

Lorena Silva Sampaio, Samira Haddad

**Análise e Implementação de Algoritmos de Busca  
de uma  $r$ -Arborescência Inversa de Custo Mínimo  
em Grafos Dirigidos com Aplicação Didática  
Interativa**

Brasil

2025

Lorena Silva Sampaio, Samira Haddad

**Análise e Implementação de Algoritmos de Busca de uma  
r-Arborescência Inversa de Custo Mínimo em Grafos  
Dirigidos com Aplicação Didática Interativa**

Dissertação apresentada ao Programa de  
Pós-Graduação como requisito parcial para  
obtenção do título de Mestre.

Universidade

Faculdade

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. Mário Leston

Brasil

2025

*Dedicatória (opcional).*

# Agradecimientos

Agradecimientos (opcional).



# Resumo

Este trabalho apresenta uma análise e implementação de algoritmos de busca de uma  $r$ -arborescência inversa de custo mínimo em grafos dirigidos com aplicação didática interativa.

**Palavras-chave:** Grafos. Arborescência. Algoritmos. Visualização.

# Abstract

This work presents an analysis and implementation of algorithms for finding a minimum cost inverse  $r$ -arborescence in directed graphs with interactive didactic application.

**Keywords:** Graphs. Arborescence. Algorithms. Visualization.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Ciclo gerado pelas escolhas locais "mais baratas por vértice". Os arcos grossos (custo 1) entram em $a, b, c$ e formam $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow a$ . Os arcos tracejados partindo de $r$ existem, mas são mais caros e por isso não são escolhidos pelo critério local. . . . .	10
Figura 2 – Ajuste de custo reduzido para um arco entrando em um ciclo contraído: o arco $(u, w)$ com $w \in C$ torna-se $(u, x_C)$ com custo reduzido $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , onde $a_w$ é o arco de menor custo que entra em $w$ . . . . .	11
Figura 3 – Bijeção entre arborescências no grafo contraído e no original: toda arborescência em $D'$ escolhe exatamente um arco que entra em $x_C$ ; ao expandir $C$ , esse arco corresponde a um $(u, w)$ que entra em algum $w \in C$ e os arcos internos (de custo reduzido zero) são mantidos, preservando o custo total. . . . .	12
Figura 4 – Reexpansão de $C$ : no grafo contraído seleciona-se um arco que entra em $x_C$ ; ao expandir, $x_C$ é substituído por $C$ e o arco selecionado entra em algum $w \in C$ ; remove-se exatamente um arco interno de $C$ para eliminar o ciclo, preservando conectividade e custo total (arcos internos têm custo reduzido zero). . . . .	12
Figura 5 – Exemplo de normalização de custos reduzidos. À esquerda, vértice $v$ com três arestas de entrada (pesos 5, 3 e 7). À direita, após aplicar <code>normalize_incoming_edge_weights(D, v)</code> : o menor peso $y(v) = 3$ é subtraído de todas as entradas, resultando em custos reduzidos 2, 0 e 4. A aresta $(u_2, v)$ (em vermelho) tem custo zero e será selecionada para $F^*$ . . . . .	21
Figura 6 – Exemplo de construção de $F^*$ a partir de um digrafo normalizado. À esquerda, o digrafo $D$ após normalização, onde cada vértice não-raiz possui ao menos uma aresta de entrada com custo zero (em vermelho). À direita, o subgrafo $F^*$ resultante contém apenas as arestas de custo zero selecionadas, uma por vértice. Note que $F^*$ pode conter ciclos (como $\{v_1, v_2\}$ ) que serão tratados nas etapas subsequentes. . . . .	23
Figura 7 – Exemplo de detecção de ciclo em $F^*$ . À esquerda, o subgrafo $F^*$ contém um ciclo formado pelos vértices $\{v_2, v_3, v_4\}$ (destacados em amarelo). A DFS percorre o grafo e detecta o ciclo ao encontrar a aresta $(v_4, v_2)$ , onde $v_2$ já está na pilha de recursão. À direita, a função retorna uma cópia do subgrafo induzido pelos vértices do ciclo, contendo apenas os três vértices e as três arestas que formam o ciclo. . . . .	25



- Figura 8 – Exemplo de contração de ciclo. À esquerda, grafo original  $D$  com ciclo  $C = \{v_2, v_3, v_4\}$  (em amarelo). Vértices externos  $r$ ,  $v_1$  e  $v_5$  têm arestas conectando ao ciclo:  $r$  envia aresta para  $v_2$  (peso 2) e  $v_4$  (peso 5);  $v_4$  envia aresta para  $v_5$  (peso 1). À direita, após a contração: o ciclo é substituído pelo supervértice  $x_C$  (vermelho). As arestas de entrada são redirecionadas:  $(r, x_C)$  recebe peso 2 (menor entre 2 e 5). A aresta de saída  $(x_C, v_5)$  mantém peso 1. Os dicionários `in_to_cycle` e `out_from_cycle` armazenam os mapeamentos originais para posterior reexpansão. . . . . 29
- Figura 9 – Remoção de aresta interna durante reexpansão. À esquerda, ciclo  $C = \{v_2, v_3, v_4\}$  após adicionar aresta externa  $(u, v_2)$  vindoura da arborescência  $T'$ : o vértice  $v_2$  tem grau de entrada 2 (aresta externa vermelha de  $u$  e aresta interna do ciclo vinda de  $v_4$ ), violando a propriedade de arborescência. À direita, após remover a aresta interna  $(v_4, v_2)$ : o vértice  $v_2$  passa a ter grau de entrada 1, o ciclo é "quebrado" no ponto de entrada, transformando-se em um caminho que se integra corretamente à estrutura de árvore. A aresta removida é mostrada tracejada em cinza. . . . . 32

# Sumário

<b>1</b>	<b>ALGORITMO DE CHU-LIU/EDMONDS</b>	<b>10</b>
<b>1.1</b>	<b>O problema dos ciclos e a solução por contração</b>	<b>10</b>
1.1.1	Supervértices e contração de ciclos	11
<b>1.2</b>	<b>Descrição do algoritmo</b>	<b>11</b>
1.2.1	Exemplo prático: Chu-Liu/Edmonds	13
1.2.2	Corretude	15
1.2.3	Complexidade	16
<b>1.3</b>	<b>Implementação em Python</b>	<b>16</b>
1.3.1	Representação de Digrafos: NetworkX	17
1.3.1.1	Estrutura Interna	17
1.3.1.2	Operações Fundamentais	17
1.3.1.3	Busca em Profundidade (DFS)	18
1.3.1.3.1	Funcionamento básico:	18
1.3.1.3.2	Deteção de ciclos em digrafos:	18
1.3.1.3.3	Complexidade:	18
1.3.1.3.4	Implementação em NetworkX:	19
1.3.2	Especificação do Algoritmo	19
1.3.3	Normalização por vértice	20
1.3.4	Construção de $F^*$ :	21
1.3.5	Deteção de ciclo:	24
1.3.6	Contração de ciclo:	25
1.3.7	Remoção de arestas que entram na raiz:	30
1.3.8	Remoção de arco interno:	31
1.3.9	Procedimento principal (recursivo):	33
1.3.9.1	Notas finais sobre a implementação	36
1.3.9.2	Decisões de projeto e implicações práticas	36
1.3.9.3	Transição para a abordagem primal-dual	37
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>38</b>
	<b>ANEXOS</b>	<b>39</b>
	<b>ANEXO A – ANEXO A</b>	<b>40</b>

# 1 Algoritmo de Chu–Liu/Edmonds

O algoritmo de Chu–Liu/Edmonds encontra uma  $r$ -arborescência de custo mínimo em um digrafo ponderado. A estratégia funciona de forma gulosa ao escolher, para cada vértice  $v \neq r$ , o arco de entrada mais barato. No entanto, essa abordagem pode gerar ciclos dirigidos, incompatíveis com a estrutura de arborescência. O algoritmo resolve esse problema combinando normalização de custos, contração de ciclos em supervértices e expansão controlada para garantir otimalidade.

## 1.1 O problema dos ciclos e a solução por contração

Em uma  $r$ -arborescência, cada  $v \neq r$  deve ter exatamente um arco de entrada e  $r$  tem grau de entrada zero. Se escolhermos para cada vértice o arco mais barato que nele entra, podemos formar um ciclo dirigido  $C$  onde todos os vértices recebem seu único arco de dentro do próprio  $C$ . Nesse caso, nenhum arco entraria em  $C$  a partir de  $V \setminus C$  (o corte  $\delta^-(C)$  ficaria vazio) e, como  $r \notin C$ , não existiria caminho de  $r$  para os vértices de  $C$ , contrariando a alcançabilidade exigida.

A Figura 1 ilustra com um microexemplo: três vértices  $a, b, c$  (todos fora de  $r$ ) onde o arco mais barato que entra em  $b$  vem de  $a$ , o de  $c$  vem de  $b$  e o de  $a$  vem de  $c$ , formando o ciclo  $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow a$ . Embora existam arcos de  $r$  para cada vértice, eles são mais caros e não são escolhidos pelo critério local, deixando os vértices "presos" no ciclo sem conexão com a raiz.

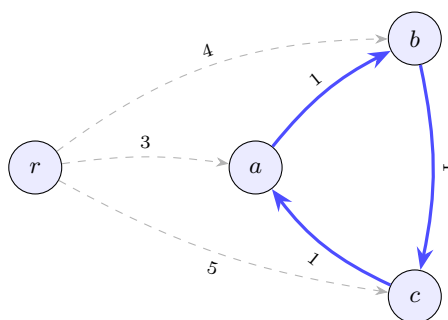


Figura 1 – Ciclo gerado pelas escolhas locais "mais baratas por vértice". Os arcos grossos (custo 1) entram em  $a, b, c$  e formam  $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow a$ . Os arcos tracejados partindo de  $r$  existem, mas são mais caros e por isso não são escolhidos pelo critério local.

A solução consiste em *normalizar os custos por vértice*: para cada  $v \neq r$ , subtraímos de todo arco que entra em  $v$  o menor custo entre os arcos que chegam a  $v$ . Após esse ajuste (custos reduzidos), cada  $v \neq r$  passa a ter ao menos um arco de custo reduzido

zero. Se os arcos de custo zero forem acíclicos, já temos a *r*-arborescência ótima. Se formarem um ciclo  $C$ , *contraímos*  $C$  em um **supervértice**  $x_C$ , ajustamos os custos dos arcos externos e resolvemos recursivamente no grafo menor. Ao final, *expandimos* as contrações removendo exatamente um arco interno de cada ciclo para manter grau de entrada 1 e aciclicidade global.

