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

#### 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



## Agradecimentos

Agradecimentos (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 $a \to b \to c \to a$ . Os arcos tracejados partindo de $r$ existem, mas são mais caros e por isso não são escolhidos pelo critério local	11
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 $w$	12
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	13
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).	13
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	
Figura 6 –	para $F^*$	20
Figura 7 –	(como $\{v_1, v_2\}$ ) que serão tratados nas etapas subsequentes 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	22
	apenas os três vértices e as três arestas que formam o ciclo	24

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	28
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	31
Figura 10 –	Grafo direcionado ponderado inicial com raiz no vértice 0. O grafo	
	contém 9 vértices e múltiplas arestas com pesos variados. O primeiro	
	passo do algoritmo seria remover arestas que entram na raiz, porém	
	não há nenhuma neste caso, logo não existe necessidade de alterar o	27
E' 11	grafo.	37
Figura 11 –	Normalização parcial das arestas de entrada para o vértice 1. As	
	arestas de entrada são $(0 \to 1)$ com peso original 3 e $(2 \to 1)$ com peso original 1. Elegendo a aresta $(2 \to 1)$ como a de menor peso (peso	
	mínimo = 1), subtraímos este valor de todas as arestas de entrada:	
	$(0 \rightarrow 1)$ passa de peso 3 para 2, e $(2 \rightarrow 1)$ passa de peso 1 para 0	
	(destacadas em vermelho). Esse processo é repetido para todos os	
	demais vértices	37
Figura 12 –	Grafo contraído após detecção do ciclo $C = \{1, 2\}$ em $F^*$ . O ciclo foi	0,
	contraído no supervértice $n*0$ (destacado em vermelho). As arestas que	
	entravam ou saíam do ciclo foram redirecionadas para o supervértice,	
	com custos ajustados segundo as fórmulas $c'(u, x_C) := c(u, w) - y(w)$	
	para arestas de entrada e $c'(x_C,v) := c(w,v)$ para arestas de saída	38
	<del>-</del>	

38
39

## Sumário

1	ALGORITMO DE CHU-LIU/EDMONDS	11
1.1	O problema dos ciclos e a solução por contração	11
1.1.1	Supervértices e contração de ciclos	12
1.2	Descrição do algoritmo	12
1.2.1	Corretude	14
1.2.2	Complexidade	15
1.3	Implementação em Python	15
1.3.1	Representação de Digrafos: NetworkX	16
1.3.1.1	Estrutura Interna	16
1.3.1.2	Operações Fundamentais	16
1.3.1.3	Busca em Profundidade (DFS)	17
1.3.1.3.1	Funcionamento básico:	17
1.3.1.3.2	Detecção de ciclos em digrafos:	17
1.3.1.3.3	Complexidade:	17
1.3.1.3.4	Implementação em NetworkX:	18
1.3.2	Especificação do Algoritmo	18
1.3.3	Normalização por vértice	19
1.3.4	Construção de $F^*$ :	20
1.3.5	Detecção de ciclo:	23
1.3.6	Contração de ciclo:	24
1.3.7	Remoção de arestas que entram na raiz:	29
1.3.8	Remoção de arco interno:	30
1.3.9	Procedimento principal (recursivo):	32
1.3.9.1	Exemplo de execução do algoritmo	37
1.3.10	Transição para a abordagem primal-dual	39
	REFERÊNCIAS	40
	ANEXOS	41
	ANEXO A - ANEXO A	42

## 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  $a \to b \to c \to a$ . 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  $a \to b \to c \to a$ . 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  $a_b=(a\to b)$  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  ${\cal C}$ . Como os arcos internos de  ${\cal C}$  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).

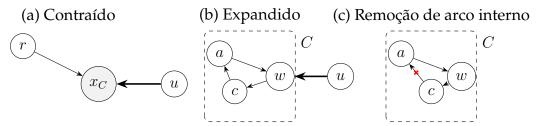


Figura 4 – Reexpansão de C: no grafo contraído seleciona-se um arco que entra em  $x_C$ ; ao expandir,  $x_C$  é substituído por C e o arco selecionado entra em algum  $w \in C$ ; remove-se exatamente um arco interno de C para eliminar o ciclo, preservando conectividade e custo total (arcos internos 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  $c:A\to\mathbb{R}_{>0}$ , raiz r.

- 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

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

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).

#### 1.2.1 Corretude

A corretude do algoritmo de Chu-Liu/Edmonds baseia-se em três pilares principais:

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  $\sum c'$ 

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

(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.

