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

Orientador: Mário Leston Discentes: Lorena Silva Sampaio, Samira Haddad

30 de setembro de 2025

# 1 Introdução

Encontrar uma r-arborescência inversa de custo mínimo em grafos dirigidos é um problema estudado em ciência da computação desde os anos 1960, com formulações fundamentais apresentadas por Jack Edmonds em 1967 [4].

Essa busca dialoga com um princípio formulado na Idade Média por Guilherme de Ockham: a navalha de Occam (princípio da parcimônia), uma heurística filosófica segundo a qual, entre explicações concorrentes para um fenômeno, devemos preferir a mais simples ou a que faz menos suposições.

Podemos pensar na navalha de Occam como critério de escolha entre explicações por meio de uma teia explicativa mínima: uma estrutura que conecta fatos ou observações com o mínimo de relações explicativas necessárias. Quando tais relações envolvem dependência ou causalidade, podemos representá-las pictograficamente como setas direcionadas entre os fatos (as hipóteses aparecem como rótulos dessas setas). Para refinar o modelo, associamos um custo a cada relação (por exemplo, o esforço para validar a relação ou a complexidade da explicação).

Encontrar a teia explicativa mínima equivale, nessa metáfora, a encontrar uma r-arborescência de custo mínimo: fixamos um vértice raiz r (a explicação inicial) e escolhemos um conjunto mínimo de relações explicativas de modo que todos os fatos tenham um caminho dirigido que leve a r, minimizando o custo total das arestas.

A r-arborescência (também chamada out-arborescência) orienta as arestas para fora de r: cada vértice  $v \neq r$  tem exatamente uma aresta de entrada, e há um caminho dirigido único de r até v. Já a r-arborescência inversa (in-arborescência) orienta as arestas em direção a r: cada  $v \neq r$  tem exatamente uma aresta de saída, e de cada vértice parte um caminho dirigido único até r [4, 5].

Com essa distinção em mente, este trabalho concentra-se na variante inversa. Formalmente, dado um grafo dirigido G = (V, E) com custos  $c : E \to \mathbb{R}^+$  nas arestas e um vértice raiz  $r \in V$ , procura-se uma r-arborescência inversa — isto é, uma árvore direcionada que atinja todos os vértices por caminhos dirigidos até r — que minimize o custo total das arestas selecionadas (cf. [4, 5]).

Nosso interesse, porém, não é apenas encontrar a arborescência mínima: o percurso até ela também importa, pois revela propriedades estruturais dos dígrafos e ilumina técnicas distintas de otimização. Por isso, investigamos duas rotas clássicas e complementares: (i) o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds, que opera por normalização dos custos das arestas de entrada, seleção sistemática de arestas de custo zero e contração de ciclos até obter um grafo reduzido, seguida pela reexpansão para reconstrução da solução [1, 4]; e (ii) a abordagem dual, em duas fases, de András Frank, fundamentada em cortes dirigidos, na qual se maximiza uma função de cortes c-viável para induzir arestas de custo zero e, em seguida, extrai-se a arborescência apenas a partir dessas arestas [5]. Embora assentados em princípios distintos — contração de ciclos no plano primal versus empacotamento/dualidade por cortes —, ambos os paradigmas produzem soluções ótimas e tornam explícitas a variedade de abordagens matemáticas que podem ser empregadas para resolver o mesmo problema.

Assim sendo, analisamos e implementamos, em Python, essas duas abordagens, e apresentaremos detalhes das implementações, desafios enfrentados e soluções adotadas. Realizamos testes de volume com milhares de instâncias geradas aleatoriamente, registrando resultados em arquivos CSV e de log; os custos obtidos pelo Chu–Liu/Edmonds e pelas duas variantes de András Frank coincidem, corroborando a correção das implementações.

Adicionalmente, desenvolvemos uma aplicação web com fins didáticos, utilizando o framework PyScript e as bibliotecas NetworkX e Matplotlib, que permitem construir grafos dirigidos interativamente, escolher o vértice-raiz, executar o algoritmo de Chu-Liu/Edmonds e acompanhar, passo a passo, a evolução do grafo e o registro detalhado da execução (log). A interface inclui operações de adicionar arestas com pesos, carregar um grafo de teste e exportar a instância em formato JSON, facilitando a experimentação por estudantes e educadores.

# 1.1 Justificativa

A busca por uma r-arborescência inversa de custo mínimo em grafos dirigidos é um problema clássico com aplicações em diversas áreas, como redes de comunicação, planejamento de rotas, análise de dependências e modelagem de processos. Mas, não precisamos dessa justificação prática para nos interessarmos pelo problema: a riqueza estrutural dos dígrafos e a variedade de técnicas algorítmicas disponíveis o tornam um excelente caso de estudo em otimização combinatória.

Do ponto de vista didático, a metáfora da "teia explicativa mínima" torna concreto o porquê de estudarmos arborescências enraizadas: ela mapeia perguntas sobre explicação, alcance e economia de recursos para estruturas dirigidas, servindo de fio condutor nas implementações e nos experimentos que apresentamos.

# 1.2 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é analisar, implementar e comparar duas abordagens clássicas para o problema de *r-arborescência de custo mínimo* em grafos dirigidos oferecendo uma aplicação web interativa que facilite o entendimento e a experimentação com o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds e o método de András Frank, tornando-o acessível para estudantes e educadores.

# 1.3 Estrutura do Trabalho

Resumidamente, o trabalho abrange as seguintes frentes:

- 1. **Fundamentação teórica**: revisão da literatura sobre arborescências em grafos dirigidos, incluindo definições, propriedades e resultados relevantes.
- 2. **Análise teórica**: consolidação dos conceitos de dígrafos e arborescências, compondo as formulações primal (normalização de custos e contração/reexpansão de ciclos no algoritmo de Chu–Liu/Edmonds) e dual (cortes dirigidos e função c-viável no método de András Frank), destacando resultados e intuições estruturais.
- 3. Implementação computacional: implementação em Python das rotinas de normalização dos custos de entrada, construção de F\*, detecção e contração de ciclos e reconstrução da solução (Chu–Liu/Edmonds), bem como das duas fases do método de András Frank; além de uma suíte de testes automatizados em larga escala sobre instâncias aleatórias com até centenas de vértices, verificando a coincidência dos custos entre os métodos e registrando resultados em CSV e log.
- 4. **Aplicação pedagógica**: desenvolvimento de uma aplicação web interativa (PyScript + NetworkX + Matplotlib) que permite montar instâncias, escolher o vértice-raiz e acompanhar, passo a passo, a execução do algoritmo com visualização do grafo e dos pesos das arestas, log textual e importação/exportação em JSON para facilitar a reprodução de experimentos.

Deste modo, o trabalho entrega implementações verificadas de Chu–Liu/Edmonds e András Frank, um visualizador web interativo e testes de volume que confirmam a equivalência de custos, úteis ao estudo e ao ensino de arborescências.

# 2 Definições Preliminares

Neste capítulo, reunimos as noções matemáticas básicas necessárias para compreensão completa do texto.

Fixaremos notações e conceitos (conjuntos, relações, funções, dígrafos, propriedade em dígrafos, dígrafos ponderados, ramificações geradoras, arborescências, funções de custo, dualidade, problemas duais e algoritmos), até chegar à formulação do problema da r-arborescência inversa de custo mínimo e adiamos descrições algorítmicas para capítulos posteriores.

# 2.1 Conjuntos

Este trabalho depende profundamente da teoria dos conjuntos, podemos dizer que todos os objetos matemáticos que iremos utilizar nessa dissertação se reduzem a conjuntos e operações entre eles.

Um **conjunto** é uma agregação de objetos distintos com características bem definidas, chamados elementos ou membros do conjunto. Os conjuntos são geralmente representados por letras maiúsculas (por exemplo, A, B, C) e seus elementos são listados entre chaves (por exemplo,  $A = \{1, 2, 3\}$ ). Dois conjuntos são iguais se contêm exatamente os mesmos elementos.

Podemos ter conjuntos de qualquer tipo de objeto, incluindo números, letras e elementos da natureza. Para motivar as definições ao longo do texto, usaremos dois exemplos complementares que vamos chamar de exemplos-mestres:

(i) Considere um universo U composto por três conjuntos: árvores T, plantas P e fungos F — para praticar pertinência, inclusão e operações; e



Figura 1: Relações entre os conjuntos de organismos:  $T \subseteq P$  (toda árvore é planta) e F é disjunto de P.

• (ii) exemplo inspirado na navalha de Occam, com três famílias: evidências E, hipóteses H e explicações  $\mathcal{M} \subseteq 2^H$ . Nesse segundo exemplo, privilegiaremos explicações parcimoniosas: entre as que cobrem E, preferimos as minimais por inclusão.

No segundo exemplo, consideremos  $E = \{\text{queda de temperatura, céu nublado}\}\ e\ H = \{H_A, H_B\}$ , em que  $H_A$  significa "frente fria" e  $H_B$ , "ilha de calor". Tanto  $\{H_A\}$  quanto  $\{H_A, H_B\}$  explicam E (cobrem ambas as evidências), mas, por parcimônia, preferimos  $\{H_A\}$ , por ser estritamente menor do que  $\{H_A, H_B\}$  ( $\{H_A\} \subset \{H_A, H_B\}$ ). Ao longo do texto, recorreremos às noções de pertinência (por exemplo,  $H_A \in H$ ), de inclusão e às operações usuais sobre conjuntos (união, interseção etc.) para comparar explicações.



Ambas as opções  $H_A$  e  $H_A + H_B$  cobrem E; por parcimônia, preferimos apenas  $H_A$ .

Figura 2: Exemplo inspirado na navalha de Occam:  $H_A$  cobre ambas as evidências (E), enquanto  $H_B$  seria redundante; prefere-se a explicação menor.

#### 2.1.1 Subconjuntos

Dizemos que A é um **subconjunto** de B, denotado  $A \subseteq B$ , quando todo elemento de A também pertence a B. Se, além disso,  $A \neq B$ , escrevemos  $A \subset B$  e chamamos A de **subconjunto próprio** de B. Ex.:  $\{1,2\} \subseteq \{1,2,3\}$  e  $\{1,2\} \subset \{1,2,3\}$ .Por convenção, o conjunto vazio  $\varnothing$  é subconjunto de qualquer conjunto X (isto é,  $\varnothing \subseteq X$ ), e todo conjunto é subconjunto de si mesmo  $(X \subseteq X)$ .

No primeiro exemplo-mestre, sejam P o conjunto de plantas, T o de árvores e F o de fungos; então  $T \subseteq P$  (toda árvore é planta), ao passo que  $F \not\subseteq P$ .

No segundo, seja  $H = \{H_A, H_B\}$  e  $E = \{\text{queda de temperatura, céu nublado}\}$ , vale  $\{H_A\} \subset \{H_A, H_B\} \subseteq H$ ; ambas as opções explicam E, mas, por parcimônia, preferimos  $\{H_A\}$ .

### 2.1.2 Pertinência e inclusão

Pertinência e inclusão são os conceitos mais fundamentais da teoria dos conjuntos.

Começando pela **noção de pertinência** denotado por  $\in$ : dizemos que um elemento x pertence a um conjunto X quando  $x \in X$  e não pertence quando  $x \notin X$ .

Seja o nosso universo U de organismos:  $P = \{\text{todas as plantas}\}, T = \{\text{todas as árvores}\}$  e  $F = \{\text{todos os fungos}\}$ . Se x é um carvalho, então  $x \in T$  e, como toda árvore é uma planta,  $x \in P$ . Já se y é um cogumelo, então  $y \in F$  e, na taxonomia moderna,  $y \notin T$  e  $y \notin P$ . Agora, considere  $A = \{\text{árvores com folhas verdes}\}$ ; a pertinência fica clara:  $x \in A$  se, e somente se, x é árvore e tem folhas verdes.

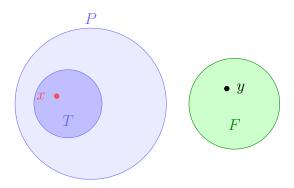


Figura 3: Pertinência:  $x \in T \subseteq P$  (ponto vermelho dentro de T) e  $y \in F$  (ponto preto); logo  $y \notin P$  e  $y \notin T$ .

Continuando, vem a **relação de inclusão** entre conjuntos denotada por  $\subseteq$ : escrevemos  $X \subseteq Y$  quando todo elemento de X também pertence a Y (e  $X \subset Y$  quando, além disso,  $X \neq Y$ ). No nosso exemplo,  $A \subseteq T \subset P$  e  $T \cap F = \emptyset$  (árvores e fungos não se sobrepõem).

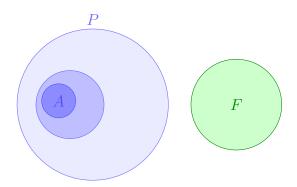


Figura 4: Inclusão:  $A \subseteq T \subset P$  (círculos aninhados) e  $T \cap F = \emptyset$  (círculos disjuntos).

# 2.1.3 Operações entre conjuntos

Com essas definições de pertinência, inclusão e subconjuntos, apresentamos as operações básicas entre conjuntos, que usaremos ao longo do texto (mantendo o exemplo com P, T, F, A).

Outras operações comuns entre conjuntos incluem:

• União  $(A \cup B)$ : o conjunto de todos os elementos que pertencem a A, a B, ou ambos.

Exemplo:  $T \cup F$  é o conjunto de todos os organismos que são árvores ou fungos (ou ambos, se existissem tais organismos).



Figura 5: União: a área colorida representa T cupF; a sobreposição evidencia a intersecção T capF (hipotética).

• União disjunta  $(A \uplus B)$ : o conjunto de todos os elementos que pertencem a A ou a B, mas não a ambos; é igual a  $A \cup B$  quando A e B são disjuntos.

Exemplo:  $T \uplus F$  é o conjunto de todos os organismos que são árvores ou fungos, mas não ambos (o que é trivialmente igual a  $T \cup F$  pois T e F são disjuntos).



Figura 6: União disjunta: como TcapF = varnothing, tem-se TuplusF = TcupF.

• Interseção  $(A \cap B)$ : o conjunto de todos os elementos que pertencem tanto a A quanto a B.

Exemplo:  $T \cap P = T$ , pois todas as árvores são plantas.



Figura 7: Interseção: como TsubseteqP, TcapP = T (a região escura é T).

• Diferença  $(A \setminus B)$ : o conjunto de todos os elementos que pertencem a A mas não a B.