### 1.1.1 Supervértices e contração de ciclos

Dado um subconjunto  $C \subseteq V$  que forma um ciclo dirigido, a *contração de*  $C$  substitui todos os vértices de  $C$  por um único vértice  $x_C$  — o **supervértice**. Todo arco com exatamente uma ponta em  $C$  passa a ser incidente a  $x_C$ : arcos  $(u, w)$  com  $u \notin C$ ,  $w \in C$  tornam-se  $(u, x_C)$ ; arcos  $(w, v)$  com  $w \in C$ ,  $v \notin C$  tornam-se  $(x_C, v)$ ; e arcos com ambas as pontas em  $C$  são descartados.

Para preservar a comparação relativa dos custos, ajustamos os arcos que *entram* em  $C$ : para um arco  $(u, w)$  com  $w \in C$ , definimos  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , onde  $a_w$  é o arco mais barato que entra em  $w$ . Essa normalização garante que decisões ótimas no grafo contraído podem ser traduzidas de volta na expansão.

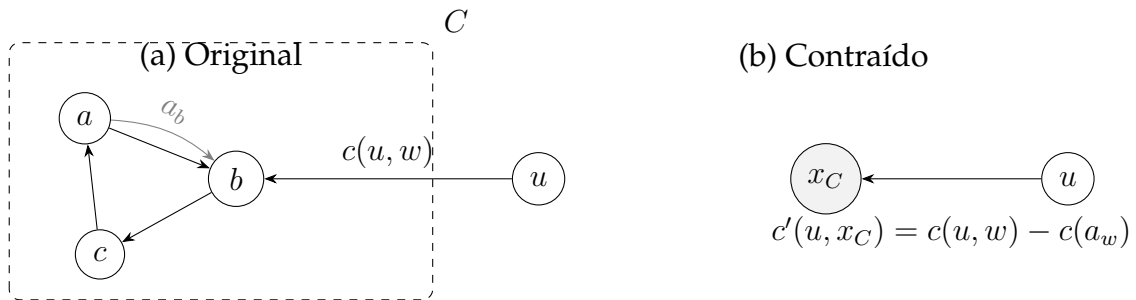


Figura 2 – Ajuste de custo reduzido para um arco entrando em um ciclo contraído: o arco  $(u, w)$  com  $w \in C$  torna-se  $(u, x_C)$  com custo reduzido  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , onde  $a_w$  é o arco de menor custo que entra em  $w$ .

A Figura 2 mostra o ajuste: o arco  $(u, b)$  com custo 7 torna-se  $(u, x_C)$  com custo reduzido  $7 - 5 = 2$ , já que  $a_b = (a \rightarrow b)$  tem custo 5.

## 1.2 Descrição do algoritmo

Apresentamos o algoritmo em visão operacional de alto nível, focando na lógica e nos passos principais. Detalhes de implementação serão discutidos na próxima seção. Denotamos por  $A'$  o conjunto de arcos escolhidos na construção da *r*-arborescência.

Construa  $A'$  escolhendo, para cada  $v \neq r$ , um arco de menor custo que entra em  $v$ . Se  $(V, A')$  é acíclico, então  $A'$  já é uma *r*-arborescência ótima, pois realizamos o menor

custo de entrada em cada vértice e nenhuma troca pode reduzir o custo mantendo as restrições (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Sec. 4.9).

Se  $A'$  contiver um ciclo dirigido  $C$  (que não inclui  $r$ ), normalizamos os custos de entrada, contraímos  $C$  em um supervértice  $x_C$  ajustando arcos que entram em  $C$  por  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , e resolvemos recursivamente no grafo contraído.

As arborescências do grafo contraído correspondem, em bijeção, às arborescências do grafo original com exatamente um arco entrando em  $C$ . Como os arcos internos de  $C$  têm custo reduzido zero, os custos são preservados na ida e na volta.

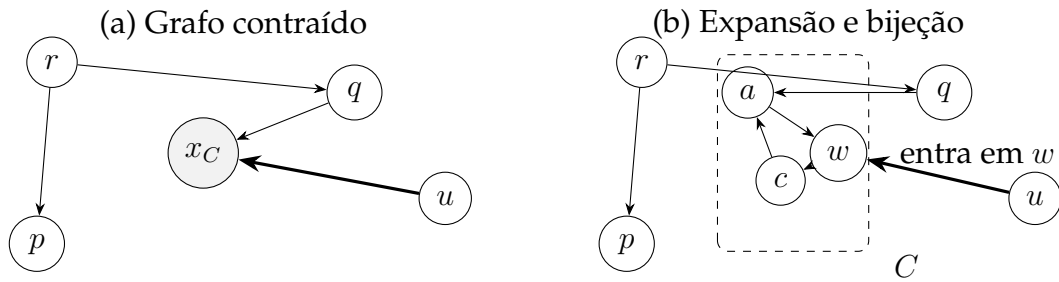


Figura 3 – Bijeção entre arborescências no grafo contraído e no original: toda arborescência em  $D'$  escolhe exatamente um arco que entra em  $x_C$ ; ao expandir  $C$ , esse arco corresponde a um  $(u, w)$  que entra em algum  $w \in C$  e os arcos internos (de custo reduzido zero) são mantidos, preservando o custo total.

Na expansão, reintroduzimos  $C$  e removemos exatamente um arco interno para manter grau de entrada 1 e aciclicidade global (SCHRIJVER, 2003; KLEINBERG; TARDOS, 2006).

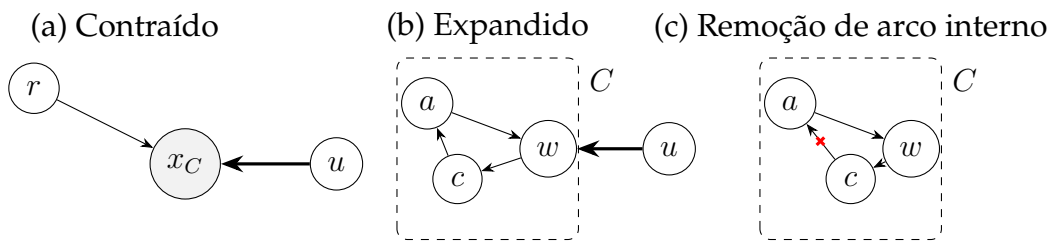


Figura 4 – Reexpansão de  $C$ : no grafo contraído seleciona-se um arco que entra em  $x_C$ ; ao expandir,  $x_C$  é substituído por  $C$  e o arco selecionado entra em algum  $w \in C$ ; remove-se exatamente um arco interno de  $C$  para eliminar o ciclo, preservando conectividade e custo total (arcos internos têm custo reduzido zero).

Abaixo, a descrição formal do algoritmo.

Abaixo, temos a descrição formal do algoritmo.

**Algoritmo 1.1: Chu–Liu/Edmonds (visão operacional)**

Entrada: digrafo  $D = (V, A)$ , custos  $c : A \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ , raiz  $r$ .<sup>a</sup>

1. Para cada  $v \neq r$ , escolha  $a_v \in \operatorname{argmin}_{(u,v) \in A} c(u, v)$ . Defina  $y(v) := c(a_v)$  e  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$ .
2. Se  $(V, F^*)$  é acíclico, devolva  $F^*$ . Por (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.36), trata-se de uma r-arborescência de custo mínimo.
3. Caso contrário, seja  $C$  um ciclo dirigido de  $F^*$  (com  $r \notin C$ ). **Contração:** contraia  $C$  em um supervértice  $x_C$  e defina custos  $c'$  por

$$\begin{aligned} c'(u, x_C) &:= c(u, w) - y(w) = c(u, w) - c(a_w) && \text{para } u \notin C, w \in C, \\ c'(x_C, v) &:= c(w, v) && \text{para } w \in C, v \notin C, \end{aligned}$$

descartando laços em  $x_C$  e permitindo paralelos. Denote o digrafo contraído por  $D' = (V', A')$ .

4. **Recursão:** compute uma r-arborescência ótima  $T'$  de  $D'$  com custos  $c'$ .
5. **Expansão:** seja  $(u, x_C) \in T'$  o único arco que entra em  $x_C$ . No grafo original, ele corresponde a  $(u, w)$  com  $w \in C$ . Forme

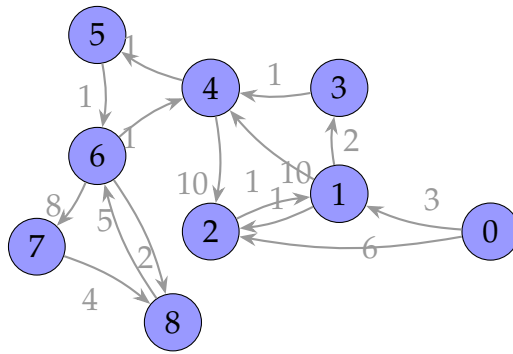
$$T := (T' \setminus \{\text{arcos incidentes a } x_C\}) \cup \{(u, w)\} \cup ((F^* \cap A(C)) \setminus \{a_w\}).$$

Então  $T$  tem grau de entrada 1 em cada  $v \neq r$ , é acíclico e tem o mesmo custo de  $T'$ ; logo, é uma r-arborescência ótima de  $D$  (KLEINBERG; TARDOS, 2006; SCHRIJVER, 2003, Sec. 4.9).

<sup>a</sup> Se algum  $v \neq r$  não possui arco de entrada, não existe r-arborescência.

### 1.2.1 Exemplo prático: Chu–Liu/Edmonds

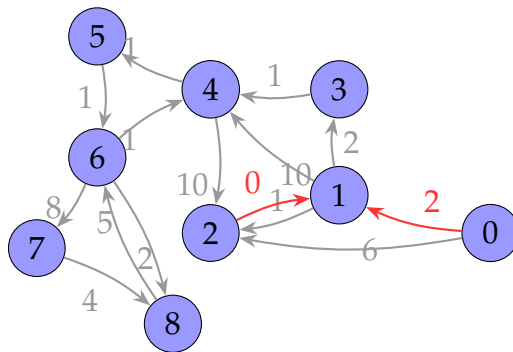
A seguir, ilustramos o funcionamento do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds em um grafo de teste. Mostramos o grafo original, os principais passos do algoritmo e a arborescência final encontrada. A Figura abaixo apresenta o grafo original com os pesos das arestas



O primeiro passo do nosso algoritmo seria remover as arestas que entram na raiz (vértice 0), porém não há nenhuma nesse caso, logo não existe a necessidade de alterar o grafo.