#### 1.2.2 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 (<a href="https://github.com/lorenypsum/GraphVisualizer">https://github.com/lorenypsum/GraphVisualizer</a>).

#### 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. Di Graph 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.

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

- 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  $c:A\to\mathbb{R}$  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) ≥ 0 para todo a ∈ 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 yv através de uma compreensão de gerador que extrai o terceiro elemento de cada tupla (linha 5) e, para cada predecessor u, subtrai yv 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

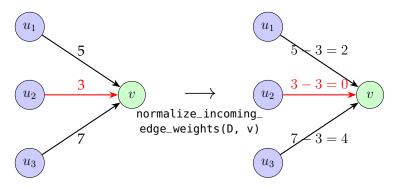


Figura 5 – Exemplo de normalização de custos reduzidos. À esquerda, vértice v com três arestas de entrada (pesos 5, 3 e 7). À direita, após aplicar normalize\_incoming\_edge\_weights(D, v): o menor peso y(v)=3 é subtraído de todas as entradas, resultando em custos reduzidos 2, 0 e 4. A aresta  $(u_2,v)$  (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 r0 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 r0 (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.

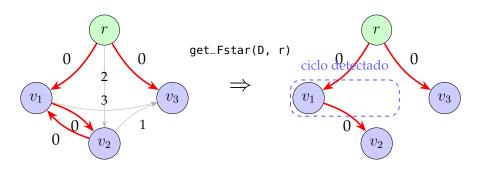
Retorna o digrafo F\_star contendo exatamente uma aresta entrando em cada  $v \neq r_0$ , todas com custo reduzido zero. O grafo original D não é modificado, preservando o estado para operações futuras. A complexidade é O(m), onde m é o número de arestas, pois cada aresta é considerada no máximo uma 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 star

Constrói o subdigrafo  $F^*$  a partir do digrafo D, selecionando para cada vértice (exceto a raiz r0) 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
0
                   F_star.add_edge(u, v, w=0)
1
      return F_star
```

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



#### Digrafo D (normalizado)

Subgrafo  $F^*$ 

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  $F_s$ tar 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.

A Figura 7 ilustra o processo de detecção de ciclo:

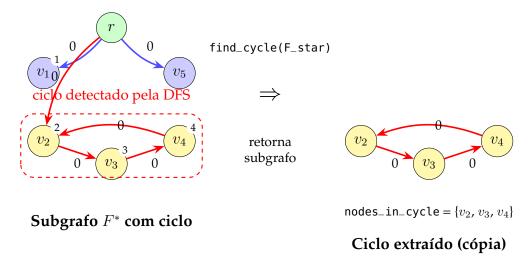


Figura 7 – Exemplo de detecção de ciclo em  $F^*$ . À esquerda, o subgrafo  $F^*$  contém um ciclo formado pelos vértices  $\{v_2,v_3,v_4\}$  (destacados em amarelo). A DFS percorre o grafo e detecta o ciclo ao encontrar a aresta  $(v_4,v_2)$ , onde  $v_2$  já está na pilha de recursão. À direita, a 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

Contrai 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
                      cycle_nodes),
                  key=lambda x: x[1],
8
9
                  default=None,)
0
              if min_weight_edge_to_cycle:
                  in_to_cycle[u] = min_weight_edge_to_cycle
1
2
      for u, (v, w) in in_to_cycle.items():
3
          D.add_edge(u, label, w=w)
4
      out_from_cycle: dict[str, tuple[str, float]] = {}
5
      for v in D.nodes:
6
          if v not in cycle_nodes:
```

A Figura 8 ilustra o processo de contração de ciclo:

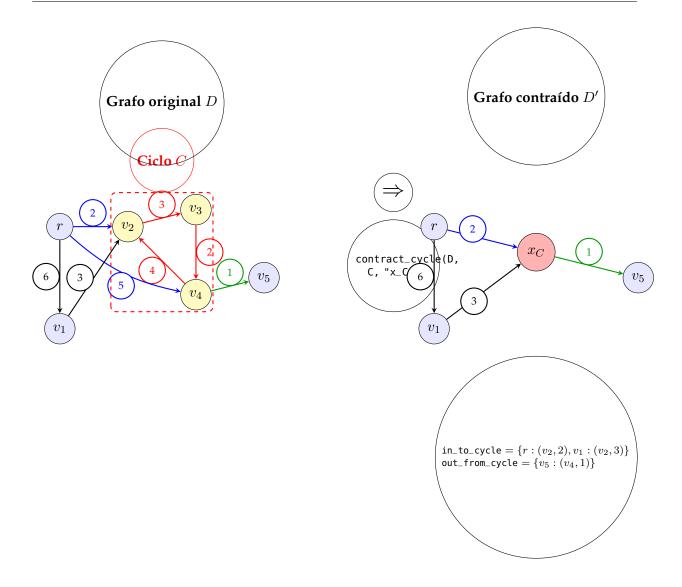


Figura 8 – Exemplo de contração de ciclo. À esquerda, grafo original D com ciclo  $C = \{v_2, v_3, v_4\}$  (em amarelo). Vértices externos r,  $v_1$  e  $v_5$  têm arestas conectando ao ciclo: r envia aresta para  $v_2$  (peso 2) e  $v_4$  (peso 5);  $v_4$  envia aresta para  $v_5$  (peso 1). À direita, 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 deteção 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

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

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 r0 da raiz. A implementação armazena em uma lista todas as arestas que entram em r0 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 r0, 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 v0, 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 v0, 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, extraindo 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:

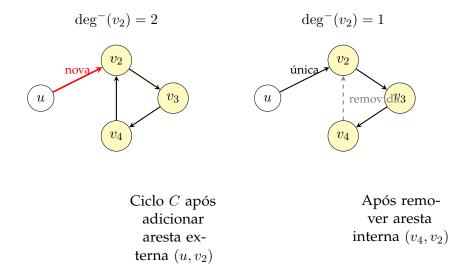


Figura 9 – Remoção de aresta interna durante reexpansão. À esquerda, ciclo  $C=\{v_2,v_3,v_4\}$  após adicionar aresta externa  $(u,v_2)$  vindoura da arborescência T': o vértice  $v_2$  tem grau de entrada 2 (aresta externa vermelha de u e aresta interna do ciclo vinda de  $v_4$ ), violando a propriedade 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. Recebe como entrada um digrafo ponderado D (objeto nx.DiGraph), o vértice raiz r0, e um parâmetro level (padrão 0) usado para rotular supervértices em níveis recursivos distintos. A implementação segue diretamente os cinco passos da descrição teórica, cada um apresentado a seguir com sua correspondência código-teoria:

#### Passo 1: Cópia do grafo original

**Descrição teórica:** Antes de iniciar o algoritmo, preserve o grafo original D=(V,A) com sua função de custo  $c:A\to\mathbb{R}$ , pois as transformações subsequentes modificarão custos in-place.

**Implementação (linha 2):** Cria uma cópia do grafo original D\_copy = D.copy() para preservar os pesos originais.

*Justificativa:* A cópia é essencial porque os passos de normalização e contração modificam os pesos das arestas in-place. Sem preservar os valores originais, seria impossível restaurar os custos corretos na arborescência final (passo 5), violando a correção do algoritmo. A biblioteca NetworkX cria uma cópia profunda da estrutura do grafo, incluindo todos os atributos de arestas e vértices, com complexidade O(m+n).

#### Passo 2: 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 o potencial dual  $y(v) := c(a_v)$  e construa  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$  contendo exatamente uma aresta de entrada por vértice não-raiz.

Implementação (linhas 3–6): Normaliza os custos de todas as arestas que entram em cada vértice  $v \neq r_0$  (linhas 3–5): para cada vértice, itera sobre todos os vértices do grafo, excluindo a raiz, e chama normalize\_incoming\_edge\_weights (D\_copy, v), que implementa a definição de potencial  $y(v) := c(a_v)$  onde  $a_v \in \arg\min_{(u,v)\in A} c(u,v)$ . A função subtrai y(v) de cada aresta de entrada (u,v), criando custos reduzidos c'(u,v) = c(u,v) - y(v). Após a normalização completa, constrói o grafo funcional  $F^*$  (linha 6) chamando get\_Fstar(D\_copy, r0), que implementa exatamente  $F^* := \{a_v : v \neq r\}$ , selecionando uma aresta de custo reduzido zero entrando em cada vértice não-raiz.

*Justificativa*: A normalização garante que cada vértice tenha pelo menos uma entrada de custo zero, propriedade fundamental que permite construir  $F^*$  selecionando arestas de custo reduzido zero sem perder otimalidade (pela teoria de dualidade e

complementaridade primal-dual). Selecionar apenas arestas de custo reduzido zero (ao invés de simplesmente o mínimo) é crucial porque garante que a solução seja ótima em relação aos custos normalizados, e a normalização preserva a estrutura de otimalidade do problema original.