Exemplo:  $T \setminus A$  é o conjunto de todas as árvores que não têm folhas verdes.



Figura 8: Diferença: região azul representa T setminus A (árvores que não têm folhas verdes).

• Complemento de X em um universo fixo U:  $X^c := U \setminus X$  (também chamado de complemento absoluto); o complemento relativo de X em Y é  $Y \setminus X$ .

Exemplo:  $T^c = U \setminus T$  é o conjunto de todos os organismos que não são árvores. Ou seja,  $T^c$  inclui plantas que não são árvores, fungos e quaisquer outros organismos no universo U.



Figura 9: Complemento: a área cinza representa  $T^c = UsetminusT$ .

• Diferença simétrica  $(A \Delta B)$ :  $(A \setminus B) \cup (B \setminus A)$ ; é igual a  $A \cup B$  quando  $A \in B$  são disjuntos.

Exemplo:  $P \Delta F$  é o conjunto de todos os organismos que são plantas ou fungos, mas não ambos (o que é trivialmente igual a  $P \cup F$  pois P e F são disjuntos).



Figura 10: Diferença simétrica: como PcapF = varnothing, temos PDelta F = PcupF.

• **Produto cartesiano**  $(A \times B)$ : o conjunto de pares ordenados (a, b) com  $a \in A$  e  $b \in B$ .

Exemplo:  $T = \{t_1, t_2\} \in F = \{f_1, f_2\}$ . Então  $T \times F = \{(t_1, f_1), (t_1, f_2), (t_2, f_1), (t_2, f_2)\}$ .



Figura 11: Produto cartesiano: pontos representam os pares de T times F para  $T = \{t_1, t_2\}$  e  $F = \{f_1, f_2\}$ .

• Conjunto das partes  $(2^U)$ : a família de todos os subconjuntos de U (inclui  $\emptyset$  e o próprio U).

Exemplo: se  $U = \{x, y\}$ , então  $2^U = \{\varnothing, \{x\}, \{y\}, \{x, y\}\}$ . Logo,  $|2^U| = 4 = 2^{|U|}$ .



Figura 12: Conjunto das partes: diagrama de Hasse de  $2^U$  para  $U=\{x,y\}$ .

Identidades úteis. Usaremos livremente as propriedades clássicas de conjuntos — comutatividade e associatividade de  $\cup$  e  $\cap$ , distributividade e as leis de De Morgan — sem prova. Quando for relevante, explicitaremos a identidade no ponto de uso. Por exemplo, no nosso universo U,  $(P \cup F)^c = P^c \cap F^c$ .

# 2.1.4 Coleção

Entre os objetos que podem pertencer a um conjunto, estão também eles mesmos, outros conjuntos. Chamaremos tais conjuntos de **coleções** (ou **famílias**) de conjuntos. Por exemplo,  $\mathcal{C} = \{P, T, F\}$  é uma coleção formada pelos conjuntos de organismos já definidos: plantas P, árvores T e fungos F. Note que  $\mathcal{C}$  é um conjunto como outro qualquer; seus elementos são, cada um, um conjunto.

Coleções são úteis para agrupar subconjuntos relacionados de um mesmo universo. Por exemplo, considere  $\mathcal{D} = \{A, B\}$ , onde  $A = \{\text{árvores com folhas verdes}\}$  e  $B = \{\text{árvores com folhas vermelhas}\}$ . Assim,  $\mathcal{D} \subseteq 2^T$  é uma coleção de subconjuntos de T.

Uma coleção  $\mathcal{F}$  é dita **laminar** quando, para quaisquer  $X, Y \in \mathcal{F}$ , vale que  $X \subseteq Y$ ,  $Y \subseteq X$  ou  $X \cap Y = \emptyset$ ; isto é, quaisquer dois conjuntos são aninhados (um está contido no outro) ou são disjuntos.

Por exemplo, na coleção  $\mathcal{C} = \{P, T, F\}$ : P é o conjunto de todas as plantas, T o de todas as árvores (portanto  $T \subseteq P$ ) e F o de todos os fungos (disjunto de plantas e, logo, de árvores). Assim, quaisquer dois conjuntos em  $\mathcal{C}$  são aninhados ou disjuntos, e  $\mathcal{C}$  é laminar. Na coleção  $\mathcal{D} = \{A, T\}$ : A é o conjunto de árvores com folhas verdes e T o de todas as árvores; como toda árvore de A é árvore de T, temos  $A \subseteq T$  e a coleção é laminar. Já em  $\mathcal{E} = \{A, R\}$ : R é o conjunto de árvores frutíferas; há árvores que são ao mesmo tempo frutíferas e de folhas verdes (a interseção é não vazia), mas nenhuma das classes contém a outra, então  $\mathcal{E}$  não é laminar.

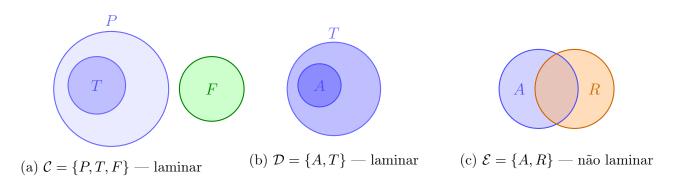


Figura 13: Laminaridade em coleções: em (a) e (b), quaisquer dois conjuntos são aninhados ou disjuntos; em (c), A e R se interceptam sem inclusão, violando a laminaridade.

Este é um importante conceito que aparecerá no restante do trabalho. A ideia de laminaridade retornará quando tratarmos de cortes dirigidos.

# 2.1.5 Comparando conjuntos: cardinalidade e maximalidade

Podemos comparar conjuntos através de relações de tamanho (cardinalidade) ou por relações de inclusão. Essas duas formas de comparação são distintas e importantes, especialmente quando lidamos com coleções de conjuntos.

A cardinalidade de um conjunto A, denotada por |A|, é o número de elementos de A. Para conjuntos finitos, é simplesmente a contagem dos elementos (por exemplo, se  $A = \{1, 2, 3\}$ , então |A| = 3). Para conjuntos infinitos, a cardinalidade pode ser mais complexa, envolvendo conceitos como infinito enumerável e não enumerável. Por exemplo, o conjunto dos números naturais  $\mathbb{N}$  é infinito enumerável, enquanto o conjunto dos números reais  $\mathbb{R}$  é infinito não enumerável.

Dizemos que  $A \in \mathcal{C}$  tem **maior cardinalidade** se  $|A| \geq |B|$  para todo  $B \in \mathcal{C}$  (podendo haver empates). Esse critério não coincide, em geral, com a comparação por relação de inclusão. Em grafos, por exemplo, distinguem-se conjuntos independentes *maximais* (não ampliáveis) de conjuntos independentes *máximos* (de cardinalidade máxima).

Ao compararmos uma coleção  $\mathcal{C}$  de conjuntos utilizando sua relações de inclusão  $(\mathcal{C},\subseteq)$ , é imprescindível distinguir **maximal** de **máximo**.

Um conjunto  $A \in \mathcal{C}$  é **maximal** se não existe  $B \in \mathcal{C}$  tal que  $A \subset B$ . Em palavras: não dá para ampliar A estritamente dentro da coleção. Podem haver vários elementos maximais, e eles podem ser incomparáveis entre si. Ex.: em  $\mathcal{C} = \{\{1\}, \{2\}\}$ , ambos  $\{1\}$  e  $\{2\}$  são maximais, mas não existe máximo.

Um conjunto  $A \in \mathcal{C}$  é **máximo** se  $B \subseteq A$  para todo  $B \in \mathcal{C}$ . Se existe, é único. Ex.: em  $\mathcal{C} = \{\{1\}, \{2\}, \{1, 2\}\},$  o conjunto  $\{1, 2\}$  é o máximo.

Um bom exemplo para ilustrar a distinção entre conjuntos maximais e máximos é a coleção  $\mathcal{C} = \{\{1\}, \{2\}, \{1,2\}, \{3\}\}\}$ . Aqui,  $\{1,2\}$  é o único conjunto máximo (contém todos os outros), enquanto  $\{1\}$ ,  $\{2\}$  e  $\{3\}$  são todos maximais (não podem ser ampliados dentro da coleção).

Esses conceitos reaparecerão ao longo do texto, especialmente na diferença entre estruturas **maximais** (saturadas por inclusão) e **máximas/ótimas** (de maior cardinalidade ou menor custo). Para fixar ideias:

- Em muitos problemas, "maximal" quer dizer: não dá para ampliar uma escolha sem violar as regras; já "máximo/ótimo" quer dizer: entre todas as escolhas válidas, essa é a melhor segundo o critério (por exemplo, menor custo).
- No algoritmo de **Chu–Liu/Edmonds**, começamos com escolhas locais que já não podem ser ampliadas dentro das regras do problema e, a partir delas, chegamos a uma solução de menor custo.
- No método de **András Frank**, primeiro construímos uma estrutura organizada que garante escolhas suficientes; depois, usando apenas relações já ativadas por essa estrutura, extraímos a solução ótima.
- Moral: partimos da ideia de "não dá para aumentar" (maximal) e chegamos a "melhor possível" (máximo/ótimo). Os detalhes técnicos de cada método aparecerão nas seções próprias.

# 2.2 Relações e Funções

Desde a introdução, vimos a ideia filosófica de explicar como "ligar" fatos a hipóteses da forma mais parcimoniosa possível. Para tornar essa intuição precisa, precisamos de uma linguagem que descreva objetos (conjuntos) e como eles se conectam. É aqui que entram as **relações** e, de modo ainda mais disciplinado, as **funções**: regras que associam a cada elemento de um conjunto exatamente um elemento de outro. Com elas, passamos do discurso qualitativo sobre explicações para uma estrutura matemática que permite medir, comparar e, adiante, otimizar.

Na matemática, uma **relação** entre dois conjuntos A e B é uma maneira de associar elementos de A com elementos de B. Uma **função** é um tipo especial de relação que associa cada elemento de A a exatamente um elemento de B.

Uma **relação** R entre dois conjuntos A e B é um subconjunto do produto cartesiano  $A \times B$ . Ou seja,  $R \subseteq A \times B$ . Se  $(a,b) \in R$ , dizemos que a está relacionado a b pela relação R, denotado aRb.

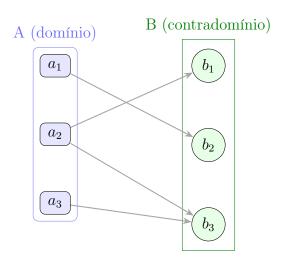


Figura 14: Relação  $R \subseteq A \times B$ . Cada seta representa um par  $(a,b) \in R$  (isto é, aRb). As formas/cores distinguem domínio (A, retângulos azuis) de contradomínio (B, círculos verdes). Note que  $a_2$  se relaciona com  $b_1$  e  $b_3$ ; logo, este R não é uma função. Para que R fosse uma função  $f: A \to B$ , cada  $a \in A$  deveria ter exatamente uma seta saindo para algum  $b \in B$ .

No nosso primeiro exemplo-mestre, considere  $P = \{\text{todas as plantas}\}\ e\ F = \{\text{todos os fungos}\}\$ . Definimos a relação R como "é um organismo que compete com". Assim, se uma planta  $p \in P$  compete com um fungo  $f \in F$ , então  $(p, f) \in R$ .

No nosso segundo exemplo, considere  $H = \{\text{hipóteses}\}\ e\ E = \{\text{evidências}\}\$ . Definimos a relação R como "explica". Se uma hipótese  $h \in H$  explica uma evidência  $e \in E$ , então  $(h,e) \in R$ .

Em teoria dos grafos, uma relação pode representar conexões entre vértices. Por exemplo, em um grafo dirigido, a relação "existe uma aresta de u para v"pode ser representada como um conjunto de pares ordenados (u, v).

Uma **função** f de um conjunto A em um conjunto B é uma relação especial que associa cada elemento de A a exatamente um elemento de B. Denotamos isso como  $f: A \to B$ . Se f(a) = b, dizemos que b é a imagem de a sob f.

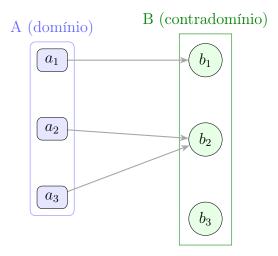


Figura 15: Função  $f: A \to B$ . Cada elemento de A tem exatamente uma seta saindo para um elemento de B (a imagem). Elementos distintos de A podem ter a mesma imagem (muitos-para-um), e nem todo elemento de B precisa ser imagem (aqui,  $b_3$  não é atingido). Compare com a Fig. 14.

No nosso exemplo-mestre, considere  $P = \{\text{todas as plantas}\}\ e\ \mathbb{N} = \{0, 1, 2, \ldots\}$  (números naturais). Definimos a função  $f: P \to \mathbb{N}$  que associa cada planta ao seu número de folhas. Se  $p \in P$  é uma árvore com 100 folhas, então f(p) = 100.

Em teoria dos grafos, funções podem ser usadas para atribuir pesos às arestas. Por exemplo, se temos um grafo G com arestas  $e_1, e_2, \ldots, e_n$ , podemos definir uma função  $c: E \to \mathbb{R}^+$  que atribui um peso  $c(e_i)$  a cada aresta  $e_i$ .

Na ciência da computação, relações e funções são usadas para modelar conexões entre dados, estruturas de dados e operações. Por exemplo, em bancos de dados relacionais, tabelas representam relações entre diferentes entidades. Em programação funcional, funções são tratadas como cidadãos de primeira classe, permitindo a criação de funções de ordem superior que podem receber outras funções como argumentos ou retorná-las como resultados.

#### 2.2.1 Conceitos em Funções

Alguns conceitos importantes relacionados a funções incluem:

- **Domínio**: o conjunto A de entrada da função  $f: A \to B$ .
- Contradomínio: o conjunto B de possíveis saídas da função.
- Imagem: o conjunto de valores efetivamente atingidos pela função,  $f(A) = \{f(a) \mid a \in A\}$ .

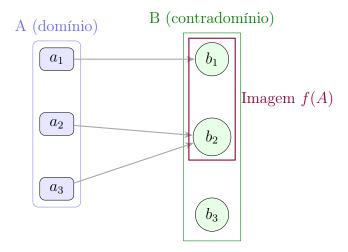


Figura 16: Domínio, contradomínio e imagem: A (retângulos azuis) mapeia via f para B (círculos verdes). A imagem f(A) é o subconjunto de B efetivamente atingido (aqui,  $\{b_1, b_2\}$ ).