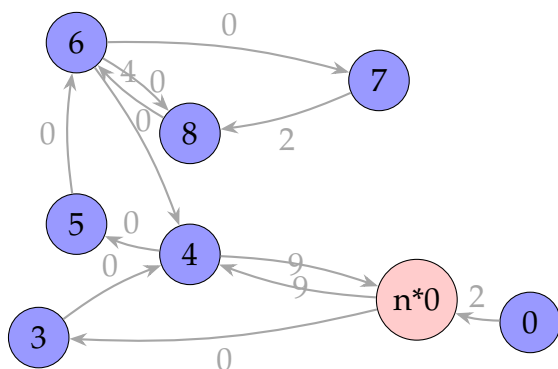
Dessa forma, o próximo passo é normalizar os pesos das arestas de entrada para cada vértice, nessa etapa, Para cada vértice  $X$  (exceto a raiz), o algoritmo encontra a aresta de menor peso que entra em  $X$  e subtrai esse menor peso de todas as arestas que entram em  $X$  (relembrando que isso serve para zerar o peso da aresta mínima de entrada em cada vértice)

Normalizando pesos de arestas de entrada para '1': Nesse processo notamos que as únicas arestas de entrada são 0 e 2 onde  $(0 \rightarrow 1)$  tem peso 3.0 e  $(2 \rightarrow 1)$  tem peso 1.0, elegendo a aresta 2 como a de menor peso podemos subtrair o peso das arestas restantes (no caso, o peso da aresta 0) pelo valor do peso da aresta 2, resultando em um novo peso de '2' para a aresta 0



Repetiremos o passo anterior para todas as outras arestas

Com os pesos normalizados, o próximo passo é construir  $F^*$ , para isso, selecionamos para cada vértice, a aresta de menor custo de entrada. Além disso, detectamos um ciclo em  $F^*$ , formado pelos vértices  $\{1$  e  $2\}$ . Portanto, precisamos contrair esse ciclo em um supervértice  $n * 0$ . O resultado é o seguinte:



1. *Normalização por custos reduzidos:* para cada  $v \neq r$ , defina  $y(v) := \min\{c(u, v) : (u, v) \in A\}$  e  $c'(u, v) := c(u, v) - y(v)$ . Para qualquer  $r$ -arborescência  $T$ , vale

$$\sum_{a \in T} c'(a) = \sum_{a \in T} c(a) - \sum_{v \neq r} y(v),$$

pois há exatamente um arco de  $T$  entrando em cada  $v \neq r$ . O termo  $\sum_{v \neq r} y(v)$  é constante (independe de  $T$ ); assim, minimizar  $\sum c$  equivale a minimizar  $\sum c'$



(KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.37). Em particular, os arcos  $a_v$  de menor custo que entram em  $v$  têm custo reduzido zero e formam  $F^*$ .

2. *Caso acíclico*: se  $(V, F^*)$  é acíclico, então já é uma  $r$ -arborescência e, por realizar o mínimo custo de entrada em cada  $v \neq r$ , é ótima (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.36).
3. *Caso com ciclo (contração/expansão)*: se  $F^*$  contém um ciclo dirigido  $C$ , todos os seus arcos têm custo reduzido zero.

Contraia  $C$  em  $x_C$  e ajuste apenas arcos que *entram* em  $C$ :  $c'(u, x_C) := c(u, w) - y(w) = c(u, w) - c(a_w)$ .

Resolva o problema no grafo contraído  $D'$ , obtendo uma  $r$ -arborescência ótima  $T'$  sob  $c'$ . Na expansão, substitua o arco  $(u, x_C) \in T'$  pelo correspondente  $(u, w)$  (com  $w \in C$ ) e remova  $a_w$  de  $C$ .

Como os arcos de  $C$  têm custo reduzido zero e  $c'(u, x_C) = c(u, w) - y(w)$ , a soma dos custos reduzidos é preservada na ida e na volta; logo,  $T'$  ótimo em  $D'$  mapeia para  $T$  ótimo em  $D$  para  $c'$ . Pela equivalência entre  $c$  e  $c'$ ,  $T$  também é ótimo para  $c$ . Repetindo o argumento a cada contração, obtemos a corretude por indução (KLEINBERG; TARDOS, 2006; SCHRIJVER, 2003, Sec. 4.9).

Em termos intuitivos,  $y$  funciona como um potencial nos vértices: torna “apertados” (custo reduzido zero) os candidatos corretos; ciclos de arcos apertados podem ser contraídos sem perder otimalidade.

### 1.2.3 Complexidade

Na implementação direta, selecionar os  $a_v$ , detectar/contrair ciclos e atualizar estruturas custa  $O(m)$  por nível; como o número de vértices decresce a cada contração, temos no máximo  $O(n)$  níveis e tempo total  $O(mn)$ , com  $n = |V|$ ,  $m = |A|$ .

O uso de memória é  $O(m + n)$ , incluindo mapeamentos de contração/expansão e as filas de prioridade dos arcos de entrada. A implementação a seguir adota a versão  $O(mn)$  por simplicidade e está disponível no repositório do projeto (<https://github.com/lorenypsum/GraphVisualizer>).

## 1.3 Implementação em Python

Esta seção apresenta uma implementação em Python do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds. A arquitetura segue os passos teóricos: recebe como entrada um digrafo ponderado, os custos das arestas e o vértice raiz. O procedimento seleciona, para cada vértice, o arco de menor custo de entrada, verifica se o grafo é acíclico e, se necessário, contrai ciclos

e ajusta custos. Ao final, retorna como saída a *r-arborescência* ótima: um conjunto de arestas que conecta todos os vértices à raiz com custo mínimo.

### 1.3.1 Representação de Digrafos: NetworkX

A implementação utiliza a biblioteca NetworkX<sup>1</sup>, que fornece estruturas de dados eficientes para grafos e digrafos. A classe `nx.DiGraph` representa grafos direcionados (directed graphs) e constitui a base para todas as operações do algoritmo.

#### 1.3.1.1 Estrutura Interna

Internamente, `nx.DiGraph` armazena o grafo usando dicionários aninhados do Python. Para um digrafo  $D = (V, A)$ :

- **Vértices:** mantidos em um dicionário que mapeia cada vértice para seus atributos. O método `D.nodes()` retorna uma visão (`NodeView`) sobre o conjunto de vértices, permitindo iteração em tempo  $O(n)$ .
- **Arestas:** armazenadas em estruturas de adjacência bidirecionais. Para cada vértice  $u$ , mantém-se:
  - Um dicionário de *sucessores*: vértices  $v$  tais que  $(u, v) \in A$ , acessível via `D[u]`.
  - Um dicionário de *predecessores*: vértices  $w$  tais que  $(w, u) \in A$ , usado por `D.in_edges(u)`.
- **Atributos de arestas:** cada aresta pode ter atributos arbitrários armazenados como dicionários. A notação `D[u][v][w]` acessa o atributo "w" (peso) da aresta  $(u, v)$ .

Esta representação garante acesso eficiente: adicionar ou remover uma aresta tem complexidade  $O(1)$  em média, consultar os vizinhos de um vértice custa  $O(\deg(v))$ , e iterar sobre todas as arestas leva tempo  $O(m)$ .

#### 1.3.1.2 Operações Fundamentais

As operações básicas usadas na implementação incluem:

- `D.nodes()`: retorna visão sobre os vértices, permitindo iteração e verificação de pertinência.
- `D.in_edges(v, data="w")`: retorna as arestas que entram em  $v$ , opcionalmente incluindo atributos. Com `data="w"`, produz tuplas  $(u, v, w)$  onde  $w$  é o peso.

<sup>1</sup> NetworkX é uma biblioteca Python para criação, manipulação e estudo de estruturas, dinâmicas e funções de redes complexas. Disponível em <https://networkx.org/>.

- `D.out_edges(u, data="w")`: retorna as arestas que saem de  $u$ , análogo a `in_edges`.
- `D.add_edge(u, v, **attr)`: adiciona a aresta  $(u, v)$  com atributos opcionais. Se  $u$  ou  $v$  não existirem, são criados automaticamente.
- `D.remove_edges_from(edges)`: remove múltiplas arestas em lote, recebendo lista de tuplas  $(u, v)$ .
- `D.remove_nodes_from(nodes)`: remove múltiplos vértices e todas as suas arestas incidentes.

### 1.3.1.3 Busca em Profundidade (DFS)

A busca em profundidade (Depth-First Search, DFS) é um algoritmo fundamental de travessia de grafos que explora sistematicamente cada ramo do grafo até sua máxima profundidade antes de retroceder. Em digrafos, a DFS é particularmente útil para detectar ciclos dirigidos, uma operação essencial no algoritmo de Chu–Liu/Edmonds.

#### 1.3.1.3.1 Funcionamento básico:

A partir de um vértice inicial  $s$ , a DFS marca  $s$  como visitado e recursivamente visita cada vizinho não visitado. Quando todos os vizinhos de um vértice foram explorados, o algoritmo retrocede (backtrack) para o vértice anterior na pilha de recursão.

#### 1.3.1.3.2 Detecção de ciclos em digrafos:

Para detectar ciclos, a DFS mantém três estados para cada vértice:

- **Não visitado**: vértice ainda não explorado.
- **Em processamento**: vértice na pilha de recursão atual (ancestral no caminho DFS).
- **Concluído**: vértice totalmente processado (todos os descendentes explorados).

Um ciclo é detectado quando a DFS encontra uma aresta  $(u, v)$  onde  $v$  está *em processamento*: isso significa que existe um caminho de  $v$  até  $u$  na árvore DFS atual, e a aresta  $(u, v)$  fecha um ciclo.

#### 1.3.1.3.3 Complexidade:

A DFS visita cada vértice exatamente uma vez e examina cada aresta no máximo uma vez (ao explorar os vizinhos). Portanto, a complexidade é  $O(n + m)$ , onde  $n = |V|$  e  $m = |A|$ .

### 1.3.1.3.4 Implementação em NetworkX:

A biblioteca NetworkX fornece a função `nx.find_cycle(G, orientation="original")` que implementa detecção de ciclos baseada em DFS. Esta função aceita dois parâmetros principais: o grafo  $G$  a ser analisado e o parâmetro opcional `orientation` que controla o formato de saída das arestas encontradas.

Quando invocada, a função percorre o grafo executando DFS a partir de cada vértice não visitado. Durante a travessia, mantém o estado de cada vértice (não visitado, em processamento, ou concluído) e, ao detectar uma aresta de retorno — isto é, uma aresta  $(u, v)$  onde  $v$  está atualmente na pilha de recursão —, identifica a presença de um ciclo.

