучај $2b$. Нека је највећи степен чворова $m = \Delta(G) < n-1$. У том случају ће доказ бити сличан доказу првог подслучаја $(2a)$, па га можемо изоставити. Максимална вредност функције γ_1 је

$$\bar{\gamma}_1^m = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n^2-1}{4}.$$

Пошто је $\bar{\gamma}_1^* > \bar{\gamma}_1^m$ закључујемо да је $\bar{\gamma}_1^*$ максимална вредност, која се постиже у тачки $N_{2a_1}^*$ или у тачки $N_{2a_2}^*$.

Показали смо да функција γ_1 постиже максималну вредност у тачкама $N_{2a_1}^*$ односно $N_{2a_2}^*$. Даљим разматрањем видимо да функција γ_2 постиже максималну вредност, која је једнака 0, у тачки $Y_{2a_1}^*$ или $Y_{2a_2}^*$ која је одређена са $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4}$ или $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+1)}{4}$ док су сви остали $y_{i,j} = 0$ (сетимо се са почетка разматрања проблема да је $y_{i,j}^* = 0$ за $i \neq j$ и $y_{i,i}^* = \frac{(n-i-1)n_i^*}{2}$). Применимо сада једнакости (8) како бисмо добили $x_{i,j}$.

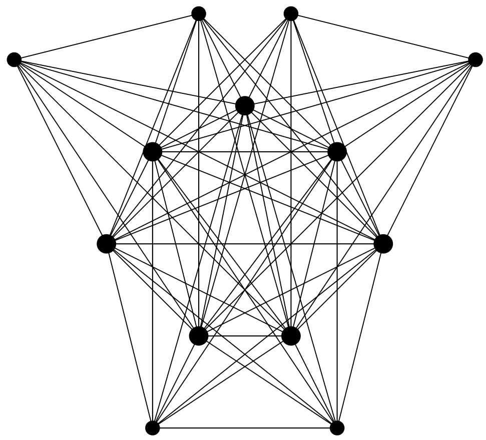
У првом случају је $n_k = \frac{n-1}{2}$ и $n_{n-1} = \frac{n+1}{2}$ а $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4}$ (сви остали су једнаки 0), те су: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(n-3)}{8} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(2k-n-1)}{8}$; $x_{k,n-1} = n_k n_{n-1} - y_{k,n-1} = \frac{(n-1)}{2}\frac{(n+1)}{2} - 0 = \frac{n^2-1}{4}$; $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2} - y_{n-1,n-1} = \frac{n_{n-1}(n_{n-1}-1)}{2} - 0 = \frac{(n+1)(n-1)}{8} = \frac{(n^2-1)}{8}$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ једнаки нули. У другом случају је $n_k = \frac{n+1}{2}$ и $n_{n-1} = \frac{n-1}{2}$ а $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+1)}{4}$ (сви остали су једнаки 0), те су: $x_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(n-1)}{8} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(2k-n+1)}{8}$; $x_{k,n-1} = n_k n_{n-1} - y_{k,n-1} = \frac{(n+1)}{2}\frac{(n-1)}{2} - 0 = \frac{n^2-1}{4}$; $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2} - y_{n-1,n-1} = \frac{n_{n-1}(n_{n-1}-1)}{2} - 0 = \frac{(n-1)(n-3)}{8}$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ једнаки нули. Водећи рачуна о целобројности променљивих, долазимо до следећег тврђења:

Теорема 5.2. *Ако је укупан број чворова n непаран број, и ако је граф $G \in G(k,n)$ тада је*

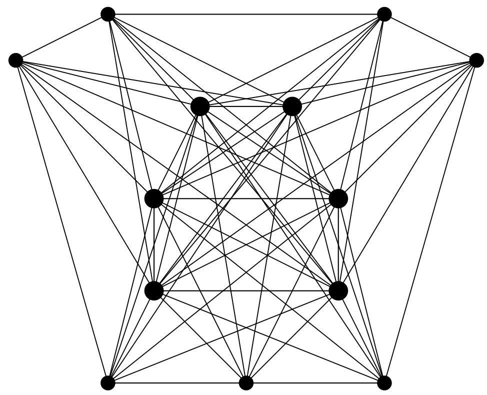
$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n^2-1}{8}.$$

Једнакост важи, за $n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$, или за $n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број, на било ком графу $G \in \mathcal{G}_{n,(n-1)/2,k}$ за који је $n_k = \frac{n-1}{2}, n_{n-1} = \frac{n+1}{2}, x_{k,k} = \frac{(n-1)(2k-n-1)}{8}, x_{k,n-1} = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{n-1,n-1} = \frac{n^2-1}{8}$ и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки нули. Ако је $n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$, или ако је $n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број, тада важи једнакост на било ком графу $G \in \mathcal{G}_{n,(n+1)/2,k}$ за који је $n_k = \frac{n+1}{2}$, $n_{n-1} = \frac{n-1}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n+1)(2k-n+1)}{8}$, $x_{k,n-1} = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{n-1,n-1} = \frac{(n-1)(n-3)}{8}$ и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки нули.

На слици 5.4. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,8}$ где је, с обзиром да је $13 \equiv 1(mod\ 4)$, $n_8 = 6, n_{12} = 7, x_{8,8} = 3, x_{8,12} = 42$ и $x_{12,12} = 21$. На слици 5.5. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8}$ где је, с обзиром да је $13 \equiv 1(mod\ 4)$ и $k = 8$ паран број, $n_8 = 7, n_{12} = 6, x_{8,8} = 7, x_{8,12} = 42$ и $x_{12,12} = 15$.

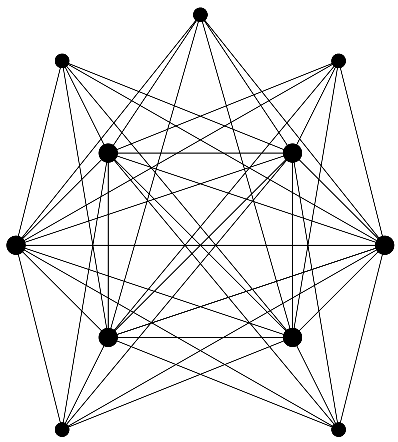


Слика 5.4. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,8}$.

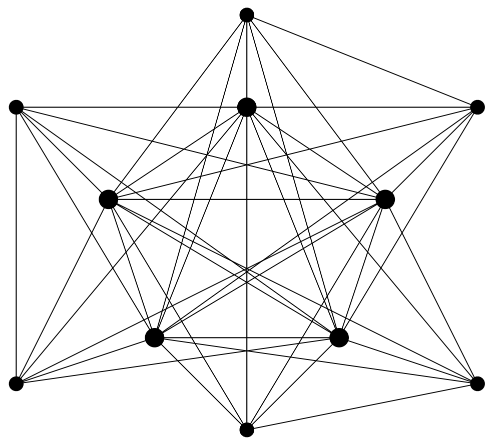


Слика 5.5. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8}$.

На слици 5.6. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6}$ где је, с обзиром да је $11 \equiv 3(mod\,4)$ и $k = 6$ паран број, $n_6 = 5, n_{10} = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,10} = 30$ и $x_{10,10} = 15$. На слици 5.7. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,6}$ где је, с обзиром да је $11 \equiv 3(mod\,4)$, $n_6 = 6, n_{10} = 5, x_{6,6} = 3, x_{6,10} = 30$ и $x_{10,10} = 10$.



Слика 5.6. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6}$.

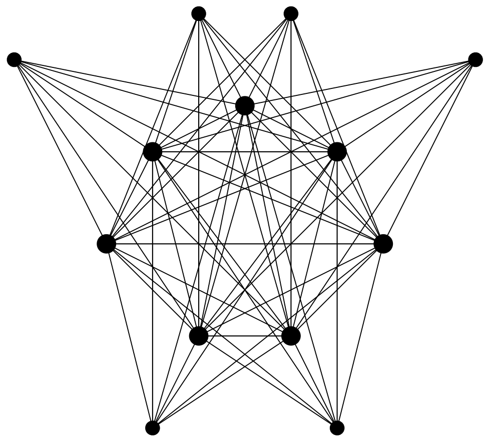


Слика 5.7. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,6}$.

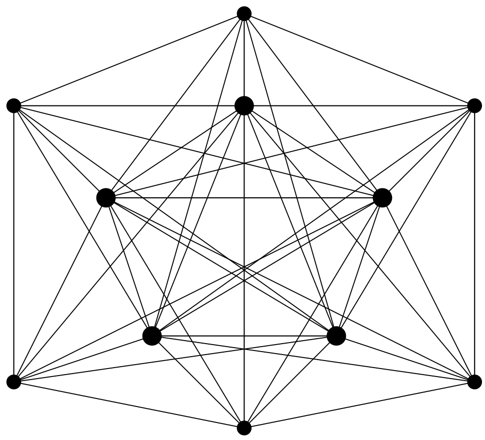
На слици 5.8. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,7}$ где је, с обзиром да је $13 \equiv 1(mod\,4)$, $n_7 = 6, n_{12} = 7, x_{7,7} = 0, x_{7,12} = 42$ и $x_{12,12} = 21$.

На слици 5.9. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,7}$ где је, с обзиром да је $11 \equiv 3(mod\,4)$, $n_7 = 6, n_{10} = 5, x_{7,7} = 6, x_{7,10} = 30$ и $x_{10,10} = 10$.

Приметимо да, ако је $n \equiv 1(\text{mod } 4)$, или ако је $n \equiv 3(\text{mod } 4)$ и k паран број, то је $p = \frac{n-1}{2} = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. Такође, ако је $n \equiv 3(\text{mod } 4)$, или ако је $n \equiv 1(\text{mod } 4)$ и k паран број, то је $p = \frac{n+1}{2} = \lceil \frac{n}{2} \rceil$. Овим смо, у случају када је n непаран број, потврдили хипотезу.



Слика 5.8. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,7}$.



Слика 5.9. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,7}$.

5.4 Трећи случај: $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број

За $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ је $\frac{n}{2}$ непаран број те је, с обзиром на парност броја k, у овом случају $k \geq \frac{n}{2}+1$. Као и раније, разматраћемо два подслучаја: први подслучај $(3a)$ када је $\Delta(G) = n-1$, и други подслучај $(3b)$ када је $\Delta(G) < n-1$. Даље, поделићемо први подслучај $(3a)$ у три нова подслучаја: први$(3a_1)$ када је $n_k \leq n/2 - 1$, други $(3a_2)$ када је $n_k = n/2$ и трећи $(3a_3)$ када је $n_k \geq n/2 + 1$.

Подслучај $3a_1$*:* У овом подслучају је, уз $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број, још и $n_k \leq n/2 - 1$. Разматрамо проблем $\overline{P^3_{a_1}}$:

$$\max\ -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i,$$

при чему важи

$$(13') \qquad -n_k + \frac{n}{2} - 1 \geq 0,$$

$$(14) \qquad n_i \geq 0, \ \text{ за } \ k \leq i \leq n-2.$$

Овај проблем $\overline{P^3_{a_1}}$ се слично решава као проблем $\overline{P^2_{a_1}}$.

Допустива тачка N је тачка максимума проблема $\overline{P^3_{a_1}}$ ако постоје ненегативни бројеви $\mu_0,\ \lambda_i$ за $k \leq i \leq n-2$, такви да за функцију Ψ дефинисану са

$$\begin{aligned}\Psi &= \bar{\gamma}_1 + \mu_0\left(-n_k + \frac{n}{2} - 1\right) + \sum_{i=k}^{n-2}\lambda_i n_i = -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 \\ &+ n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i + \mu_0\left(-n_k + \frac{n}{2} - 1\right) + \sum_{i=k}^{n-2}\lambda_i n_i\end{aligned}$$

важи $\partial\Psi/\partial n_i = 0$ за $k \le i \le n-2$, односно:

(15)

$$-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_j+n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2-\mu_0+\lambda_k=0,$$

$$(16)\quad -2\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_j+n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2+\lambda_i=0,$$

за $k+1 \le i \le n-2$,

и

$$(17') \qquad \mu_0\left(-n_k+\frac{n}{2}-1\right)=0,$$

$$(18) \qquad \lambda_i n_i = 0 \quad \text{за} \quad k \le i \le n-2.$$

Важи следеће тврђење:

Лема 5.4. *Тачка* $\overline{N}^*_{3a_1}$ *одређена са* $(\frac{n}{2}-1, 0, \ldots, 0)$ *је тачка максимума проблема* $\overline{P^3_{a_1}}$.

Доказ. За ову тачку су испуњени услови (13') и (14) те је она допустива тачка. Из (18), пошто је $n_k = \frac{n}{2}-1 \neq 0$, видимо да је $\lambda^*_k = 0$ и самим тим се из (15) добија:

$$\begin{aligned}
\mu^*_0 &= -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{n}{2}-1\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\\
&= 2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2.
\end{aligned}$$

Такође из (16), за $k+1 \le i \le n-2$, важи:

$$\begin{aligned}
\lambda^*_i &= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{n}{2}-1\right)-n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{n-2}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{2}{\sqrt{n-1}}\right).
\end{aligned}$$

Функције $\frac{1}{\sqrt{i}}$ и $(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}})$ су опадајуће те важи:

$$\begin{aligned}
&\frac{n-2}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{2}{\sqrt{n-1}} \ge \frac{n-2}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{k+1}}+\frac{2}{\sqrt{n-1}}\\
&= (n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-2\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\\
&= (n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-2\sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}}\right)\\
&\ge (n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-2(n-k-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\\
&= (-n+2k+2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) \ge 0,
\end{aligned}$$

с обзиром да је $k \geq \frac{n}{2} - 1$. Видимо да су $\mu_0^* \geq 0$ и $\lambda_i^* \geq 0$, за $k+1 \leq i \leq n-2$. С обзиром да допустива тачка $\overline{N}_{3a_1}^*$ испуњава Kuhn–Tucker -ове услове она је и тачка максимума проблема $\overline{P_{a_1}^3}$, што је и требало доказати. □

Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$, односно функције γ_1, је

$$\hat{\gamma}_1^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(\frac{n^2}{4} - 1\right),$$

и она се постиже у тачки $N_{3a_1}^* \in X$ одређеној са $(\frac{n}{2} - 1, 0, ..., 0, \frac{n}{2} + 1)$.

Подслучај $3a_2$: У овом подслучају је, уз $n \equiv 2 (\mathrm{mod}\, 4)$ и k паран број, још и $n_k = n/2$. Функција γ_1, за коју важе услови (2) и (9), постиже максималну вредност када је $n_k = \frac{n}{2}, n_{n-1} = \frac{n}{2}$ и сви остали $n_i = 0$. Међутим, у том случају (с обзиром да је $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2}$) је $x_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - y_{k,k} = \frac{n(n-2)}{8} - \frac{(n-k-1)n}{4} = \frac{n}{4}(k - \frac{n}{2})$, што није цео број. Да би смо дошли до графовског решења мора да постоји бар једно n_i које ће бити позитивно за $k+1 \leq i \leq n-2$. Разматрамо проблем $\overline{P_{a_2}^3}$:

$$\max \; -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i\right)^2 + n \sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i,$$

при чему важи

$$n_k = \frac{n}{2}, \tag{20}$$

$$n_i \geq 1, \quad \text{за најмање једно} \quad i \in \{k+1, ..., n-2\}, \tag{21}$$

$$n_i \geq 0, \quad \text{за} \quad k+1 \leq i \leq n-2. \tag{22}$$

За $n_k = \frac{n}{2}$ добијамо, за $k+1 \leq i \leq n-2$:

$$\frac{\partial \bar{\gamma}_1}{\partial n_i} = -2\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) \sum_{j=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_j + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2$$

$$= \left(-\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n - 2 \sum_{j=k+1}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_j + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)$$

За $n_k = \frac{n}{2}$, $n_i \geq 0$ и бар једно $n_i \geq 1$, лако је видети да је $\partial\bar{\gamma}_1/\partial n_i < 0$, за $k+1 \leq i \leq n-2$. Тада, функција $\bar{\gamma}_1$ постиже максималну вредност када се узме управо једно $n_j = 1$ и сви остали $n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq n-2,\ i \neq j$. Означимо са $\bar{\gamma}_1^j$ максималну вредност функције $\bar{\gamma}_1$, односно функције γ_1 на X, када је $n_j = 1$ и сви остали $n_i = 0$. Пошто је тада $n_{n-1} = \frac{n}{2} - 1$, имамо да је

$$\bar{\gamma}_1^j = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} - 1\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(\frac{n}{2} - 1\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 \frac{n}{2}.$$

Упоредимо функције $\hat{\gamma}_1^*$ и $\bar{\gamma}_1^j$ за $k+1 \le j \le n-2$.

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma}_1^* - \bar{\gamma}_1^j &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(\frac{n^2}{4} - 1\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} - 1\right) \\
&- \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(\frac{n}{2} - 1\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 \frac{n}{2} \\
&= \left[\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\right]\left(\frac{n}{2} - 1\right) \\
&- \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 \frac{n}{2} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{n-1}{\sqrt{j}} - \frac{n-2}{\sqrt{n-1}}\right).
\end{aligned}$$

Пошто је $\frac{1}{\sqrt{j}}$ опадајућа функција и $k \ge \frac{n}{2} - 1$, имамо да је $-\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{n-1}{\sqrt{j}} - \frac{n-2}{\sqrt{n-1}} \ge -\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{n-1}{\sqrt{n-2}} - \frac{n-2}{\sqrt{n-1}} \ge -\frac{1}{\sqrt{\frac{n}{2}-1}} + \frac{n-1}{\sqrt{n-2}} - \frac{n-2}{\sqrt{n-1}} = \frac{n-1-\sqrt{2}}{\sqrt{n-2}} - \frac{n-2}{\sqrt{n-1}}$. Последњи израз ће бити позитиван када је $(n-1-\sqrt{2})^2(n-1) > (n-2)^3 \iff (n^2+1+2-2n-2\sqrt{2}n+2\sqrt{2})(n-1) > n^3-6n^2+12n-8 \iff (-1-2-2\sqrt{2}+6)n^2+(2+2\sqrt{2}+3+2\sqrt{2}-12)n+8-3-2\sqrt{2} > 0 \iff (3-2\sqrt{2})n^2+(4\sqrt{2}-7)n+5-2\sqrt{2} > 0$. Провером за $n=5$ и $n=6$ показује се да је последњи квадратни израз у неједнакости прво негативан па позитиван, те можемо закључити да је неједнакост испуњена за $n \ge 6$ (за $n \le 5$ не постоји $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број). Закључујемо да је максимална вредност у случају (a_2) мања од $\hat{\gamma}_1^* = (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})^2(\frac{n^2-4}{4})$.

Подслучај $3a_3$: У овом подслучају је, уз $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран број, још и $n_k \ge \frac{n}{2}+1$. Разматрамо проблем $\overline{P^3_{a_3}}$:

$$\max -\left(\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i,$$

при чему важи

$$(23) \qquad n_k - \frac{n}{2} - 1 \ge 0,$$

$$(14) \qquad n_i \ge 0, \quad \text{за} \quad k \le i \le n-2.$$

Овај проблем је сличан проблему $\overline{P^2_{a_2}}$. Ако је $n_k \ge \frac{n}{2}+1$ и $n_i \ge 0,$ за $k+1 \le i \le n-2$, тада је $x = \sum_{i=k}^{n-2}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})n_i \ge (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})(\frac{n}{2}+1) > (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})\frac{n}{2}$. Функција $g(x) = -x^2 + nx\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) = \frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(x - \frac{n}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)^2$, под условом да је $x \ge (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})(\frac{n}{2}+1)$, постиже максималну вредност у тачки $x^* = (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}})(\frac{n}{2}+1)$. Ова тачка x^* се добија за $n_k = \frac{n}{2}+1, n_i = 0$ за $k+1 \le i \le n-2$. Пошто је $\gamma_1 = \bar{\gamma}_1 \le g$ на X, и $\bar{\gamma}_1(x^*) = g(x^*)$, видимо да и функција γ_1 постиже максималну вредност $\bar{\gamma}_1^*$ у тачки $N^*_{3a_3}$ која је одртеђена са $n_k = \frac{n}{2}+1,\ n_i = 0$ за $k+1 \le i \le n-2$ и $n_{n-1} = \frac{n}{2}-1$. Тиме смо доказали тврђење:

Лема 5.5. *Функција γ_1, за коју су испуњени услови (2),(9) и (23) постиже максималну вредност*

$$\hat{\gamma}_1^* = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \left(\frac{n^2}{4} - 1\right).$$

у тачки $N^*_{3a_3}$.