- Injetora: uma função f é injetora se  $f(a_1) = f(a_2)$  implica  $a_1 = a_2$ ; ou seja, elementos distintos do domínio têm imagens distintas.
- Sobrejetora: uma função f é sobrejetora se para todo  $b \in B$ , existe  $a \in A$  tal que f(a) = b; ou seja, a imagem é igual ao contradomínio.
- Bijetora: uma função que é tanto injetora quanto sobrejetora; estabelece uma correspondência um-para-um entre os elementos de A e B.

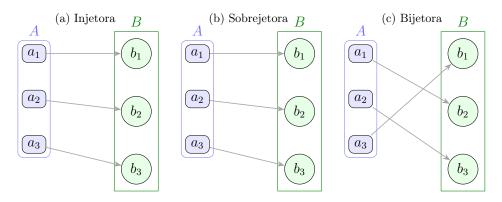


Figura 17: Funções especiais: (a) Injetora — elementos distintos em A têm imagens distintas em B; (b) Sobrejetora — todo elemento de B é imagem; (c) Bijetora — umpara-um e sobre B.

# 2.2.2 Funções de agregação e somatórios

Além de relacionar elementos de conjuntos, muitas operações familiares em matemática, envolvem funções que recebem coleções de números (ou funções) e devolvem um número.

Uma **função de agregação** é uma função que recebe um conjunto (ou sequência) de valores e retorna um único valor que representa algum aspecto agregado desses valores. Exemplos comuns incluem:

- **Média**: A média aritmética de um conjunto de números  $x_1, x_2, \ldots, x_n$  é dada por  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$ .
- Máximo e Mínimo: A função máximo retorna o maior valor em um conjunto, enquanto a função mínimo retorna o menor valor.
- **Produto**: O produto de um conjunto de números  $x_1, x_2, \ldots, x_n$  é dado por  $\prod_{i=1}^n x_i$ .
- Contagem: A função contagem retorna o número de elementos em um conjunto.

O **somatório**, por exemplo, é uma função de agregação linear que mapeia uma sequência  $(x_1, \ldots, x_n)$  em sua soma:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i.$$

Esse conceito é especialmente útil em otimização e em análise combinatória: somatórios aparecem o tempo todo e serão explorados ao longo deste trabalho.

**Exemplos com grafos.** As sessões seguintes explorarão em maiores detalhes grafos e dígrafos, mas agora, consideremos a ideia básica: um **grafo** é um conjunto de pontos (*vértices*) ligados por linhas (*arestas*). No caso *não dirigido*, as linhas não têm seta; no caso *dirigido*, cada linha tem um sentido e é chamada de *arco*.

A noção de somatória aparecerá naturalmente quando lidamos com propriedades dos grafos. Por exemplo:

Seja um grafo não dirigido G=(V,E). O **grau** de um vértice  $v\in V$ , escrito  $\deg(v)$ , é quantas arestas tocam em v. A soma dos graus de todos os vértices conta cada aresta duas vezes (uma por extremidade), portanto:

$$\sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E|.$$

Em grafos dirigidos, distinguimos  $\deg^-(v)$  (quantos arcos *chegam* em v) e  $\deg^+(v)$  (quantos arcos *saem* de v). Cada arco contribui com 1 para um grau de saída e 1 para um grau de entrada, logo:

$$\sum_{v \in V} \deg^{-}(v) = \sum_{v \in V} \deg^{+}(v) = |E|.$$

Agora suponha que cada aresta/arco  $e \in E$  tenha um peso (ou custo)  $c(e) \ge 0$ . O custo total de um subconjunto  $F \subseteq E$  é simplesmente a soma dos pesos das arestas escolhidas:

$$C(F) = \sum_{e \in F} c(e).$$

De maneira análoga, se  $X\subseteq V$  é um conjunto de vértices, o **valor total** (ou peso total) dos arcos que saem de X é a soma dos pesos dessas setas. Usaremos mais adiante a notação  $\delta^+(X)$  para o conjunto de arcos que saem de X (ver a seção de dígrafos); com essa notação,

$$\operatorname{val}^+(X) = \sum_{e \in \delta^+(X)} c(e).$$

Esses exemplos mostram como somatórios capturam propriedades estruturais do grafo por meio de funções simples de agregação.

# 2.2.3 Funções Especiais

# Função de custo

Uma **função de custo** é uma função  $c:A\to\mathbb{R}^+$  que atribui um valor numérico não negativo (custo) a cada elemento de um conjunto A. Essas funções são amplamente utilizadas em otimização, economia e teoria dos grafos para modelar despesas, penalidades ou recursos associados a escolhas ou ações.

Exemplo: Considere um conjunto de tarefas  $T = \{t_1, t_2, t_3\}$ . Uma função de custo  $c: T \to \mathbb{R}^+$  pode ser definida como:

$$c(t_1) = 5$$
,  $c(t_2) = 10$ ,  $c(t_3) = 3$ .

Aqui,  $c(t_i)$  representa o custo de realizar a tarefa  $t_i$ .

Depende diretamente do conceito de somatório, pois frequentemente queremos minimizar o custo total de um conjunto de escolhas. Se  $S \subseteq A$  é um subconjunto de elementos escolhidos, o custo total associado a S é dado por:

$$C(S) = \sum_{a \in S} c(a).$$

Função c-disjunta Uma função c-disjunta é uma função  $f: A \to B$  que, para quaisquer  $a_1, a_2 \in A$  com  $a_1 \neq a_2$ , as imagens  $f(a_1)$  e  $f(a_2)$  são disjuntas, ou seja,  $f(a_1) \cap f(a_2) = \emptyset$ . Em outras palavras, elementos distintos do domínio são mapeados para conjuntos disjuntos no contradomínio.

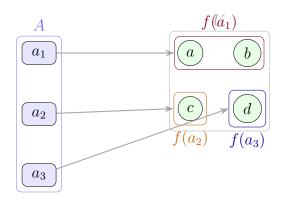


Figura 18: Função c-disjunta: cada  $a \in A$  mapeia para um subconjunto de U, e as imagens são dois a dois disjuntas (sem sobreposição). No exemplo,  $f(a_1) = \{a, b\}$ ,  $f(a_2) = \{c\}$  e  $f(a_3) = \{d\}$ .

Exemplo: Considere  $A=\{1,2,3\}$  e  $B=\{\{a\},\{b\},\{c\},\{d\}\}$ . Definimos a função  $f:A\to B$  como:

$$f(1)=\{a,b\},\quad f(2)=\{c\},\quad f(3)=\{d\}.$$

Aqui, f é c-disjunta, pois  $f(1) \cap f(2) = \emptyset$ ,  $f(1) \cap f(3) = \emptyset$  e  $f(2) \cap f(3) = \emptyset$ .

# Função c-viável

Uma função c-viável é uma função  $g:A\to\mathbb{R}^+$  que satisfaz certas condições de viabilidade relacionadas a um conjunto de restrições ou critérios. Essas funções são frequentemente usadas em otimização e teoria dos grafos para garantir que as soluções propostas atendam a requisitos específicos.

Exemplo: Considere um conjunto de projetos  $P = \{p_1, p_2, p_3\}$  e uma função  $g: P \to \mathbb{R}^+$  que atribui um valor de viabilidade a cada projeto. Suponha que temos a restrição de que a soma dos valores de viabilidade deve ser menor ou igual a um certo limite L. Se definirmos:

$$g(p_1) = 4$$
,  $g(p_2) = 6$ ,  $g(p_3) = 3$ ,

então a função g é c-viável se  $g(p_1) + g(p_2) + g(p_3) \leq L$ .

Essas funções são essenciais para garantir que as soluções propostas em problemas de otimização sejam práticas e atendam aos critérios estabelecidos.

## Funções de otimização

Do ponto de vista semiótico, "melhor" exprime uma preferência entre interpretações: ao comparar alternativas, escolhemos aquela cuja significação é mais adequada a um critério. Para tornar isso operacional, a matemática troca "fazer mais sentido" por "ter maior (ou menor) valor" em uma escala formal: fixamos (i) um conjunto de soluções viáveis  $\mathcal{F}$  e (ii) uma função numérica sobre  $\mathcal{F}$  que induz uma ordem de comparação.

Formalmente, usamos uma função objetivo (ou função de otimização)

$$h: \mathcal{F} \to \mathbb{R},$$

que atribui um número real a cada solução. Buscamos uma solução  $S^* \in \mathcal{F}$  que minimize ou maximize h (isto é, um argmin ou argmax). Quando esse número resulta da soma de contribuições elementares, obtemos o caso aditivo, em ligação direta com os somatórios apresentados antes.

Caso aditivo. Quando cada elemento  $a \in A$  tem um custo  $c(a) \ge 0$  e as soluções são subconjuntos  $S \subseteq A$ , a função objetivo mais comum é o custo total

$$C(S) = \sum_{a \in S} c(a),$$

que desejamos minimizar. De modo análogo, se cada item tem um benefício  $p(a) \ge 0$ , podemos maximizar o benefício total  $P(S) = \sum_{a \in S} p(a)$ , possivelmente sujeito a restrições (por exemplo, de orçamento ou limite).

Outro exemplo: considere produtos  $X = \{x_1, x_2, x_3\}$  com lucro  $p(x_1) = 10$ ,  $p(x_2) = 15$ ,  $p(x_3) = 7$ . Se houver um limite de custo que impede escolher todos, o objetivo típico é escolher um subconjunto  $S \subseteq X$  que maximize  $\sum_{x \in S} p(x)$  respeitando as restrições. Essa forma reflete exatamente os somatórios introduzidos antes.

Em todos os casos, a função objetivo explicita o critério de "melhor", e as restrições determinam quais soluções são aceitáveis.

# 2.2.4 Otimização

O princípio da navalha de occam nos diz que a explicação mais simples tende a ser a correta. Do ponto de vista semiótico, isso é escolher, entre interpretações possíveis, a que melhor satisfaz um critério. A matemática também se preocupa com identificar a "melhor" solução entre várias alternativas, mas traduz essa ideia em termos quantitativos: fixamos (i) um conjunto de soluções viáveis  $\mathcal{F}$  e (ii) uma função numérica sobre  $\mathcal{F}$  que induz uma ordem de comparação.

Assim, a otimização envolve a maximização ou minimização de uma função objetivo  $h: \mathcal{F} \to \mathbb{R}$  sobre um conjunto de soluções viáveis  $\mathcal{F}$ .

Esse conceito pode aparecer em muitas necessidades do dia-a-dia: uma empresa pode querer minimizar custos de produção, um viajante pode buscar o caminho mais curto entre dois pontos, ou um investidor pode tentar maximizar o retorno de um portfólio. Em cada caso, a função objetivo quantifica o que significa ser "melhor" ou "mais eficiente".

Pensando em modelagem de problemas em grafos, podemos pensar em exemplos clássicos de otimização:

- Caminho mais curto: Dado um grafo com pesos nas arestas, encontrar o caminho entre dois vértices que minimize a soma dos pesos das arestas percorridas.
- **Ārvore geradora mínima**: Encontrar uma árvore que conecte todos os vértices de um grafo com o menor custo total das arestas.
- Fluxo máximo: Em um grafo direcionado com limites nas arestas, encontrar o fluxo máximo que pode ser enviado de uma fonte a um sumidouro sem exceder esses limites.

#### A dualidade

O taoísmo chinês fala do yin e yang, forças opostas que se complementam. Um conceito que remete à contrastes, noite e dia, matéria e anti-matéria, máximos e mínimos. Na matemática, um conceito semelhante é a dualidade, que conecta problemas de minimização a problemas de maximização.

Em termos matemáticos, para cada problema de otimização (o primal), existe um problema associado (o dual) que oferece uma perspectiva complementar. Resolver um desses problemas pode fornecer insights ou soluções para o outro.

**Exemplo:** Considere um problema de otimização onde queremos minimizar o custo de transporte de mercadorias entre diferentes armazéns. O problema primal busca a solução de transporte que minimize os custos totais, enquanto o problema dual pode ser formulado como a maximização do valor dos recursos disponíveis (como a capacidade dos armazéns e a demanda dos clientes).

No nosso texto, consideramos como problema primal a minimização do custo de uma estrutura (como uma árvore geradora mínima) e como dual a maximização de um conjunto de pesos ou preços que justificam esse custo mínimo. A relação entre primal e dual é formalizada por teoremas de dualidade, que garantem que o valor ótimo do primal é igual ao valor ótimo do dual sob certas condições.

Esse ponto de vista leva a "teoremas min–max" que ligam problemas de *minimização* a problemas de *maximização* e fornecem certificados verificáveis de otimalidade.

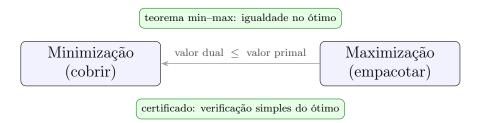


Figura 19: Intuição de min-max: um problema de cobrir (minimização) e um de empacotar (maximização) andam juntos. Sempre vale valor dual  $\leq$  valor primal; quando há igualdade, temos um certificado de otimalidade.

No contexto de grafos, a otimização costuma aparecer como a busca por subestruturas (caminhos, árvores, cortes, fluxos) que minimizam ou maximizam um custo, sempre respeitando a topologia do grafo.

Nesta dissertação, essa noção de otimização é central: olhamos para o mesmo problema por dois ângulos que se completam. No lado "primal", queremos montar diretamente a arborescência de menor custo. O algoritmo de Chu–Liu/Edmonds faz isso de forma gulosa: ajusta os custos por vértice, cria arestas de custo zero (0-arestas), contrai ciclos quando aparecem e segue até montar a solução ótima. ([1, 4]).

No lado "dual", em vez de montar a árvore, colocamos custos em cortes do grafo com raiz r. A regra é simples: nenhum custo pode ultrapassar o custo das arestas que cruzam o corte. Buscamos escolher esses custos para somar o máximo possível. As arestas que "batem no limite" viram 0-arestas, e a partir delas conseguimos reconstruir uma arborescência ótima. Essa visão, desenvolvida por Frank, leva a um teorema min—max e a um procedimento em duas etapas: primeiro ajustamos os custos, depois extraímos a solução usando apenas 0-arestas. (cf. [5, 7])

# 2.3 Problemas interessantes

Qual o número mínimo de cores necessárias para colorir um mapa de países, de modo que países vizinhos tenham cores diferentes? Qual o caminho mais curto entre duas cidades em um mapa rodoviário? Como encontrar a árvore geradora mínima que conecta todas as cidades com o menor custo total? Essas perguntas são exemplos clássicos de problemas que podem ser modelados e resolvidos usando a teoria dos grafos. Vistas sob a lente da navalha de occam, todas elas buscam a solução mais parcimoniosa que atende ao requisito: usar poucas cores, percorrer um caminho curto ou conectar tudo com custo mínimo.