#### Passo 3: Verificação de aciclicidade (caso base)

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

Implementação (linhas 7–10): Verifica se  $F^*$  é uma arborescência válida usando nx.is\_arborescence (F\_star) (linha 7), que testa se o grafo é conexo, acíclico e possui exatamente uma entrada por vértice (exceto a raiz). Se a verificação retorna True, o algoritmo alcançou o caso base da recursão. A implementação restaura os pesos originais de D para cada aresta de  $F^*$  (linhas 8–9): itera sobre todas as arestas (u, v) em F\_star.edges e copia o atributo de peso 'weight' do grafo original D para a aresta correspondente em F\_star. Retorna F\_star como a r-arborescência de custo mínimo (linha 10).

Justificativa: O uso de nx.is\_arbores cence (ao invés de apenas verificar aciclicidade com nx.is\_directed\_acyclic\_graph) garante não apenas ausência de ciclos, mas também conectividade e grau de entrada correto ( $\deg^-(v)=1$  para todo  $v\neq r$ ), todas propriedades necessárias para certificar que  $F^*$  é uma r-arborescência válida. A restauração dos pesos originais é obrigatória porque o algoritmo trabalha com custos reduzidos internamente, mas deve retornar uma solução expressa nos custos do problema original; a Observação 4.36 de Kleinberg garante que a estrutura ótima encontrada com custos reduzidos corresponde à solução ótima nos custos originais.

#### Passo 4: Contração e resolução recursiva (caso recursivo)

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

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

descartando laços em  $x_C$  e permitindo arestas paralelas. Denote o digrafo contraído por D' = (V', A'). Resolva recursivamente em D' obtendo arborescência ótima F'.

Implementação (linhas 11–16): Caso  $F^*$  contenha um ciclo, entra no caso recursivo (linha 11: else). Detecta um ciclo C chamando  $C = find\_cycle(F\_star)$  (linha 12), que utiliza nx. find\\_cycle para encontrar um ciclo dirigido em  $F^*$ . Cria um rótulo único contracted\_label = f"contracted\_{level}" para o supervértice  $x_C$  usando o nível de recursão (linha 13), e contrai o ciclo chamando in\_to\_cycle, out\_from\_cycle = contract\_cycle(D\_copy, C, contracted\_label) (linhas 14–15). Esta função implementa a operação "contraia C em  $x_C$ "e os ajustes de custos especificados nas fórmulas acima: para cada aresta externa entrando no ciclo, calcula  $c'(u,x_C):=c(u,w)-y(w)$ ; para arestas saindo, define  $c'(x_C,v):=c(w,v)$ . 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) com F\_prime = find\_optimum\_arborescence\_chuliu(D\_copy, r0, level+1), obtendo a arborescência ótima F' da instância reduzida D'.

Justificativa: O rótulo baseado em level garante que supervértices em diferentes níveis de recursão tenham identificadores únicos, evitando colisões de nomes. A contração reduz o problema a uma instância menor preservando a estrutura de otimalidade (provado pela teoria de dualidade e potenciais), permitindo resolver recursivamente. A modificação in-place (ao invés de criar nova cópia) reduz significativamente o uso de memória em grafos grandes ou com múltiplos níveis recursivos. Os dicionários são essenciais para a reexpansão correta, pois armazenam qual vértice do ciclo original deve receber cada conexão externa identificada pela solução recursiva.

#### Passo 5: Reexpansão do ciclo contraído

**Descrição teórica:** Dada a arborescência ótima F' em D', expanda  $x_C$  de volta para o ciclo original C. Se  $(u,x_C) \in F'$ , adicione (u,v) onde v é o vértice do ciclo original mapeado por u, remova a aresta interna que entrava em v para manter  $\deg^-(v)=1$ , e reintegre as demais arestas de C e suas saídas. Restaure custos originais e devolva a arborescência final.