Подслучај $3b$. Нека је највиши степен чворова $m = \Delta(G) < n-1$. У том случају је доказ сличан доказу подслучају $3a$ те га изостављамо. Максимална вредност функције γ_1 је

$$\hat{\gamma}_1^m = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \left(\frac{n^2}{4} - 1\right).$$

Пошто је $\hat{\gamma}_1^* > \hat{\gamma}_1^m$ закључујемо да је $\hat{\gamma}_1^*$ максимална вредност, која се постиже у тачки $N^*_{3a_1}$ или у тачки $N^*_{3a_3}$.

Доказали смо да функција γ_1 постиже максималну вредност у било којој тачки $N^*_{3a_1}$ или $N^*_{3a_3}$. Даљим разматрањем видимо да функција γ_2 постиже максималну вредност, која је једнака 0, у тачки $Y^*_{3a_1}$ или $Y^*_{3a_3}$ која је одређена са $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-2)}{4}$ или $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+2)}{4}$ док су сви остали $y_{i,j} = 0$ (сетимо се са почетка разматрања проблема да је $y^*_{i,j} = 0$ за $i \neq j$ и $y^*_{i,i} = \frac{(n-i-1)n^*_i}{2}$). Применимо сада једнакости (8) како бисмо добили $x_{i,j}$.

У првом случају је $n_k = \frac{n}{2} - 1$ и $n_{n-1} = \frac{n}{2} + 1$ а $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-2)}{4}$ (сви остали су једнаки 0), те су: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(n-4)}{8} - \frac{(n-k-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(2k-n-2)}{8}$; $x_{k,n-1} = n_k n_{n-1} - y_{k,n-1} = (\frac{n}{2}-1)(\frac{n}{2}+1) - 0 = \frac{n^2-4}{4}$; $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2} - y_{n-1,n-1} = \frac{n_{n-1}(n_{n-1}-1)}{2} - 0 = \frac{n(n+2)}{8}$, и сви остали $x_{i,j},\ x_{i,i}$ једнаки су нули. У другом случају је $n_k = \frac{n}{2}+1$ и $n_{n-1} = \frac{n}{2}-1$ а $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+2)}{4}$ (сви остали су једнаки 0), те су: $x_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)n}{8} - \frac{(n-k-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)(2k-n+2)}{8}$; $x_{k,n-1} = n_k n_{n-1} - y_{k,n-1} = (\frac{n}{2}+1)(\frac{n}{2}-1) - 0 = \frac{n^2-4}{4}$; $x_{n-1,n-1} = \binom{n_{n-1}}{2} - y_{n-1,n-1} = \frac{n_{n-1}(n_{n-1}-1)}{2} - 0 = \frac{(n-2)(n-4)}{8}$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ једнаки су нули.

Водећи рачуна о целобројности променљивих, долазимо до следећег тврђења:

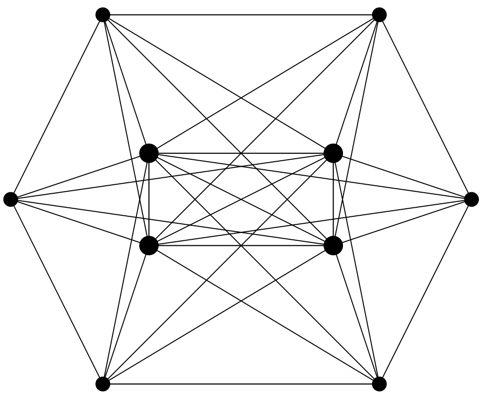
Теорема 5.3. *Ако је $n \equiv 2(\mathrm{mod}\ 4)$, k паран, $(k \geq \frac{n}{2}+1)$, и ако $G \in G(k,n)$, тада*

$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 \frac{(n^2-4)}{4}.$$

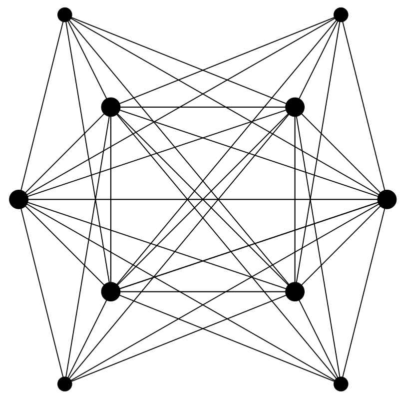
Једнакост се постиже на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,\frac{n+2}{2},k}$ за које је $n_k = \frac{n}{2}+1,\ n_{n-1} = \frac{n}{2}-1$, $x_{k,k} = \frac{1}{2}(\frac{n}{2}+1)(k-\frac{n}{2}+1)$, $x_{k,n-1} = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{n-1,n-1} = (\frac{n}{2}-1)(\frac{n}{2}-2)/2$ и сви остали $x_{i,j}$, $x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0 или на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,\frac{n-2}{2},k}$ за које је $n_k = \frac{n}{2}-1,\ n_{n-1} = \frac{n}{2}+1$, $x_{k,k} = \frac{(n-2)(2k-n-2)}{8}$, $x_{k,n-1} = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{n-1,n-1} = \frac{n(n+2)}{8}$ и сви остали $x_{i,j}$, $x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0.

У првом случају је $p = \frac{n+2}{2}$, а у другом $p = \frac{n-2}{2}$, што се поклапа са хипотезом.

На слици 5.10. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{10,6,6}$, где је $n_6 = 6, n_9 = 4, x_{6,6} = 6, x_{6,9} = 24$ и $x_{9,9} = 6$. На слици 5.11. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{10,4,6}$, где је $n_6 = 4, n_9 = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,9} = 24$ и $x_{9,9} = 15$.



Слика 5.10. Граф $G \in \mathcal{G}_{10,6,6}$.



Слика 5.11. Граф $G \in \mathcal{G}_{10,4,6}$.

Глава 6

Минимална вредност Рандићевог индекса за $k \leq \frac{n}{2}$

Као што је поменуто у претходној глави, у овој глави ћемо доказати **хипотезу 5.2**, коју су поставили M. Aouchiche и P. Hansen 2007. године у раду [1]. Подсећамо читаоце да су све хипотезе 5.1., 5.2. и 5.3. исте у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$. Тиме ће у потпуности бити решен проблем **налажења минималне вредност Рандићевог индекса на скупу простих графова са n чворова при чему је минимални степен чворова k.**

Доказаћемо следеће тврђење.

Теорема 6.1. *Ако је $k \leq \frac{n}{2}$, и граф G припада скупу $G(k,n)$, тада је*

$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G = K^*_{k,n-k}$ при чему је: $n_k = n-k, n_{n-1} = k, x_{k,n-1} = (n-k)k, x_{n-1,n-1} = k(k-1)/2$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки нули.

Пре него што пређемо на доказ наведене теореме дефинисаћемо проблем и доказати једну лему. Проблем P одређивања минимума $\min\{R(G) : G \in G(k,n)\}$ можемо представити у следећем облику:

$$\min \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$$

при чему, уз $k \leq \frac{n}{2}$, важи:

$$(1) \qquad \begin{array}{rcl}
2x_{k,k} + x_{k,k+1} + x_{k,k+2} + \cdots + x_{k,n-1} &=& kn_k, \\
x_{k,k+1} + 2x_{k+1,k+1} + x_{k+1,k+2} + \cdots + x_{k+1,n-1} &=& (k+1)n_{k+1}, \\
x_{k,k+2} + x_{k+1,k+2} + 2x_{k+2,k+2} + \cdots + x_{k+2,n-1} &=& (k+2)n_{k+2}, \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots && \\
x_{k,n-1} + x_{k+1,n-1} + x_{k+2,n-1} + \cdots + 2x_{n-1,n-1} &=& (n-1)n_{n-1},
\end{array}$$

$$n_k + n_{k+1} + \ldots, n_{n-1} = n, \tag{2}$$

$$x_{i,j} \leq n_i n_j, \text{ за } k \leq i < j \leq n-1, \tag{3}$$

$$x_{i,i} \leq \binom{n_i}{2}, \text{ за } k \leq i \leq n-1, \tag{4}$$

$$x_{i,j}, n_i \text{ ненегативни цели бројеви за } k \leq i \leq j \leq n-1. \tag{5}$$

Као што је раније наведено, на основу једнакости (1) и (2), Рандићев индекс $R(G) = \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$ можемо представити и у следећем облику:

$$R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{k \leq i \leq j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}. \tag{6}$$

И на крају, када дефинишемо нову функцију:

$$\gamma = \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}, \tag{7}$$

видимо да се проблем P минимизације може преформулисати у проблем максимизације функције γ уз иста ограничења.

С обзиром да је минимални степен чворова k , то укупан број n_{n-1} чворова степена $n-1$ не може бити већи од k, те важи ограничење $n_{n-1} \leq k$. У противном, минимални степен чворова био би већи од k јер је сваки чвор степена $n-1$ повезан са свим осталим чворовима. Управо ово ограничење, $n_{n-1} \leq k$, наводи на закључак теореме да је број чворова $n_{n-1} = k$.

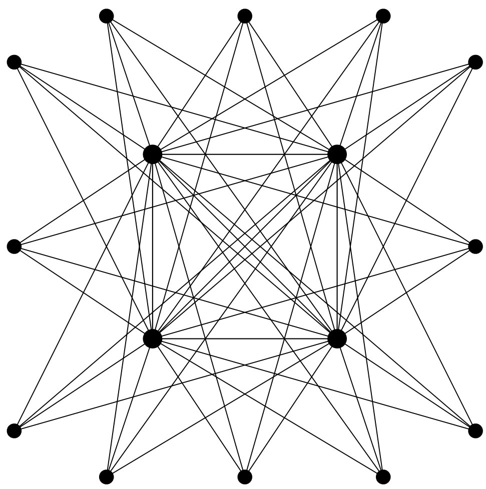
Издвојићемо прво једну неједнакост, која се често користи у доказу теореме.

Лема 6.1. *За* $k \leq i < j$ *је*

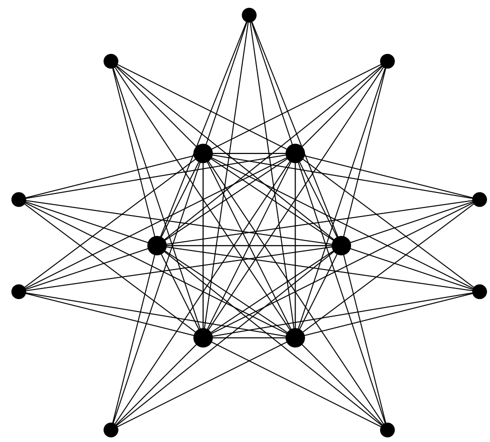
$$k \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 \geq i \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2.$$

Доказ. Посматрајмо функцију $f(x) = x\left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2$, за $x < j$ и j фиксиран број. С обзиром да за први извод важи $f'(x) = 1 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 + x \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right) \cdot \frac{-1}{2x\sqrt{x}} = \left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{x}}\right) = -\frac{1}{\sqrt{j}}\left(\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right) < 0$, за $x < j$, то је функција $f(x)$ опадајућа. Максимална вредност се постиже, када је $k \leq x \leq j$, за $x = k$. $\square$

Сликама 6.1. и 6.2. представљени су графови на којима се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, када је ред графа $n = 16$ односно $n = 15$ и када је минимални степен чворова $k = 4$ односно $k = 6$.



Слика 6.1. Граф $K^*_{4,12}$.



Слика 6.2. Граф $K^*_{6,9}$.

Доказ теореме 6.1. Да би доказали теорему треба показати да је максимална вредност функције γ вредност $\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k$. Сам доказ теореме поделићемо у три случаја. Први случај (a), када је укупан број чворова n_{n-1} степена $n-1$ управо k, тј. $n_{n-1} = k$. Други случај (b), ако је $n_{n-1} < k$ и постоји $m \in \{k+1, k+2, \ldots, n-2\}$ такав да је $n_m + ... + n_{n-2} + n_{n-1} = k$ (види се да је циљ да се бирају чворови што већег степена). У трећем случају (c), када нису испуњена прва два случаја, поделићемо чворове одговарајућег степена $m \in \{k, k, \ldots, n-2\}$ у две групе тако да је: $n_{m''} + n_{m+1} + ... + n_{n-1} = k$ и $n_k + \cdots + n_{m-1} + n_{m'} = n - k$, при чему је $n_m = n_{m'} + n_{m''}$.

Случај а. У овом случају је $n_{n-1} = k$. До резултата у овом случају су прво дошли Lj. Pavlović и T. Divnić у раду [33]. Овде ће бити презентован другачији доказ, који одговара доказу у раду [11], а којим се обухвата целокупан случај $k \leq \frac{n}{2}$. Такође, до тог доказа долази аутор ове дисертације.

За функцију γ важи:

$$
\begin{aligned}
\gamma &= \sum_{k \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j} = \sum_{j=k+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k,j} \\
&+ \sum_{j=k+2}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k+1,j} + \sum_{j=k+3}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k+2}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k+2,j} \\
&+ \cdots + \sum_{j=n-1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{n-2}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{n-2,j}.
\end{aligned}
$$

Сабирак $\sum_{j=i+1}^{n-1}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 x_{i,j}$, за $k \leq i \leq n-2$, представља тежину свих грана које повезују чворове степена i са чворовима степена j, за $i+1 \leq j \leq n-1$. Лако је видети да број грана у оваквом сабирку не може бити већи од производа броја чворова n_i и броја грана једног чвора i, т.ј. $\sum_{j=i+1}^{n-1} x_{i,j} \leq in_i$ (ово још можемо видети из једнакости (1)). Самим тим је $\sum_{j=i+1}^{n-1}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 x_{i,j} \leq (\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}})^2 in_i$, при чему су и тежине замењене не мањим тежинама. Сада за функцију γ важи неједнакост:

$$\gamma \leq k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k+(k+1)\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{k+1}+$$
$$(k+2)\left(\frac{1}{\sqrt{k+2}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{k+2}+\cdots+(n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{n-2}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-2}.$$

Ако сада применимо лему 6.1. за функцију γ даље добијамо:

$$\begin{aligned}\gamma &\leq k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_k+k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{k+1}\\ &+ k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{k+2}+\cdots+k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-2}\\ &= k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n_k+n_{k+1}+n_{k+2}+\cdots+n_{n-2})\\ &= k\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k),\end{aligned}$$

с обзиром на једнакост (2) и $n_{n-1}=k$. Овим смо доказали први случај.

Случај b. У овом случају је $n_m+...+n_{n-2}+n_{n-1}=k$, за неко $m \in \{k+1,k+2,\ldots,n-2\}$. Тада је, на основу (2), $n_k+n_{k+1}+...+n_{m-1}=n-k$. За функцију γ важи:

$$\begin{aligned}\gamma &= \sum_{k\leq i<j\leq n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}=\sum_{j=k+1}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k,j}\\ &+ \sum_{j=k+2}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k+1,j}+\sum_{j=k+3}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k+2}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{k+2,j}\\ &+ \cdots+\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{m-1,j}+\sum_{m\leq i<j\leq n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}.\end{aligned}$$

У произвољној суми $\sum_{j=i+1}^{n-1}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 x_{i,j}$, за $k \leq i \leq m-1$, узећемо максимално могуће тежине грана. Пошто је $n_m+n_{m+1}+\cdots+n_{n-1}=k$ и $\sum_{j=i+1}^{n-1} x_{i,j} \leq in_i$, прво ћемо чвор степена i повезати са k чворова највиших степена $n-1,\ldots,m$ и са $i-k$ чворова других степена j, $i+1 \leq j \leq m-1$. Како бисмо тежине ових $i-k$

грана учинили максимално могућим, посматраћемо их као гране између чворова степена i и чворова степена $m-1$. Закључујемо да је:

$$\sum_{j=i+1}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j} \leq n_i\left(\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j+\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2(i-k)\right).$$

Сада за функцију γ важи:

$$\begin{aligned}
\gamma \;&\leq\; n_k\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-1}+\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)^2 n_{n-2}+\cdots\right.\\
&+\;\left.\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_m\right)\\
&+\; n_{k+1}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-1}+\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)^2 n_{n-2}\right.\\
&+\;\left.\cdots+\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_m+\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\right)+\cdots+\\
&+\; n_{m-1}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-1}+\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)^2 n_{n-2}\right.\\
&+\;\left.\cdots+\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_m+\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2(m-1-k)\right)\\
&+\;\sum_{m\leq i<j\leq n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}\\
&=\;\sum_{k\leq i\leq m-1} g(i)n_i+\sum_{m\leq i<j\leq n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}=\Sigma_1+\Sigma_2,
\end{aligned}$$

где је $g(i)=\sum_{j=m}^{n-1}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 n_j+(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}})^2(i-k)$. Даље, када применимо лему 6.1. на функцију $g(i)$, добијамо:

$$\begin{aligned}
g(i) \;&=\; \frac{1}{i}\left(\sum_{j=m}^{n-1} i\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j+i\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2(i-k)\right)\\
&\leq\; \frac{k}{i}\left(\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j+\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2(i-k)\right)\\
&=\; \left(1-\frac{i-k}{i}\right)\left(\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j\right)+\frac{k(i-k)}{i}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\\
&=\; \sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j+\frac{i-k}{i}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 k\right.\\
&-\;\left.\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j\right)\leq\sum_{j=m}^{n-1}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j,
\end{aligned}$$

пошто је $\sum_{j=m}^{n-1} n_j = k$ и $m \leq j \leq n-1$ (а очигледно је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \leq \frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}$). Сада, с обзиром да је $n_k + \cdots + n_{m-1} = n-k$, за суму Σ_1 добијамо:

$$\begin{aligned}
\Sigma_1 &= \sum_{k \leq i \leq m-1} g(i) n_i \leq \left(\sum_{j=m}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_j \right) \sum_{i=k}^{m-1} n_i \\
&= (n-k) \sum_{j=m}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_j = \sum_{j=m}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 (n-k) n_j \\
&- \sum_{j=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 (n-k) n_j + \sum_{j=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 (n-k) n_j \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 (n-k) k + \sum_{j=m}^{n-2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 \right. \\
&- \left. \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 \right) (n-k) n_j = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 (n-k) k \\
&- \sum_{j=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right) \left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right) (n-k) n_j .
\end{aligned}$$

Пређимо сада на суму Σ_2. Пошто је $x_{i,j} \leq n_i n_j$, за $m \leq i < j \leq n-1$, и $n_{n-1} = k - \sum_{j=m}^{n-2} n_j$, биће:

$$\begin{aligned}
\Sigma_2 = \sum_{m \leq i < j \leq n-1} & \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j} \leq \sum_{m \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j \\
&= \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i \left(k - \sum_{j=m}^{n-2} n_j \right) + \sum_{m \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i - \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i^2 \\
&+ \sum_{m \leq i < j \leq n-2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 \right) n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i - \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i^2 \\
&- 2 \sum_{m \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right) n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_i - \left(\sum_{i=m}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right) n_i \right)^2 .
\end{aligned}$$

Коначно, за функцију γ важи:

$$\begin{aligned}
\gamma &\le \Sigma_1 + \Sigma_2 \le \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k - \sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) \\
&\cdot \left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k)n_i + k\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i \\
&- \left(\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k \\
&- \left(\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + \sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)k - \left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k)\right)n_i.
\end{aligned}$$

С обзиром да је $k \le \frac{n}{2}$ то је $k \le n-k$, те даље за функцију γ важи:

$$\begin{aligned}
\gamma &\le \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k - \left(\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 + (n-k) \\
&\cdot \sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) - \left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)n_i \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k - \left(\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2 \\
&- 2(n-k)\sum_{i=m}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}}\right)n_i \\
&\le \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k.
\end{aligned}$$

Једнакост важи када су $n_i = 0$ за $k+1 \le i \le n-2$, $n_k = n-k$, $n_{n-1} = k$, $x_{k,n-1} = (n-k)k$, $x_{n-1,n-1} = \binom{k}{2}$, и сви остали $x_{i,j}$ једнаки 0. Тада су графови за које Рандићев индекс постиже минималну вредност $K^*_{k,n-k}$.