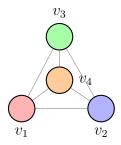


Figura 20: Coloração de grafos: exemplo de coloração própria do grafo completo  $K_4$ . Como  $K_4$  é completo, precisamos de 4 cores para colorir seus vértices de modo que vértices adjacentes tenham cores diferentes. Uma coloração é uma função  $\varphi: V \to C$  tal que, se  $uv \in E$ , então  $\varphi(u) \neq \varphi(v)$ .

Sem a teoria dos grafos, seria difícil formalizar e resolver esses problemas de maneira eficiente. Ao representar situações do mundo real como grafos, tornamos a parcimônia da navalha de occam algo operacional: escolhemos uma medida simples (número de cores, comprimento, custo) e aplicamos algoritmos que, entre as soluções viáveis, minimizam ou maximizam esse critério — produzindo soluções ótimas ou, quando necessário, boas aproximações.

# 2.4 Grafos

Falamos bastante de grafos ao longo do texto, aqui fixamos a noção básica.

Um **grafo** G = (V, E) é uma estrutura matemática composta por um conjunto V de  $v\'{e}rtices$  (ou  $n\'{o}s$ ) e um conjunto E de arestas (ou  $ligaç\~{o}es$ ) que conectam pares de  $v\'{e}rtices$ .

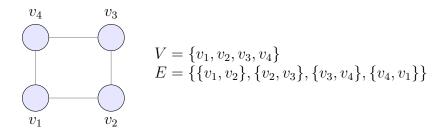


Figura 21: Definição de grafo: exemplo de grafo simples G = (V, E). Pontos representam os vértices V e linhas representam as arestas E, que são pares não ordenados de vértices distintos.

O conjunto de vértices V pode ser definido como  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ , onde cada  $v_i$  representa um ponto distinto no grafo. O conjunto de arestas E é um conjunto de pares não ordenados de vértices, ou seja,  $E \subseteq \{\{u,v\} \mid u,v \in V, u \neq v\}$ . Cada aresta  $\{u,v\}$  indica uma conexão entre os vértices  $u \in v$ .

Esses vértices e arestas podem representar uma variedade de entidades e relações no mundo real. Por exemplo, em um grafo que modela uma rede social, os vértices podem representar pessoas, e as arestas podem representar amizades entre elas. Em um grafo

que representa uma rede de transporte, os vértices podem ser cidades, e as arestas podem ser estradas ou rotas de voo conectando essas cidades.

Tendo em mente esses problemas, podemos falar de custos associados às arestas. Por exemplo, em um grafo que representa uma rede de transporte, cada aresta pode ter um custo associado, como a distância entre duas cidades ou o tempo necessário para percorrer uma estrada. Em um grafo que modela uma rede de comunicação, as arestas podem ter custos relacionados à largura de banda ou à latência.

Esses custos representam uma função  $c: E \to \mathbb{R}^+$  que atribui um valor numérico não negativo a cada aresta do grafo. Assim, para cada aresta  $\{u,v\} \in E$ ,  $c(\{u,v\})$  representa o custo associado a essa conexão.

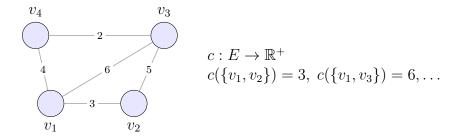


Figura 22: Grafo com custos nas arestas: a função  $c: E \to \mathbb{R}^+$  atribui a cada aresta um custo c(e) (mostrado junto às arestas). Por exemplo,  $c(\{v_1, v_2\}) = 3$ . O custo total de um subconjunto  $F \subseteq E$  é  $C(F) = \sum_{e \in F} c(e)$ .

Grafos apresentam diversas estruturas especiais. Essas estruturas são definidas como subgrafos e são fundamentais para entender a topologia e as propriedades dos grafos, e muitas vezes são o foco de problemas de otimização.

# 2.4.1 Subgrafos

Um subgrafo  $H = (V_H, E_H)$  de um grafo G = (V, E) é um grafo cujos vértices e arestas são subconjuntos dos vértices e arestas de G. Formalmente,  $V_H \subseteq V$  e  $E_H \subseteq E$ , e cada aresta em  $E_H$  conecta dois vértices em  $V_H$ .

Alguns subgrafos interessantes incluem: caminhos, ciclos, componentes conexas e árvores. Muitas propriedades e algoritmos em grafos dependem dessas estruturas, como encontrar o caminho mais curto entre dois vértices, detectar ciclos ou construir árvores geradoras mínimas. Dentre essas muitas estruturas especiais, vamos apresentar as que são relevantes para o desenvolvimento desta dissertação:

#### Caminhos

Um **caminho** em um grafo é uma sequência de vértices conectados por arestas. Formalmente, um caminho P de comprimento  $k \geq 1$  é uma sequência de vértices  $P = (v_1, v_2, \ldots, v_{k+1})$  tal que cada par consecutivo  $(v_i, v_{i+1})$  é uma aresta em E. O comprimento do caminho é o número de arestas que ele contém, que é k.

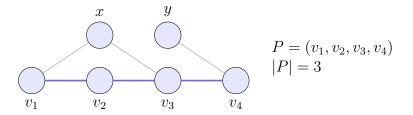


Figura 23: Caminho em grafo não dirigido: o caminho  $P = (v_1, v_2, v_3, v_4)$  está destacado em azul. Seu comprimento é o número de arestas percorridas, |P| = 3.

## Ciclos

Um **ciclo** é um caminho que começa e termina no mesmo vértice, ou seja,  $v_1 = v_{k+1}$ . Formalmente, um ciclo C é uma sequência de vértices  $C = (v_1, v_2, \ldots, v_k, v_1)$  tal que cada par consecutivo  $(v_i, v_{i+1})$  é uma aresta em E e  $k \geq 2$ . O comprimento do ciclo é o número de arestas que ele contém, que é k.

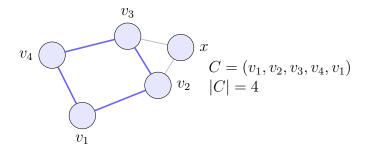


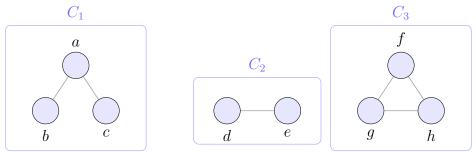
Figura 24: Ciclo em grafo não dirigido: o ciclo  $C = (v_1, v_2, v_3, v_4, v_1)$  está destacado em azul. Seu comprimento é o número de arestas, |C| = 4.

# Componentes conexas

Uma componente conexa de um grafo é um subgrafo maximal que é conexo. Formalmente, uma componente conexa C é um subgrafo  $C = (V_C, E_C)$  onde  $V_C \subseteq V$  e  $E_C \subseteq E$ , que satisfaz a seguinte propriedade:

• C é conexo: existe um caminho entre qualquer par de vértices em  $V_C$ .

Além disso, C é maximal, o que significa que não é possível adicionar mais vértices ou arestas a C sem perder a propriedade de conexidade.



Cada caixa destaca uma componente conexa. Não há arestas entre  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ .

Figura 25: Componentes conexas: o grafo possui três componentes  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ . Cada  $C_i$  é conexo e maximal: adicionar qualquer vértice de fora quebraria a propriedade de conexidade interna ou exigiria arestas ausentes.

#### Árvores

Uma **árvore** é um grafo conexo e acíclico. Formalmente, uma árvore T é um grafo  $T = (V_T, E_T)$  onde  $V_T \subseteq V$  e  $E_T \subseteq E$ , que satisfaz as seguintes propriedades:

- T é conexo: existe um caminho entre qualquer par de vértices em  $V_T$ .
- $\bullet$  T é acíclico: não contém ciclos.

Além disso, uma árvore com n vértices sempre tem exatamente n-1 arestas.

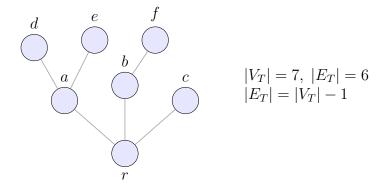


Figura 26: Árvore: grafo conexo e acíclico. No exemplo,  $|V_T| = 7$  e  $|E_T| = 6$ , satisfazendo  $|E_T| = |V_T| - 1$ . Não há ciclos e existe um único caminho simples entre quaisquer dois vértices.

Para o nosso objetivo principal, nos interessa entendê-las em grafos que a direção das conexões (arestas) importa.

# 2.5 Dígrafos: quando a direção importa

Existem problemas que a direção das arestas faz toda a diferença. Por exemplo, em uma rede de tráfego, algumas ruas são de mão única, ou em uma rede de comunicação, os dados podem ser enviados em uma direção específica. Nesses casos, usamos grafos dirigidos (ou grafos direcionados ou simplesmente dígrafos), onde as arestas são pares de vértices ordenados.

Um **grafo dirigido - dígrafo** (grafos direcionados) é uma estrutura matemática composta por um conjunto V de  $v\'{e}rtices$  e um conjunto A de arcos (ou arestas direcionadas) que conectam pares ordenados de  $v\'{e}rtices$ .

Por vértices entendemos o mesmo conjunto que em grafos comuns, mas agora as arestas entre eles têm uma direção específica. Cada arco  $(u, v) \in A$  indica uma conexão direcionada do vértice u para o vértice v, significando que a relação ou fluxo ocorre de u para v.

Assim, temos os conceitos de cabeça e cauda de um arco: em (u, v), u é a cauda (origem) e v é a cabeça (destino). Esses conceitos podem ser formalizados por meio de funções  $s, t: A \to V$ , onde s((u, v)) = u (cauda) e t((u, v)) = v (cabeça).

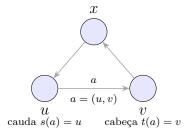


Figura 27: Dígrafos: arcos têm direção. No arco a=(u,v), u é a cauda (origem) e v é a cabeça (destino). As funções  $s,t:A\to V$  dão a origem e o destino de cada arco.

Em digrafos podem ocorrer laços (arcos que conectam um vértice a ele mesmo, como (u,u)) nesse caso as funções s e t coincidem. Também podem ocorrer múltiplos arcos entre o mesmo par de vértices (como (u,v) e (u,v) distintos). Pictograficamente representamos essas condições com setas com dupla ponta ou com rótulos diferentes.

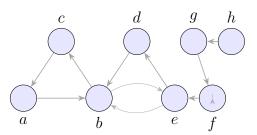


Figura 28: Dígrafo: exemplo de grafo dirigido D = (V, A). Pontos representam os vértices V e setas representam os arcos A, que são pares ordenados de vértices. Laços (como (f, f)) e múltiplos arcos (como (b, e) e (e, b)) são permitidos.

Tal qual os grafos comuns, os dígrafos podem ter custos associados aos arcos. A função de custo  $c: A \to \mathbb{R}^+$  atribui um valor numérico geralmente não negativo a cada arco do dígrafo. Assim, para cada arco  $(u,v) \in A$ , c((u,v)) representa o custo associado a essa conexão direcionada.

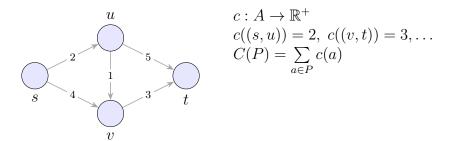


Figura 29: Dígrafos com custos nos arcos: a função  $c: A \to \mathbb{R}^+$  atribui a cada arco (u, v) um custo c((u, v)) (mostrado junto à seta). O custo de um caminho P é a soma dos custos de seus arcos,  $C(P) = \sum_{a \in P} c(a)$ .

Um conceito importante em dígrafos é o de grau de um vértice. O **grau de entrada** (ou *in-degree*) de um vértice v, denotado por  $d^-(v)$ , é o número de arcos que chegam a v (ou seja, o número de arcos cujo destino é v). O **grau de saída** (ou *out-degree*) de um vértice v, denotado por  $d^+(v)$ , é o número de arcos que saem de v (ou seja, o número de arcos cuja origem é v). Formalmente, temos:

$$d^{-}(v) = |\{(u, v) \in A \mid u \in V\}|$$

$$d^{+}(v) = |\{(v, w) \in A \mid w \in V\}|$$

Esse conceito é útil para analisar conectividade, o que nos leva ao próximo tópico, empacotamento de vértices.

#### Empacotamento de Vértices

Um **empacotamento de vértices** (conjunto independente) em um dígrafo é um conjunto  $S \subseteq V$  tal que, no subdígrafo induzido por S, todo vértice tem grau de entrada e de saída iguais a zero. Em notação de graus, se denotamos por D[S] o subdígrafo induzido, então para todo  $v \in S$  vale  $d_{D[S]}^-(v) = 0$  e  $d_{D[S]}^+(v) = 0$ . Isso é equivalente a dizer que não existe arco com ambas as extremidades em S (isto é, nenhum  $(u, v) \in A$  com  $u, v \in S$ ).

#### Empacotamento Máximo de Vértices

Um empacotamento máximo de vértices é um empacotamento de vértices que contém o maior número possível de vértices. Em outras palavras, é um conjunto  $S \subseteq V$  tal que não existem arcos entre vértices em S e S é o maior possível em termos de cardinalidade. Encontrar um empacotamento máximo em um dígrafo é um problema NP-difícil, vamos falar sobre o que isso significa na sessão de algoritmos e complexidade.

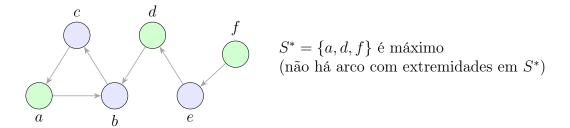


Figura 30: Empacotamento máximo de vértices: para este dígrafo,  $S^* = \{a, d, f\}$  (vértices em verde) é um conjunto independente de tamanho máximo.