Implementação (linhas 17–30): Na fase de reexpansão, a implementação desfaz a substituição do supervértice pelo ciclo original. Identifica a aresta externa que entra no supervértice em F': external\_edge = list(F\_prime.in\_edges(contracted\_label))[0] (linha 17). Extrai o vértice externo u, \_ = external\_edge dessa aresta (linha 18). Consulta v = in\_to\_cycle[u] para determinar o vértice v dentro do ciclo original que deve receber essa conexão (linha 19), implementando o mapeamento in-

verso da contração. Remove a aresta interna que entrava em v chamando remove\_internal\_edge\_to\_cycle\_entry(C, v) (linha 20), "quebrando" o ciclo C no ponto de entrada v e garantindo que cada vértice mantenha exatamente uma entrada. Adiciona a aresta externa F\_prime.add\_edge(u, v) a F' (linha 21). Reintegra todas as arestas restantes do ciclo C usando F\_prime.add\_edges\_from(C.edges) (linhas 22–23). Processa as arestas de saída do supervértice (linhas 24–26): para cada aresta (contracted\_label, w) em F', consulta o vértice origem real v\_out = out\_from\_cycle[w] e adiciona F\_prime.add\_edge(v\_out, w). Remove o supervértice F\_prime.remove\_node(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): itera sobre F\_prime.edges e copia os atributos 'weight' do grafo original, desfazendo os custos reduzidos. Retorna F\_prime como a r-arborescência de custo mínimo (linha 30).

*Justificativa:* A remoção da aresta interna é obrigatória porque o vértice v recebe uma nova entrada vinda do exterior; manter ambas violaria a propriedade de arborescência ( $\deg^-(v)=1$  para todo  $v\neq r$ ). A escolha de qual aresta remover é determinada univocamente pela solução recursiva em D': a aresta externa escolhida em F' determina o ponto de entrada no ciclo, e a aresta interna correspondente deve ser removida. A reintegração do ciclo (menos uma aresta) combina a solução recursiva no grafo contraído com a estrutura cíclica original, preservando otimalidade: o ciclo reduzido contribui com |C|-1 arestas, e a aresta externa estabelece a conexão correta com o resto da arborescência. Como no caso base (Passo 3), a restauração é necessária para que a solução retornada reflita os custos originais do problema, não os custos reduzidos usados internamente pelo algoritmo.

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 no Passo 1 (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 decomposição em cinco passos explícitos demonstra como o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds se traduz em operações concretas: o Passo 1 preserva o grafo original (linha 2), o Passo 2 normaliza e constrói  $F^*$  (linhas 3–6), o Passo 3 verifica aciclicidade e retorna no caso base (linhas 7–10), o Passo 4 contrai e resolve recursivamente (linhas 11–16), e o Passo 5 reexpande e restaura custos (linhas 17–30). 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, com cada escolha de implementação fundamentada em necessidades de correção, eficiência ou clareza algorítmica.