Случај c. Поделимо чворове степена m у две групе тако да је: $n_m = n_{m'} + n_{m''}$, $n_{m''} + n_{m+1} + ... + n_{n-1} = k$, а самим тим ће бити и $n_k + \cdots + n_{m-1} + n_{m'} = n-k$. Обојимо чворове степена m црвено и бело, тако да је број црвених $n_{m''}$. Означимо са $x_{i,m'}(x_{i,m''})$, за $i \ne m$, број грана између чворова степена i и белих (црвених) чворова степена m, са $x_{m',m'}$ $(x_{m'',m''})$ број грана између белих (црвених) чворова степена m, и са $x_{m',m''}$ број грана између белих и црвених чворова степена m. Тада је $x_{i,m} = x_{i,m'} + x_{i,m''}$ за $i \ne m$, и $x_{m,m} = x_{m',m'} + x_{m',m''} + x_{m'',m''}$. Систему (1)

одговараће систем:
(1′)

$$\begin{aligned}
x_{k,i} \ + \cdots + \ x_{i,m-1} \ + \ x_{i,m'} \ + \ x_{i,m''} \ + \ x_{i,m+1} \ + \cdots + \ x_{i,n-1} &= in_i, \\
k \le i \le n-1, i \ne m&, \\
x_{k,m'} + \cdots + x_{m-1,m'} + 2x_{m',m'} + x_{m',m''} + x_{m',m+1} + \cdots + x_{m',n-1} &= mn_{m'}, \\
x_{k,m''} + \cdots + x_{m-1,m''} + x_{m',m''} + 2x_{m'',m''} + x_{m'',m+1} + \cdots + x_{m'',n-1} &= mn_{m''}.
\end{aligned}$$

Да не би дошло до компликованијег записа на даље, напоменимо следеће: када ознаке m', m'' буду у функцији индекса $n_{m'}, x_{i,m'}, n_{m''}, x_{i,m''}$ разумећемо их као што је изнад објашњено; међутим, када m', m'' представљају број (степен чвора) биће $m' = m'' = m$.

Доказ ће бити сличан доказу претходног случаја (b). За функцију γ важи:

$$\begin{aligned}
\gamma \ = \ & \sum_{k \le i < j \le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j} = \sum_{j=k+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{k,j} \\
+ \ & \sum_{j=k+2}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{k+1,j} + \cdots + \sum_{j=m}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{m-1,j} \\
+ \ & \sum_{j=m+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{m',j} + \sum_{j=m+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{m'',j} \\
+ \ & \sum_{m+1 \le i < j \le n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j}.
\end{aligned}$$

Слично као у претходном случају (b), узећемо максимално могуће тежине за суму $\sum_{j=i+1}^{n-1} (\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2 x_{i,j}$, за $k \le i \le m'$. Пошто је $n_{m''} + n_{m+1} + \cdots + n_{n-1} = k$ и $\sum_{j=i+1}^{n-1} x_{i,j} \le in_i$, сматраћемо да су повезани чвор степена i са свих k чворова степена $n-1, \ldots, m''$ (тако добијамо максималне тежине) и са $i-k$ чворова других степена j, $i+1 \le j \le m'$. Максимизираћемо тежину ових последњих $i-k$ грана тако што ћемо посматрати тежине грана између чвора степена i и $i-k$ чворова степена $m' = m$. Тада је, за $k \le i \le m'$:

$$\sum_{j=i+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 x_{i,j} \le n_i \left(\sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}} \right)^2 n_j + \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 (i-k) \right).$$

За функцију γ биће:

$$\begin{aligned}
\gamma \ \le \ & n_k \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_{n-1} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}} \right)^2 n_{n-2} + \cdots \right. \\
+ \ & \left. \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 n_{m''} \right) \\
+ \ & n_{k+1} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}} \right)^2 n_{n-1} + \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}} \right)^2 n_{n-2} \right.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \quad \cdots + \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_{m''} + \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\Bigg) + \cdots + \\
&+ \quad n_{m-1}\Bigg(\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-1} + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)^2 n_{n-2} \\
&+ \quad \cdots + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_{m''} + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (m-1-k)\Bigg) \\
&+ \quad n_{m'}\Bigg(\left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_{n-1} + \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)^2 n_{n-2} + \cdots \\
&+ \quad \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_{m''} + \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (m-k)\Bigg) \\
&+ \quad \sum_{j=m+1}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{m'',j} + \sum_{m+1 \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j} \\
&= \quad \sum_{k \leq i \leq m'} g(i) n_i + \sum_{m'' \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j} = \Sigma_1 + \Sigma_2,
\end{aligned}
$$

где је $g(i) = \sum_{j=m''}^{n-1} (\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2 n_j + (\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}})^2 (i-k)$. Даље, када применимо лему 6.1. на функцију $g(i)$, добијамо:

$$
\begin{aligned}
g(i) &\leq \frac{k}{i}\left(\sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (i-k)\right) \\
&= \left(1 - \frac{i-k}{i}\right)\left(\sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j\right) + \frac{k(i-k)}{i}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\
&= \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j + \frac{i-k}{i}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 k - \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j\right) \\
&\leq \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j,
\end{aligned}
$$

пошто је $\sum_{j=m''}^{n-1} n_j = k$ и $m'' \leq j \leq n-1$. Како је $n_k + \cdots + n_{m-1} + n_{m'} = n-k$, за суму Σ_1 добијамо:

$$
\begin{aligned}
\Sigma_1 &= \sum_{k \leq i \leq m'} g(i) n_i \leq \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j \sum_{i=k}^{m'} n_i \\
&= (n-k) \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_j = \sum_{j=m''}^{n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k) n_j
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- \sum_{j=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)n_j + \sum_{j=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 (n-k)n_j \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k + \sum_{j=m''}^{n-2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2\right. \\
&- \left.\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\right) (n-k)n_j = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k \\
&- \sum_{j=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k)n_j.
\end{aligned}
$$

Како је $x_{i,j} \leq n_i n_j$, $m'' \leq i < j \leq n-1$, и $n_{n-1} = k - \sum_{j=m''}^{n-2} n_j$, за суму Σ_2 биће:

$$
\begin{aligned}
\Sigma_2 &= \sum_{m'' \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j} \leq \sum_{m'' \leq i < j \leq n-1} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j \\
&= \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i \left(k - \sum_{j=m''}^{n-2} n_j\right) + \sum_{m'' \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i^2 \\
&+ \sum_{m'' \leq i < j \leq n-2} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2\right) n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i^2 \\
&- 2 \sum_{m'' \leq i < j \leq n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i n_j \\
&= k \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \left(\sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i\right)^2.
\end{aligned}
$$

Коначно, за функцију γ важи:

$$
\begin{aligned}
\gamma \;&\leq\; \Sigma_1 + \Sigma_2 \leq \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 (n-k)k \\
&- \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k)n_i \\
&+ k \sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2 n_i - \left(\sum_{i=m''}^{n-2} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{n-1}}\right) n_i\right)^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
= & \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(n-k)k-\left(\sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2+\\
& \sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)k-\left(\frac{2}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)(n-k)\right)n_i.
\end{aligned}
$$

С обзиром да је $k \leq \frac{n}{2}$ то је $k \leq n-k$, те даље за функцију γ важи:

$$
\begin{aligned}
\gamma \leq & \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(n-k)k-\left(\sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2+(n-k)\\
\cdot & \sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)-\left(\frac{2}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\right)n_i\\
= & \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(n-k)k-\left(\sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)n_i\right)^2\\
- & 2(n-k)\sum_{i=m''}^{n-2}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{i}}\right)n_i\\
\leq & \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2(n-k)k.
\end{aligned}
$$

Овим је теорема потврђена и у последњем случају. □

Глава 7

Уопштења неких резултата о екстремним вредностима Рандићевог индекса на графовима

Приликом одређивања минималне вредности Рандићевог индекса на простим графовима увек је постојао услов задавања минималног степена чворова k на графу. (Неспорно, уколико тај услов не би постојао, минимална вредност Рандићевог индекса на скупу графова реда n био би нула и остварио би се на графу без грана, тј. графу коме су сви чворови изоловани.) Осим тога, на простом графу реда n степен било ког чвора није већи од $n-1$. Минималне вредности Рандићевог индекса на скупу $G(k,n)$ се управо остварују на графовима који имају само чворове степена k и степена $n-1$. Спонтано се намеће питање одређивања екстремних вредности Рандићевог индекса када је ограничен и максимални степен чворова на графу.

Нека је m максимални степен чворова графа G реда n. Са $G(k,m,n)$ ћемо означити скуп простих графова реда n чији је минимални степен чворова k и максимални степен чворова m. До резултата о екстремним вредностима Рандићевог индекса на скупу $G(k,m,n)$ долази аутор дисертације, а ови резултати су изнесени у радовима $[27, 11, 12]$.

У овој глави се на почетку кратко говори о максималној вредности Рандићевог индекса на скупу $G(k,m,n)$. Затим се у првом делу, као и раније, одвојено разматра случај $k \geq \frac{n}{2}$. Овде ће нагласак бити на случају када су минимални степен, максимални степен и ред графа непарни бројеви. На крају ће кратко бити обрађен случај када је $k \leq \frac{n}{2}$.

Наведимо одмах, да проблем одређивања максималне вредности Рандићевог индекса на скупу $G(k,m,n)$ не даје нове резултате. Сетимо се, да се максимална вредност постиже на било ком регуларном графу (или графу састављеном од више регуларних компоненти) без обзира на степен регуларности. Уколико би граф имао паран број чворова, 1-регуларан граф добијамо спајањем по два чвора, а уколико би граф имао непаран број чворова, направимо један троугао и од осталих чворова дужи. Видимо, да ограничење максималног степена чворова не мења резултат (максимална вредност Рандићевог индекса, као што знамо, је $\frac{n}{2}$).

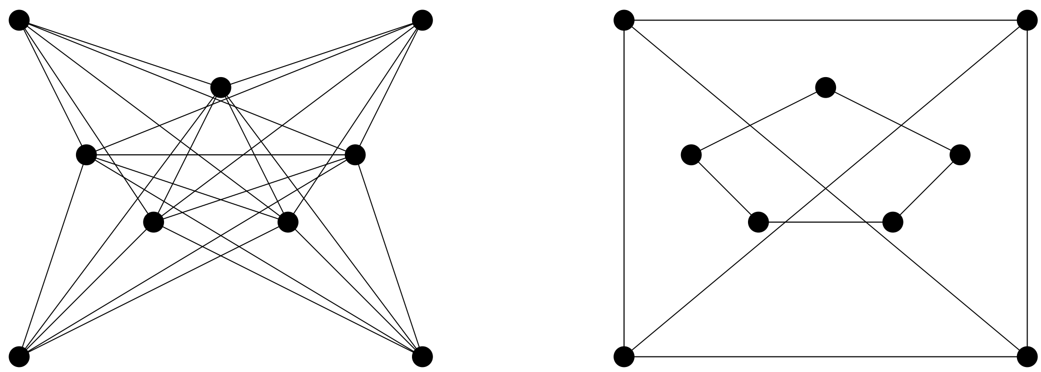
7.1 Уопштења резултата у случају када је $k \geq \frac{n}{2}$

У овом случају је $\frac{n}{2} \leq k \leq m \leq n-2$. Разматрајући у *петој глави* минималне вредности Рандићевог индекса, ми долазимо до резултата када је дат максимални степен чворова m (видети у све три секције подслучај (б)). Остало је отворено питање: *да ли су то и графовска решења?*

Нека је

$$p = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{за } n \equiv 0(\text{mod } 4); \quad \text{n} \equiv 2(\text{mod } 4) \text{ и k и m непарни}, \\ \frac{n-1}{2} & \text{за } n \equiv 1(\text{mod } 4) \text{ и m паран; } \text{n} \equiv 3(\text{mod } 4) \text{ и k паран}, \\ \frac{n+1}{2} & \text{за } n \equiv 3(\text{mod } 4) \text{ и m паран; } \text{n} \equiv 1(\text{mod } 4) \text{ и k паран}, \\ \frac{n+2}{2} \text{ или} \frac{n-2}{2} & \text{за } n \equiv 2(\text{mod } 4) \text{ и k или m парни}, \end{cases}$$

и нека је $\mathcal{G}_{n,p,k,m}$ фамилија комплемената графова који се састоје од $(n-k-1)$-регуларног графа са p чворова и $(n-m-1)$-регуларног графа са $n-p$ чворова (слика 7.1.).



$G_{n,p,k,m}$ $\overline{G}_{n,p,k,m}$

Слика 7.1. Граф из $\mathcal{G}_{n,p,k,m}$ и његов комплемент, за $n = 9, p = 4$, $k = 5$ и $m = 6$.

Фамилију $\mathcal{G}_{n,p,k,m}$ можемо такође описати као фамилију графова са n чворова која настаје из комплетног графа K_n брисањем грана $(n-k-1)$-регуларног графа од p чворова и брисањем грана $(n-m-1)$-регуларног графа осталих $n-p$ чворова .

Дајемо сада теореме које одговарају теоремама 5.1., 5.2. и 5.3.

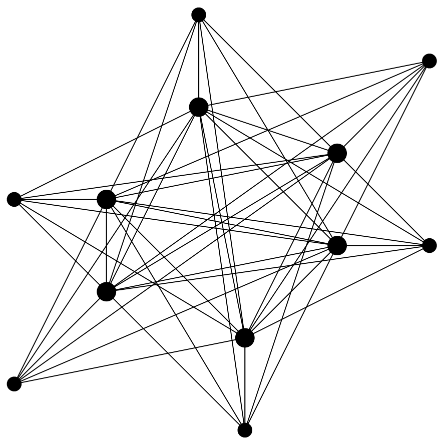
Теорема 7.1. *Ако је $n \equiv 0(mod\ 4)$, или ако је $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k и m непарни бројеви, и ако $G \in G(k,m,n)$, тада је*

$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{n^2}{8}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2.$$

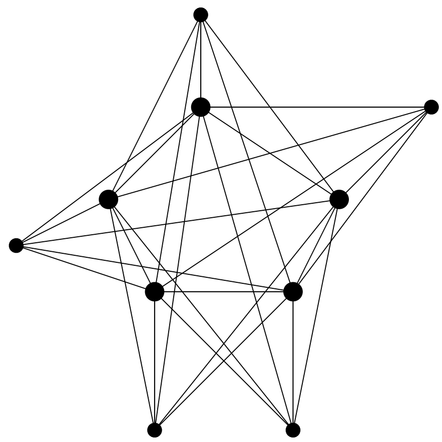
Ова вредност се постиже на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,n/2,k,m}$ за које је $n_k = n_m = n/2, x_{k,k} = n(2k-n)/8, x_{k,m} = n^2/4, x_{m,m} = n(2m-n)/8$, и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0.

Доказ. Доказ ове теореме је аналоган доказу теореме 5.1., те га овом приликом изостављамо. Треба пропратити само целобројност променљивих, тј. видети да ли се добија графовско решење. Број чворова степена k и број чворова степена m се поклапају и важи $n_k = n_m = \frac{n}{2}$ и остале вредности за n_i, када је $k+1 \leq i \leq m-1$, су једнаке нули. Вредности одговарајућих променљивих $y_{i,j}$ за функцију γ_2, када је $k \leq i \leq j \leq m$, се налазе на основу веза: $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$ и сви остали су једнаки нули. Конкретно, у нашем случају ће бити: $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2} = \frac{(n-k-1)n}{4}$, $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} = \frac{(n-m-1)n}{4}$ и све остале вредности за $y_{i,j}$ су једнаке нули. Вредности почетних променљивих су: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)n}{4} = \frac{n(n-2)}{8} - \frac{(n-k-1)n}{4} = \frac{n(2k-n)}{8}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = \frac{n}{2}\frac{n}{2} - 0 = \frac{n^2}{4}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)n}{4} = \frac{n(n-2)}{8} - \frac{(n-m-1)n}{4} = \frac{n(2m-n)}{8}$ и све остале су једнаке нули. Сада су, под условима теореме да је $n \equiv 0(mod\ 4)$, или да је $n \equiv 2(mod\ 4)$ и k и m непарни бројеви, све променљиве целобројне. □

На слици 7.2. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{12,6,6,10}$, где је $n_6 = n_{10} = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,10} = 36$ и $x_{10,10} = 15$.



Слика 7.2. Граф $G \in \mathcal{G}_{12,6,6,10}$.



Слика 7.3. Граф $G \in \mathcal{G}_{10,5,5,7}$.

На слици 7.3. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{10,5,5,7}$, где је $n_5 = n_7 = 5, x_{5,5} = 0, x_{5,7} = 25$ и $x_{7,7} = 5$.

Теорема 7.2. *Ако је n непаран број и k или m парни и ако $G \in G(k,m,n)$, тада је*

$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n^2-1}{8}.$$

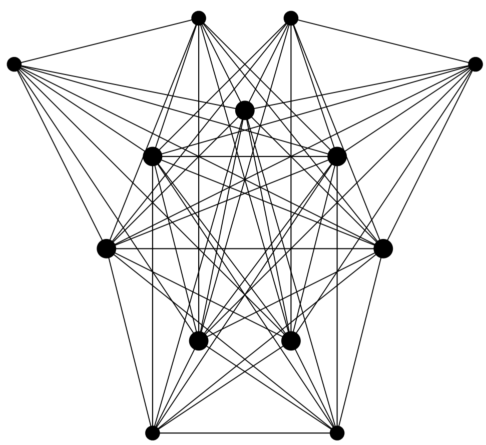
Ако је $n \equiv 1(\mathrm{mod}\ 4)$ и m паран, или ако је $n \equiv 3(\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран, тада се ова вредност постиже на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,(n-1)/2,k,m}$ за које је $n_k = \frac{n-1}{2}, n_m =$

$\frac{n+1}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n-1)(2k-n-1)}{8}$, $x_{k,m} = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{m,m} = \frac{(n+1)(2m-n+1)}{8}$ и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0. Ако је $n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$ и m паран, или ако је $n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран, тада се ова вредност постиже на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,(n+1)/2,k,m}$ за које је $n_k = \frac{n+1}{2}$, $n_m = \frac{n-1}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n+1)(2k-n+1)}{8}$, $x_{k,m} = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{m,m} = \frac{(n-1)(2m-n-1)}{8}$ и сви остали $x_{i,j}, x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0.

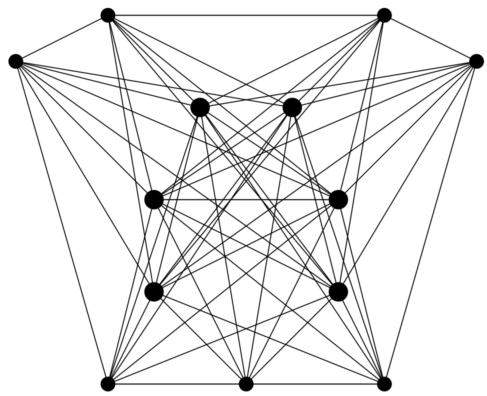
Доказ. Доказ ове теореме је аналоган доказу теореме 5.2., те га овом приликом изостављамо. Као и у претходној теореми, треба само пропратити целобројност променљивих, тј. видети да ли се добија графовско решење. Број чворова степена k и број чворова степена m морају имати једну од вредности $\frac{n-1}{2}$ и $\frac{n+1}{2}$, наизменично, а остале вредности за n_i, када је $k+1 \leq i \leq m-1$, су једнаке нули.

Нека је у првом случају $n_k = \frac{n-1}{2}$ и $n_m = \frac{n+1}{2}$. Вредности променљивих $y_{i,j}$ функције γ_2, када је $k \leq i \leq j \leq m$, које нису једнаке нули су: $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4}$ и $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} = \frac{(n-m-1)(n+1)}{4}$. На основу претходних података, лако долазимо до вредности не нула почетних променљивих: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(n-3)}{8} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(2k-n-1)}{8}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = \frac{(n-1)}{2}\frac{(n+1)}{2} - 0 = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(n-1)}{8} - \frac{(n-m-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(2m-n+1)}{8}$. Услов целобројности ће бити испуњен када је $n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ и m паран, или ако је $n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран.