Esses conceitos de conectividade e empacotamento de vértices nos levam a explorar as subestruturas especiais que existem em dígrafos, que são similares às que vimos em grafos comuns, mas com algumas diferenças importantes devido à direção dos arcos.

# 2.5.1 Subestruturas em dígrafos

Tal qual os grafos que discutimos na sessão anterior, os dígrafos também possuem as mesmas estruturas especiais, essas estruturas chamadas sub-digrafos mudam um pouco em nomenclatura: caminhos quando direcionados são chamados de trilhas, e ciclos são chamados de circuitos e componentes conexas são componentes fortemente conexas e árvores viram arborescências. Além da nomenclatura, a direção dos arcos traz algumas nuances importantes, discutiremos sobre essas nuances apenas na sessão de arborescências e como os algoritmos de busca mudam bastante em complexidade se estamos tratando de arborescências ou árvores comuns.

Um subdígrafo D' = (V', A') de um dígrafo D = (V, A) é um dígrafo onde  $V' \subseteq V$  e  $A' \subseteq A$ . Ou seja, D' é formado por um subconjunto dos vértices e arcos de D.

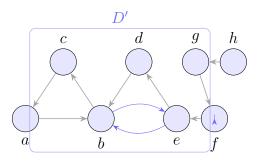


Figura 31: Subdígrafo: o subdígrafo D' = (V', A') está destacado em azul. Aqui,  $V' = \{b, c, d, e\}$  e  $A' = \{(b, c), (c, b), (d, b), (e, d), (b, e), (e, b)\}.$ 

# Subdigrafos Induzidos

Um subdigrafo pode ser induzido por um conjunto de vértices  $V' \subseteq V$ , denotado como D[V']. Nesse caso, o conjunto de arcos A' inclui todos os arcos em A que têm ambas as extremidades em V', ou seja,  $A' = \{(u,v) \in A \mid u,v \in V'\}$ .

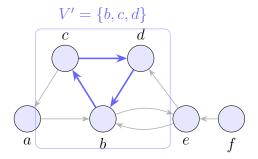


Figura 32: Subdígrafo induzido: para  $V' = \{b, c, d\}$ , o subdígrafo D[V'] contém todos os arcos de D cujas extremidades pertencem a V' (em azul). Arcos que incidem em V' mas conectam a vértices fora de V' não pertencem a D[V'].

# Subdigrafo Maximal

Um subdigrafo é tido como maximal se não é possível adicionar mais vértices ou arcos a ele sem perder alguma propriedade específica, como conexidade ou aciclicidade.

$$D' = \{b, c, d\}, \ (b, c), (c, d) \text{ \'e ac\'aclico.}$$
 Adicionar  $(d, b)$  cria o circuito  $b \to c \to d \to b$ .

Figura 33: Subdígrafo maximal (por aciclicidade): D' é acíclico e maximal em D; adicionar o arco restante (d,b) cria um circuito.

# Subdigrafo Gerador

Um subdigrafo é tido como gerador se inclui todos os vértices do dígrafo original, ou seja, V' = V. Nesse caso, o subdigrafo é formado por um subconjunto dos arcos do dígrafo original.

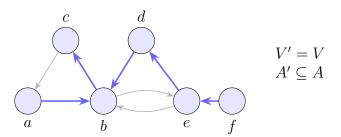


Figura 34: Subdígrafo gerador: inclui todos os vértices do dígrafo original (V' = V) e apenas um subconjunto dos arcos (em azul).

Com essas definições em mente, podemos explorar as subdigrafos específicos que citaremos ao longo da dissertação, começando pelas trilhas, circuitos, componentes fortemente conexas, componentes-fonte e arborescências.

### 2.5.2 Subdigrafos Especiais

#### **Trilhas**

Uma **trilha** (ou caminho direcionado) em um dígrafo é uma sequência de vértices conectados por arcos que respeitam a direção. Formalmente, uma trilha P de comprimento  $k \geq 1$  é uma sequência de vértices  $P = (v_1, v_2, \ldots, v_{k+1})$  tal que cada par consecutivo  $(v_i, v_{i+1})$  é um arco em A. O comprimento da trilha é o número de arcos que ela contém, que é k.

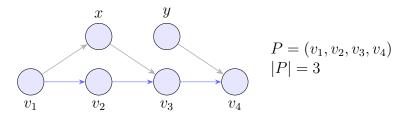


Figura 35: Trilha em dígrafo: a trilha  $P = (v_1, v_2, v_3, v_4)$  está destacada em azul. Seu comprimento é o número de arcos percorridos, |P| = 3.

Uma conceito importante relacionado às trilhas é o de cortes.

#### Cortes e Min-cortes

Um **corte** em um dígrafo é um conjunto de arcos cuja remoção desconecta o dígrafo, ou seja, impede que haja uma trilha entre certos pares de vértices. Formalmente, dado um dígrafo D = (V, A), um corte C é um subconjunto de arcos  $C \subseteq A$  tal que a remoção dos arcos em C resulta em um dígrafo  $D' = (V, A \setminus C)$  onde não existe mais uma trilha (caminho direcionado) entre pelo menos um par de vértices  $u, v \in V$ .

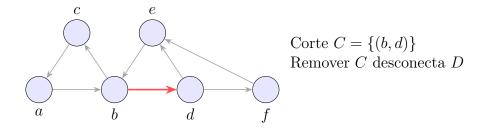


Figura 36: Corte em dígrafo: o corte  $C = \{(b, d)\}$  está destacado em vermelho. Remover esse arco desconecta o dígrafo, impedindo caminhos direcionados entre certos pares de vértices.

De forma resumida, dado um dígrafo D=(V,A) e um subconjunto  $X\subseteq V$ , denotamos por um corte s-t é determinado pela escolha de um conjunto de vértices  $X\subseteq V$  tal que  $s\in X$  e  $t\notin X$ ; pensa-se nele como a "divisão" do grafo em dois lados: X e  $V\setminus X$ .

Para tornar a notação precisa e fácil de ler:

- s-t: lê-se "de s para t". Aqui, s é a fonte (onde o fluxo nasce) e t é o sumidouro (onde o fluxo chega).
- $\delta^+(X)$  (fronteira de saída de X): conjunto de todos os arcos que saem de X para fora, isto é, para  $V \setminus X$ .
- $\delta^-(X)$  (fronteira de entrada de X): conjunto de todos os arcos que entram em X vindos de  $V \setminus X$ . Note que  $\delta^-(X) = \delta^+(V \setminus X)$ .
- Valor do corte: dado um peso (ou custo)  $c: A \to \mathbb{R}_+$  para cada arco, o valor do corte induzido por X é a soma dos pesos dos arcos que cruzam de X para fora:

$$c(\delta^+(X)) = \sum_{a \in \delta^+(X)} c(a).$$

No caso não ponderado, esse valor coincide com a quantidade de arcos que saem de X.

**Exemplo:** se 
$$\delta^+(X) = \{(u_1, v_1), (u_2, v_2)\}$$
 com  $c((u_1, v_1)) = 2$  e  $c((u_2, v_2)) = 3$ , então  $c(\delta^+(X)) = 2 + 3 = 5$ .

Um min-corte é um corte de tamanho mínimo, ou seja, é o corte com o menor número possível de arcos cuja remoção desconecta o dígrafo. Formalmente, dado um dígrafo D = (V, A), um min-corte  $C_{min}$  é um corte tal que para qualquer outro corte C,  $|C_{min}| \leq |C|$ . O tamanho do min-corte é o número de arcos em  $C_{min}$ .

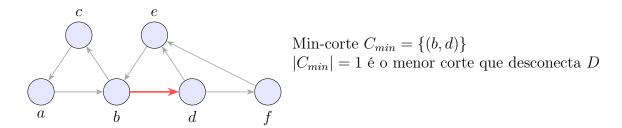


Figura 37: Min-corte em dígrafo: o min-corte  $C_{min} = \{(b,d)\}$  está destacado em vermelho. Remover esse arco desconecta o dígrafo, e é o menor corte possível, com tamanho  $|C_{min}| = 1$ .

Um teorema importante relacionado a min-cortes é o Teorema do Fluxo Máximo - Corte Mínimo, que estabelece uma relação entre o fluxo máximo que pode ser enviado de uma fonte s para um sumidouro t em um dígrafo e o valor do min-corte que separa s de t. Escolhemos apresensentar esse teorema aqui pois ele traz uma intuição interessante sobre a relação entre fluxos e cortes em dígrafos, relevantes para os algoritmos que discutiremos mais adiante.

#### Teorema 2.1: Fluxo-Corte Máximo = Mínimo Corte.

Em dígrafos com limites/pesos não negativos nos arcos, o valor de um fluxo máximo de s para t é igual ao valor de um min-corte s-t. Em símbolos: max valor(f) = min  $c(\delta^+(X))$ , onde o mínimo é sobre  $X \subseteq V$  com  $s \in X$ ,  $t \notin X$ , e  $c(\delta^+(X))$  =  $\sum_{a \in \delta^+(X)} c(a)$ .

# Prova (esboço):

(i)  $Desigualdade \leq .$  Seja f um fluxo qualquer. Para um corte  $(X, V \setminus X)$  com  $s \in X, t \notin X$ , a conservação de fluxo implica que o fluxo líquido que sai de X é exatamente valor(f). Logo,

$$\operatorname{valor}(f) = \sum_{a \in \delta^+(X)} f(a) - \sum_{a \in \delta^-(X)} f(a) \le \sum_{a \in \delta^+(X)} f(a) \le \sum_{a \in \delta^+(X)} c(a) = c(\delta^+(X)),$$

pois  $f(a) \le c(a)$  para todo arco (limite). Como isso vale para todo X, obtemos valor $(f) \le \min_X c(\delta^+(X))$ .

(ii) Desigualdade  $\geq e$  igualdade. Considere um fluxo máximo f sem caminho aumentante no grafo residual  $R_f$  (isto é, não há como aumentar o valor do fluxo). Defina X como o conjunto de vértices alcançáveis a partir de s em  $R_f$ . Então, não existe arco residual de X para  $V \setminus X$ ; logo, todo arco original que sai de X está saturado (f(a) = c(a)), e todo arco que entra em X carrega fluxo zero. Assim,

$$\operatorname{valor}(f) = \sum_{a \in \delta^+(X)} f(a) = \sum_{a \in \delta^+(X)} c(a) = c(\delta^+(X)).$$

Portanto, f atinge exatamente o valor de um corte s–t; em particular, esse corte é mínimo e f é máximo.

Comentário: Esse resultado é um protótipo de teorema *min-max*: "empacotar" muito fluxo (caminhos) equivale a "cobrir" pouco com um corte. Ver, por exemplo, [7].

Quando falamos em trilhas, precisamos também falar sobre circuitos, que são ciclos direcionados. A diferença entre trilhas e circuitos é que trilhas são caminhos direcionados que não necessariamente retornam ao ponto de origem, enquanto circuitos são caminhos direcionados que começam e terminam no mesmo vértice.

# Circuitos

Um **circuito** é um caminho direcionado que começa e termina no mesmo vértice, ou seja,  $v_1 = v_{k+1}$ . Formalmente, um circuito C é uma sequência de vértices  $C = (v_1, v_2, \ldots, v_k, v_1)$  tal que cada par consecutivo  $(v_i, v_{i+1})$  é um arco em A e  $k \geq 2$ . O comprimento do circuito é o número de arcos que ele contém, que é k.

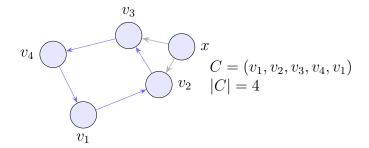


Figura 38: Ciclo direcionado em dígrafo: o ciclo  $C = (v_1, v_2, v_3, v_4, v_1)$  está destacado em azul. Seu comprimento é o número de arcos, |C| = 4.

Propriedades importantes dos circuitos incluem:

- Circuito simples: um circuito é dito simples se não repete vértices, exceto o vértice inicial/final. Ou seja,  $v_i \neq v_j$  para  $1 \leq i < j \leq k$ .
- Circuito Euleriano: um circuito que percorre cada arco exatamente uma vez. Um dígrafo possui um circuito euleriano se e somente se é fortemente conexo e o grau de entrada é igual ao grau de saída para cada vértice.
- Circuito Hamiltoniano: um circuito que visita cada vértice exatamente uma vez, exceto o vértice inicial/final. Determinar a existência de um circuito hamiltoniano é um problema que chamamos de NP-completo. Vamos explicar mais sobre isso na seção de algoritmos e complexidade computacional.

Existe um princípio chamado de princípio da casa dos pombos, que diz que se você tem mais pombos do que casas, pelo menos uma casa deve conter mais de um pombo. Em termos de grafos, isso se traduz na ideia de que se um grafo tem mais arestas do que vértices, ele deve conter pelo menos um ciclo.

Esse princípio também se aplica a dígrafos, mas com uma nuance importante: em dígrafos, o critério correto para garantir a existência de um circuito dirigido é que o grau mínimo de saída (ou de entrada) seja pelo menos 1. Ou seja, se cada vértice em um dígrafo tem pelo menos um arco saindo dele (ou entrando nele), então o dígrafo deve conter pelo menos um circuito dirigido. Abaixo apresentamos esse resultado formalmente.

#### Lema 2.1: Princípio da casa dos pombos para circuitos.

Se D = (V, A) é um dígrafo finito em que todo vértice tem grau de saída ao menos 1, isto é,  $d^+(v) \ge 1$  para todo  $v \in V$ , então D contém pelo menos um circuito dirigido. (De forma equivalente, a afirmação vale trocando "saída" por "entrada".)

**Prova:** Escolha para cada  $v \in V$  um arco (v, f(v)) que sai de v (possível porque  $d^+(v) \geq 1$ ). Fixado um vértice  $v_0$ , considere a sequência  $v_0, v_1 = f(v_0), v_2 = f(v_1), \ldots$  Como V é finito, algum vértice repete: existem i < j com  $v_i = v_j$ . O trecho  $v_i \to v_{i+1} \to \cdots \to v_j = v_i$  é um circuito dirigido em D. A versão com graus de entrada segue aplicando o argumento ao dígrafo com arcos invertidos.

**Observação:** A condição |A| > |V| não garante a existência de circuito dirigido em geral (há orientações acíclicas com muitos arcos). O critério correto, simples e útil, é o grau mínimo de saída (ou de entrada) ser pelo menos 1. Ver, por exemplo, [7].