O retorno da função é um *iterador* (não uma lista materializada) sobre as arestas que compõem o ciclo detectado. Cada elemento do iterador é uma tupla  $(u, v, key)$  quando `orientation="original"`, onde  $u$  e  $v$  são os vértices da aresta e `key` contém metadados de orientação (que tipicamente ignoramos usando desempacotamento com `_`). A escolha de retornar um iterador em vez de uma lista reduz o uso de memória, permitindo processamento sob demanda das arestas do ciclo.

Um aspecto crucial do design desta função é seu comportamento em grafos acíclicos: em vez de retornar um valor especial como `None` ou uma lista vazia, a função lança a exceção `NetworkXNoCycle`. Esta decisão de design segue o princípio EAFP (*Easier to Ask for Forgiveness than Permission*) do Python, onde operações excepcionais são sinalizadas por exceções em vez de valores de sentinela. Isso força o código cliente a tratar explicitamente o caso acíclico com um bloco `try-except`, resultando em código mais robusto e com intenção clara.

A complexidade da função é  $O(n + m)$ , onde  $n = |V|$  e  $m = |A|$ , pois no pior caso (grafo acíclico) a DFS visita todos os vértices e examina todas as arestas exatamente uma vez antes de concluir que não há ciclos.

## 1.3.2 Especificação do Algoritmo

Com a representação estabelecida, especificamos formalmente o algoritmo implementado:

- **Entrada:** digrafo ponderado  $D = (V, A)$  (objeto `nx.DiGraph`), custos  $c : A \rightarrow \mathbb{R}$  armazenados no atributo `"w"` das arestas, raiz  $r \in V$ .
- **Hipóteses:**
  - $D$  é conexo a partir de  $r$ : (i) todo  $v \neq r$  é alcançável a partir de  $r$  (caso contrário, não há  $r$ -arborescência); (ii) para todo subconjunto não vazio  $X \subseteq V \setminus \{r\}$ ,

existe ao menos um arco que entra em  $X$  ( $\delta^-(X) \neq \emptyset$ ; condições clássicas de existência à la Edmonds ([SCHRIJVER, 2003](#))).

- Os custos são não negativos:  $c(a) \geq 0$  para todo  $a \in A$ .
- **Saída:** subgrafo  $T$  (objeto `nx.DiGraph`) com  $|A_T| = |V| - 1$  arestas, tal que cada  $v \neq r$  tem grau de entrada 1, todos os vértices são alcançáveis a partir de  $r$  e  $\sum_{a \in A_T} c(a)$  é mínimo.
- **Convenções:** arcos paralelos (múltiplos arcos entre o mesmo par de vértices) são permitidos após contrações; laços (self-loops) são descartados.

Criamos funções auxiliares para traduzir cada passo do algoritmo teórico em operações concretas sobre o objeto `nx.DiGraph` e uma função principal chama essas auxiliares na ordem correta, gerenciando contrações e expansões e todo o fluxo descrito formalmente na seção anterior.

A seguir, detalhamos as implementações das funções auxiliares, apresentamos como elas correspondem aos passos do algoritmo teórico, apresentamos exemplos de uso e por fim discutiremos a função principal que orquestra a execução do algoritmo. Cada função é explicada em termos de sua lógica, parâmetros, retornos e complexidade, começando pela normalização dos custos por vértice.

### 1.3.3 Normalização por vértice

Esta função implementa a normalização de custos reduzidos: calcula  $y(v) = \min\{w(u, v)\}$  e substitui cada peso  $w(u, v)$  por  $w(u, v) - y(v)$ , garantindo que ao menos uma aresta de entrada tenha custo zero. Como cada  $r$ -arborescência possui exatamente uma aresta entrando em cada vértice não-raiz, a soma total dos valores  $y(v)$  subtraídos é constante para qualquer solução, preservando assim a ordem de otimalidade entre diferentes arborescências.

Recebe como entrada um digrafo  $D$  (objeto `nx.DiGraph`) e o rótulo `node` do vértice a ser normalizado. A implementação coleta todas as arestas de entrada de `node` com seus pesos usando o método `D.in_edges(node, data="w")`, que retorna uma lista de tuplas  $(u, node, w)$  (linha 2). Em seguida, verifica se a lista está vazia e se estiver retorna imediatamente sem fazer alterações (linhas 3–4). Caso contrário, calcula o peso mínimo  $y_v$  através de uma compreensão de gerador que extrai o terceiro elemento de cada tupla (linha 5) e, para cada predecessor  $u$ , subtrai  $y_v$  do peso armazenado em `D[u][node][w]` (linha 6).

Não retorna nenhum valor (retorno implícito `None`), pois a operação é realizada in-place: o grafo  $D$  passado como parâmetro é modificado diretamente, e ao menos uma

aresta de entrada de node terá custo reduzido zero após a execução. A complexidade é  $O(\deg^-(v))$ , pois cada operação percorre as arestas de entrada uma única vez.

#### Normalização por vértice: custos reduzidos

*Normaliza os pesos das arestas que entram em node, subtraindo de cada uma o menor peso de entrada. Modifica o grafo D in-place.*

```

1 def normalize_incoming_edge_weights(D: nx.DiGraph, node: str):
2     predecessors = list(D.in_edges(node, data="w"))
3     if not predecessors:
4         return
5     yv = min((w for _, _, w in predecessors))
6     D[u][node]["w"] -= yv

```

A Figura 5 ilustra o funcionamento da normalização:

**Antes:**  $y(v) = \min\{5, 3, 7\} = 3$  **Depois:** ao menos uma entrada tem custo 0

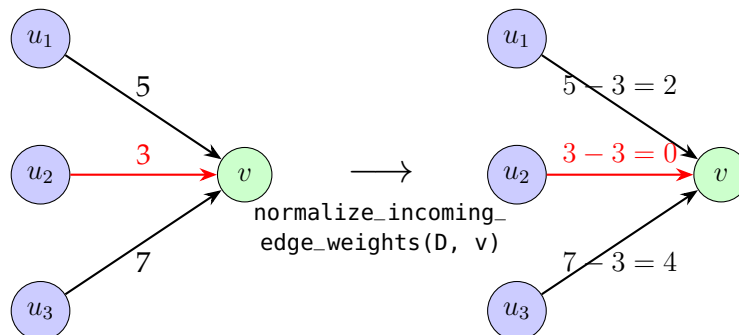


Figura 5 – Exemplo de normalização de custos reduzidos. À esquerda, vértice  $v$  com três arestas de entrada (pesos 5, 3 e 7). À direita, após aplicar `normalize_incoming_edge_weights(D, v)`: o menor peso  $y(v) = 3$  é subtraído de todas as entradas, resultando em custos reduzidos 2, 0 e 4. A aresta  $(u_2, v)$  (em vermelho) tem custo zero e será selecionada para  $F^*$ .

Observe que as diferenças relativas são preservadas: a aresta mais cara permanece 4 unidades acima da mais barata, e a intermediária mantém sua posição relativa. Como cada  $r$ -arborescência contém exatamente uma aresta entrando em cada vértice não-raiz, a soma  $\sum_{w \neq r} y(w)$  é constante para qualquer solução, garantindo que a ordem de otimalidade seja preservada.

#### 1.3.4 Construção de $F^*$ :

Esta função constrói o subdigrafo  $F^*$  selecionando, para cada vértice  $v \neq r_0$ , uma única aresta de custo reduzido zero que entra em  $v$ .

Recebe como entrada um digrafo  $D$  (objeto `nx.DiGraph`) e o rótulo  $r_0$  da raiz. A implementação cria um novo digrafo vazio  $F\_star$  (linha 2) em vez de modificar  $D$  diretamente; essa escolha de criar uma estrutura separada é fundamental porque  $F^*$  é um subgrafo conceitual usado para detecção de ciclos, e preservar  $D$  inalterado permite que as operações subsequentes (como contração) trabalhem com o grafo original completo, evitando perda de informação sobre arestas não selecionadas que podem ser necessárias após reexpansões.

Em seguida, para cada vértice  $v$  diferente de  $r_0$  (linhas 3–4), utilizando o método `D.nodes()`, coleta todas as arestas de entrada de  $v$  com seus pesos em uma lista e armazena na variável `in_edges` (linha 5); a materialização em lista é necessária porque a subsequente iteração sobre as arestas para encontrar aquela de peso zero poderia causar problemas se trabalhássemos diretamente com a visão retornada por `in_edges`, especialmente em cenários de modificação concorrente. Se não houver arestas de entrada, prossegue para o próximo vértice (linhas 6–7) usando `continue`, pois um vértice isolado ou inacessível não contribui para  $F^*$  e sua ausência será detectada posteriormente como violação das hipóteses de conectividade.

Caso contrário, utiliza uma compreensão de gerador combinada com `next` para encontrar o primeiro predecessor  $u$  cuja aresta  $(u, v)$  tem peso zero (linha 8); a escolha de `next` com gerador em vez de uma busca exaustiva é eficiente porque interrompe a iteração assim que encontra a primeira aresta de custo zero, evitando processamento desnecessário das arestas restantes (embora teoricamente todas as arestas de custo zero sejam equivalentes, na prática apenas uma é necessária para  $F^*$ ). A função `next` retorna `None` se nenhuma aresta de peso zero existir, o que teoricamente não deveria ocorrer após a normalização correta (que garante ao menos uma aresta de custo zero por vértice), mas o tratamento defensivo evita erros em casos degenerados. Se tal aresta existir, adiciona-a a  $F\_star$  com peso zero usando o método `add_edge` (linhas 9–10); a especificação explícita de  $w=0$  garante que  $F^*$  contenha apenas arestas de custo reduzido zero, propriedade fundamental para a corretude do algoritmo.

Retorna o digrafo  $F\_star$  contendo exatamente uma aresta entrando em cada  $v \neq r_0$ , todas com custo reduzido zero. O grafo original  $D$  não é modificado, preservando o estado para operações futuras. A complexidade é  $O(m)$ , onde  $m$  é o número de arestas, pois cada aresta é considerada no máximo uma vez durante a iteração sobre todos os vértices: para cada um dos  $n - 1$  vértices não-raiz, examina-se suas arestas de entrada (totalizando no máximo  $m$  arestas ao longo de todas as iterações), e para cada vértice a busca por aresta de peso zero é interrompida no primeiro match, resultando em tempo linear no tamanho do grafo.