Нека је, сада, $n_k = \frac{n+1}{2}$ и $n_m = \frac{n-1}{2}$. Вредности променљивих $y_{i,j}$ функције γ_2, када је $k \leq i \leq j \leq m$, које нису једнаке нули су: $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2} = \frac{(n-k-1)(n+1)}{4}$ и $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} = \frac{(n-m-1)(n-1)}{4}$. На основу претходних података, лако долазимо до вредности не нула почетних променљивих:$x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(n-1)}{8} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(2k-n+1)}{8}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = \frac{(n+1)}{2}\frac{(n-1)}{2} - 0 = \frac{n^2-1}{4}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(n-3)}{8} - \frac{(n-m-1)(n-1)}{4} = \frac{(n-1)(2m-n-1)}{8}$. Услов целобројности ће бити испуњен када је $n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$ и m паран, или ако је $n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ и k паран. □



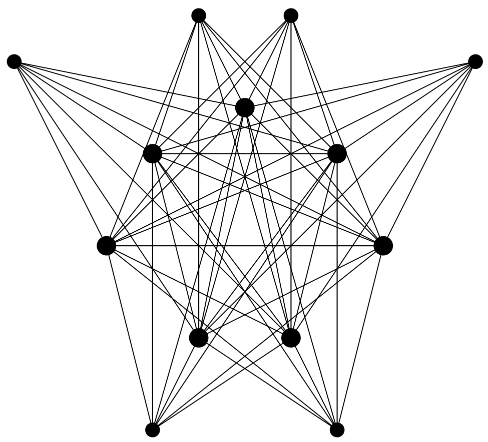
Слика 7.4. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,8,10}$.



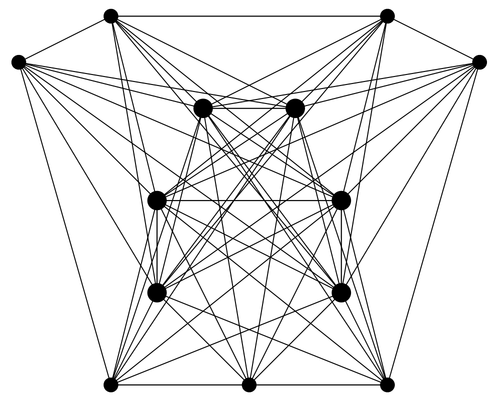
Слика 7.5. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8,10}$.

На сликама 7.4 – 7.7. представљени су екстремни графови реда $n = 13$ ($13 \equiv$

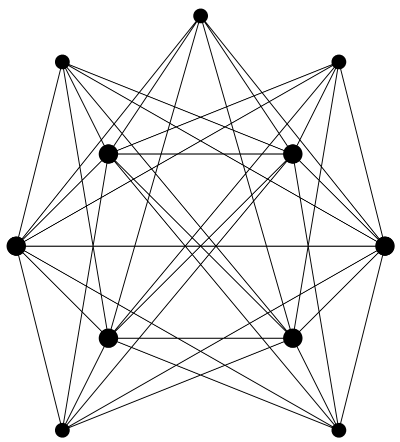
$1(mod\ 4)$) при чему су узети у обзир различити случајеви из теореме 7.2. На слици 7.4. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,8,10}$ ($m = 10$ паран број) где је: $n_8 = 6, n_{10} = 7, x_{8,8} = 3, x_{8,10} = 42$ и $x_{10,10} = 14$. На слици 7.5. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8,10}$ ($k = 8$ паран број) где је: $n_8 = 7, n_{10} = 6, x_{8,8} = 7, x_{8,10} = 42$ и $x_{10,10} = 9$. На слици 7.6. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,7,10}$ ($m = 10$ паран број) где је: $n_7 = 6, n_{10} = 7, x_{7,7} = 0, x_{7,10} = 42$ и $x_{10,10} = 14$. На слици 7.7. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8,10}$ ($k = 8$ паран број) где је: $n_8 = 7, n_{11} = 6, x_{8,8} = 7, x_{8,11} = 42$ и $x_{11,11} = 12$.



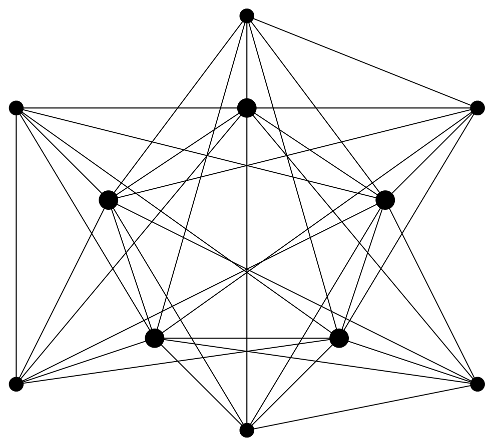
Слика 7.6. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,6,7,10}$.



Слика 7.7. Граф $G \in \mathcal{G}_{13,7,8,11}$.



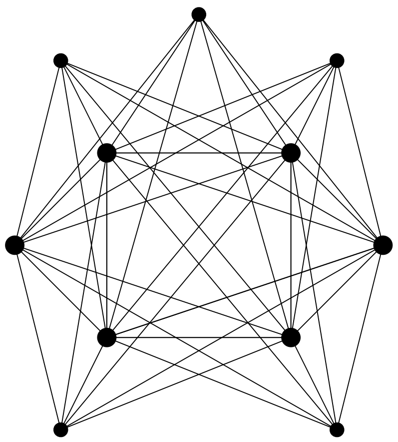
Слика 7.8. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6,8}$.



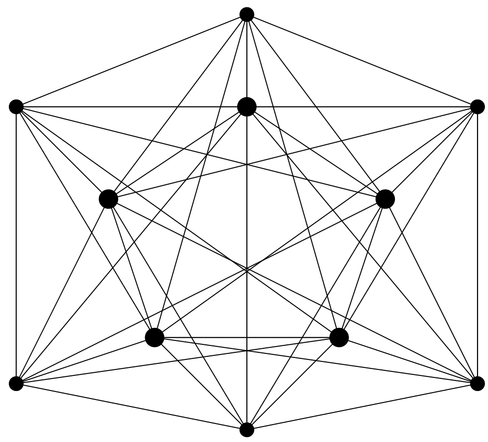
Слика 7.9. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,6,8}$.

На сликама 7.8 – 7.11. представљени су екстремни графови реда $n = 11$ ($11 \equiv 3(mod\ 4)$) при чему су узети у обзир различити случајеви из теореме 7.2. На слици 7.8. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6,8}$ ($k = 6$ паран број) где је: $n_6 = 5, n_8 = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,8} = 30$ и $x_{8,8} = 9$. На слици 7.9. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,6,8}$ ($m = 8$ паран број) где је: $n_6 = 6, n_8 = 5, x_{6,6} = 3, x_{6,8} = 30$ и $x_{8,8} = 5$.

На слици 7.10. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6,9}$ ($k = 6$ паран број) где је: $n_6 = 5, n_9 = 6, x_{6,6} = 0, x_{6,9} = 30$ и $x_{9,9} = 12$. На слици 7.11. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,7,8}$ ($m = 8$ паран број) где је: $n_7 = 6, n_8 = 5, x_{7,7} = 6, x_{7,8} = 30$ и $x_{8,8} = 5$.



Слика 7.10. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,5,6,9}$.



Слика 7.11. Граф $G \in \mathcal{G}_{11,6,7,8}$.

Теорема 7.3. *Ако је $n \equiv 2 (mod\ 4)$, и k или m парни, и ако $G \in G(k, m, n)$, тада је*

$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n^2-4)}{4}.$$

Ова вредност се постиже на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,\frac{n+2}{2},k,m}$ за које је $n_k = \frac{n}{2} + 1$, $n_m = \frac{n}{2} - 1$, $x_{k,k} = \frac{(n+2)(2k-n+2)}{8}$, $x_{k,m} = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{m,m} = \frac{(n-2)(2m-n-2)}{8}$, и сви остали $x_{i,j}$, $x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0 или на графовима $G \in \mathcal{G}_{n,\frac{n-2}{2},k,m}$ за које је $n_k = \frac{n}{2} - 1$, $n_m = \frac{n}{2} + 1$, $x_{k,k} = \frac{(n-2)(2k-n-2)}{8}$, $x_{k,m} = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{m,m} = \frac{(n+2)(2m-n+2)}{8}$ и сви остали $x_{i,j}$, $x_{i,i}$ и n_i су једнаки 0.

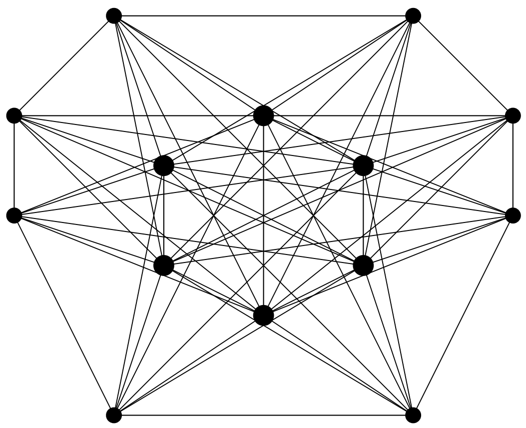
Доказ. Доказ ове теореме је сличан доказу теореме 5.3., те га овом приликом изостављамо. Треба пропратити само целобројност променљивих. Број чворова степена k и број чворова степена m морају имати једну од вредности $\frac{n}{2} + 1$ и $\frac{n}{2} - 1$, наизменично, а остале вредности за n_i, када је $k + 1 \leq i \leq m - 1$, су једнаке нули.

Нека је, у првом случају, $n_k = \frac{n}{2} + 1$ и $n_m = \frac{n}{2} - 1$. Вредности променљивих $y_{i,j}$ функције γ_2, када је $k \leq i \leq j \leq m$, које нису једнаке нули су: $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2} = \frac{(n-k-1)(n+2)}{4}$ и $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} = \frac{(n-m-1)(n-2)}{4}$. На основу претходних података, лако долазимо до вредности не нула почетних променљивих: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)n}{8} - \frac{(n-k-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)(2k-n+2)}{8}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = (\frac{n}{2} + 1)(\frac{n}{2} - 1) - 0 = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(n-4)}{8} - \frac{(n-m-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(2m-n-2)}{8}$.

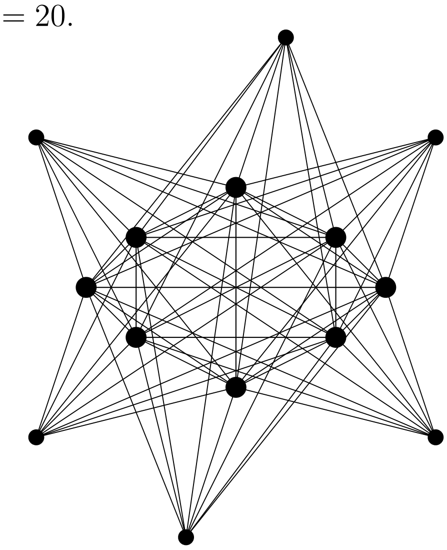
Нека је, сада, $n_k = \frac{n}{2} - 1$ и $n_m = \frac{n}{2} + 1$. Вредности променљивих $y_{i,j}$ функције γ_2, када је $k \leq i \leq j \leq m$, које нису једнаке нули су: $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)n_k}{2} = \frac{(n-k-1)(n-2)}{4}$

и $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m}{2} = \frac{(n-m-1)(n+2)}{4}$. На основу претходних података, лако долазимо до вредности не нула почетних променљивих: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(n-4)}{8} - \frac{(n-k-1)(n-2)}{4} = \frac{(n-2)(2k-n-2)}{8}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = (\frac{n}{2}-1)(\frac{n}{2}+1) - 0 = \frac{n^2-4}{4}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)n}{8} - \frac{(n-m-1)(n+2)}{4} = \frac{(n+2)(2m-n+2)}{8}$. Услов целобројности ће бити испуњен у оба случаја, с обзиром на услов теореме да је $n \equiv 2(mod\,4)$, и k или m парни. $\square$

На слици 7.12. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{14,8,8,11}$, где је $n_8 = 8, n_{11} = 6, x_{8,8} = 8, x_{8,11} = 48$ и $x_{11,,11} = 9$. На слици 7.13. видимо екстремни граф $G \in \mathcal{G}_{14,6,8,11}$, где је $n_8 = 6, n_{11} = 8, x_{8,8} = 0, x_{8,11} = 48$ и $x_{11,11} = 20$.



Слика 7.12. Граф $G \in \mathcal{G}_{14,8,8,11}$.



Слика 7.13. Граф $G \in \mathcal{G}_{14,6,8,11}$.

Када су n, k, и m непарни бројеви није могуће добити графове, на којима се постиже екстремна вредност, слично претходним случајевима. Разлог лежи у теореми 2.1.у којој се каже да је број чворова непарног степена у било ком графу паран па, с обзиром да је ред графа непаран, мора да постоји и неки чвор парног степена.

7.2 Случај када су k, m и n непарни бројеви

Под условом k, m и n непарни бројеви и $k \geq \frac{n+1}{2}$ (што је еквивалентно услову $k \geq \frac{n}{2}$) одредићемо минималну вредност Рандићевог индекса на скупу $G(k, m, n)$. Показаћемо да графови на којима се постиже екстремна вредност имају чворове степена k, m и $m-1$, тачније један чвор степена $m-1$. Први пут екстремни граф има неки чвор степена различитог од минимално или максимално могућег степена у графу. Овај случај је интересантан и тежак јер захтева промене и у математичком моделу и у методама доказивања.

На основу теореме 2.1., с обзиром да је ред графа n непаран, минималан степен чворова k непаран и максималан степен чворова m непаран, мора да постоји непаран број чворова парног степена, тј. бар један. Проблем ћемо дефинисати тако што ћемо наметнути услов да постоји бар један чвор степена већег од k и мањег од m (услов парности није неопходно наметати). Проблем P одређивања минимума $\min\{R(G) : G \in G(k,m,n)\}$ можемо представити у следећем облику:

$$\min \sum_{k\le i\le j\le m} \frac{x_{i,j}}{\sqrt{ij}}$$

при чему важи:

$$(1)\qquad \begin{array}{ccccccccc} 2x_{k,k} & + & x_{k,k+1} & + & x_{k,k+2} & +\cdots+ & x_{k,m} & = & kn_k, \\ x_{k,k+1} & + & 2x_{k+1,k+1} & + & x_{k+1,k+2} & +\cdots+ & x_{k+1,m} & = & (k+1)n_{k+1}, \\ \multicolumn{9}{c}{\dotfill} \\ x_{k,m} & + & x_{k+1,m} & + & x_{k+2,m} & +\cdots+ & 2x_{m,m} & = & mn_m, \end{array}$$

$$(2)\qquad n_k + n_{k+1} + \cdots + n_m = n,$$

$$(3)\qquad x_{i,j} \le n_i n_j, \qquad \text{за} \quad k \le i \le m, \quad i < j \le m,$$

$$(4)\qquad x_{i,i} \le \binom{n_i}{2}, \qquad \text{за} \quad k \le i \le m,$$

$$(5)\qquad x_{i,j},\ n_i \quad \text{су ненегативни цели бројеви, за } \ k \le i \le j \le m,$$

$$(6)\qquad n_p \ge 1,\ \text{за бар једно } \ p \in \{k+1, ..., m-1\}.$$

Из (1) и (2) добијамо да је вредност Рандићевог индекса:

$$(7)\qquad R(G) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_{k\le i\le j\le m} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}.$$

Дефинишимо функцију

$$(8)\qquad \gamma = \sum_{k\le i\le j\le m} \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 x_{i,j}.$$

Као и раније, разматраћемо проблем максимизације функције γ како бисмо дошли до минимума Рандићевог индекса $R(G)$. Такође, уведимо смену:

$$(9)\qquad \begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \le i \le m,\ i < j \le m, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \le i \le m. \end{array}$$

Након замене $x_{i,j}$ и $x_{i,i}$ из (9) у функцији γ и једнакостима (1), предефинишимо проблем оптимизације (означимо га са $\overline{P}$) на следећи начин:

$$\max \sum_{k\le i<j\le m}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_in_j - \sum_{k\le i<j\le m}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 y_{i,j}$$

при чему важи

$$(1') \qquad \begin{array}{l} 2y_{k,k} + y_{k,k+1} + y_{k,k+2} + \cdots + y_{k,m} = (n-k-1)n_k, \\ y_{k,k+1} + 2y_{k+1,k+1} + y_{k+1,k+2} + \cdots + y_{k+1,m} = (n-k-2)n_{k+1}, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ y_{k,m} + y_{k+1,m} + y_{k+2,m} + \cdots + 2y_{m,m} = (n-m-1)n_m, \end{array}$$

$$(2) \qquad n_k + n_{k+1} + \cdots + n_m = n,$$

$$(10) \qquad n_i \ge 0, \qquad \text{за} \quad k \le i \le m,$$

$$(11) \qquad y_{i,j} \ge 0, \qquad \text{за} \quad k \le i \le j \le m,$$

$$(6') \qquad n_p \ge 1, \qquad \text{за бар једно} \quad p \in \{k+1, ..., m-1\},$$

$$(5') \qquad y_{i,j},\ n_i \quad \text{су цели бројеви, за} \ k \le i \le j \le m,$$

$$(12) \qquad \text{ако је } n_i = 1 \text{ за неко } i, \quad \text{тада је} \quad y_{i,i} = 0.$$

Нека је $\gamma_1 = \sum_{k\le i<j\le m}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 n_in_j$ и $\gamma_2 = -\sum_{k\le i<j\le m}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}})^2 y_{i,j}$. Несумњиво важи да је $\max\gamma \le \max\gamma_1 + \max\gamma_2$, при чему се све максималне вредности остварују под истим ограничењима $(1'), (2), (10-12), (5', 6')$. Означимо са $(n_k^*, \dots, n_m^*)$ односно N^* оптималну тачку функције γ_1 и са $(n_k^\star, \dots, n_m^\star, y_{k,k}^\star, \dots, y_{m,m}^\star)$ оптималну тачку функције γ_2 . Пошто функција γ_2 може имати више оптималних тачака и пошто $y_{i,j}$ зависи од n_i, можемо изабрати, ако је то могуће, $n_i^\star = n_i^*$ како бисмо добили оптималну тачку функције γ. У складу са тим, нађимо тачку N^* при чему ћемо изоставити ограничења $(1')$, (11) и(12), с обзиром да су за функцију γ_1 само ограничења $(2), (10), (5')$ и $(6')$ важна. У почетку ћемо ограничење $(5')$ изоставити, а питање целобројности ћемо разматрати на крају. Треба напоменути да ћемо често додавати нова ограничења.

Из (2), добијамо да је $n_m = n - \sum_{j=k}^{m-1} n_j$. За функцију γ_1 важи:

$$\gamma_1 = \sum_{k\le i<j\le m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2 n_in_j + \sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i\left(n-\sum_{j=k}^{m-1} n_j\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= n\sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i - \sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i^2 \\
&+ \sum_{k\le i<j\le m-1}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{j}}\right)^2-\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2-\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right) n_i n_j \\
&= n\sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i - \sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i^2 \\
&- 2\sum_{k\le i<j\le m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right) n_i n_j \\
&= -\left(\sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right) n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i.
\end{aligned}
$$

Дефинишимо сада нову функцију $\bar{\gamma}_1$ са $\bar{\gamma}_1(n_k,...,n_{m-1}) = -\left(\sum_{i=k}^{m-1}(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}})n_i\right)^2 + n\sum_{i=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i$ и нека је $X = \{(n_k,...,n_m) \mid n_k+...+n_m = n\}$. Сада је $\gamma_1(n_k,...,n_m) = \bar{\gamma}_1(n_k,...,n_{m-1})$ за $(n_k,...,n_m) \in X$. Функција $\bar{\gamma}_1$ је конкавна на $\mathbb{R}^{m-k}$ пошто је први израз композиција квадратне и линеарне функције (са негативним предзнаком), а други израз линеарна функција. Разматраћемо функцију $\bar{\gamma}_1$ уместо функције γ_1. При томе, тачки $(n_k,...,n_{m-1}) \in \mathbb{R}^{m-k}$, на основу једнакости (2), одговара тачка $(n_k,...,n_{m-1}, n-\sum_{j=k}^{m-1} n_j) \in \mathbb{R}^{m-k+1}$ скупа X.