Esse princípio ajuda a entender o comportamento básico dos métodos que os algoritmos empregam para encontrar as arborescências de custo mínimo. Vamos elaborar melhor esse ponto na seção de algoritmos em arborescências, especialmente ao discutir o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds.

No algoritmo de Chu–Liu/Edmonds que exploraremos em detalhes em capítulo posterior, para cada vértice  $v \neq r$ , escolhemos a aresta de menor custo que entra em v, o subgrafo obtido fica com grau de entrada igual a 1 em todos os  $v \neq r$ . Pelo lema, enquanto esse subgrafo ainda não for uma arborescência, ele necessariamente contém um circuito: assim o algoritmo se baseia em detectar o circuitos, contraí-lo a um único vértice e repetir a seleção sob custos reduzidos. Quando não houver mais circuitos, as arestas escolhidas formam uma arborescência ótima enraizada em r.

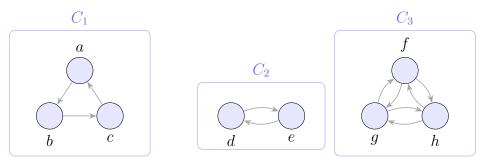
# Componentes fortemente conexas

Uma componente fortemente conexa (abreviaremos como CFC) é um subdígrafo maximal onde existe um caminho direcionado (trilha) entre qualquer par de vértices.

Formalmente, uma componente fortemente conexa C é um subdígrafo  $C = (V_C, A_C)$  onde  $V_C \subseteq V$  e  $A_C \subseteq A$ , que satisfaz a seguinte propriedade:

• C é fortemente conexo: existe um caminho direcionado entre qualquer par de vértices em  $V_C$ .

Além disso, C é maximal, o que significa que não é possível adicionar mais vértices ou arcos a C sem perder a propriedade de forte conexidade.



Cada caixa destaca uma componente fortemente conexa. Não há arcos entre  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ .

Figura 39: Componentes fortemente conexas: o dígrafo possui três componentes  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ . Cada  $C_i$  é fortemente conexo e maximal: adicionar qualquer vértice de fora quebraria a propriedade de forte conexidade interna ou exigiria arcos ausentes.

A seguir falaremos sobre a propriedade de alcançabilidade mútua em CFC, que é fundamental para entendermos a relação entre elas e arborescências (que apenas mencionaremos aqui, para aprofundarmos na sessão sobre arborescências e com os grafos acíclicos dirigidos (DAGs))<sup>1</sup>:

- CFCs e alcançabilidade mútua: dois vértices u e v pertencem à mesma CFC se, e somente se, u → v e v → u. Ou seja, existe um caminho direcionado de u para v e um caminho direcionado de v para u. A relação de pertencer à mesma CFC é uma relação de equivalência que particiona o conjunto de vértices V em subconjuntos disjuntos, cada um correspondendo a uma CFC.
- Arborescências em dígrafos fortemente conexos: um dígrafo é fortemente conexo se, e somente se, para algum (equiv., para todo) vértice r existem uma arborescência de saída enraizada em r que alcança todos os vértices e uma arborescência de entrada enraizada em r que é alcançada por todos os vértices. De fato, se D é fortemente conexo, basta rodar buscas a partir de r; no sentido inverso,  $r \rightsquigarrow v$  pela arborescência de saída e  $v \rightsquigarrow r$  pela de entrada, implicando alcançabilidade mútua entre quaisquer dois vértices via r.
- CFC e DAG. Ao contrair cada CFC a um único vértice obtemos o grafo condensado  $Cond(D)^2$ . Não há circuitos dirigidos em Cond(D); portanto, ele é um DAG.

Consequências: todo DAG tem ao menos uma componente-fonte (falaremos em seguida sobre eles) e uma componente-sumidouro; logo, Cond(D) também tem ao menos uma CFC-fonte e ao menos uma CFC-sumidouro.

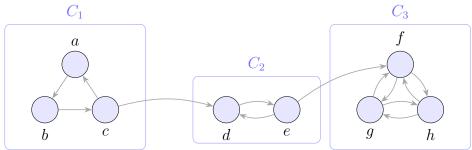
#### Components-fonte

Uma componente-fonte é uma componente fortemente conexa que não possui arcos direcionados saindo dela para outras componentes. Formalmente, uma componente-fonte C é uma componente fortemente conexa  $C = (V_C, A_C)$  onde  $V_C \subseteq V$  e  $A_C \subseteq A$ , que satisfaz a seguinte propriedade:

- Não existem arcos  $(u, v) \in A$  tais que  $u \in V_C$  e  $v \notin V_C$ .
- C é maximal: não é possível adicionar mais vértices ou arcos a C sem perder a propriedade de forte conexidade.
- C é fortemente conexo: existe um caminho direcionado entre qualquer par de vértices em  $V_C$ .

¹Um DAG (Directed Acyclic Graph) é um grafo direcionado que não contém ciclos. Em outras palavras, não é possível começar em um vértice e seguir uma sequência de arcos que retorne ao mesmo vértice. Os DAGs são estruturas fundamentais em muitas áreas da computação, incluindo a representação de dependências e a modelagem de processos.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>O grafo condensado é uma representação simplificada do dígrafo original, onde as CFCs são representadas como vértices únicos.



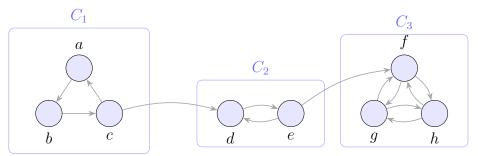
A componente  $C_1$  é uma componente-fonte porque não há arcos saindo dela para outras componentes. Já  $C_2$  e  $C_3$  não são componentes-fonte, pois há arcos entrando nelas.

Figura 40: Componente-fonte: o dígrafo possui três componentes  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ . A componente  $C_1$  é uma componente-fonte porque não há arcos saindo dela para outras componentes. Já  $C_2$  e  $C_3$  não são componentes-fonte, pois há ar cos entrando nelas.

# Componentes-sumidouro

Uma componente-sumidouro é uma componente fortemente conexa que não possui arcos direcionados entrando nela vindos de outras componentes. Formalmente, uma componente-sumidouro C é uma componente fortemente conexa  $C = (V_C, A_C)$  onde  $V_C \subseteq V$  e  $A_C \subseteq A$ , que satisfaz a seguinte propriedade:

- Não existem arcos  $(u, v) \in A$  tais que  $u \notin V_C$  e  $v \in V_C$ .
- C é maximal: não é possível adicionar mais vértices ou arcos a C sem perder a propriedade de forte conexidade.
- C é fortemente conexo: existe um caminho direcionado entre qualquer par de vértices em  $V_C$ .



A componente  $C_3$  é uma componente-sumidouro porque não há arcos entrando nela vindos de outras componentes. Já  $C_1$  e  $C_2$  não são componentes-sumidouro, pois há arcos saindo delas.

Figura 41: Componente-sumidouro: o dígrafo possui três componentes  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$ . A componente  $C_3$  é uma componente-sumidouro porque não há arcos entrando nela vindos de outras componentes. Já  $C_1$  e  $C_2$  não são componentes-sumidouro, pois há arcos saindo delas.

Existe um resultado clássico que relaciona o número de componentes-fonte e componentessumidouro em um dígrafo com o número mínimo de arcos necessários para torná-lo fortemente conexo.

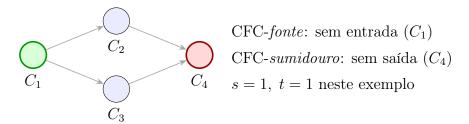


Figura 42: Grafo condensado Cond(D) e a contagem de CFCs-fonte/sumidouro:  $C_1$  não recebe arcos (fonte) e  $C_4$  não emite arcos (sumidouro).

Seja D = (V, A) um dígrafo com k componentes fortemente conexas (CFCs):

Denote por Cond(D) o grafo condensado, obtido ao contrair cada CFC de D em um único vértice; Cond(D) é sempre um DAG. Escreva s para o número de CFCs-fonte (vértices de Cond(D) sem arcos de entrada) e t para o número de CFCs-sumidouro (vértices de Cond(D) sem arcos de saida). Com essa notação, vale o seguinte:

## Lema 2.2: Mínimo de arcos para conexidade forte

Se k=1, então D já é fortemente conexo e o mínimo de arcos a adicionar é 0. Se  $k\geq 2$ , o número mínimo de arcos a adicionar para tornar D fortemente conexo é

$$\min = \max\{s, t\} \quad .$$

# Prova (esboço).

Necessidade: em qualquer supergrafo fortemente conexo, cada CFC-fonte deve receber ao menos um arco entrando e cada CFC-sumidouro deve ter ao menos um arco saindo; logo, são necessários ao menos  $\max\{s,t\}$  arcos novos.

Suficiência: numa ordenação topológica de Cond(D), conecte CFCs-sumidouro a CFCs-fonte de modo a formar um ciclo que percorra todas as CFCs. Isso pode ser feito com exatamente  $\max\{s,t\}$  arcos, mesmo quando  $s \neq t$ , emparelhando sobras de um lado com o outro.

Ver, por exemplo, textos clássicos sobre dígrafos (e.g., [7]).

Esse lema explica por que todo dígrafo com mais de uma CFC-fonte ou mais de uma CFC-sumidouro não pode ser fortemente conexo. Além disso, ele é útil em algoritmos que buscam tornar um dígrafo fortemente conexo, pois fornece um limite inferior para o número de arcos que precisam ser adicionados.

As noções de CFCs e componentes-fonte conversam diretamente com o conceito de arborescências. Pois, em uma arborescência, todos os vértices são alcançáveis a partir da raiz, o que não implica que a arborescência é fortemente conexa, mas encontrar essas componentes dentro de um dígrafo pode nos ajudar em uma busca otimizada por arborescências.

#### Arborescências

Uma **arborescência** é um dígrafo acíclico e conexo, onde há um vértice especial chamado raiz que tem um caminho direcionado para todos os outros vértices. Formalmente, uma arborescência T é um dígrafo  $T = (V_T, A_T)$  onde  $V_T \subseteq V$  e  $A_T \subseteq A$ , que satisfaz as seguintes propriedades:

- T é conexo: existe um caminho direcionado da raiz para qualquer vértice em  $V_T$ .
- T é acíclico: não contém ciclos direcionados.

Além disso, uma arborescência com n vértices sempre tem exatamente n-1 arcos.

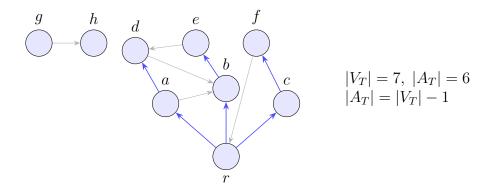


Figura 43: Arborescência: dígrafo conexo e acíclico com raiz r de onde há um caminho direcionado para todos os outros vértices em azul. No exemplo,  $|V_T| = 7$  e  $|A_T| = 6$ , satisfazendo  $|A_T| = |V_T| - 1$ . Em cinza, arcos que não fazem parte da arborescência.

#### Definições e notação adicionais

Para facilitar a discussão sobre arborescências, introduzimos algumas definições e notações adicionais: seja D=(V,A) um dígrafo e  $r\in V$  um vértice específico (a raiz). Denotamos por  $d_D^+(v)$  o grau de saída de um vértice v em D, ou seja, o número de arcos que saem de v. Analogamente,  $d_D^-(v)$  é o grau de entrada de v, o número de arcos que entram em v.

As arborescências são o principal objeto de investigação desse trabalho, portanto vamos usar uma sessão dedicada a elas para apresentar suas características, variações e aplicações.

# 2.6 Arborescências em foco

Já tratamos do conceito básico de arborescência, agora falaremos de arborescências especiais:

Arborescência Geradora: Uma arborescência é considerada geradora se inclui todos os vértices do dígrafo original, ou seja,  $V_T = V$ . Nesse caso, a arborescência é formada por um subconjunto dos arcos do dígrafo original.

**Arborescência Maximal:** Uma arborescência é dita maximal se não é possível adicionar mais vértices ou arcos a ela sem perder a propriedade de ser uma arborescência, ou seja, sem criar ciclos ou desconectar o dígrafo.

#### Ramificações Geradoras

Uma **ramificação geradora** é um subdígrafo que é uma arborescência que inclui todos os vértices do dígrafo original. Formalmente, uma ramificação geradora R é um subdígrafo  $R = (V_R, A_R)$  onde  $V_R = V$  e  $A_R \subseteq A$ , que satisfaz as seguintes propriedades:

- R é uma arborescência: existe um vértice especial chamado raiz que tem um caminho direcionado para todos os outros vértices.
- R é maximal: não é possível adicionar mais arcos a R sem perder a propriedade de ser uma arborescência.

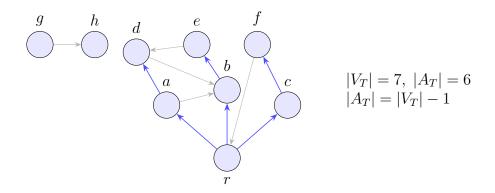


Figura 44: Ramificação geradora: arborescência que inclui todos os vértices do dígrafo original, em azul. No exemplo,  $|V_T| = 7$  e  $|A_T| = 6$ , satisfazendo  $|A_T| = |V_T| - 1$ . Em cinza, arcos que não fazem parte da ramificação geradora.

Quando falama<br/>os de ramificações geradoras, podemos falar de uma estrutura que fixa um vértice raiz r e constrói uma arborescência que alcança todos os outros vértices a partir dessa raiz. Essa estrutura é conhecida como r-arborescência.

Arborescência de Raiz Específica: uma arborescência de raiz específica é uma arborescência onde a raiz é um vértice pré-determinado do dígrafo. Isso é útil em situações onde um ponto de origem específico deve ser o início dos caminhos direcionados para todos os outros vértices. Podemos chamá-la de r-arborescência, onde r é o vértice raiz.

Em uma arborescência  $T = (V_T, A_T)$  enraizada em r, temos as seguintes propriedades:

• A raiz r tem grau de entrada zero:  $d_T^-(r) = 0$ .

- Todo outro vértice  $v \in V_T \setminus \{r\}$  tem grau de entrada exatamente um:  $d_T^-(v) = 1$ . Isso significa que há exatamente um arco direcionado entrando em cada vértice, exceto na raiz.
- O grau de saída  $d_T^+(v)$  pode variar, mas para garantir que T seja conexo, deve haver pelo menos um arco saindo de r para alcançar os outros vértices.