Construção de  $F^*$ 

Constrói o subdigrafo  $F^*$  a partir do digrafo  $D$ , selecionando para cada vértice (exceto a raiz  $r_0$ ) uma aresta de custo reduzido zero que entra nele.

```

1 def get_Fstar(D: nx.DiGraph, r0: str):
2     F_star = nx.DiGraph()
3     for v in D.nodes():
4         if v != r0:
5             in_edges = list(D.in_edges(v, data="w"))
6             if not in_edges:
7                 continue
8             u = next((u for u, _, w in in_edges if w == 0), None)
9             if u:
10                 F_star.add_edge(u, v, w=0)
11     return F_star

```

A Figura 6 ilustra a construção de  $F^*$ :

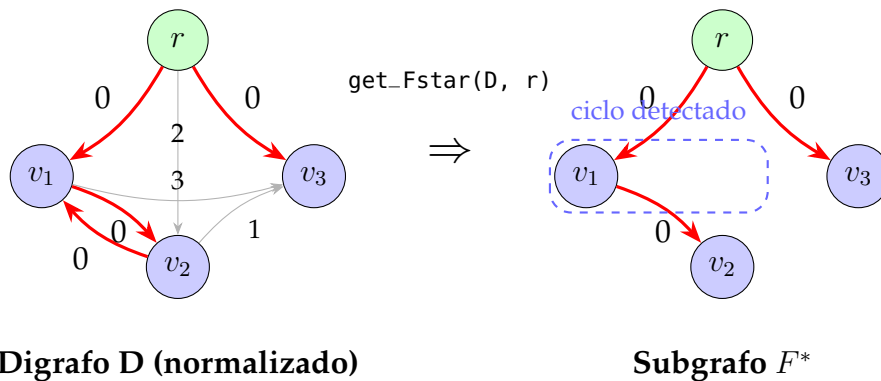


Figura 6 – Exemplo de construção de  $F^*$  a partir de um digrafo normalizado. À esquerda, o digrafo  $D$  após normalização, onde cada vértice não-raiz possui ao menos uma aresta de entrada com custo zero (em vermelho). À direita, o subgrafo  $F^*$  resultante contém apenas as arestas de custo zero selecionadas, uma por vértice. Note que  $F^*$  pode conter ciclos (como  $\{v_1, v_2\}$ ) que serão tratados nas etapas subsequentes.

A detecção de ciclos é crucial, pois a presença de um ciclo em  $F^*$  indica que a escolha de arestas de custo reduzido zero não formou uma arborescência válida. Esses ciclos precisam ser tratados nas etapas subsequentes do algoritmo.

As funções de normalização por vértice e construção de  $F^*$  juntas implementam o passo 1 da descrição do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds:



### Passo 1 do Algoritmo de Chu–Liu/Edmonds

**Passo 1:** Para cada  $v \neq r$ , escolha  $a_v \in \arg \min_{(u,v) \in A} c(u, v)$ . Defina  $y(v) := c(a_v)$  e  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$ .

#### 1.3.5 Detecção de ciclo:

Esta função detecta a presença de um ciclo dirigido em  $F^*$  e retorna um subgrafo que o contém; se  $F^*$  for acíclico, retorna None.

Recebe como entrada um digrafo `F_star` (objeto `nx.DiGraph`). A implementação utiliza um bloco `try` (linha 2) para capturar exceções caso não haja ciclo; esta escolha de tratamento por exceção é necessária porque a API do NetworkX adota o padrão EAFP (*Easier to Ask for Forgiveness than Permission*), onde `nx.find_cycle` não retorna um valor especial (como None) quando o grafo é acíclico, mas sim lança a exceção `NetworkXNoCycle` para sinalizar a ausência de ciclos.

Em seguida a função inicializa um conjunto vazio `nodes_in_cycle` (linha 3) e emprega a função `nx.find_cycle` do NetworkX (linha 4), que realiza uma busca em profundidade (DFS) para detectar ciclos (ver Seção 1.3.1.3). A função `nx.find_cycle` percorre o grafo visitando vértices e arestas: ao encontrar uma aresta  $(u, v)$  onde  $v$  já está na pilha de recursão da DFS, identifica um ciclo e retorna um iterador sobre todas as arestas que compõem esse ciclo. O laço na linha 4 itera sobre essas arestas retornadas, desempacotando cada uma na forma  $(u, v, \_)$  (ignorando o terceiro elemento com `_`, que contém metadados de orientação), e para cada aresta  $(u, v)$  adiciona ambos os vértices ao conjunto `nodes_in_cycle` (linha 5); a escolha de usar conjunto em vez de lista garante que cada vértice seja adicionado apenas uma vez mesmo que o ciclo tenha múltiplas arestas incidentes, e a operação de adição tem complexidade  $O(1)$  amortizada.

Após coletar todos os vértices do ciclo, constrói e retorna uma cópia do subgrafo induzido por eles (linha 7); a cópia é necessária porque o método `subgraph` retorna apenas uma visão dinâmica sobre o grafo original.

Se nenhum ciclo existir, a exceção `nx.NetworkXNoCycle` é capturada no bloco `except` (linha 8) e a função retorna None (linha 9);

No final, um subgrafo contendo os vértices e arestas do ciclo detectado é retornado, ou None se não houver ciclo. O grafo original `F_star` não é modificado. A complexidade é  $O(m)$ , onde  $m$  é o número de arestas, pois a DFS visita cada aresta no máximo uma vez.

### Detecção de ciclo dirigido em $F^*$

Detecta um ciclo dirigido em  $F^*$  e retorna um subgrafo contendo seus vértices e arestas, ou *None* se for acíclico.

```

1 def find_cycle(F_star: nx.DiGraph):
2     try:
3         nodes_in_cycle = set()
4         for u, v, _ in nx.find_cycle(F_star, orientation="original"):
5             nodes_in_cycle.update([u, v])
6         return F_star.subgraph(nodes_in_cycle).copy()
7     except nx.NetworkXNoCycle:
8         return None

```

A Figura 7 ilustra o processo de detecção de ciclo:

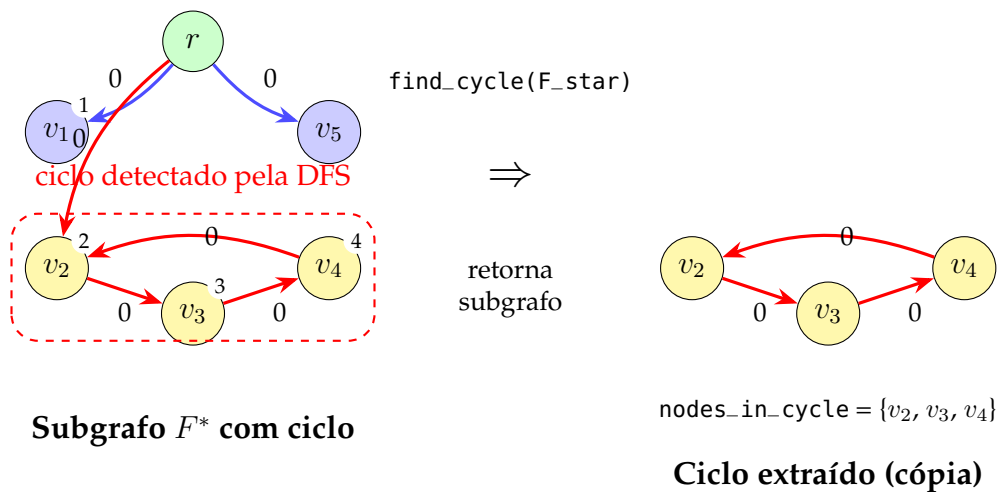


Figura 7 – Exemplo de detecção de ciclo em  $F^*$ . À esquerda, o subgrafo  $F^*$  contém um ciclo formado pelos vértices  $\{v_2, v_3, v_4\}$  (destacados em amarelo). A DFS percorre o grafo e detecta o ciclo ao encontrar a aresta  $(v_4, v_2)$ , onde  $v_2$  já está na pilha de recursão. À direita, a função retorna uma cópia do subgrafo induzido pelos vértices do ciclo, contendo apenas os três vértices e as três arestas que formam o ciclo.

Ao detectar um ciclo, a função permite que o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds prossiga para a etapa de contração, onde o ciclo será reduzido a um supervértice, facilitando a resolução do problema no grafo modificado.

#### 1.3.6 Contração de ciclo:

Esta função contrai um ciclo dirigido  $C$  em um supervértice  $x_C$ , redirecionando arcos incidentes e ajustando custos segundo a regra de custos reduzidos. Retorna

dicionários auxiliares para reexpansão.

Recebe como entrada um digrafo  $D$  (objeto `nx.DiGraph`), o ciclo  $C$  a ser contraído e o rótulo `label` do novo supervértice. A implementação coleta os vértices de  $C$  em um conjunto (linha 2) para permitir verificações de pertinência em tempo  $O(1)$ , essencial dado que essa operação é realizada repetidamente nos laços seguintes. Inicializa `in_to_cycle` (linha 3), um dicionário que tem como chave vértices externos ao ciclo e como valor tuplas  $(v, w)$ , onde  $v$  é o vértice do ciclo conectado a  $u$  e  $w$  é o peso da aresta  $(u, v)$ ; essa estrutura preserva não apenas o peso mínimo, mas também o ponto exato de entrada no ciclo, informação crucial para a reexpansão posterior.

Para cada vértice  $u$  no digrafo  $D$  (linha 4), se  $u$  não pertence ao ciclo (linha 5), identifica a aresta de menor peso que sai de  $u$  e entra em  $C$  (linhas 6–9) usando uma compreensão de gerador: a expressão `((v, w) for _, v, w in D.out_edges(u, data="w") if v in cycle_nodes)` itera sobre todas as arestas que saem de  $u$ , desempacota cada aresta na forma  $(_, v, w)$  (ignorando a origem com `_`, capturando o destino  $v$  e o peso  $w$ ), filtra apenas aquelas cujo destino  $v$  pertence ao ciclo, e produz tuplas  $(v, w)$ ; a função `min` (linha 6) então seleciona a tupla de menor peso usando `key=lambda x: x[1]` (linha 7) para comparar pelo segundo elemento (o peso), e retorna `None` se não houver arestas (linha 8). A escolha de selecionar apenas a aresta de *menor peso* reflete a propriedade fundamental do algoritmo: qualquer solução ótima que conecta um vértice externo ao ciclo contraído usará necessariamente a aresta de custo mínimo, pois todas as outras seriam subótimas. Se tal aresta existir, armazena em `in_to_cycle` (linhas 9–10).