Посебну важност при доказивању има теорема 2.2. (видети другу главу).

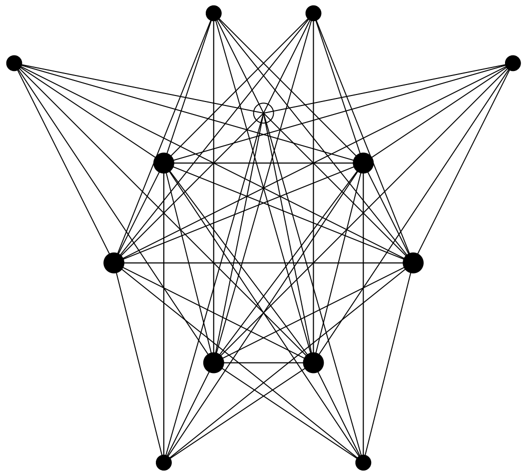
У почетку изнесимо тврђења за различите случајеве, а онда ће, уз већи број помоћних тврђења, бити презентовани и докази.

Теорема 7.4. *Ако су k, m, n непарни бројеви и $n \equiv 1(mod\ 4)$, и ако $G \in G(k,m,n)$, тада је*

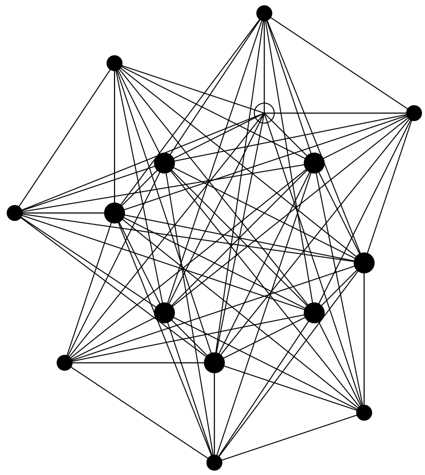
$$
\begin{aligned}
R(G) \;\ge\;& \frac{n}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{(n-1)^2}{8} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\frac{(n-1)}{4} \\
-& \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{(-n+2m-1)}{4}.
\end{aligned}
$$

Ова вредност се постиже на графовима фамилије $\mathcal{G}_{(\frac{n-1}{2},0,...,0,1,\frac{n-1}{2})}$, за које је $n_k = \frac{n-1}{2}$, $n_i = 0$ за $k+1 \le i \le m-2$, $n_{m-1} = 1, n_m = \frac{n-1}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n-1)(-n+2k-1)}{8}$, $x_{k,m-1} = \frac{n-1}{2}$, $x_{k,m} = \frac{(n-1)^2}{4}$, $x_{m-1,m} = \frac{-n+2m-1}{2}$, $x_{m,m} = \frac{(n-1)(-n+2m-1)}{8} + \frac{n-m}{2}$ и сви остали $x_{i,j} = 0$.

На слици 7.14. представљен је граф $G \in G(7,11,13)$ (где је $k = 7,\ m = 11$ и $n = 13$), односно граф $G \in \mathcal{G}_{(6,0,0,1,6)}$, на коме се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, под условима теореме 7.4. Нагласимо да је $x_{7,7} = 0$, $x_{7,10} = 6$, $x_{7,11} = 36$, $x_{10,11} = 4$ и $x_{11,,11} = 13$.



Слика 7.14. Граф $G \in \mathcal{G}_{(6,0,0,1,6)}$.



Слика 7.15. Граф $G \in \mathcal{G}_{(7,1,7)}$.

Ако је $n \equiv 3(mod\ 4)$, дајемо две теореме.

Теорема 7.5. *Ако су k, m, n непарни бројеви, $m = k+2$ и $n \equiv 3(mod\ 4)$, и ако $G \in G(k,m,n)$, тада је*

$$\begin{aligned} R(G) \quad &\geq \quad \frac{n}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+2}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{8} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)^2 \frac{(n-3)}{4} \\ &- \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{k+2}}\right)^2 \frac{(-n+2k+5)}{4}. \end{aligned}$$

Ова вредност се постиже на графовима фамилије $\mathcal{G}_{(\frac{n-1}{2},1,\frac{n-1}{2})}$, за које је $n_k = \frac{n-1}{2}$, $n_{k+1} = 1, n_{k+2} = \frac{n-1}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n-1)(-n+2k-1)}{8} + \frac{1}{2}, x_{k,k+1} = \frac{n-3}{2}, x_{k,k+2} = \frac{(n-1)^2}{4}$, $x_{k+1,k+1} = 0$, $x_{k+1,k+2} = \frac{-n+2k+5}{2}$, и $x_{k+2,k+2} = \frac{(n-3)(-n+2k+5)}{8}$.

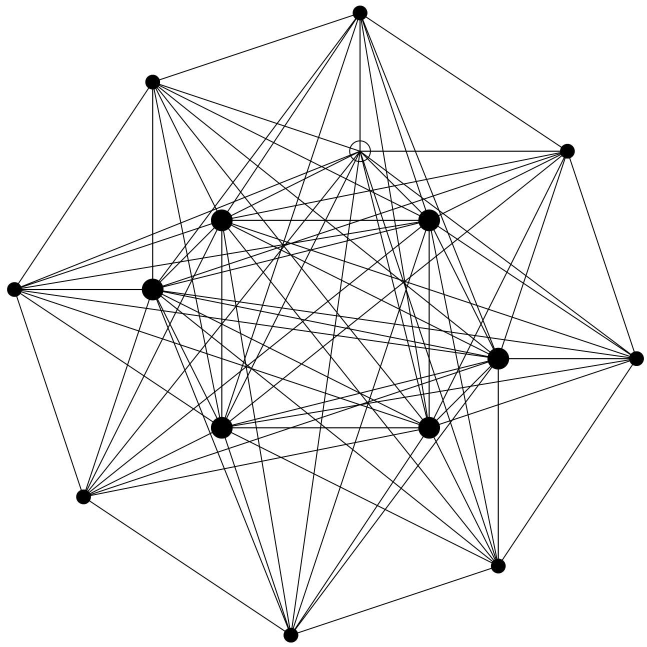
На слици 7.15. представљен је граф $G \in G(9,11,15)$, односно граф $G \in \mathcal{G}_{(7,1,7)}$, на коме се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, под условима теореме 7.5. Нагласимо да је $x_{9,9} = 4$, $x_{9,10} = 6$, $x_{9,11} = 49$, $x_{10,11} = 4$ и $x_{11,,11} = 12$.

Теорема 7.6. *Ако су k, m, n непарни бројеви, $m > k+2$ и $n \equiv 3(mod\ 4)$, и ако $G \in G(k,m,n)$, тада је*

$$\begin{aligned} R(G) \quad &\geq \quad \frac{n}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{8} - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{(n+1)}{4} \\ &- \quad \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(-n+2m-3)}{4}. \end{aligned}$$

Ова вредност се постиже на графовима фамилије $\mathcal{G}_{(\frac{n+1}{2},0,\ldots,0,1,\frac{n-3}{2})}$, за које је $n_k = \frac{n+1}{2}$, $n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-2$, $n_{m-1} = 1, n_m = \frac{n-3}{2}$, $x_{k,k} = \frac{(n+1)(-n+2k+1)}{8}$, $x_{k,m-1} = \frac{n+1}{2}$, $x_{k,m} = \frac{(n+1)(n-3)}{4}$, $x_{m-1,m} = \frac{-n+2m-3}{2}$, $x_{m,m} = \frac{(n-3)(-n+2m-3)}{8} + \frac{n-m}{2}$ и сви остали $x_{i,j}$ су једнаки нули.

На слици 7.16. представљен је граф $G \in G(9, 13, 15)$, односно граф $G \in \mathcal{G}_{(8,0,0,1,6)}$, на коме се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, под условима теореме 7.6. Нагласимо да је $x_{9,9} = 8$, $x_{9,12} = 8$, $x_{9,13} = 48$, $x_{12,13} = 4$ и $x_{13,,13} = 13$.



Слика 7.16. Граф $G \in \mathcal{G}_{(8,0,0,1,6)}$.

Разматраћемо два главна случаја: 1. $n_p = 1$ и 2. $n_p \geq 2$, за неко p, $k + 1 \leq p \leq m - 1$. Одредићемо максималну вредност или горњу границу функција γ_1 и γ_2 применом релевантних ограничења у оба случаја. У првом пододељку наћи ћемо максималну вредност функције γ_1 у првом случају 1. Затим ћемо одредити максималну вредност функције γ_2 у оба случаја. У наредном пододељку, одредићемо горњу границу функције γ_1 у другом случају 2. На крају ћемо прво доказати теорему 7.4., па заједно друге две теореме.

Идеја доказа је да покажемо да графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати два чвора степена p, за $k + 1 \leq p \leq m - 1$, и не могу имати један чвор степена p за $k + 2 \leq p \leq m - 2$. Самим тим, долазимо до графова који имају један чвор степена p за који функција $\gamma_1 + \gamma_2$ постиже максималну вредност.

У целокупном раду на даље важи: $\frac{n+1}{2} \leq k < p < m \leq n - 2$.

7.2.1 Максимална вредност функције γ_1 када је $n_p = 1$

У овом случају одредићемо максимум функције γ_1 при чему важе услови (2), (10), $(5')$ и $n_p = 1$ за неко p, $k+1 \leq p \leq m-1$. Означимо са (a) услов $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \geq 0$ и са (b) услов $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \leq 0$. Самим тим, разликујемо два подслучаја: подслучај (a) ако је испуњен услов (a), и подслучај (b) када је испуњен услов (b). Даље, поделимо подслучај (a) у нова два подслучаја: подслучај (a_1), када је $n_k \leq \frac{n-1}{2}$, и подслучај (a_2), када је $n_k \geq \frac{n+1}{2}$. Такође, и подслучај (b) поделимо у нова два подслучаја: подслучај (b_1), када је $n_k \le \frac{n-3}{2}$, и подслучај (b_2), када је $n_k \ge \frac{n-1}{2}$. Одредимо максималну вредност функције γ_1 у сваком подслучају и, након тога, максимум функције γ_1 у целокупном случају.

Подслучај a_1. У овом подслучају одредићемо максималну вредност функције γ_1 када су испуњени услови $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \ge 0$ и $n_k \le \frac{n-1}{2}$. Разматрамо проблем $\overline{P}_{a_1}$:

$$\max -\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)^2 + n\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_j$$

при чему важи

$$\begin{aligned} n_p &= 1, \\ -n_k + \frac{n-1}{2} &\ge 0, \\ n_i \ge 0, \quad \text{за} \quad & k \le i \le m-1,\ i \ne p. \end{aligned}$$

Означимо са N допустиву тачку $(n_k, \ldots, n_{m-1})$ проблема $\overline{P}_{a_1}$. Применимо Kuhn–Tucker -ову теорему 2.2. на проблем $\overline{P}_{a_1}$. По тој теореми, допустива тачка N је тачка максимума овог проблема ако постоје ненегативни бројеви μ_k, λ_i, за $k \le i \le m-1, i \ne p$, такви да важе Kuhn–Tucker -ови услови:

$$(13)\quad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2-\mu_k+\lambda_k=0,$$

$$(14)\quad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2+\lambda_i=0,$$
$$\text{за}\quad k+1 \le i \le m-1,\ i \ne p,$$

и

$$(15)\qquad \mu_k\left(-n_k+\frac{n-1}{2}\right)=0,$$

$$(16)\qquad \lambda_i n_i = 0, \quad \text{за} \quad k \le i \le m-1,\ i \ne p.$$

Лема 7.1. *Тачка* $\overline{N}^*_{a_1}$, *одређена са* $n_k = \frac{n-1}{2}$, $n_p = 1$ *и* $n_i = 0$, *за* $k+1 \le i \le m-1$, $i \ne p$, *је тачка максимума проблема* $\overline{P}_{a_1}$.

Доказ. Лако се види да је наведена тачка допустива. У овој тачки је $\lambda_k^* = 0$, пошто је $\delta(G) = k$ и из (16), па на основу (13) биће:

$$\begin{aligned} \mu_k^* &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-1}{2}-2\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right. \\ &+ \left. n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{2}{\sqrt{p}}+\frac{1}{\sqrt{m}}\right). \end{aligned}$$

На основу услова подслучаја (a) $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \geq 0$, је $\mu_k^* \geq 0$. Из једнакости (14), $k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p$, важи:

$$\lambda_i^* = \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-1}{2} + 2\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)$$
$$= \left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{n-1}{\sqrt{k}} + \frac{2}{\sqrt{p}} - \frac{n}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right).$$

Пошто су $\frac{1}{\sqrt{i}}$ и $\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{j+1}}$ опадајуће функције, имамо да је $\frac{n-1}{\sqrt{k}} + \frac{2}{\sqrt{p}} - \frac{n}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \geq \frac{n-1}{\sqrt{k}} + \frac{2}{\sqrt{p}} - \frac{n}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \geq (n-1)(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) - (\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{p}}) = (n-1)(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) - \sum_{j=k+1}^{p-1}(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{j+1}}) \geq (n-1)(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) - (p-k-1)(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) = (n-p+k)(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}) \geq 0$, и отуд $\lambda_i^* \geq 0$. На основу свега, тачка $\overline{N}_{a_1}^*$ испуњава Kuhn–Tucker -ове услове те је и тачка максимума. □

Закључак можемо представити следећим тврђењем.

Лема 7.2. *Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$ и самим тим функције γ_1 је*

$$\gamma_{1(a_1)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n-1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2},$$

и она се постиже у тачки $N_{a_1}^* \in X$ одређеној са $(\frac{n-1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0, \frac{n-1}{2})$.

Подслучај a_2. У овом подслучају одредићемо максималну вредност функције γ_1 када су испуњени услови $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \geq 0$ и $n_k \geq \frac{n+1}{2}$. Разматрамо проблем $\overline{P}_{a_2}$:

$$\max -\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)^2 + n\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_j$$

при чему важи

$$n_p = 1,$$
$$n_k - \frac{n+1}{2} \geq 0,$$
$$n_i \geq 0, \quad \text{за} \quad k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p.$$

За $k \leq i \leq m-1$, добијамо :

$$\partial\bar{\gamma}_1/\partial n_i = -2\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 =$$
$$\left(-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_k - 2\sum_{j=k+1}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$
$$< \left(-\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)(n+1) + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) < 0,$$

пошто је $n_k \geq \frac{n+1}{2}$ и $n_i \geq 0$. Како је $\partial\bar{\gamma}_1/\partial n_i \leq 0$, за $k \leq i \leq m-1$, функција $\bar{\gamma}_1$ постиже максималну вредност за $n_k = \frac{n+1}{2}, n_p = 1$ и $n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-1, i \neq p$. Можемо приметити да се у овом подслучају не користи услов (a). Закључак можемо уобличити следећим тврђењем.

Лема 7.3. *Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$ и самим тим функције γ_1 у подслучају (a_2) је*

$$\gamma_{1(a_2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n+1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2},$$

и она се постиже у тачки$N^*_{a_2} \in X$ *одређеној са* $(\frac{n+1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0, \frac{n-3}{2})$.

Подслучај b_1. У овом подслучају одредићемо максималну вредност функције γ_1 када су испуњени услови $\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \leq 0$ анд $n_k \leq \frac{n-3}{2}$. Разматрамо проблем $\overline{P}_{b_1}$:

$$\max - \left(\sum_{j=k}^{m-1} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) n_j\right)^2 + n \sum_{j=k}^{m-1} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_j$$

при чему важи

$$n_p = 1,$$
$$-n_k + \frac{n-3}{2} \geq 0,$$
$$n_i \geq 0, \quad \text{за} \quad k \leq i \leq m-1,\ i \neq p.$$

По теореми 2.2., допустива тачка $(n_k, \ldots, n_{m-1})$ је тачка максимума наведеног проблема ако постоје ненегативни бројеви $\mu_k,\ \lambda_i$, за $k \leq i \leq m-1, i \neq p$, такви да важе Kuhn–Tucker -ови услови:

$$(13)\quad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 - \mu_k + \lambda_k = 0,$$

$$(14)\quad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1} \left(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) + n\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + \lambda_i = 0,$$
$$\text{за} \quad k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p,$$

и

$$(17)\quad \mu_k\left(-n_k + \frac{n-3}{2}\right) = 0,$$

$$(16)\quad \lambda_i n_i = 0, \quad \text{за} \quad k \leq i \leq m-1,\ i \neq p.$$

Лема 7.4. *Тачка $\overline{N}^*_{b_1}$ одређена са $n_k = \frac{n-3}{2}$, $n_p = 1$ анд $n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p$, је тачка максимума проблема $\overline{P}_{b_1}$.*

Доказ. Лако се види да је наведена тачка допустива. У овој тачки је $\lambda^*_k = 0$, на основу (16) и пошто је $\delta(G) = k$, па на основу (13) биће:

$$\begin{aligned}\mu_k^* &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-3}{2}-2\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right.\\ &+ \left. n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)=\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{3}{\sqrt{k}}-\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right).\end{aligned}$$

Како је $\frac{3}{\sqrt{k}} \geq \frac{2}{\sqrt{p}}+\frac{1}{\sqrt{m}}$, видимо да је $\mu_k^* \geq 0$. На основу (14) , за $k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p$, је:

$$\begin{aligned}\lambda_i^* &= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-3}{2}+2\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)\\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{n-3}{\sqrt{k}}+\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{1}{\sqrt{m}}\right).\end{aligned}$$

Пошто је $\frac{2}{\sqrt{p}} \geq \frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}$ и пошто су функције $\frac{1}{\sqrt{i}}$ и $\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}}$ опадајуће, добијамо да је $\frac{n-3}{\sqrt{k}}+\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{n}{\sqrt{i}}+\frac{1}{\sqrt{m}} \geq \frac{n-3}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}-\frac{n}{\sqrt{k+1}}+\frac{1}{\sqrt{m}} = (n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}) - 2(\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}) = (n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-2\sum_{j=k+1}^{m-1}(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}}) \geq (n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}) - 2(m-k-1)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}) \geq (n-2-2m+2k+2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}) \geq 0$, пошто је $n-2m+2k \geq n-2(n-2)+2\frac{n+1}{2} > 0$. Видимо да је и $\lambda_i^* \geq 0$. Значи, тачка $\overline{N}_{b_1}^*$ задовољава Kuhn–Tucker -ове услове и то је тачка максимума. □

Важи следеће тврђење.

Лема 7.5. *Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$ и самим тим функције γ_1 је*

$$\gamma_{1(b_1)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{(n-3)(n+1)}{4}+\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2\frac{n-3}{2}+\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{n+1}{2},$$

и она се постиже у тачки $N_{b_1}^* \in X$ одређеној са $(\frac{n-3}{2}, 0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0, \frac{n+1}{2})$.