Arborescência inversa (in-arborescência): uma arborescência inversa enraizada em r — também chamada de in-arborescência — é o resultado de inverter a orientação de todos os arcos de uma arborescência (out-arborescência) enraizada em r. Equivalentemente: é um dígrafo acíclico no qual, para todo  $v \neq r$ , existe exatamente um caminho direcionado de v até r (isto é, todos os arcos estão orientados em direção à raiz). Em termos de graus, numa in-arborescência cada vértice  $v \neq r$  tem grau de saída igual a 1 (o arco para seu "pai") e a raiz r tem grau de saída 0; os graus de entrada são complementares aos de uma out-arborescência.

As arborecências podem ter custos associados aos seus arcos, o que nos leva ao conceito de arborescência de custo mínimo.

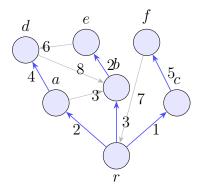
#### Arborescência de Custo Mínimo:

Uma arborescência de custo mínimo é uma arborescência que minimiza a soma dos pesos dos arcos que a compõem. Esse conceito é especialmente relevante em aplicações onde os arcos têm custos associados, como em redes de transporte ou comunicação.

Finalmente podemos conceituar a principal estrutura que estudaremos nesta dissertação: a r-arborescência de custo mínimo e sua variante, a r-arborescência inversa de custo mínimo.

**r-arborescência de custo mínimo:** é uma arborescência enraizada em um vértice específico r que minimiza a soma dos pesos dos arcos que a compõem. Formalmente, dada uma função de custo  $c: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$  que atribui um custo a cada arco do dígrafo D = (V, A), uma r-arborescência de custo mínimo T é uma arborescência  $T = (V_T, A_T)$  onde  $V_T \subseteq V$  e  $A_T \subseteq A$ , que satisfaz as seguintes propriedades:

- T é uma arborescência enraizada em r: existe um caminho direcionado de r para qualquer vértice em  $V_T$ .
- T minimiza o custo total: a soma dos custos dos arcos em  $A_T$  é mínima, ou seja,  $\sum_{a \in A_T} c(a)$  é minimizada.

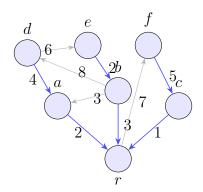


Custo total da r-arborescência: 2+3+1+4+2+5=17

Figura 45: r-arborescência de custo mínimo: arborescência enraizada em r que minimiza a soma dos custos dos arcos, em azul. No exemplo, o custo total é 17. Em cinza, arcos que não fazem parte da r-arborescência de custo mínimo.

**r-arborescência inversa de custo mínimo:** é uma arborescência inversa enraizada em um vértice específico r que minimiza a soma dos pesos dos arcos que a compõem. Formalmente, dada uma função de custo  $c: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$  que atribui um custo a cada arco do dígrafo D = (V, A), uma r-arborescência inversa de custo mínimo T é uma arborescência inversa  $T = (V_T, A_T)$  onde  $V_T \subseteq V$  e  $A_T \subseteq A$ , que satisfaz as seguintes propriedades:

- T é uma arborescência inversa enraizada em r: existe um caminho direcionado de qualquer vértice em  $V_T$  até r.
- T minimiza o custo total: a soma dos custos dos arcos em  $A_T$  é mínima, ou seja,  $\sum_{a \in A_T} c(a)$  é minimizada.



Custo total da r-arborescência inversa: 2+3+1+4+2+5=17

Figura 46: r-arborescência inversa de custo mínimo: arborescência inversa enraizada em r que minimiza a soma dos custos dos arcos, em azul. No exemplo, o custo total é 17. Em cinza, arcos que não fazem parte da r-arborescência inversa de custo mínimo.

As arborescências são a principal estrutura que exploraremos ao longo desta dissertação, especialmente a r-arborescência de custo mínimo e r-arborescência inversa de custo mínimo, abordaremos o problema de encontrá-las eficientemente em dígrafos com custos associados aos arcos.

#### Noções aprofundadas em arborescências

Vamos explorar algumas propriedades e teoremas importantes relacionados a arborescências, que serão úteis para entender os algoritmos que discutiremos posteriormente.

#### Grau e contagem de arcos:

Seja T uma out-arborescência enraizada em r com n vértices. Ela é exatamente a estrutura que satisfaz as três condições combinadas abaixo (todas muito fáceis de checar):

- 1. (Contagem)  $|A_T| = n 1$ .
- 2. (Entrada única) Cada vértice  $v \neq r$  recebe exatamente um arco:  $d_T^-(v) = 1$ .
- 3. (Raiz sem entrada) A raiz não recebe arcos:  $d_T^-(r)=0.\,$

De forma simétrica, numa in-arborescência (arborescência inversa) valem as versões "espelhadas": cada  $v \neq r$  tem exatamente um arco saindo ( $d_T^+(v) = 1$ ) e a raiz tem grau de saída zero ( $d_T^+(r) = 0$ ).

Reciprocamente, qualquer subdígrafo que satisfaça (1)–(3) é uma out-arborescência enraizada em r (e análogamente no caso inverso).

#### Discussões importantes sobre arborescências

Dado um Dígrafo D=(V,A) e um vértice raiz  $r\in V$ , uma questão fundamental é determinar quando existe uma arborescência enraizada em r. Existem alguns resultados clássicos que caracterizam a existência de arborescências em dígrafos, bem como condições para a existência de múltiplas arborescências disjuntas. Vamos apresentar dois teoremas fundamentais nesse contexto.

#### Teorema de Fulkerson

Existem várias formas de caracterizar a existência de arborescências em um dígrafo. Uma delas é via a condição de cortes, que estabelece uma relação entre a existência de arborescências e a estrutura dos cortes no dígrafo.

Esse resultado é conhecido como o **Teorema de Fulkerson** e para entendermos ele precisamos ter em mente as seguintes definições:

• Seja D = (V, A) um dígrafo e  $X \subseteq V$  um subconjunto de vértices. O conjunto  $\delta^-(X)$  é definido como o conjunto de todos os arcos que entram em X vindos de  $V \setminus X$ . Formalmente,

$$\delta^-(X) = \{(u,v) \in A : u \in V \setminus X, v \in X\}.$$

• Um corte em um dígrafo é uma partição dos vértices em dois subconjuntos disjuntos. O conjunto  $\delta^-(X)$  representa o corte que separa X do resto do grafo.

A seguir apresentamos o teorema propriamente dito e um esboço de sua prova.

#### Teorema 2.2: Condição de existência via cortes (Fulkerson)

Seja D = (V, A) e  $r \in V$ . Existe uma out-arborescência (arborescência dirigida) enraizada em r se, e somente se,

$$\forall X \subseteq V \setminus \{r\}, \ X \neq \emptyset : \ \delta^-(X) \neq \emptyset.$$

Isto é: todo subconjunto não vazio que não contém a raiz recebe ao menos um arco vindo de fora.

# Prova (esboço):

 $(S \acute{o} se:)$  Suponha que T é uma out-arborescência enraizada em r. Pegue qualquer  $X \neq \emptyset$  sem r. Considere o primeiro vértice de X alcançado a partir de r no caminho dentro de T; o arco imediatamente anterior entra em X e pertence a  $\delta^-(X)$ . Logo  $\delta^-(X) \neq \emptyset$ .

(Se:) Agora suponha que toda parte X não vazia sem r recebe um arco. Construímos T iterativamente: comece com  $S=\{r\}$ . Enquanto  $S\neq V$ , tome um vértice  $v\in V\setminus S$  tal que existe um arco (u,v) com  $u\in S$  (existe porque, caso contrário, o conjunto  $X=V\setminus S$  não receberia arco). Adicione v e o arco (u,v). Não criamos ciclos porque cada novo vértice entra com exatamente um arco e só aponta para frente (a direção é de um vértice já inserido para um novo). Ao final, cada  $v\neq r$  tem exatamente um arco de entrada e o grafo é conexo a partir de r, logo obtivemos uma out-arborescência.

Intuição curta. A condição "todo X tem um arco entrando" impede que qualquer bloco de vértices fique isolado da raiz; o processo guloso de anexar o primeiro arco que entra em cada bloco produz a arborescência sem retrocessos.

Referência: ver, por exemplo, [7].

Outro resultado clássico é o teorema que caracteriza a existência de múltiplas arborescências arcodisjuntas em um dígrafo, conhecido como o **Teorema de Edmonds**. Precisamos de algumas definições antes de enunciá-lo:

- Duas arborescências são ditas arcodisjuntas se não compartilham nenhum arco, ou seja,  $A_{T_1} \cap A_{T_2} = \emptyset$ .
- A condição de cortes para múltiplas arborescências estabelece que, para qualquer subconjunto  $X \subseteq V \setminus \{r\}$ , o número de arcos que entram em X deve ser pelo menos igual ao número de arborescências desejadas.

- Uma out-arborescência enraizada em r é uma arborescência onde todos os caminhos direcionados partem de r e alcançam todos os outros vértices.
- O conjunto  $\delta^-(X)$  é definido como o conjunto de todos os arcos que entram em X vindos de  $V \setminus X$ . Formalmente,

$$\delta^-(X) = \{(u,v) \in A : u \in V \setminus X, v \in X\}.$$

• Um corte em um dígrafo é uma partição dos vértices em dois subconjuntos disjuntos. O conjunto  $\delta^-(X)$  representa o corte que separa X do resto do grafo.

Antes de enunciar o teorema, vale a pena mencionar o conceito de *interseção de matroides*, mas, para não alongar demais, deixamos a explicação detalhada para o Apêndice A. Aqui, apenas uma breve introdução:

- Matroides, são estruturas combinatórias que generalizam a noção de independência linear em álgebra linear. A interseção de matroides é um conceito que permite combinar duas ou mais estruturas de matroides para formar uma nova estrutura que mantém certas propriedades de independência.
- A interseção de matroides é frequentemente utilizada em problemas de otimização combinatória, onde é necessário encontrar soluções que satisfaçam múltiplas condições de independência simultaneamente.
- Familia de conjuntos independentes: cada matroide é definido por uma coleção de subconjuntos de um conjunto finito, chamados de conjuntos independentes, que satisfazem certas propriedades.
- No contexto de arborescências, a interseção de matroides pode ser usada para modelar a seleção de arcos que formam múltiplas arborescências arcodisjuntas, garantindo que cada arborescência mantenha suas propriedades de independência.

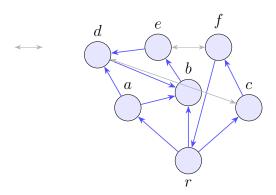


Figura 47: Dígrafo de exemplo para múltiplas arborescências arcodisjuntas.

Agora podemos enunciar o teorema de Edmonds, que fornece uma condição necessária e suficiente para a existência de k arborescências arcodisjuntas enraizadas em um vértice r.

#### Teorema 2.3: k arborescências arcodisjuntas (Edmonds)

Seja  $D = (V, A), r \in V$  e  $k \ge 1$  inteiro. São equivalentes:

- 1. Existem k out-arborescências enraizadas em r que são par a par arcodisjuntas.
- 2. (Condição de cortes) Para todo subconjunto  $X\subseteq V\setminus\{r\}$  vale  $|\delta^-(X)|\geq k$ .

Em palavras: cada "bloco" X que não contém a raiz precisa ter pelo menos k arcos distintos chegando de fora; isso é exatamente o que permite "alimentar" X a partir de r em k estruturas de ramificação independentes.

**Prova (esboço):**  $(1 \Rightarrow 2)$  Se temos k out-arborescências arcodisjuntas, então cada arborescência deve entrar em qualquer X (senão não alcançaria seus vértices). Como os arcos são distintos entre as k estruturas, precisamos de pelo menos k arcos entrando em X; logo  $|\delta^-(X)| \geq k$ .

 $(2\Rightarrow 1)$  Trata-se a construção como um problema de *interseção de matroides* ou aplicamos um procedimento incremental de troca ("augmenting"). O conjunto de arcos pode suportar no máximo k(n-1) arcos selecionados se quisermos k arborescências, onde cada vértice  $v\neq r$  recebe exatamente k arcos de entrada (um de cada arborescência). A condição de cortes impede gargalos: se algum subconjunto X tivesse menos que k arcos entrando, seria impossível abastecer seus vértices com k escolhas independentes.

Uma prova clássica (Edmonds) formula o problema como interseção de duas famílias independentes:

- (i) uma família que limita a quantidade de arcos entrando em cada vértice a no máximo k;
- (ii) uma família que evita a criação de ciclos dirigidos ao selecionar arcos (estrutura de matroide de partição + matroide gráfico orientado).

A hipótese de cortes garante que o algoritmo de aumento (que tenta adicionar um arco e, se criar ciclo ou saturar um vértice, realiza trocas) nunca fica travado antes de atingir k(n-1) arcos. Agrupando, particionamos esses k(n-1) arcos em k coleções de (n-1) arcos cada, que formam as k out-arborescências arcodisjuntas.

Referências: Edmonds (teorema das branchings) [4], apresentações modernas em [7].

Teoremas como esses servem para responder perguntas do tipo "quando existe?" e "quão rica pode ser a estrutura?". Em particular, eles nos dizem que:

• A existência de uma arborescência enraizada em r é garantida se, e somente se, todo subconjunto não vazio que não contém r recebe pelo menos um arco vindo de fora (Teorema de Fulkerson).

• A existência de k arborescências arcodisjuntas enraizadas em r é garantida se, e somente se, todo subconjunto não vazio que não contém r recebe pelo menos k arcos vindos de fora (Teorema de Edmonds).

Mas, agora estamos interessados em achar essas arborescências de forma eficiente, especialmente quando os arcos têm custos associados. Queremos encontrar a r-arborescência de custo mínimo, ou seja, a arborescência enraizada em r que minimiza a soma dos custos dos arcos que a compõem.

Um resultado central agora é a caracterização de *optimalidade* para r-arborescências de custo mínimo: as chamadas *condições de Fulkerson*. Elas conectam a solução primal (os arcos escolhidos) a um certificado dual (potenciais em subconjuntos) via custos reduzidos.

#### Terminologia:

Para um dígrafo D = (V, A), raiz r e custos  $c : A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ , um subconjunto não vazio  $X \subseteq V \setminus \{r\}$  é dito **apertado** (para uma família de pesos y) se exatamente um arco da solução escolhida entra em X e y(X) > 0.