Em seguida, a implementação itera sobre `in_to_cycle` usando o método `items()`, desempacotando cada entrada na forma  $(u, (v, w))$ , onde  $u$  é o vértice externo e  $(v, w)$  é a tupla com o vértice do ciclo e o peso (linhas 11–12). Para cada par, cria uma aresta de  $u$  para `label` com peso  $w$ , efetivamente redirecionando as arestas de entrada para o supervértice. A separação entre coleta (linhas 4–10) e criação (linhas 11–12) é necessária porque modificar o grafo durante a iteração sobre seus vértices causaria comportamento indefinido; ao coletar primeiro todos os dados em estruturas auxiliares, garantimos que as modificações posteriores sejam seguras.

De forma análoga, constrói o dicionário `out_from_cycle` (linha 13) para mapear arestas que saem do ciclo. Para cada vértice  $v$  em  $D$  (linha 14), se  $v$  não pertence ao ciclo (linha 15), identifica a aresta de menor peso que sai de  $C$  e entra em  $v$  (linhas 16–17) usando uma compreensão de gerador análoga: a expressão `((u, w) for u, _, w in D.in_edges(v, data="w") if u in cycle_nodes)` itera sobre todas as arestas que entram em  $v$ , desempacota cada aresta na forma  $(u, _, w)$  (capturando a origem  $u$ , ignorando o destino com `_`, e capturando o peso  $w$ ), filtra apenas aquelas cuja origem  $u$  pertence ao ciclo, e produz tuplas  $(u, w)$ ; a função `min` seleciona a de menor peso pela mesma razão de otimalidade. Se existir, armazena em `out_from_cycle` (linhas 18–19).

Depois, itera sobre `out_from_cycle` e cria arestas de `label` para cada vértice  $v$  com os respectivos pesos (linhas 20–21). Por fim, remove todos os vértices de  $C$  do grafo (linha 22); essa remoção é realizada por último para garantir que todas as operações de consulta (linhas 4–21) tenham acesso aos dados originais antes da modificação estrutural.

Retorna dois dicionários: `in_to_cycle` mapeia vértices externos aos pontos de entrada no ciclo original, e `out_from_cycle` mapeia vértices externos aos pontos de saída. Esses dicionários são essenciais para a fase de reexpansão, onde será necessário determinar exatamente qual aresta interna do ciclo deve ser removida para restaurar a propriedade de arborescência. O digrafo  $D$  é modificado in-place: os vértices de  $C$  são removidos e substituídos por `label`. A escolha de modificação in-place (em vez de criar uma cópia) reduz significativamente o uso de memória e o tempo de execução, especialmente em grafos grandes ou com múltiplos níveis de recursão, embora exija atenção cuidadosa ao gerenciamento de referências. A complexidade é  $O(m)$ , onde  $m$  é o número de arestas, pois cada aresta incidente ao ciclo é processada uma vez: os laços nas linhas 4–10 e 14–19 examinam cada aresta no máximo uma vez, e as operações de adição (linhas 11–12, 20–21) e remoção (linha 22) têm custo proporcional ao número de arestas afetadas.

#### Contração de ciclo

*Contraí o ciclo  $C$  em um supervértice `label`, redirecionando arcos incidentes e ajustando custos. Modifica  $D$  in-place e retorna dicionários para reexpansão.*

```

1 def contract_cycle(D: nx.DiGraph, C: nx.DiGraph, label: str):
2     cycle_nodes: set[str] = set(C.nodes())
3     in_to_cycle: dict[str, tuple[str, float]] = {}
4     for u in D.nodes:
5         if u not in cycle_nodes:
6             min_weight_edge_to_cycle = min(
7                 ((v, w) for _, v, w in D.out_edges(u, data="w") if v in
8                     cycle_nodes),
9                 key=lambda x: x[1],
10                default=None,)
11             if min_weight_edge_to_cycle:
12                 in_to_cycle[u] = min_weight_edge_to_cycle
13     for u, (v, w) in in_to_cycle.items():
14         D.add_edge(u, label, w=w)
15     out_from_cycle: dict[str, tuple[str, float]] = {}
16     for v in D.nodes:
17         if v not in cycle_nodes:

```

```
17         min_weight_edge_from_cycle = min(  
18             ((u, w) for u, _, w in D.in_edges(v, data="w") if u in  
                cycle_nodes), key=lambda x: x[1], default=None,  
19         if min_weight_edge_from_cycle:  
20             out_from_cycle[v] = min_weight_edge_from_cycle  
21     for v, (u, w) in out_from_cycle.items():  
22         D.add_edge(label, v, w=w)  
23     D.remove_nodes_from(cycle_nodes)  
24     return in_to_cycle, out_from_cycle
```

A Figura 8 ilustra o processo de contração de ciclo:

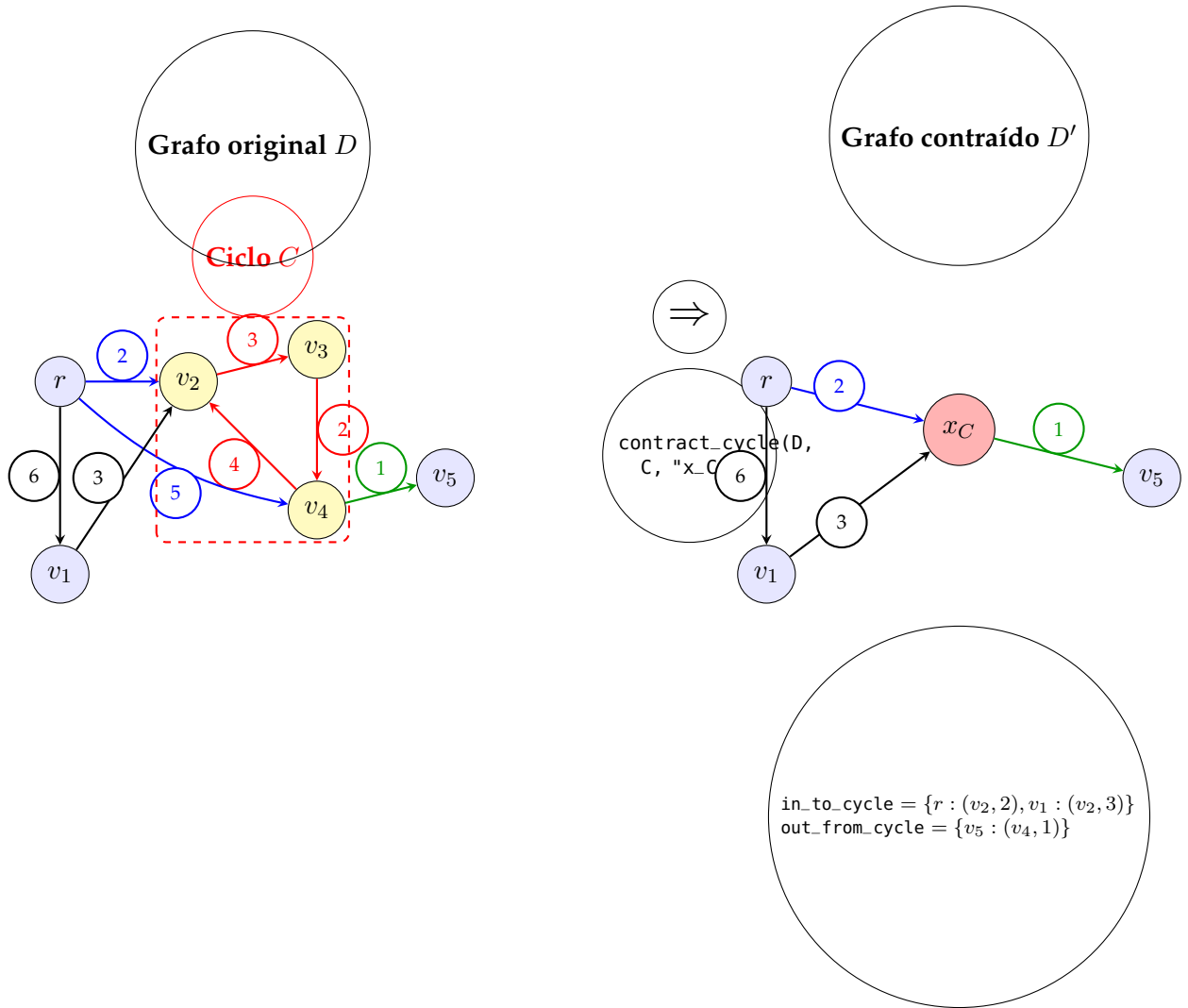


Figura 8 – Exemplo de contração de ciclo. À esquerda, grafo original  $D$  com ciclo  $C = \{v_2, v_3, v_4\}$  (em amarelo). Vértices externos  $r$ ,  $v_1$  e  $v_5$  têm arestas conectando ao ciclo:  $r$  envia aresta para  $v_2$  (peso 2) e  $v_4$  (peso 5);  $v_4$  envia aresta para  $v_5$  (peso 1). À direita, após a contração: o ciclo é substituído pelo supervértice  $x_C$  (vermelho). As arestas de entrada são redirecionadas:  $(r, x_C)$  recebe peso 2 (menor entre 2 e 5). A aresta de saída  $(x_C, v_5)$  mantém peso 1. Os dicionários `in_to_cycle` e `out_from_cycle` armazenam os mapeamentos originais para posterior reexpansão.

A função de detecção de ciclo e a de contração juntas implementam os passos 2 e 3 da descrição do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds:

#### Passos 2 e 3 do Algoritmo de Chu–Liu/Edmonds

**Passo 2:** Se  $(V, F^*)$  é acíclico, devolva  $F^*$ . Por (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.36), trata-se de uma  $r$ -arborescência de custo mínimo.

**Passo 3:** Caso contrário, seja  $C$  um ciclo dirigido de  $F^*$  (com  $r \notin C$ ). **Contração:**

contraia  $C$  em um supervértice  $x_C$  e defina custos  $c'$  por

$$\begin{aligned} c'(u, x_C) &:= c(u, w) - y(w) = c(u, w) - c(a_w) && \text{para } u \notin C, w \in C, \\ c'(x_C, v) &:= c(w, v) && \text{para } w \in C, v \notin C, \end{aligned}$$

descartando laços em  $x_C$  e permitindo paralelos. Denote o digrafo contraído por  $D' = (V', A')$ .