Подслучај b_2. У овом подслучају одредићемо максималну вредност функције γ_1 када су испуњени услови $\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}-\frac{2}{\sqrt{p}} \leq 0$ анд $n_k \geq \frac{n-1}{2}$. Разматрамо проблем $\overline{P}_{b_2}$:

$$\max -\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)^2+n\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_j$$

при чему важи

$$\begin{gathered} n_p = 1,\\ n_k - \frac{n-1}{2} \geq 0,\\ n_i \geq 0, \quad \text{за} \quad k+1 \leq i \leq m-1,\ i \neq p.\end{gathered}$$

По теореми 2.2., допустива тачка $(n_k, \ldots, n_{m-1})$ је тачка максимума наведеног проблема ако постоје ненегативни бројеви $\mu_k,\ \lambda_i$, за $k+1 \leq i \leq m-1, i \neq p$, такви да важе Kuhn–Tucker -ови услови:

$$(13') \quad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2+\mu_k = 0,$$

$$(14)\qquad -2\left(\sum_{j=k}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_j\right)\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)+n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2+\lambda_i=0,$$
$$\text{за}\quad k+1\le i\le m-1,\ i\ne p,$$

и

$$(18)\qquad \mu_k\left(n_k-\frac{n-1}{2}\right)=0,$$

$$(16')\qquad \lambda_i n_i=0,\quad \text{за}\quad k+1\le i\le m-1,\ i\ne p.$$

Лема 7.6. *Тачка $\overline{N}^*_{b_2}$ одређена са $n_k=\frac{n-1}{2}$, $n_p=1$ и $n_i=0$, за $k+1\le i\le m-1$, $i\ne p$, је тачка максимума проблема $\overline{P}_{b_2}$.*

Доказ. Лако се види да је наведена тачка допустива. У овој тачки из $(13')$ биће:

$$\mu_k^*=\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-1}{2}+2\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-n\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)$$
$$=\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right).$$

На основу услова (b) $\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}-\frac{2}{\sqrt{p}}\le 0$ видимо да је $\mu_k^*\ge 0$. Из (14), за $k+1\le i\le m-1,\ i\ne p$, у овој тачки биће:

$$\lambda_i^*=\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\frac{n-1}{2}+2\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-n\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)$$
$$=\left(\frac{1}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{n-1}{\sqrt{k}}+\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{n}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right).$$

Како је $\frac{2}{\sqrt{p}}\ge\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}$, добијамо да је: $\frac{n-1}{\sqrt{k}}+\frac{2}{\sqrt{p}}-\frac{n}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\ge\frac{n-1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{k}}+\frac{1}{\sqrt{m}}-\frac{n}{\sqrt{i}}-\frac{1}{\sqrt{m}}=\frac{n}{\sqrt{k}}-\frac{n}{\sqrt{i}}\ge 0$. Видимо да је и $\lambda_i^*\ge 0$. Значи, тачка $\overline{N}^*_{b_2}$ задовољава Kuhn–Tucker -ове услове те је тачка максимума. □

Коначно и у овом случају долазимо до следећег тврђења.

Лема 7.7. *Максимална вредност функције $\bar{\gamma}_1$ и самим тим и функције γ_1 је*

$$\gamma_{1(b_2)}=\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{(n-1)^2}{4}+\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2\frac{n-1}{2}+\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{n-1}{2},$$

и она се постиже у тачки $N^*_{b_2}\in X$ одређеној са $(\frac{n-1}{2},0,\ldots,0,1,0,\ldots,0,\frac{n-1}{2})$.

Сада ћемо утврдити вредност за p када функције $\gamma_{1(a_1)}$, $\gamma_{1(a_2)}$, $\gamma_{1(b_1)}$ и $\gamma_{1(b_2)}$ постижу максималне вредности. Поновимо вредности ових функција.

$$\gamma_{1(a_1)}=\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{(n-1)^2}{4}+\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2\frac{n-1}{2}+\left(\frac{1}{\sqrt{p}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\frac{n-1}{2},$$

$$\gamma_{1(a_2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n+1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2},$$

$$\gamma_{1(b_1)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-3)(n+1)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n-3}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n+1}{2},$$

$$\gamma_{1(b_2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n-1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2}.$$

Пошто је $\partial\gamma_{1(a_1)}/\partial p = \frac{n-1}{2\sqrt{p^3}}(\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}}) \geq 0$, с обзиром на услов (a), закључујемо да функција $\gamma_{1(a_1)}$ постиже максималну вредност $\gamma^*_{1(a_1)}$ за $p = m-1$. Пошто је $\partial\gamma_{1(a_2)}/\partial p = \frac{1}{2\sqrt{p^3}}(\frac{n+1}{\sqrt{k}} + \frac{n-3}{\sqrt{m}} - \frac{2(n-1)}{\sqrt{p}}) = \frac{1}{2\sqrt{p^3}}(\frac{n-1}{\sqrt{k}} + \frac{n-1}{\sqrt{m}} - \frac{2(n-1)}{\sqrt{p}} + \frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{2}{\sqrt{m}}) > 0$, закључујемо да функција $\gamma_{1(a_2)}$ постиже максималну вредност $\gamma^*_{1(a_2)}$ за $p = m-1$. Даље, $\partial\gamma_{1(b_2)}/\partial p = \frac{n-1}{2\sqrt{p^3}}(\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}}) \leq 0$, на основу услова (b) и можемо закључити да функција $\gamma_{1(b_2)}$ постиже максималну вредност $\gamma^*_{1(b_2)}$ за $p = k+1$. На крају, пошто је $\partial\gamma_{1(b_1)}/\partial p = \frac{1}{2\sqrt{p^3}}(\frac{n-3}{\sqrt{k}} + \frac{n+1}{\sqrt{m}} - \frac{2(n-1)}{\sqrt{p}}) < 0$, на основу услова (b), и функција $\gamma_{1(b_1)}$ постиже максималну вредност $\gamma^*_{1(b_1)}$ за $p = k+1$. Наведимо све четири екстремне вредности.

$$\begin{aligned}
\gamma^*_{1(a_1)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n-1}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2}, \\
\gamma^*_{1(a_2)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n+1}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma^*_{1(b_1)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-3)(n+1)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)^2 \frac{n-3}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n+1}{2}, \\
\gamma^*_{1(b_2)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)^2 \frac{n-1}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2}.
\end{aligned}$$

Упоредимо сада $\gamma^*_{1(a_1)}$ и $\gamma^*_{1(a_2)}$.

$$\begin{aligned}
\gamma^*_{1(a_1)} - \gamma^*_{1(a_2)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\
&= 2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) > 0.
\end{aligned}$$

Видимо да је већа вредност $\gamma^*_{1(a_1)}$. Упоредимо сада $\gamma^*_{1(b_2)}$ и $\gamma^*_{1(b_1)}$.

$$\begin{aligned}\gamma^*_{1(b_2)} - \gamma^*_{1(b_1)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\ &= 2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) > 0.\end{aligned}$$

У овом случају је већа вредност $\gamma^*_{1(b_2)}$. Сада, упоредимо и вредности $\gamma^*_{1(a_1)}$ и $\gamma^*_{1(b_2)}$.

$$\begin{aligned}\gamma^*_{1(a_1)} \quad &- \quad \gamma^*_{1(b_2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n-1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2} \\ &- \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)^2 \frac{n-1}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2} \\ &= \quad (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m}}\right).\end{aligned}$$

Пошто је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} > \frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}$, следи да је $\gamma^*_{1(a_1)} > \gamma^*_{1(b_2)}$, ако је $k+1 \neq m-1$. Овим смо управо доказали следеће тврђење:

Лема 7.8. *Ако је $n_p = 1$ за неко p, $k+1 \leq p \leq m-1$, тада функција γ_1, која испуњава услове* $(2), (5'), (10)$, *постиже максималну вредност*

$$\begin{aligned}\gamma^*_{1(a_1)} &= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n-1}{2} \\ &+ \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2},\end{aligned}$$

у тачки одређеној са $(\frac{n-1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, \frac{n-1}{2})$.

7.2.2 Максимална вредност функције γ_2

Разматраћемо два подслучаја: први подслучај (1) када је $n_p = 1$ за неко p, где је $k < p < m$, и други подслучај (2) када је $n_p \geq 2$ за неко p, где је $k < p < m$.

Подслучај 1. За $n_p = 1$ добијамо да је $x_{p,p} = 0$, односно $y_{p,p} = 0$. Такође, важи систем једнакости $(1')$, а специјално $y_{k,p} + y_{k+1,p} + \ldots + 2y_{p,p} + \ldots + y_{p,m} = (n-p-1)n_p = n-p-1$. Функција $\gamma_2 = -\sum_{k \leq i < j \leq m}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{j}})^2 y_{i,j}$ очигледно мора бити мања од нуле. Максималну вредност ће добити када има само један сабирак (сваки је непозитиван). С обзиром да постоји један чвор степена p, најмања тежина гране се добија са чвором степена $p+1$ или чвором степена $p-1$. На основу свега реченог, функција γ_2 има максималну вредност када је $y_{p,p+1} = n-p-1$, $y_{p+1,p+1} = \frac{(n-p-2)n_{p+1} - (n-p-1)}{2}$, $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$, $k \leq i \leq m$, $i \neq p$, $i \neq p+1$ и сви остали $y_{i,j} = 0$ или када је $y_{p-1,p} = n-p-1$, $y_{p-1,p-1} = \frac{(n-p)n_{p-1} - (n-p-1)}{2}$, $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$, за $k \leq i \leq m$, $i \neq p$, $i \neq p-1$ и сви остали $y_{i,j} = 0$. Означимо максималну вредност функције γ_2 у првом случају са $\bar{\gamma}_2$ и у другом случају са $\hat{\gamma}_2$. Тада је $\bar{\gamma}_2 = -(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{p+1}})^2(n-p-1)$ и $\hat{\gamma}_2 = -(\frac{1}{\sqrt{p-1}} - \frac{1}{\sqrt{p}})^2(n-p-1)$. Пошто је функција $(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{j+1}})$ опадајућа, то је $\bar{\gamma}_2 > \hat{\gamma}_2$. Даље, како за извод функције $\bar{\gamma}_2$ важи: $\partial\bar{\gamma}_2/\partial p = (\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{p+1}})(\frac{1}{\sqrt{p^3}} - \frac{1}{\sqrt{(p+1)^3}})(n-p-1) + (\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{p+1}})^2 > 0$, закључујемо да функција $\bar{\gamma}_2$ постиже максималну вредност $\bar{\gamma}_2^*$ за $p = m-1$. Ова вредност је

$$\bar{\gamma}_2^* = -\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-m),$$

и постиже се када је $y_{m-1,m} = n-m, y_{m,m} = \frac{(n-m-1)n_m-(n-m)}{2}, y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$, за $i \neq m-1,\ i \neq m$ и сви остали $y_{i,j} = 0$. Поред тога, $y_{i,i}$ и n_i морају бити цели бројеви. Како је $n_{m-1} = 1$, то остале вредности за n_i морају бити цели бројеви за које важи $n_k + ... + n_{m-2} + n_m = n-1$ (а тих могућности има доста). Закључујемо да постоји више екстремних тачака функције γ_2. Доказали смо следеће тврђење:

Лема 7.9. *Ако је $n_p = 1$ за неко p, где је $k+1 \leq p \leq m-1$, тада је максимална вредност функције γ_2, за коју важе услови $(1'), (2), (5'), (10-12)$, вредност $\bar{\gamma}_2^*$.*

Како бисмо нашли оптималну вредност функције γ , можемо за n_i узети вредности из тачке $(\frac{n-1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, \frac{n-1}{2})$ за коју γ_1 постиже максималну вредност $\gamma_{1(a_1)}^*$. То су: $n_k = \frac{n-1}{2}, n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-2$, $n_{m-1} = 1$, $n_m = \frac{n-1}{2}$, $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4}, y_{m-1,m} = n-m$, $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)(n-1)-2(n-m)}{4}$, и сви остали $y_{i,j} = 0$. Нека је

$$\gamma^* = \gamma_{1(a_1)}^* + \bar{\gamma}_2^*.$$

Сада се може видети да су $y_{i,i}$, за $k \leq i \leq m$, целобројни ако је $n \equiv 1(mod\ 4)$. Графове на којима функција γ добија вредност γ^*, када је $n \equiv 1(mod\ 4)$, смо записали у облику $G_{(\frac{n-1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, \frac{n-1}{2})}$.

У случају када је $n \equiv 3(mod\ 4)$ услов целобројности није испуњен за наведене вредности променљивих. Анализирајмо вредности из тачке $(\frac{n+1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, \frac{n-3}{2})$ за коју функција γ_1 постиже вредност $\gamma_{1(a_2)}^*$. Тада су: $n_k = \frac{n+1}{2}, n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-2$, $n_{m-1} = 1$, $n_m = \frac{n-3}{2}$, $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+1)}{4}, y_{m-1,m} = n-m$, $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)(n-3)-2(n-m)}{4}$, и сви остали $y_{i,j} = 0$. Видимо да су све променљиве целобројне. Графове за које функција γ постиже вредност $\gamma_{1(a_2)}^* + \bar{\gamma}_2^*$, а која може да се реализује у случају $n \equiv 3(mod\ 4)$, смо записали у облику $G_{(\frac{n+1}{2}, 0, \ldots, 0, 1, \frac{n-3}{2})}$.

Испоставиће се, да се на поменутим графовима и постиже екстремна вредност функције γ, односно да је, у случају када је $n \equiv 1(mod\ 4)$, екстремна вредност баш $\gamma^* = \gamma_{1(a_1)}^* + \bar{\gamma}_2^*$, а у случају када је $n \equiv 3(mod\ 4)$ и $k+1 < m-1$, екстремна вредност управо $\gamma_{1(a_2)}^* + \bar{\gamma}_2^*$. Када је $k+1 = m-1$ екстремна вредност функције γ се постиже на графовима облика $G_{(\frac{n-1}{2}, 1, \frac{n-1}{2})}$. О томе ће бити више речи касније.

Подслучај 2. Ако је $n_p \geq 2$ за неко p, где је $k < p < m$, можемо за функцију γ_2 узети максималну вредност γ_2^* једнаку нули. Ова вредност се постиже у тачки за коју је $y_{i,i} = \frac{(n-i-1)n_i}{2}$, за $k \leq i \leq m$, и сви остали $y_{i,j} = 0$. Показаћемо да графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати више од једног чвора n_p.

7.2.3 Горња граница функције γ_1 када је $n_p \geq 2$

У овом делу доказаћемо следеће тврђење:

Лема 7.10. *Ако је $n_p \geq 2$ за неко p између $k+1$ и $m-1$, и $n_i \geq 0$, за $k \leq i \leq m-1$, $i \neq p$, тада је*

$$\bar{\gamma}_1(n_k, ..., n_{m-1}) \leq \frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 - 2n\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right).$$

Доказ. Означимо са $x = \sum_{i=k, i\neq p}^{m-1}(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}})n_i$. Имамо да је

$$\begin{aligned}
\bar{\gamma}_1 &= -\left(\sum_{i=k,i\neq p}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_i + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_p\right)^2 \\
&+ n\sum_{i=k,i\neq p}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i + n\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_p \\
&= -\left(\sum_{i=k,i\neq p}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_i\right)^2 - 2n_p\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\sum_{i=k,i\neq p}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)n_i \\
&- \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_p^2 + n\sum_{i=k,i\neq p}^{m-1}\left(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_i + n\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_p \\
&\leq -x^2 - 2n_p\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)x + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)x + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_p(n-n_p),
\end{aligned}$$

пошто је $(\frac{1}{\sqrt{i}} - \frac{1}{\sqrt{m}}) \leq (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}})$, за $k \leq i \leq m-1$, $i \neq p$. Дефинишимо функцију

$$g = -x^2 + \left(n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - 2n_p\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right)x + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 n_p(n-n_p).$$

Нађимо извод функције g по x:

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -2x + n\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - 2n_p\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right).$$

Како је други извод функције g по x негативан, $\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = -2$, функција g постиже максималну вредност за $x^* = \frac{n}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - n_p\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)$. Нађимо вредност $g(x^*)$.

$$
\begin{aligned}
& g(x^*) = x^* \left(n \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - 2n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - x^* \right) \\
+ \quad & \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 n_p(n - n_p) = \left(\frac{n}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \right) \\
\cdot \quad & \left(n \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - 2n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) + n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \right) \\
+ \quad & \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 n_p(n - n_p) = \left(\frac{n}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) - n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \right)^2 \\
+ \quad & \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 n_p(n - n_p) = \frac{n^2}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 + n_p^2 \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 \\
- \quad & n n_p \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 n_p(n - n_p) \\
= \quad & \frac{n^2}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 - n n_p \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}} \right).
\end{aligned}
$$

Нађимо сада извод по n_p. Како је $\frac{\partial g(x^*)}{\partial n_p} = -n \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}} \right) < 0$, то функција $g(x^*)$ постиже максималну вредност $\bar{g}(x^*)$ за $n_p = 2$. Сада је

$$
g(x^*) \leq \frac{n^2}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 - 2n \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}} \right) = \bar{g}(x^*).
$$

Даље је

$$
\frac{\partial \bar{g}(x^*)}{\partial p} = \frac{n}{\sqrt{p^3}} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{2}{\sqrt{p}} \right).
$$

Ако важи услов (a), тада функција $\bar{g}(x^*)$ постиже максималну вредност $\bar{g}_1(x^*)$ за $p = m - 1$. Ако важи услов (b), тада функција $\bar{g}(x^*)$ постиже максималну вредност $\bar{g}_2(x^*)$ за $p = k + 1$. Означимо са $\triangle g$ разлику функција $\bar{g}_1(x^*) - \bar{g}_2(x^*)$ функција. С обзиром да су први сабирци исти, биће:

$$
\begin{aligned}
& \triangle g = 2n \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} \right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \right. \\
& \left. \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \right) \right) = 2n \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \right. \\
& \left. \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} \right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \right) \right) \\
& = 2n \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m}} \right).
\end{aligned}
$$

Како је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} \geq \frac{1}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m}}$, закључујемо да је максимална вредност функције $\bar{g}(x^*)$ управо $\bar{g}_1(x^*) = \frac{n^2}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right)^2 - 2n \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \right)$. Такође, доказали смо да је $\bar{\gamma}_1 \leq \bar{g}_1(x^*)$, односно $\gamma_1 \leq \bar{g}_1(x^*)$ за $(n_k, ..., n_m) \in X$. $\square$

7.2.4 Докази теорема

Пре него што пређемо на доказ прве теореме, докажимо једну лему.

Лема 7.11. *Графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати два или више чворова степена* p*, за* $k+1 \leq p \leq m-1$.