#### Procedimento principal (recursivo)

Implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds de forma recursiva para encontrar a rarborescência de custo mínimo em um digrafo ponderado  $\mathbf D$  com raiz  $\mathbf r\mathbf 0$ . 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  $\mathbf n \mathbf x$ .  $\mathbf D$ i $\mathbf G$ raph contendo exatamente |V|-1 arestas com grau de entrada  $\mathbf 1$  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"]
0
           return F_star
1
      else:
2
           C: nx.DiGraph = find_cycle(F_star)
3
           contracted_label = f"\n n*{level}"
4
           in_to_cycle, out_from_cycle = contract_cycle(
5
           D_copy, C, contracted_label)
6
           F_prime = find_optimum_arborescence_chuliu(D_copy,r0,level + 1)
           in_edge = next(iter(F_prime.in_edges(contracted_label, data="w")),
              None)
8
           u, _, _ = in_edge
           v, _ = in_to_cycle[u]
           remove_internal_edge_to_cycle_entry(C, v)
           F_prime.add_edge(u, v)
           for u_c, v_c in C.edges:
               F_prime.add_edge(u_c, v_c)
           for _, z, _ in F_prime.out_edges(contracted_label, data=True):
               u_cycle, _ = out_from_cycle[z]
               F_prime.add_edge(u_cycle, z)
           F_prime.remove_node(contracted_label)
           for u, v in F_prime.edges:
               F_{prime}[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
30
           return F_prime
```

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.

#### 1.3.9.1 Exemplo de execução do algoritmo

A seguir, demonstramos a execução completa do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds em um grafo exemplo, ilustrando cada fase do processo: normalização, construção de  $F^*$ , detecção de ciclos, contração, resolução recursiva e reexpansão.

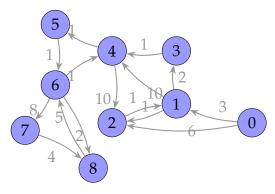


Figura 10 – Grafo direcionado ponderado inicial com raiz no vértice 0. O grafo contém 9 vértices e múltiplas arestas com pesos variados. O primeiro passo do algoritmo seria remover arestas que entram na raiz, porém não há nenhuma neste caso, logo não existe necessidade de alterar o grafo.

O próximo passo é normalizar os pesos das arestas de entrada para cada vértice. Nessa etapa, para cada vértice v (exceto a raiz), o algoritmo encontra a aresta de menor peso que entra em v e subtrai esse menor peso de todas as arestas que entram em v (isso serve para zerar o peso da aresta mínima de entrada em cada vértice).

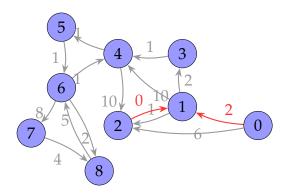


Figura 11 – Normalização parcial das arestas de entrada para o vértice 1. As arestas de entrada são  $(0 \to 1)$  com peso original 3 e  $(2 \to 1)$  com peso original 1. Elegendo a aresta  $(2 \to 1)$  como a de menor peso (peso mínimo = 1), subtraímos este valor de todas as arestas de entrada:  $(0 \to 1)$  passa de peso 3 para 2, e  $(2 \to 1)$  passa de peso 1 para 0 (destacadas em vermelho). Esse processo é repetido para todos os demais vértices.

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

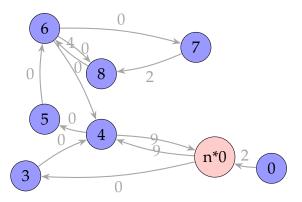


Figura 12 – Grafo contraído após detecção do ciclo  $C=\{1,2\}$  em  $F^*$ . O ciclo foi contraído no supervértice n\*0 (destacado em vermelho). As arestas que entravam ou saíam do ciclo foram redirecionadas para o supervértice, com custos ajustados segundo as fórmulas  $c'(u,x_C):=c(u,w)-y(w)$  para arestas de entrada e  $c'(x_C,v):=c(w,v)$  para arestas de saída.

Agora, repetimos o processo recursivamente no grafo contraído até obter uma arborescência válida.

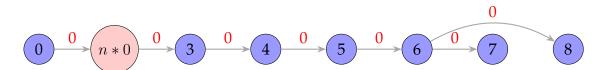


Figura 13 – Arborescência ótima F' obtida no grafo contraído. Todas as arestas selecionadas têm custo reduzido 0 (destacados em vermelho), e o grafo forma uma arborescência válida enraizada em 0: cada vértice (exceto a raiz) tem exatamente uma aresta de entrada, não há ciclos, e todos os vértices são alcançáveis a partir da raiz. Como F' é acíclico, alcançamos o caso base da recursão.

Após validarmos que  $F^*$  não possui mais ciclos e forma uma arborescência, iniciamos o processo de reexpansão do ciclo contraído para obter a arborescência final no grafo original. Adicionamos a aresta de entrada ao ciclo (0,1), as arestas internas do ciclo modificado (1,2), e as arestas de saída (1,3), chegando a uma arborescência válida.

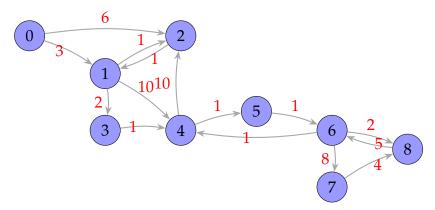


Figura 14 – Arborescência ótima final no grafo original com pesos restaurados. O supervértice n\*0 foi expandido de volta para os vértices 1 e 2, com a aresta externa (0,1) escolhida pela solução recursiva conectando ao ciclo. A aresta interna (2,1) do ciclo original foi removida para manter a propriedade de arborescência ( $\deg^-(v)=1$ ). O resultado é uma 0-arborescência de custo mínimo com exatamente 8 arestas, onde cada vértice não-raiz tem grau de entrada 1 e todos são alcançáveis a partir da raiz 0.

#### 1.3.10 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 $^2$   $y(\cdot)$ , 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.

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 13, 14, 15, 28 e 33.

SCHRIJVER, A. *Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency*. [S.l.]: Springer, 2003. Citado 4 vezes nas páginas 13, 14, 15 e 19.



## ANEXO A - Anexo A

Conteúdo do anexo A.