### 1.3.7 Remoção de arestas que entram na raiz:

Esta função remove todas as arestas que entram no vértice raiz  $r_0$ , garantindo que a raiz não tenha predecessores. A remoção é necessária porque, por definição, uma  $r$ -arborescência é uma arborescência enraizada em  $r_0$  onde todo vértice  $v \neq r_0$  deve ser alcançável a partir de  $r_0$ , mas a própria raiz não pode ter predecessores (grau de entrada zero). Se o grafo original contiver arestas entrando em  $r_0$ , essas arestas violariam a definição de arborescência enraizada e poderiam criar ciclos envolvendo a raiz, o que tornaria impossível obter uma estrutura válida. Além disso, a presença de arestas entrando na raiz interfere na normalização: ao tentar normalizar custos de entrada para  $r_0$ , criaríamos custos reduzidos artificiais que não fazem sentido no contexto do problema, já que nenhuma solução válida pode incluir tais arestas. Portanto, esta função atua como um passo de pré-processamento essencial que prepara o grafo para os passos subsequentes do algoritmo.

A escolha de implementar esta operação como uma função auxiliar separada (em vez de incluí-la apenas inline na função principal) segue princípios de design de software: (1) *modularidade*, encapsulando uma responsabilidade específica e bem definida (remover entradas na raiz) em uma unidade testável independente; (2) *reutilização*, permitindo que outras partes do código ou implementações alternativas possam chamar esta operação quando necessário sem duplicar lógica; (3) *clareza semântica*, dando um nome descritivo (`remove_edges_to_r0`) que documenta a intenção da operação no ponto de chamada, tornando a função principal mais legível ao abstrair detalhes de implementação; e (4) *facilidade de teste*, possibilitando escrever testes unitários focados exclusivamente nesta operação de pré-processamento, verificando casos extremos (como grafos onde a raiz já não tem predecessores ou onde todas as arestas entram na raiz) sem precisar testar toda a complexidade do algoritmo recursivo.

Em detalhes, ela recebe como entrada um digrafo  $D$  (objeto `nx.DiGraph`) e o rótulo  $r_0$  da raiz. A implementação armazena em uma lista todas as arestas que entram em  $r_0$  usando o método `in_edges` (linha 2). Se a lista não estiver vazia (linha 3), remove todas essas arestas usando o método `remove_edges_from` (linha 4). Este método da biblioteca NetworkX recebe como parâmetro uma lista de tuplas representando arestas na forma

$(u, v)$  e remove cada uma delas do grafo. A operação é realizada em lote: `NetworkX` itera sobre a lista fornecida e, para cada tupla  $(u, v)$ , remove a aresta correspondente da estrutura interna de adjacência. Se alguma aresta especificada não existir no grafo, ela é silenciosamente ignorada sem gerar erro. A complexidade de `remove_edges_from` é  $O(k)$ , onde  $k$  é o número de arestas na lista de entrada, pois cada remoção individual tem custo  $O(1)$  em média devido ao uso de dicionários aninhados para armazenar arestas.

Por fim, a função retorna o grafo  $D$  atualizado in-place com todas as arestas de entrada em `r0` são removidas (linha 5). A complexidade total da função é  $O(\deg^-(r_0))$ , pois a operação coleta e remove cada aresta de entrada uma única vez.

#### Remoção de arestas que entram na raiz

*Remove todas as arestas que entram na raiz  $r_0$ , modificando  $D$  in-place e retornando o grafo atualizado.*

```
1 def remove_edges_to_r0(D: nx.DiGraph, r0: str):
2     in_edges = list(D.in_edges(r0))
3     if in_edges:
4         D.remove_edges_from(in_edges)
5     return D
```

### 1.3.8 Remoção de arco interno:

Esta função é invocada durante a fase de reexpansão do ciclo contraído, após a chamada recursiva retornar com a arborescência ótima  $T'$  do grafo contraído. Quando o supervértice  $x_C$  é expandido de volta para o ciclo original  $C$ , uma aresta externa  $(u, v)$  é adicionada conectando um vértice externo  $u$  a um vértice  $v$  dentro do ciclo. Como o ciclo  $C$  originalmente continha exatamente uma aresta entrando em cada um de seus vértices (formando um ciclo fechado), e agora  $v$  recebe uma aresta adicional vinda do exterior, esse vértice teria grau de entrada 2, violando a propriedade fundamental de arborescência (cada vértice não-raiz deve ter exatamente uma entrada). Para restaurar essa propriedade, a função remove a aresta interna que anteriormente entrava em  $v$ , mantendo apenas a nova aresta externa. Essa remoção "quebra" o ciclo no ponto de entrada, transformando-o em um caminho que se integra corretamente à estrutura de árvore.

A função recebe como entrada o subgrafo do ciclo  $C$  (objeto `nx.DiGraph`) e o vértice de entrada  $v$ . A implementação utiliza uma compreensão de gerador combinada com `next` para encontrar o predecessor de  $v$  dentro do ciclo (linha 2): a expressão `(u for u, _ in C.in_edges(v))` itera sobre as arestas de entrada de  $v$ , extraíndo apenas o



vértice origem  $u$  (ignorando metadados com  $_$ ), e `next` retorna o primeiro (e teoricamente único) predecessor. Em seguida, remove a aresta (`predecessor`,  $v$ ) do ciclo usando o método `remove_edge` (linha 3).

A função modifica o subgrafo  $C$  in-place e não retorna valor. A complexidade é  $O(\deg^-(v))$ , dominada pela operação de busca das arestas de entrada, embora em ciclos simples isso seja tipicamente  $O(1)$  pois cada vértice tem exatamente um predecessor.

#### Remover arco interno na reexpansão

*Remove a aresta interna que entra no vértice de entrada  $v$  do ciclo  $C$  durante a reexpansão, pois  $v$  passa a receber uma aresta externa, e manter ambas violaria a propriedade de arborescência.*

```
1 def remove_internal_edge_to_cycle_entry(C: nx.DiGraph, v):
2     predecessor = next((u for u, _ in C.in_edges(v)), None)
3     C.remove_edge(predecessor, v)
```

A Figura 9 ilustra o objetivo da função:

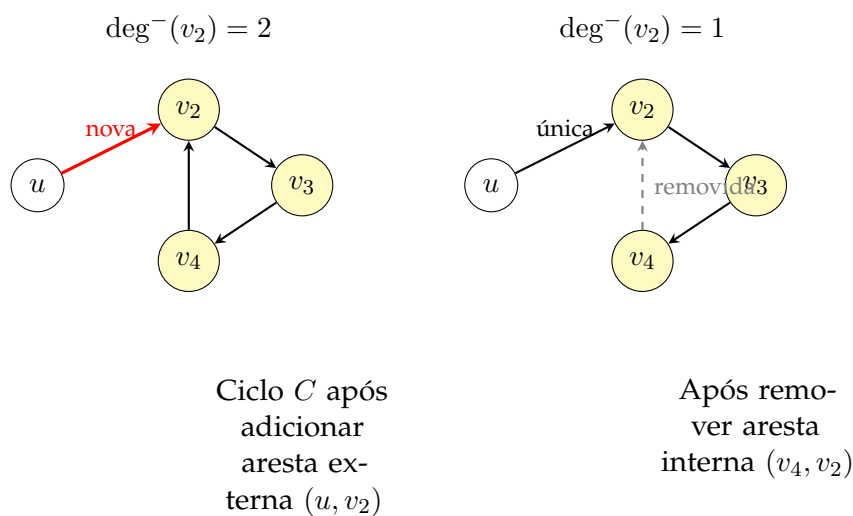


Figura 9 – Remoção de aresta interna durante reexpansão. À esquerda, ciclo  $C = \{v_2, v_3, v_4\}$  após adicionar aresta externa  $(u, v_2)$  vindoura da arborescência  $T'$ : o vértice  $v_2$  tem grau de entrada 2 (aresta externa vermelha de  $u$  e aresta interna do ciclo vinda de  $v_4$ ), violando a propriedade de arborescência. À direita, após remover a aresta interna  $(v_4, v_2)$ : o vértice  $v_2$  passa a ter grau de entrada 1, o ciclo é "quebrado" no ponto de entrada, transformando-se em um caminho que se integra corretamente à estrutura de árvore. A aresta removida é mostrada tracejada em cinza.

### 1.3.9 Procedimento principal (recursivo):

Esta função implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds de forma recursiva, orquestrando todas as fases do método descritas anteriormente. A implementação segue diretamente os três passos da descrição teórica apresentada nas caixas verdes anteriores.

Recebe como entrada um digrafo ponderado  $D$  (objeto `nx.DiGraph`), o vértice raiz  $r_0$ , e um parâmetro `level` (padrão 0) usado para rotular supervértices em níveis recursivos distintos. A estrutura da implementação espelha a formulação teórica:

#### Passo 1: Normalização e construção de $F^*$

**Descrição teórica:** Para cada  $v \neq r$ , escolha  $a_v \in \arg \min_{(u,v) \in A} c(u, v)$ . Defina  $y(v) := c(a_v)$  e  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$ .

**Implementação (linhas 2–6):** Primeiro, cria uma cópia do grafo original `D_copy` (linha 2) para preservar os pesos originais. Em seguida, normaliza os custos de todas as arestas que entram em cada vértice  $v \neq r_0$  (linhas 3–5): para cada vértice, chama `normalize_incoming_edge_weights`, que implementa a definição de potencial  $y(v) := c(a_v)$  onde  $a_v \in \arg \min_{(u,v) \in A} c(u, v)$ , subtraindo este valor mínimo de cada aresta de entrada para criar custos reduzidos  $c'(u, v) = c(u, v) - y(v)$ . Após a normalização, constrói o grafo funcional  $F^*$  (linha 6) chamando `get_Fstar`, que implementa exatamente  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$ , selecionando uma aresta de custo reduzido zero entrando em cada vértice não-raiz.

#### Passo 2: Verificação de aciclicidade

**Descrição teórica:** Se  $(V, F^*)$  é acíclico, devolva  $F^*$ . Por Observação 4.36 de (KLEINBERG; TARDOS, 2006), trata-se de uma  $r$ -arborescência de custo mínimo.

**Implementação (linhas 7–10):** Verifica se  $F^*$  é uma arborescência válida usando `nx.is_arborescence` (linha 7), que testa se o grafo é conexo, acíclico e possui exatamente uma entrada por vértice (exceto a raiz). Se  $F^*$  for uma arborescência, o algoritmo alcançou o caso base. A implementação restaura os pesos originais de  $D$  para cada aresta de  $F^*$  (linhas 8–9) e retorna  $F^*$  como a  $r$ -arborescência de custo mínimo (linha 10), que pela Observação 4.36 de Kleinberg garante otimalidade.