Доказ. Означимо са $\tilde{\gamma}^*$ максималну вредност функције γ када постоје два или више чворова степена p, за $k+1 \leq p \leq m-1$. Тада је $\tilde{\gamma}^* \leq \bar{g}_1(x^*) + \gamma_2^* = \bar{g}_1(x^*)$, пошто је $\gamma_2^* = 0$. Имамо да је

$$\begin{aligned}
\gamma^* &- \tilde{\gamma}^* \geq \gamma^*_{1(a_1)} + \bar{\gamma}_2^* - \bar{g}_1(x^*) \geq \gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}_2^* - \bar{g}_1(x^*) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n+1}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-m) \\
&- \frac{n^2}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + 2n\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{-2n-3}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n+1}{2} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2} - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-m) \\
&+ 2n\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) = \frac{n+1}{2}\left(-\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right. \\
&+ \left.\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right) - \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\
&- (n-m+2)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + 2n\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&= (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) - \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\
&- (n-m+2)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2,
\end{aligned}$$

јер је: $-(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}})^2 + (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}})^2 + (\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}})^2 = -2(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}})(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}})$. Како је $(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}) \leq (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}})$, имамо да је

$$\begin{aligned}
\gamma^* - \tilde{\gamma}^* &\geq (n-1-n+m-2)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&- \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 =
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= (m-3)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\\
&- \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\\
&\geq \frac{(4m-12-2-1)}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\\
&- \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\\
&= \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left((4m-15)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\right)\\
&\geq \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left((4m-15)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right.\\
&\quad \left.-(m-1-k)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\right).
\end{aligned}
$$

Овде смо користили: $(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{m-1}})=\sum_{j=k}^{m-2}(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}})\leq(m-1-k)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})$. Како је $(\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}})$ опадајућа функција и $\frac{n-1}{2}\leq k<m<n$, имамо да је $\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\leq\frac{1}{\sqrt{\frac{n-1}{2}}}-\frac{1}{\sqrt{\frac{n-1}{2}+1}}=\sqrt{2}(\frac{1}{\sqrt{n-1}}-\frac{1}{\sqrt{n+1}})=\sqrt{2}(\frac{1}{\sqrt{n-1}}-\frac{1}{\sqrt{n}}+\frac{1}{\sqrt{n}}-\frac{1}{\sqrt{n+1}})\leq 2\sqrt{2}(\frac{1}{\sqrt{n-1}}-\frac{1}{\sqrt{n}})<4(\frac{1}{\sqrt{n-1}}-\frac{1}{\sqrt{n}})<4(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}})$. Када применимо неједнакост $(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})<4(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}})$, добијамо да је

$$
\begin{aligned}
&(4m-15)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-(m-1-k)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)>\\
&(4m-15-4m+4k+4)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)=(4k-11)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)>0,
\end{aligned}
$$

за $k\geq 3$. Тиме смо показали да је $\gamma^*>\tilde{\gamma}^*$. Из овога следи да графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати два или више чворова степена p, за $k+1\leq p\leq m-1$. □

Доказ теореме 7.4. На основу претходног (леме 7.11. и лема 7.8. и 7.9.) видимо да функција γ постиже максималну вредност γ^* у тачки одређеној са $n_k=\frac{n-1}{2}, n_i=0$, за $k+1\leq i\leq m-2, n_{m-1}=1, n_m=\frac{n-1}{2}, y_{k,k}=\frac{(n-k-1)(n-1)}{4}, y_{m-1,m}=n-m, y_{m,m}=\frac{(n-m-1)(n-1)-2(n-m)}{4}$, и сви остали су $y_{i,j}=0$. Из (9) налазимо одговарајуће вредности за $x_{i,j}$. Биће: $x_{k,k}=\binom{n_k}{2}-y_{k,k}=\frac{n_k(n_k-1)}{2}-\frac{(n-k-1)(n-1)}{4}=\frac{(n-1)(n-3)}{8}-\frac{(n-k-1)(n-1)}{4}=\frac{(n-1)(-n+2k-1)}{8}$, $x_{k,m-1}=n_kn_{m-1}-y_{k,m-1}=\frac{n-1}{2}\cdot 1-0=\frac{n-1}{2}$, $x_{k,m}=n_kn_m-y_{k,m}=\frac{n-1}{2}\frac{n-1}{2}-0=\frac{(n-1)^2}{4}$, $x_{m-1,m}=n_{m-1}n_m-y_{m-1,m}=1\cdot\frac{n-1}{2}-(n-m)=\frac{-n+2m-1}{2}$, $x_{m,m}=\binom{n_m}{2}-y_{m,m}=\frac{(n-1)(n-3)}{8}-\frac{(n-m-1)(n-1)-2(n-m)}{4}=\frac{(n-1)(-n+2m-1)}{8}+\frac{n-m}{2}$ и сви остали $x_{i,j}=0$. Све вредности променљивих су цели бројеви за $n\equiv 1(mod\ 4)$ (али нису за $n\equiv 3(mod\ 4)$). На основу (7) и вредности за $x_{i,j}$ лако долазимо до минималне вредности Рандићевог индекса наведене у теореми (или на основу вредности за γ^*). Одговарајуће графове можемо описати са

$G_{(\frac{n-1}{2},0,\ldots,0,1,\frac{n-1}{2})}$, те смо овим коначно доказали прву од три теореме. $\square$

Даља разматрања се односе само на случај $n \equiv 3(mod\, 4)$. Као што смо рекли, графови за које функција γ има вредност $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2$ постоје за $n \equiv 3(mod\, 4)$, пошто су одговарајуће вредности за $y_{i,j}$ цели бројеви а самим тим су и вредности $x_{i,j}$ цели бројеви (на крају ћемо их наћи). Прво ћемо показати да је вредност $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2$ већа од било које вредности функције γ на графовима који имају један чвор степена p када је $k+1 \leq p \leq m-2$. Како смо показали да је наведена вредност функције γ већа од вредности када граф има два чвора, остају касније за разматрање само графови који имају чворове степена k, степена m и један чвор степена $m-1$.

Лема 7.12. *Ако је $k+1 < m-1$, графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати чвор степена p, за $k+1 \leq p \leq m-2$.*

Доказ. Покажимо да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(a_1)}(p)$, за $k+1 \leq p \leq m-2$. Како $\gamma_{1(a_1)}$ зависи од k, m, n и p, тј. $\gamma_{1(a_1)} = \gamma_{1(a_1)}(k,m,n,p)$, ми са $\gamma_{1(a_1)}(p)$ ($\gamma_{1(a_1)}(p) = \gamma_{1(a_1)}$) истичемо зависност од p. Означимо са $\triangle$ разлику $\gamma^*_{1(a_2)} - \gamma_{1(a_1)}(p)$. За почетак нека је $p \neq k+1$, тј. $k+2 \leq p \leq m-2$. Имамо да је:

$$\begin{aligned}
\triangle &= \gamma^*_{1(a_2)} - \gamma_{1(a_1)}(p) = \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} \\
&+ \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n+1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2} \\
&- \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-1)^2}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2 \frac{n-1}{2} + \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-1}{2}\right) \\
&= -\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\
&+ \frac{n-1}{2}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right)^2\right. \\
&- \left.\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right] = -\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&- \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + \frac{n-1}{2}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\frac{2}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\right. \\
&- \left.\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{p}} + \frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{2}{\sqrt{m}}\right)\right],
\end{aligned}$$

односно да је:

$$\begin{aligned}
(19) \quad \triangle &= -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) + (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right).
\end{aligned}$$

Пошто је $\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \geq \frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}$, то је

$$\triangle \geq \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$
$$\cdot \left((n-1)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) - 2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right).$$

Приметимо да је, за $\frac{n+1}{2} \leq k < m \leq n-2$, $m-k \leq n-2-\frac{n+1}{2} = \frac{n-5}{2}$. Како је

$$\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) \leq (m-k)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) \leq \frac{(n-5)}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)$$

и $k+1 < p$, имамо да је

$$\begin{aligned}
& (n-1)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) - 2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) \\
\geq \ & (n-1)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{p}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) \\
- \ & (n-5)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) \geq 4\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) > 0.
\end{aligned}$$

Покажимо да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(a_1)}(k+1) = \gamma^*_{1(b_2)}$. Означимо са $\bar{\triangle}$ разлику $\gamma^*_{1(a_2)} - \gamma^*_{1(b_2)}$. Разлику $\bar{\triangle}$ добијамо из (19) за $p = k+1$.

$$\begin{aligned}
\bar{\triangle} &= -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) + (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) \\
&= -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}} + \frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) \\
&+(n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)\left((n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) - (n+1)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) \\
&-2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - 2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2.
\end{aligned}$$

Пошто је $k+1 < m-1$, или $k+4 \leq m$ пошто су непарни бројеви, па је

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} &= \frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{k+2}} + \frac{1}{\sqrt{k+2}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} \\
&> 2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)
\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} & (n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-(n+1)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right) \\ > \; & (n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-(n+2)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right). \end{aligned}$$

Овај израз са десне стране последње неједнакости је позитиван, што ћемо показати касније. Сада је

$$\begin{aligned} \bar{\triangle} > & \, 2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left((n-1)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-(n+1)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right) \\ & -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)-2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\ & = 2\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left((n-2)\left(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}}\right)-(n+2)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right). \end{aligned}$$

Сада докажимо да је израз $(n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-(n+2)(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}})$ позитиван. Пошто је $\frac{1}{\sqrt{j}}-\frac{1}{\sqrt{j+1}}$ опадајућа функција и важи $k<k+1<k+2<m-1<m\leq n-2$, имамо да је $(n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-(n+2)(\frac{1}{\sqrt{m-1}}-\frac{1}{\sqrt{m}}) \geq (n-2)(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-(n+2)(\frac{1}{\sqrt{k+3}}-\frac{1}{\sqrt{k+4}}) \geq k(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-(k+4)(\frac{1}{\sqrt{k+3}}-\frac{1}{\sqrt{k+4}}) = \sqrt{k}-\sqrt{k+1}+\frac{1}{\sqrt{k+1}}-\frac{1}{\sqrt{k+3}}+\sqrt{k+4}-\sqrt{k+3} = -\frac{1}{\sqrt{k}+\sqrt{k+1}}+\frac{1}{\sqrt{k+3}+\sqrt{k+4}}+\frac{2}{\sqrt{(k+1)(k+3)}(\sqrt{k+1}+\sqrt{k+3})} \geq -\frac{1}{\sqrt{k}+\sqrt{k+1}}+\frac{1}{\sqrt{k+3}+\sqrt{k+4}}+\frac{2}{(k+2)(\sqrt{k+3}+\sqrt{k+4})} = -\frac{1}{\sqrt{k}+\sqrt{k+1}}+\frac{k+4}{(k+2)(\sqrt{k+3}+\sqrt{k+4})} \geq -\frac{1}{\sqrt{k}+\sqrt{k+1}}+\frac{k+4}{2(k+2)\sqrt{k+4}} = -\frac{1}{\sqrt{k}+\sqrt{k+1}}+\frac{\sqrt{k+4}}{2(k+2)}$. Последњи израз ће бити позитиван када је $\sqrt{k+4}(\sqrt{k}+\sqrt{k+1}) > 2(k+2)$, а ова неједнакост се своди на неједнакост $8k^3-k^2-104k-144>0$, која је тачна за $k\geq 5$. За $k\leq 4$, можемо проверити да је $k(\frac{1}{\sqrt{k}}-\frac{1}{\sqrt{k+1}})-(k+4)(\frac{1}{\sqrt{k+3}}-\frac{1}{\sqrt{k+4}})>0$, мада и не постоји вредност за k за коју је $\frac{n}{2}<k<m<n$ и да су k, m, n непарни бројеви (јер ако је $k=1$ мора бити $n\leq 1$, а за $k=3$ мора бити $n\leq 5$). Сада је, коначно, $\bar{\triangle}>0$.

Добили смо да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(a_1)}(p)$, за $k+1\leq p\leq m-2$. Пошто и $\gamma_{1(a_1)}(p)$ и $\gamma_{1(b_2)}(p)$ имају исти запис, важи да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(b_2)}(p)$ за $k+1\leq p\leq m-2$. Можемо додати још и то да, када је $p=k+1$, је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(a_1)}(k+1) = \gamma_{1(b_2)}(k+1) = \gamma^*_{1(b_2)} \geq \gamma_{1(b_2)}(p)$. Неспорно такође важи да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(a_2)}(p)$, када је $p\leq m-2$ и важи услов (a) и да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \gamma_{1(b_1)}(p)$, када је $p\geq k+1$ и важи услов (b).

Како функција γ_2 постиже, под условом $n_p=1$ за неко p, максималну вредност $\bar{\gamma}^*_2$, управо када постоји чвор степена $m-1$ и када се остварује вредност $\gamma^*_{1(a_2)}$, можемо закључити да графови на којима се постиже екстремна вредност не могу имати чворове неког степена p за $k+1\leq p\leq m-2$. $\square$

Доказ теорема 7.5. и 7.6. Поновимо још једном, екстремне вредности функција γ постиже на графовима који имају само чворове степена k, један чвор степена $m-1$ и чворове степена m. Упоредимо даље,под условом $n\equiv 3(mod\, 4)$, вредности функције γ на графовима за које функција γ_1 постиже вредности $\gamma^*_{1(a_1)}$ и $\gamma^*_{1(a_2)}$, с тим што ћемо и у првом случају остварити услов целобројности. Ако је $n \equiv 3 (mod\, 4)$ и како смо раније видели да вредност $x_{k,k} = \frac{(n-1)(-n+2k-1)}{8}$, која се постиже на графу $G_{(\frac{n-1}{2},0,\ldots,0,1,\frac{n-1}{2})}$, није цео број, можемо изменити функцију γ_2 како бисмо добили допустиво графовско решење. Ту промену учинићемо најбољом могућом како бисмо сачували што већу вредност функције γ_2. Подсећамо читаоца да систем једначина $(1')$ сада има облик $(1''')$ који се састоји само од три једначине, пошто су $n_i = 0$ за $k+1 \le i \le m-2$ ($y_{m-1,m-1} = 0$ јер је $n_{m-1} = 1$).

$$(1''')\qquad \begin{aligned} 2y_{k,k} + y_{k,m-1} + y_{k,m} \quad &= (n-k-1)n_k, \\ y_{k,m-1} \qquad\qquad + y_{m-1,m} &= \quad (n-m)\cdot 1, \\ y_{k,m} + y_{m-1,m} + 2y_{m,m} \quad &= (n-m-1)n_m. \end{aligned}$$

Како је раније било $y_{m-1,m} = n-m$, узмимо да су $y_{k,m-1} = 1$ и $y_{m-1,m} = n-m-1$, $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} - \frac{1}{2}, y_{m,m} = \frac{(n-m-1)(n-3)}{4}$, и сви остали $y_{i,j} = 0$ (све наведене променљиве су целобројне). Означимо са $\tilde{\gamma}_2$ вредност функције γ_2 која се добија за наведене вредности, тј. $\tilde{\gamma}_2 = -(n-m-1)(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}})^2 - (\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}})^2$. Означимо даље, са $\triangle_1$ разлику $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2 - \gamma^*_{1(a_1)} - \tilde{\gamma}_2$. Из (19) се за $p = m-1$ лако добија да је разлика

$$\gamma^*_{1(a_2)} - \gamma^*_{1(a_1)} = -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$

(а и раније смо упоређивали ове вредности). Важи и да је

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}^*_2 - \tilde{\gamma}_2 \quad &= \quad -\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-m) - \left(-(n-m-1)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right. \\ &- \quad \left.\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2\right) = -\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2. \end{aligned}$$

Имамо да је:

$$\begin{aligned} \triangle_1 \quad &= \quad -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \\ &+ \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 = -2\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right) \\ &+ \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{2}{\sqrt{m-1}} + \frac{1}{\sqrt{m}}\right) \\ &= \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{4}{\sqrt{m-1}} + \frac{3}{\sqrt{m}}\right) \\ &= \quad \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right) - 3\left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)\right). \end{aligned}$$

Када је $k+1 < m-1$, (односно $k \le m-4$), имамо да је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}} = \sum_{j=k}^{m-2}(\frac{1}{\sqrt{j}} - \frac{1}{\sqrt{j+1}}) > (m-k-1)(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}) \ge 3(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}})$. Закључујемо да је

$\triangle_1 > 0$ и да је могућа екстремна вредност функције γ вредност $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2$ која се постиже на графу $G_{(\frac{n+1}{2},0,\ldots,0,1,\frac{n-3}{2})}$.

Када је $k+1 = m-1$, имамо да је:

$$\triangle_1 \;=\; \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+2}}\right)\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{k+1}}\right) - 3\left(\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{1}{\sqrt{k+2}}\right)\right).$$

Како је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{4}{\sqrt{k+1}} + \frac{3}{\sqrt{k+2}} = \frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{3}{\sqrt{k+1}} - (\frac{1}{\sqrt{k+1}} - \frac{3}{\sqrt{k+2}})$ и за први извод по k важи $\frac{\partial}{\partial k}(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{3}{\sqrt{k+1}}) = -\frac{1}{2k\sqrt{k}} + \frac{3}{2(k+1)\sqrt{k+1}} = \frac{3k\sqrt{k}-(k+1)\sqrt{k+1}}{2k\sqrt{k}(k+1)\sqrt{k+1}} \geq \frac{\sqrt{(2k)^3}-\sqrt{(k+1)^3}}{2k\sqrt{k}(k+1)\sqrt{k+1}} \geq 0$ за $k \geq 1$, закључујемо да је $\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{4}{\sqrt{k+1}} + \frac{3}{\sqrt{k+2}} \leq 0$ за $k \geq 1$. Сада је $\triangle_1 < 0$ и могућа екстремна вредност функције γ је вредност $\gamma^*_{1(a_1)} + \tilde{\gamma}_2$ која се постиже на графу $\tilde{G}_{(\frac{n-1}{2},1,\frac{n-1}{2})}$.

На крају, упоредимо вредност $\gamma^*_{1(a_2)}$ са новом максималном вредношћу функције $\bar{\gamma}_1$ у случају (a_1) која се разликује од вредности $\gamma^*_{1(a_1)}$, тј. искључимо тачку $\overline{N}^*_{a_1}$ за $p = m-1$. Налазимо, у том случају (a_1'), максималну вредност $\bar{\gamma}_1'$ функције $\bar{\gamma}_1$ под условима $n_k \leq \frac{n-3}{2}$, $n_i = 0$ за $k+1 \leq i \leq m-2$ и $n_{m-1} = 1$. Ова вредност $\bar{\gamma}_1'$ се лако добија и износи:

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_1' \;&=\; \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n-3)(n+1)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n-3}{2}\\ &+\; \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n+1}{2}.\end{aligned}$$

Како је

$$\begin{aligned}\gamma^*_{1(a_2)} \;&=\; \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{(n+1)(n-3)}{4} + \left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 \frac{n+1}{2}\\ &+\; \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 \frac{n-3}{2},\end{aligned}$$

разлика наведених вредности ће бити:

$$\gamma^*_{1(a_2)} - \bar{\gamma}_1' = 2\left(\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m-1}}\right)^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{m-1}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2\right) > 0.$$

Видимо да је $\gamma^*_{1(a_2)} > \bar{\gamma}_1'$.

Након свега закључујемо да је, у случају када је $k+1 = m-1$, максимална вредност функције γ вредност $\gamma^*_{1(a_1)} + \tilde{\gamma}_2$ односно, у случају када је $k+1 < m-1$, вредност $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2$. Раније смо видели да су све вредности променљивих n_i и $y_{i,j}$ целобројне у оба случаја постизања максималне вредности функције γ. На основу веза

$$(9) \qquad \begin{array}{lll} x_{i,j} = n_i n_j - y_{i,j} & \text{за} & k \leq i \leq m,\ i < j \leq m, \\ x_{i,i} = \binom{n_i}{2} - y_{i,i} & \text{за} & k \leq i \leq m, \end{array}$$

услов целобројности је испуњен и за променљиве $x_{i,j}$.

Када је $m = k+2$, вредност $\gamma^*_{1(a_1)} + \tilde{\gamma}_2$ се постиже за: $n_k = \frac{n-1}{2}$, $n_{k+1} = n_{m-1} = 1$, $n_{k+2} = n_m = \frac{n-1}{2}$, $y_{k,k+1} = y_{k,m-1} = 1$, $y_{k+1,k+2} = y_{m-1,m} = n-m-1 = n-k-3$, $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} - \frac{1}{2}$, $y_{k+2,k+2} = y_{m,m} = \frac{(n-m-1)(n-3)}{4} = \frac{(n-k-3)(n-3)}{4}$, $y_{k,k+2} = 0$ и $y_{k+1,k+1} = 0$. Сада су вредности почетних променљивих: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} + \frac{1}{2} = \frac{(n-1)(n-3)}{8} - \frac{(n-k-1)(n-1)}{4} + \frac{1}{2} = \frac{(n-1)(2k-n-1)}{8} + \frac{1}{2}$, $x_{k,k+1} = n_k n_{k+1} - y_{k,k+1} = \frac{n-1}{2}1 - 1 = \frac{n-3}{2}$, $x_{k,k+2} = n_k n_{k+2} - y_{k,k+2} = \frac{n-1}{2}\frac{n-1}{2} - 0 = \frac{(n-1)^2}{4}$, $x_{k+1,k+1} = \binom{n_{k+1}}{2} - y_{k+1,k+1} = \frac{n_{k+1}(n_{k+1}-1)}{2} - 0 = \frac{1(1-1)}{2} = 0$, $x_{k+1,k+2} = n_{k+1}n_{k+2} - y_{k+1,k+2} = 1\frac{n-1}{2} - (n-k-3) = \frac{2k-n+5}{2}$ и $x_{k+2,k+2} = \binom{n_{k+2}}{2} - y_{k+2,k+2} = \frac{n_{k+2}(n_{k+2}-1)}{2} - \frac{(n-k-3)(n-3)}{4} = \frac{(n-1)(n-3)}{8} - \frac{(n-k-3)(n-3)}{4} = \frac{(n-3)(2k-n+5)}{8}$. На основу ових вредности и дефиниције Рандићевог индекса лако се долази до вредности наведене у теореми 7.5.

Када је $k+1 < m-1$, вредност $\gamma^*_{1(a_2)} + \bar{\gamma}^*_2$ се постиже за: $n_k = \frac{n+1}{2}, n_i = 0$, за $k+1 \leq i \leq m-2$, $n_{m-1} = 1$, $n_m = \frac{n-3}{2}$, $y_{k,k} = \frac{(n-k-1)(n+1)}{4}, y_{m-1,m} = n-m$, $y_{m,m} = \frac{(n-m-1)(n-3)-2(n-m)}{4}$, и сви остали $y_{i,j} = 0$. Вредности почетних променљивих су: $x_{k,k} = \binom{n_k}{2} - y_{k,k} = \frac{n_k(n_k-1)}{2} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(n-1)}{8} - \frac{(n-k-1)(n+1)}{4} = \frac{(n+1)(2k-n+1)}{8}$, $x_{k,m-1} = n_k n_{m-1} - y_{k,m-1} = \frac{n+1}{2}1 - 0 = \frac{n+1}{2}$, $x_{k,m} = n_k n_m - y_{k,m} = \frac{n+1}{2}\frac{n-3}{2} - 0 = \frac{(n+1)(n-3)}{4}$, $x_{m-1,m} = n_{m-1}n_m - y_{m-1,m} = 1\frac{n-3}{2} - (n-m) = \frac{2m-n-3}{2}$, $x_{m,m} = \binom{n_m}{2} - y_{m,m} = \frac{n_m(n_m-1)}{2} - \frac{(n-m-1)(n-3)-2(n-m)}{4} = \frac{(n+1)(n-1)}{8} - \frac{(n-m-1)(n-3)-2(n-m)}{4} = \frac{(n-3)(2m-n-3)}{8} + \frac{n-m}{2}$ и све остале променљиве су једнаке нули. На основу ових вредности и дефиниције Рандићевог индекса лако се долази до вредности наведене у теореми 7.6. □

7.3 Уопштења резултата у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$

У случају када је $k \leq \frac{n}{2}$ биће презентовано уопштење само када је $n-k \leq m \leq n-2$. Износимо тврђење које одговара теореми 6.1. и до кога се долази на сличан начин.

Теорема 7.7. *Ако је $k \leq \frac{n}{2}$, $n-k \leq m \leq n-2$ и $G \in G(k,m,n)$, тада је*

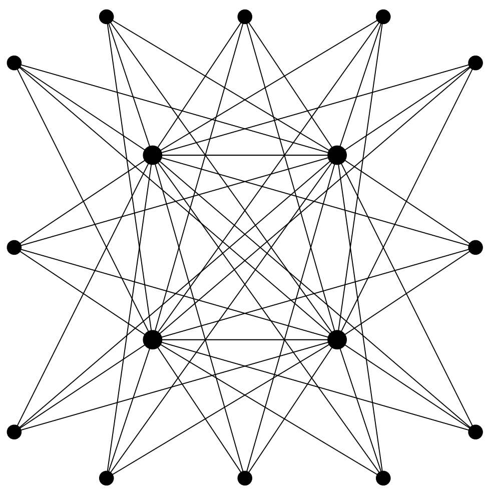
$$R(G) \geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{k}} - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^2 (n-k)k.$$

Ако је k паран, или ако су k и $n-m$ непарни бројеви, ова вредност се постиже на графовима за које је $n_k = n-k$, $n_m = k$, $x_{k,m} = (n-k)k$, $x_{m,m} = k(k+m-n)/2$, и сви остали $x_{i,j}$, $x_{i,i}$ и n_i су једнаки нули.

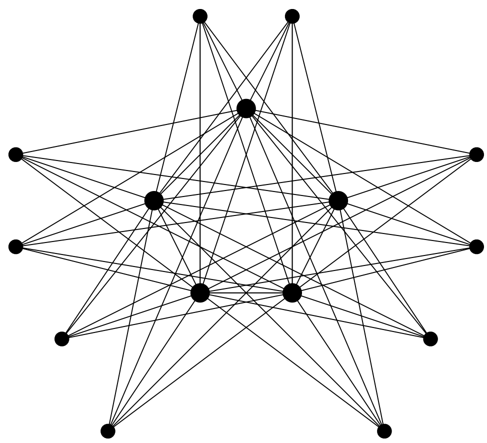
Доказ. Како је доказ теореме сличан доказу теореме 6.1., износимо само краће напомене. У случају када је $\triangle(G) = n-1$, имали смо ограничење $n_{n-1} \leq k$. Сада, када је $\triangle(G) = m$ и $n-k \leq m \leq n-2$, може бити и $n_q > k$. У том случају можемо узети k чворова степена m и обојити их у црвено. Даље ћемо доказ наставити као доказ случаја (c). □

Ако је k непаран број и разлика $n - m$ паран, тада вредност $x_{m,m}$ није цео број и не постоји екстремни граф. Наведена вредност у теореми је доња граница Рандићевог индекса. Значи, остаје отворен проблем у случају када су k непаран и $n - q$ паран број. Такође, и у случају када је $k \leq \frac{n}{2}$ и $k \leq m \leq n - k$ проблем је отворен.

На слици 7.17. представљен је граф $G \in G(4, 13, 16)$ на коме се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, односно граф реда $n = 16$, минималног степена чворова $k = 4$ и максималног степена чворова $m = 13$, при чему је $n_4 = 12$, $n_{13} = 4$, $x_{4,13} = 48$ и $x_{13,13} = 2$.



Слика 7.17. Граф $G \in G(4, 13, 16)$.



Слика 7.18. Граф $G \in G(5, 12, 15)$.

На слици 7.18. представљен је граф $G \in G(5, 12, 15)$ на коме се постиже минимална вредност Рандићевог индекса, односно граф реда $n = 15$, минималног степена чворова $k = 5$ и максималног степена чворова $m = 12$, при чему је $n_5 = 10$, $n_{12} = 5$, $x_{5,12} = 50$ и $x_{12,12} = 5$.

Summary

This doctoral dissertation belongs to the Combinatorial Optimization applied to graphs, which includes elements of Linear and Quadratic Programming and Graph Theory.

Combinatorial Optimization, as special mathematical discipline, is relatively young, although the first papers are more than two hundred years old. The fast development emerges after the second wold war, when grows need for optimization many tasks and processes. Since many objects could be represents as graph and combinatorial optimization solve extremal problems on discrete structures, there is narrow connection with Graph Theory.

The subject of this dissertation is finding minimal value of the Randić index on n-vertex graphs $G(k, n)$ with given minimum degree k of vertices and describing the structure of extremal graphs. This index was introduced 1975 by chemist Milan Randić in order to measure the branching of some molecules. There is a good correlations between this index and some physico-chemical properties of alcanes. There is, also, connection between Randić index and the eigenvalues of the Laplacian matrix of graph.

Hereby, we describe in short the content of this dissertation. The dissertation consists of seven Chapters divided in sections, References and Appendix.

Chapter 1 corresponds to the introduction. At the end of this Chapter, is specified original contribution of the author to scientific research in this field.

In Chapter 2 are given some basic notions and definitions from graph theory (section 2.1), definition of the Randić index from [35](section 2.2) and basic notions and definitions from convex analysis and mathematical programming (section 2.3). In section 2.2 are given short review of relevant results about the Randić index.

Chapter 3 consists of two section. In section 3.1 are given mathematical models of simple n-vertex graphs with minimum degree k of vertices from [31],[33]. Through the complete dissertation are given many mathematical models which describes graphs from different points of view. In order to solve some optimization problem very important is mathematical model which describes it. Choosing mathematical model which fits the problem very well is half task. The other half is to choose mathematical method to solve the problem (section 3.2). In subsection 3.2.1 is given method of linear programming from [28] and in subsection 3.2.2 method of quadratic programming [33]. The successful applying of quadratic programming method to given problem is original contribution of the author of this dissertation [33].

In Chapter 4 is given maximal value of the Randić index and graphs on which it attains.These results are already known [14],[28].

Chapter 5 is dedicated to finding minimal value of the Randić index on n vertex graph with given minimum degree k and describing extremal graphs, when minimum degree $k \geq \frac{n}{2}$. The results are shown in [27]. This chapter consists of 4 sections. In section 5.1 are given three conjectures about the structure of the extremal graphs from [10], [1] and [27]. Minimal value of the Randić index depends of the parity of k and n. Since the case $k \geq \frac{n}{2}$ is divided to three subcases, every section 5.1, 5.2 and 5.3 is dedicated to separate subcase. In section 5.2 is done subcase $n \equiv 0(\mod 4)$ and $n \equiv 2(\mod 4)$ with k odd. In section 5.3 is done subcase when n is odd and in section 5.4 subcase $n \equiv 2(\mod 4)$ and k is even. The new approach to this problem and carrying out the third subcase represents original contributions of the author. Due to the new approach, the proofs in all three subcases are substantially simplified, instead of 21 lemmas are given 5 necessary lemmas.

Chapter 6 consists of the proof of the first part, when $k \leq \frac{n}{2}$, of all three conjectures dedicated to the Randić index. Results are shown in [11]. To give proof was the most difficult part, since this problem was open one decade. This proof gives the tools for other similar problems with given minimum degree of vertices.

Chapter 7 is dedicated to generalization of the results obtained in Chapters 5 and 6. This chapter consists of 3 section. In section 7.1 are considered the n-vertex graph $G(k, m, n)$ with given minimum degree $k \geq \frac{n}{2}$, maximum degree m of vertices, where k, m and n are not all odd numbers. Extremal graphs on which Randić index attains its minimal value are found. The results from this section are presented in [27]. In section 7.2 are considered graphs from $G(k, m, n)$, $k \geq \frac{n}{2}$, where k, m and n are all odd numbers. From the technical point of view, this section is the more complicated and new mathematical models are also introduced. This section is divided into 4 subsections. Every subsection corresponds to some part of the proof. Extremal graphs are found and the results are presented in [12]. In section 7.3 are considered the graphs from $G(k, m, n)$ for $k \leq \frac{n}{2}$. The results are given in [11].

Литература

[1] M. Aouchiche, P. Hansen, On a conjecture about the Randić index, Discrete Mathematics, 307 (2), 2007, 262-265.

[2] M. Aouchiche M., Hansen P., Zheng M., Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs. 18. Conjectures and Results about the Randić Index, MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 56 (2006), 541-550.

[3] Aouchiche M., Hansen P., Zheng M., Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs. 19. Further Conjectures and Results about the Randić Index, MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 58 (2007), 83-102.

[4] B. Bollobás, P. Erdős, Graphs of Extremal Weights, Ars Combinatoria 50 (1998), 225 - 233.

[5] G. Caporossi, I. Gutman, P. Hansen, Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs IV:Chemical Trees with Extremal Connectivity Index, Computers & Chemistry, 23 (1999), 469 - 477.

[6] G. Caporossi, I. Gutman, P. Hansen, Lj. Pavlović, Graphs with maximum connectivity index, Computational Biology and Chemistry, 2003, 27, 85-90.

[7] G. Caporossi, P. Hansen, Variable Neighborhood for Extremal graphs I. The System AutoGraphix, Discrete Mathematics, 212 (2000), 29-44.

[8] L.H. Clark, J.W. Moon, On the general Randić Index for Certain Families of Trees, Ars Combinatoria 54 (2000), 223-235.

[9] D. Cvetković, M. Čangalović, Dj. Dugošija, V. K.-Vujčić, S. Simić, J.Vuleta, Kombinatorna Optimizacija, Društvo operacionih istraživača, Beograd, (1996).

[10] C. Delorme, O. Favaron, D. Rautenbach, On the Randić index, Discrete Mathematics, Vol. 257(2002), Issue 1, 29-38.

[11] T. Divnić, Lj. Pavlović, Proof of the first part of the conjecture of Aouchiche and Hansen about the Randić index, Discrete Applied Mathematics, Volume 161, Issues 7-8, May 2013, Pages 953-960.

[12] T. Divnić, Lj. Pavlović, B. Liu, Extremal graphs for the Randić index when minimum, maximum degree and order of graph are odd, submitted to the journal.

[13] T. Divnić, M. Milivojević, Lj. Pavlović, Extremal graphs for the geometric-arithmetic index with given minimum degree, submitted to the journal.

[14] S. Fajtlowicz (1998), Written on the Wall, Conjectures derived on the basis of the program Galatea Gabriella Graffiti, University of Houston.

[15] I.Gutman, B. Furtula, Recent Results in the Theory of Randić index, Mathematical Chemistry Monographs No. 6, Kragujevac, 2008.

[16] I. Gutman, Lj. Pavlović, O. Miljković, On graphs with extremal connectivity indices, Bulletin de l'Academie Serbe des Sciences et des Arts, 2000, 24, 1-14.

[17] P. Hansen, D. Vukicević, Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs. 23. On the Randić index and the chromatic number, Discrete Mathematics,Vol. 309 (2009), Issue 13,pp. 4228-4234.

[18] P. Hansen, N. Mladenović, Variable Neighborhood Search: Principles and Applications, European Journal of Operations Research, 130 (2001), 449-467.

[19] P. Hansen, H. Mélot, Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs VI: Analyzing bounds for the connectivity index, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 43 (2003), 1-14.

[20] L.B. Kier, L.H. Hall, Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research, Academic Press, New York (1976).

[21] L.B. Kier, L.H. Hall, The Nature of Structure-Activity Relationships and their Relation to Molecular Connectivity, European Journal of Medicinal Chemistry, 12, 307-312 (1977b).

[22] L.B. Kier, L.H. Hall, Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis, Research Studies Press-Wiley, Chichester (UK) (1986).

[23] X. Li, I. Gutman, Mathematical Aspects of Randić-Type Molecular Structure Descriptors, Mathematical Chemistry Monographs No. 1, Kragujevac, 2006.

[24] X. Li, B. Liu, J. Liu, Complete solution to a conjecture on Randić index, European Journal of Operational Research, Vol. 200, Issue 1, 1 January 2010, 9-13.

[25] X. Li, Y. Shi, Some new results on a conjecture about the Randić index, Mathematical Chemistry Monographs No. 6, Recent Results in the Theory of Randić index, Kragujevac, 2008, pp. 57-72.

[26] N. Limić, H. Pašagić, Č. Rnjak, Linearno i nelinearno programiranje, Informator, Zagreb (HR)(1978)

[27] B. Liu, Lj. Pavlović, T. Divnić, J. Liu, M. Stojanović, On the conjecture of Aouchiche and Hansen about the Randić index,Discrete Mathematics, Vol. 313, Issue 3, 6 February 2013, 225-235.

[28] Lj. Pavlović, I. Gutman, Graphs with Extremal connectivity index, Novi Sad J. Math, 2001, Vol. 31, No. 2, 53-58.

[29] Lj. Pavlović, Maximal value of the zeroth-order Randić index, Discrete Applied Mathematics, 127 (2003), 615-626.

[30] Lj. Pavlović, Graphs with extremal Randić index when the minimum degree of vertices is two, Kragujevac Journal of Mathematics, 25 (2003), 55-63.

[31] Lj. Pavlović, On the conjecture of Delorme, Favaron and Rautenbach about the Randić index, European Journal of Operational Research , 2007, Vol. 180, Issue 1, pp. 369-377.

[32] Lj. Pavlović, The linear Programming approach to the Randić index, ITOR - International Transactions in Operational Research, November 2007, Vol. 14, Issue 6, pp. 535-545.

[33] Lj. Pavlović, T. Divnić, A quadratic programming approach to the Randić index, European Journal of Operational Research, 2007, Vol. 176, Issue 1, pp. 435-444.

[34] Lj. Pavlović, Comment on "Complete solution to a conjecture on Randić index", European Journal of Operational Research, Vol. 207, Issue 1, 16 November 2010, pp. 539-542.

[35] M. Randić, On characterization of molecular branching, J. Am. Chem. Soc., 97 (1975), 6609 -6615.

[36] V. Vujčić, M. Ašić, N. Miličić, Matematičko programiranje, Matematički Institut, Beograd (1980).

[37] D. Vukičević, B. Furtula, Topological index based on the ratios of geometrical and arithmetical means of end -vertex degrees of edges, Journal of Mathematical Chemistry, Vol. 46, Issue 2 (2009), 1369-1376.

Биографија

Томица Дивнић је рођен 01.01.1969. године у Обрежу, од оца Радивоја и мајке Драгице. Основну школу завршио је у родном месту. Прва два разреда средње усмереног образовања је завршио у Варварину, а трећи и четврти разред у Трстенику 1988. године. Исте године се уписује на студијску групу Математика Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу. После одслужења војног рока прву годину слуша школске 1989/90. године, а с обзиром на постигнут успех исте године бива проглашен за најбољег студента Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Дипломира, за просечном оценом 9.25, дана 29.06.1993. године и стиче звање Дипломирани математичар за рачунарство и информатику.

Године 1995. се жени са Невенком, такође професором математике. У срећном браку имају двоје деце Немању и Николу.

Последипломске студије Томица је завршио, на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, 21.02.2000. године одбраном магистарске тезе под називом: "Неке примене оператора за налажење приближног решења обичних диференцијалних једначина и система диференцијалних једначина".

Од октобра 1993. године до 31.10.2003. године ради на ПМФ-у у Крагујевц. Новембра 1994. године је изабран за асистента-приправника. Држао је везбе из следећих предмета: нацртна геометрија, алгебра 1, диференцијалне једначине, теорија функција комплексне променљиве, операциона истраживања, анализа 1, на студијској групи математика, и математика 2 на групи физика. У звање асистента изабран је 2000. године. Из породичних разлога прешао је да ради 01.11.2003. године у Средњу школу у Варварину.

Томица је био ангажован на два пројекта Министарства за науку. Ангажовање на пројекту му је прекинуто 2003. године, када је прешао у Средњу школу.

У свом научно-истраживачком раду изучава више области, а највише успеха има бавећи се проблемима одређивања екстремних вредности Рандићевог индекса на графовима.

Списак научних радова

1. Tomica Divnić, An estimation of approximation for the solution of ordinary differential equations, Mathematica, 4, (2000), pp.21-26, ISSN: 1450-5932, M52.

2. Tomica Divnić, Zlata Djurić, A generalization of the Riesz potential, Kragujevac Journal of Mathematics, 22(2000), pp.83-86, ISSN: 1450-9628, M51.

3. Tomica Divnić, On approximative solutions of some differential equations by

means of Bernstein polynomials, Univ. Beograd, Publ. Electrotehn. Fak., 12, (2001), pp.12-15, ISSN 0353-8893, M51. (Sada: Applicable Analysis and Discrete Mathematics, ISSN 1452-8630).

4. Ljiljana Pavlović, Tomica Divnić, A quadratic programming approach to the Randić index, European Journal of Operational Research, Vol. 176, Issue 1, (2007), pp.435-444, ISSN: 0377-2217, M21.

5. T. Divnić, Lj. Pavlović, A slight modification of the first phase of the simplex algorithm, Yugoslav Journal of Operation Research, Vol.22 (2012), Number 1, 107-114, M51.

6. B. Liu, Lj. Pavlović, T. Divnić, J. Liu, M. Stojanović, On the conjecture of Aouchiche and Hansen about the Randić index, Discrete Mathematics, Vol. 313, Issue 3, 6 February 2013, 225-235, M23.

7. T. Divnić, Lj. Pavlović, Proof of the first part of the conjecture of Aouchiche and Hansen about the Randić index, Discrete Applied Mathematics, Volume 161, Issues 7-8, May 2013, Pages 953-960, M22

8. T. Divnić, Lj. Pavlović, B. Liu, Extremal graphs for the Randić index when minimum, maximum degree and order of graph are odd, submitted to the journal.

9. T. Divnić, M. Milivojević, Lj. Pavlović, Extremal graphs for the geometric-arithmetic index with given minimum degree, submitted to the journal.

Учешће на конференцијама

1. Vladimir Savić, Tomica Divnić, Generalization of Riesz potentials, Volume of Abstract, 4^{th} Symposium on mthematical analysis and its applications, Aranđelovac, May 26-30, 1997, pp.65.

2. Tomica Divnić, On p-convex functions, Volume of Abstract, 10th Congress of Yugoslav mathematicians, Belgrade, October 8-11, 2000, pp.40.

3. Tomica Divnić, A method of solving differential equations, Volume of Abstract, 10th Congress of Yugoslav mathematicians, Belgrade, October 8-11, 2000, pp.40.