#### Passo 3: Contração, recursão e reexpansão

**Descrição teórica:** Caso contrário, seja  $C$  um ciclo dirigido de  $F^*$  (com  $r \notin C$ ). Contração: contraia  $C$  em um supervértice  $x_C$  e defina custos  $c'$  por

$$\begin{aligned} c'(u, x_C) &:= c(u, w) - y(w) = c(u, w) - c(a_w) && \text{para } u \notin C, w \in C, \\ c'(x_C, v) &:= c(w, v) && \text{para } w \in C, v \notin C, \end{aligned}$$

descartando laços em  $x_C$  e permitindo paralelos. Denote o digrafo contraído por  $D' = (V', A')$ . Resolva recursivamente em  $D'$  e expanda o resultado.

**Implementação (linhas 11–30):** Caso  $F^*$  contenha um ciclo, entra no caso recursivo (linha 11). Detecta um ciclo  $C$  chamando `find_cycle` (linha 12), correspondendo a "*seja  $C$  um ciclo dirigido de  $F^*$* ". Cria um rótulo único `contracted_label` para o supervértice  $x_C$  usando o nível de recursão (linha 13), e contrai o ciclo chamando `contract_cycle` (linhas 14–15), que implementa a operação "*contraia  $C$  em um supervértice  $x_C$* " e os ajustes de custos reduzidos especificados nas fórmulas  $c'(u, x_C) := c(u, w) - y(w)$  e  $c'(x_C, v) := c(w, v)$ . A função modifica `D_copy` in-place criando o digrafo contraído  $D' = (V', A')$  e retorna os dicionários `in_to_cycle` e `out_from_cycle` que armazenam os mapeamentos necessários para a reexpansão. Chama-se recursivamente (linha 16) no grafo contraído com `level+1`, obtendo a arborescência ótima  $F'$  da instância reduzida  $D'$ .

**Reexpansão:** Na fase de reexpansão, a implementação desfaz a substituição do supervértice pelo ciclo original. Identifica a aresta externa que entra no supervértice em  $F'$  (linha 17), extrai o vértice externo  $u$  dessa aresta (linha 18), consulta `in_to_cycle[u]` para determinar o vértice  $v$  dentro do ciclo original que deve receber essa conexão (linha 19), implementando o mapeamento inverso da contração. Remove a aresta interna que entrava em  $v$  chamando `remove_internal_edge_to_cycle_entry` (linha 20), "quebrando" o ciclo  $C$  no ponto de entrada  $v$  e garantindo que cada vértice mantenha exatamente uma entrada (propriedade fundamental de arborescência). Adiciona a aresta externa  $(u, v)$  a  $F'$  (linha 21), reintegra todas as arestas restantes do ciclo  $C$  (linhas 22–23), processa as arestas de saída do supervértice consultando `out_from_cycle` (linhas 24–26), e remove o supervértice `contracted_label` de  $F'$  (linha 27), completando a substituição de  $x_C$  pelo ciclo modificado. Por fim, restaura os pesos originais de  $D$  para todas as arestas de  $F'$  (linhas 28–29), desfazendo os custos reduzidos e retornando aos custos do problema original, e retorna  $F'$  como a  $r$ -arborescência de custo mínimo (linha 30).

A função retorna um digrafo contendo exatamente  $|V| - 1$  arestas onde cada vértice  $v \neq r_0$  tem grau de entrada 1, todos os vértices são alcançáveis a partir de  $r_0$ , e o custo total é mínimo. O grafo original  $D$  não é modificado devido à cópia na linha 2. A complexidade é  $O(mn)$  no pior caso, onde cada nível de recursão (até  $O(n)$  níveis) processa  $O(m)$  arestas durante normalização, detecção de ciclos e contração/expansão.

Essa correspondência direta entre implementação e teoria, agora destacada nas caixas verdes acima, demonstra como os três passos abstratos do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds se traduzem em operações concretas: o Passo 1 se manifesta na

normalização e construção de  $F^*$  (linhas 2–6), o Passo 2 na verificação de aciclicidade e retorno (linhas 7–10), e o Passo 3 na contração, recursão e reexpansão (linhas 11–30). A estratégia primal do método — induzir custos reduzidos zero, extrair estrutura funcional, e resolver ciclos por contração/expansão — emerge naturalmente dessa correspondência entre formulação teórica e código.

#### Procedimento principal (recursivo)

*Implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds de forma recursiva para encontrar a  $r$ -arborescência de custo mínimo em um digrafo ponderado  $D$  com raiz  $r_0$ . Normaliza custos, constrói  $F^*$ , detecta ciclos e, se houver, contrai em supervértice, resolve recursivamente no grafo reduzido e reexpande, restaurando a arborescência ótima no grafo original. Retorna um `nx.DiGraph` contendo exatamente  $|V| - 1$  arestas com grau de entrada 1 para cada vértice exceto a raiz.*

```

1 def find_optimum_arborescence_chuliu(D: nx.DiGraph, r0: str, level=0,):
2     D_copy = D.copy()
3     for v in D_copy.nodes:
4         if v != r0:
5             normalize_incoming_edge_weights(D_copy, v)
6     F_star = get_Fstar(D_copy, r0)
7     if nx.is_arborescence(F_star):
8         for u, v in F_star.edges:
9             F_star[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
10    return F_star
11    else:
12        C: nx.DiGraph = find_cycle(F_star)
13        contracted_label = f"\n n*{level}"
14        in_to_cycle, out_from_cycle = contract_cycle(
15            D_copy, C, contracted_label)
16        F_prime = find_optimum_arborescence_chuliu(D_copy, r0, level + 1)
17        in_edge = next(iter(F_prime.in_edges(contracted_label, data="w")),
18                          None)
19        u, _, _ = in_edge
20        v, _ = in_to_cycle[u]
21        remove_internal_edge_to_cycle_entry(C, v)
22        F_prime.add_edge(u, v)
23        for u_c, v_c in C.edges:
24            F_prime.add_edge(u_c, v_c)
25        for _, z, _ in F_prime.out_edges(contracted_label, data=True):
26            u_cycle, _ = out_from_cycle[z]

```

```
26         F_prime.add_edge(u_cycle, z)
27     F_prime.remove_node(contracted_label)
28     for u, v in F_prime.edges:
29         F_prime[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
30     return F_prime
```

### 1.3.9.1 Notas finais sobre a implementação

A implementação acima segue diretamente a descrição do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds, enfatizando clareza e correção. Para aplicações práticas, otimizações podem ser introduzidas, como estruturas de dados eficientes para seleção de mínimos, detecção rápida de ciclos e manipulação de grafos dinâmicos. Além disso, a função pode ser adaptada para lidar com casos especiais, como grafos desconexos ou múltiplas raízes, conforme necessário.

A complexidade da implementação direta é  $O(mn)$  no pior caso, onde  $m$  é o número de arestas e  $n$  o número de vértices, devido à potencial profundidade de recursão e ao processamento linear em cada nível. Implementações mais sofisticadas podem reduzir isso para  $O(m \log n)$  usando estruturas avançadas, como heaps e union-find, mas a versão apresentada prioriza a compreensão do algoritmo fundamental.

SAMIRA

### 1.3.9.2 Decisões de projeto e implicações práticas

Antes de prosseguir para uma visão alternativa do mesmo problema, vale destacar algumas decisões de projeto e implicações práticas da implementação de Chu–Liu/Edmonds:

- **Estruturas e efeitos colaterais:** Optamos por modificar grafos *in-place* (por exemplo, durante a normalização e a contração de ciclos) para reduzir alocações e facilitar a visualização incremental. Isso exige invariantes explícitos e cuidado com referências ativas ao grafo original.
- **Empates, paralelos e laços:** Empates são resolvidos de forma determinística/local sem afetar a otimalidade. A contração pode induzir *arcos paralelos*; preservamos apenas o de menor custo. Laços (self-loops) são descartados por construção.
- **Validação e testes:** O repositório inclui artefatos úteis para experimentação (por exemplo, `tests.py`, `test_results.csv`, `test_log.txt`). Onde um volume de grafos é gerado aleatoriamente, a função é executada e os resultados são validados são comparados com soluções de força bruta.

- **Integração com visualização e logs:** A função `draw_fn` permite registrar *snapshots* (normalização, formação de  $F^*$ , contração/expansão). O log facilita auditoria e depuração em execuções recursivas.
- **Extensões:** Variantes com múltiplas raízes, restrições adicionais (p.ex., proibições por partição) e empacotamento de arborescências exigem ajustes na fase de extração/expansão ou formulações via matroides.

### 1.3.9.3 Transição para a abordagem primal-dual

Embora o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds seja elegante e eficiente, sua mecânica operacional — normalizar custos, selecionar mínimos, contrair ciclos — pode parecer um conjunto de heurísticas bem-sucedidas sem uma justificativa teórica unificadora aparente. Por que escolher a melhor entrada para cada vértice garante otimalidade global após o tratamento de ciclos? A resposta reside na *dualidade em programação linear*.

No capítulo seguinte, revisitaremos o mesmo problema sob uma ótica primal–dual em duas fases, proposta por András Frank. Essa perspectiva organiza a normalização via potenciais<sup>2</sup>  $y(\cdot)$ , explica os custos reduzidos e introduz a noção de cortes apertados (família laminar) como guias das contrações. Veremos como a mesma mecânica operacional (normalizar  $\rightarrow$  contrair  $\rightarrow$  expandir) emerge de condições duais que também sugerem otimizações e generalizações.

<sup>2</sup> No contexto primal–dual, “potenciais” são valores escalares  $y(v)$  atribuídos aos vértices para definir custos reduzidos  $c'(u, v) = c(u, v) - y(v)$ . Ajustar  $y$  desloca uniformemente os custos das arestas que entram em  $v$ , sem mudar a otimalidade global: preserva a ordem relativa entre entradas e torna “apertadas” (custo reduzido zero) as candidatas corretas, habilitando contrações e uma prova de corretude via cortes apertados.

# Referências

KLEINBERG, J.; TARDOS, É. *Algorithm Design*. [S.l.]: Addison-Wesley, 2006. Citado 5 vezes nas páginas [12](#), [13](#), [16](#), [29](#) e [33](#).

SCHRIJVER, A. *Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency*. [S.l.]: Springer, 2003. Citado 4 vezes nas páginas [12](#), [13](#), [16](#) e [20](#).

# Anexos



# ANEXO A – Anexo A

Conteúdo do anexo A.