Diremos que um arco a = (u, v) entra em X se  $u \notin X$  e  $v \in X$ .

Dada uma família de pesos  $y: \{X \subseteq V \setminus \{r\} : X \neq \emptyset\} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ , definimos o **custo** reduzido de a por

$$c'(a) = c(a) - \sum_{\substack{X \subseteq V \setminus \{r\}, \\ X \neq \emptyset, \ u \notin X, \ v \in X}} y(X).$$

# Teorema 2.4: Optimalidade de Fulkerson (r-arborescência de custo mínimo)

Seja D=(V,A), raiz r e custos  $c:A\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ . Seja T uma out-arborescência enraizada em r. As afirmações são equivalentes:

- 1. T tem custo mínimo entre todas as out-arborescências enraizadas em r.
- 2. Existem pesos  $y(X) \geq 0$  para cada  $\emptyset \neq X \subseteq V \setminus \{r\}$  tais que:
  - (a)  $c'(a) \ge 0$  para todo arco  $a \in A$  (não negatividade dos custos reduzidos);
  - (b) c'(a) = 0 para todo arco  $a \in T$  (complementaridade em arcos usados);
  - (c) Para todo X com y(X) > 0 entra exatamente um arco de T em X (complementaridade em conjuntos apertados).

Além disso, quando (2) vale, o valor  $\sum_{X} y(X)$  é exatamente o custo de T.

# Prova (esboço):

 $(2 \Rightarrow 1)$ . Para qualquer arborescência B temos

$$\mathbf{custo}(B) = \sum_{a \in B} c(a) = \sum_{a \in B} \Big( c'(a) + \sum_{X: a \text{ entra } X} y(X) \Big).$$

Trocando a ordem da soma:

$$\mathbf{custo}(B) = \sum_{a \in B} c'(a) + \sum_{X} y(X) \left| \{ a \in B : a \text{ entra } X \} \right|.$$

Pelas condições,  $c'(a) \geq 0$ , logo a primeira soma é  $\geq 0$ . Como uma out-arborescência entra em qualquer  $X \neq \emptyset$  (senão X estaria desconectado de r), temos  $|\{a \in B : a \text{ entra } X\}| \geq 1$ . Assim

$$\mathbf{custo}(B) \geq \sum_X y(X).$$

Para B=T, pela complementaridade c'(a)=0 se  $a\in T$  e para cada X com y(X)>0 entra exatamente um arco de T, obtendo

$$\mathbf{custo}(T) = 0 + \sum_{X} y(X),$$

logo  $\operatorname{custo}(T) \leq \operatorname{custo}(B)$  para qualquer B; T é ótimo.

 $(1\Rightarrow 2)$ . (Ideia) Execute o procedimento clássico: enquanto houver vértice (ou componente contraída)  $v\neq r$  sem arco de custo reduzido zero entrando, subtraia do custo de todos os arcos que entram em v o menor custo positivo entre eles (isso equivale a aumentar uniformemente y(X) para cada subconjunto X cujo primeiro arco zero estamos "criando"). Quando um ciclo de arcos de custo reduzido zero surge, contraia-o e continue no dígrafo comprimido. Ao final, os arcos de custo reduzido zero selecionados formam T. As quantidades subtraídas definem y: cada vez que subtraímos  $\alpha>0$  para um subconjunto/componente X, somamos  $\alpha$  a y(X). Construção garante (a)–(c).

**Intuição.** Os pesos y "pagam" parcialmente cada arco de fora para dentro dos subconjuntos; arcos da solução ficam exatamente "quitados" (custo reduzido 0). Se algum arco restante tivesse custo reduzido negativo, poderíamos baixar o custo da solução trocando-o por um arco de T, contradizendo optimalidade. Conjuntos com y(X) > 0 exigem uso único de um arco para não desperdiçar potencial.

Referências: Fulkerson (condições de optimalidade), apresentações modernas em [5, 7].

O teorema anterior nos diz como reconhecer, de forma concreta, que a arborescência encontrada é realmente de custo mínimo. Fazemos uma normalização simples de custos<sup>3</sup>: para cada "parte" do grafo, subtraímos, dos arcos que entram nessa parte, o menor custo

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Por "normalização de custos" entendemos subtrair a mesma constante de todos os arcos que entram em um mesmo subconjunto (ou componente) do grafo, para simplificar os valores e criar arcos de custo reduzido zero, sem alterar qual solução é ótima; em outras palavras, trabalhar com custos reduzidos.

observado; com isso, pelo menos um arco que entra em cada parte zera. A solução ótima pode ser construída usando apenas arcos com custo reduzido zero e, sob esse ajuste, não sobra nenhuma troca que diminua o custo.

Na prática, a verificação de optimalidade se reduz a checar condições locais:

- não há arcos com custo reduzido negativo;
- todo arco que compõe a arborescência tem custo reduzido zero;
- para cada conjunto "apertado" (isto é, que recebeu desconto positivo no ajuste), entra exatamente um arco da arborescência.

Se alguma dessas condições falhar, existe uma troca que barateia a solução; se todas forem satisfeitas, temos um certificado de optimalidade curto e fácil de verificar.

Com essa ideia em mãos, saímos do "o que é ótimo?" para "como chegar lá, passo a passo?". No próximo capítulo apresentamos a noção de algoritmo que adotaremos e descrevemos os métodos clássicos para este problema: o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds (que cria arcos de custo zero e contrai ciclos) e o procedimento em duas fases de András Frank. Veremos as etapas, a intuição por trás e como vamos implementá-los no projeto.

# 2.7 Algoritmos

Quando falamos em passo a passo é muito comum vir à mente a ideia de receitas de cozinha, instruções de montagem ou manuais de operação. Em ciência da computação, o termo *algoritmo* captura essa ideia de forma mais formal e precisa.

O primeiro uso documentado do termo "algoritmo" em inglês data de 1230, em uma tradução latina do trabalho de Al-Khwarizmi. No entanto, o conceito de algoritmos é muito mais antigo, remontando a procedimentos matemáticos e lógicos desenvolvidos ao longo dos séculos.

Um dos primeiros algoritmos conhecidos é o *método de Euclides* para encontrar o máximo divisor comum (mdc) de dois números inteiros, descrito por Euclides em sua obra "Os Elementos" por volta de 300 a.C.

#### Algoritmo 2.1: Método de Euclides (mdc)

Dados inteiros positivos a e b:

- 1. enquanto b > 0, substitua (a, b) por  $(b, a \mod b)$ ;
- 2. quando b = 0, devolva a.

Mas, o que diferencia uma mera receita de um algoritmo? A resposta está na clareza, precisão e capacidade de execução repetitiva das instruções. Um algoritmo deve ser:

• Não ambiguidade: cada passo deve ser definido de maneira inequívoca, sem ambiguidade.

- Especificidade: as instruções devem ser detalhadas o suficiente para que possam ser seguidas sem interpretação subjetiva.
- Executabilidade: deve ser possível executar o algoritmo de forma sistemática, sem necessidade de criatividade ou intuição.

Por isso, que chamamos o método de Euclides de algoritmo: os passos são não ambíguos; termina porque a segunda coordenada diminui até zerar; é correto pois mantém o invariante  $gcd(a,b) = gcd(b,a \mod b)$ ; e o custo é baixo (proporcional ao número de dígitos de a e b).

Além dessas características, precisamos citar mais alguns conceitos úteis na análise de algoritmos:

- Invariante: uma propriedade que permanece verdadeira durante a execução do algoritmo. Por exemplo, em um algoritmo de ordenação, um invariante pode ser que os elementos à esquerda de um índice específico estão sempre ordenados. (ex.: "não há custos reduzidos negativos" ou "cada componente tem ao menos um arco zero entrando").
- Correção: a garantia de que o algoritmo produz a saída correta para todas as entradas válidas. Isso geralmente é demonstrado por meio de provas formais ou argumentos lógicos. (ex.: justificativa de que o resultado final é uma arborescência válida e de custo mínimo)
- Terminação: a garantia de que o algoritmo sempre chegará a um ponto final, ou seja, que não entrará em um loop infinito. Isso pode ser demonstrado mostrando que alguma medida (como o tamanho da entrada) diminui a cada passo. (ex.: cada contração reduz |V|; cada ajuste cria um novo arco zero).

Essas características não definem formalmente o que é um algoritmo, mas ajudam a entender o conceito. A definição formal envolve a ideia de  $computabilidade^4$ , e isso envolve uma discussão profunda demais para o escopo deste trabalho.

#### 2.7.1 Complexidade de Algoritmos

Porém, precisamos nos aprofunda em um dos conceitos que estão envolvidos em computabilidade: o de *complexidade de algoritmos*, que se refere à quantidade de recursos computacionais (tempo e espaço) que um algoritmo consome em função do tamanho da entrada.

A complexidade de um algoritmo pode ser analisada em termos de *complexidade de tempo* e *complexidade de espaço*. A complexidade de tempo refere-se ao tempo que um algoritmo leva para ser executado, enquanto a complexidade de espaço refere-se à quantidade de memória que um algoritmo utiliza durante sua execução.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>A computabilidade é um conceito na teoria da computação, que se refere à capacidade de um problema ser resolvido por um algoritmo em um tempo finito. *Comentário formal.* Esse conceito é formalizado por meio de modelos como máquinas de Turing, funções recursivas, RAM, entre outros. Essas formalizações são equivalentes quanto ao que é computável (Tese de Church–Turing) e permitem discutir com rigor correção e complexidade (tempo e memória).

A notação assintótica é frequentemente usada para expressar a complexidade de algoritmos, permitindo descrever o comportamento do algoritmo à medida que o tamanho da entrada cresce. As notações mais comuns são:

- O grande (Big O): descreve um limite superior para o crescimento da função. Por exemplo, se um algoritmo tem complexidade  $O(n^2)$ , isso significa que o tempo de execução do algoritmo cresce no máximo proporcional a  $n^2$  para entradas grandes.
- Ômega ( $\Omega$ ): descreve um limite inferior para o crescimento da função. Se um algoritmo tem complexidade  $\Omega(n)$ , isso significa que o tempo de execução do algoritmo cresce no mínimo proporcional a n para entradas grandes.
- Theta  $(\Theta)$ : descreve um limite assintótico preciso, indicando que a função cresce exatamente proporcional a uma determinada função. Se um algoritmo tem complexidade  $\Theta(n \log n)$ , isso significa que o tempo de execução do algoritmo cresce proporcional a  $n \log n$  para entradas grandes.

Essas notações ajudam a comparar a eficiência de diferentes algoritmos e a entender como eles se comportam à medida que o tamanho da entrada aumenta<sup>5</sup>. Ao analisar a complexidade de um algoritmo, é importante considerar o pior caso, o caso médio e o melhor caso, dependendo do contexto em que o algoritmo será utilizado.

Para ilustrar a análise de complexidade, consideremos o exemplo da busca linear vs busca binária em um vetor ordenado<sup>6</sup>.

#### Exemplo: Busca Linear vs Busca Binária

O algoritmo de busca linear percorre cada elemento do vetor até encontrar o valor desejado ou chegar ao final do vetor. A complexidade desse algoritmo é O(n) no pior caso, onde n é o tamanho do vetor, pois pode ser necessário verificar todos os elementos.

## Algoritmo 2.2: Busca Linear

Dado um vetor V de tamanho n e um valor x:

- 1. Para cada índice i de 0 a n-1:
  - (a) Se V[i] = x, retorne i.
- 2. Retorne -1 (indica que x não está no vetor).

 $<sup>^5</sup>$ Por "tamanho da entrada" entendemos a quantidade de símbolos necessária para codificar a instância (tipicamente, o número de bits). Exemplos: (i) para grafos, mede-se usualmente por n=|V| e m=|E|; se há pesos, também se contabiliza o número de bits para representá-los; (ii) para inteiros, é o número de dígitos; (iii) para strings, o comprimento. Em análises de alto nível, é comum expressar custos como funções de n e m no modelo RAM (palavra de  $\Theta(\log n)$  bits), mas quando os pesos são grandes a complexidade em bits pode prevalecer.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Por vetor ordenado entendemos um arranjo (array) em que os elementos estão armazenados em posições consecutivas e dispostos segundo uma ordem total (tipicamente crescente ou não decrescente). Essa organização permite algoritmos como a busca binária, que dependem de comparações para descartar metades do intervalo.

Já o algoritmo de busca binária aproveita o fato de que o vetor está ordenado para reduzir o espaço de busca pela metade a cada iteração.

# Algoritmo 2.3: Busca Binária

Dado um vetor ordenado V de tamanho n e um valor x:

- 1. Defina início = 0 e fim = n 1.
- 2. Enquanto início  $\leq$  fim:
  - (a) Calcule  $meio = \left\lfloor \frac{\text{início} + \text{fim}}{2} \right\rfloor$ .
  - (b) Se V[meio] = x, retorne meio.
  - (c) Se V[meio] < x, defina início = meio + 1.
  - (d) Caso contrário, defina fim = meio 1.
- 3. Retorne -1 (indica que x não está no vetor).

O algoritmo de busca linear tem a seguinte complexidade:

- Melhor caso: O(1) o elemento procurado está na primeira posição.
- Caso médio: O(n) em média, metade dos elementos precisam ser verificados.
- Pior caso: O(n) o elemento procurado está na última posição ou não está no vetor.

Já o algoritmo de busca binária tem a seguinte complexidade:

- Melhor caso: O(1) o elemento procurado está no meio do vetor.
- Caso médio:  $O(\log n)$  em média, a cada iteração, o tamanho do vetor é reduzido pela metade.
- Pior caso:  $O(\log n)$  o elemento procurado não está no vetor ou está na extremidade.

Esse exemplo ilustra como a análise de complexidade pode fornecer insights sobre a eficiência de um algoritmo em diferentes cenários. A busca binária é muito mais eficiente do que uma busca linear (O(n)) para grandes vetores, graças à sua capacidade de reduzir o espaço de busca pela metade a cada iteração.

#### 2.7.2 Os problemas e suas complexidades

Não avaliamos só o desempenho de um algoritmo; também queremos saber quão difícil  $\acute{e}$  o  $pr\acute{o}prio$  problema, assim temos a seguinte forma de classificar problemas:

- Problemas de decisão: problemas que podem ser respondidos com "sim"ou "não". Ex.: "Existe um caminho entre dois vértices em um grafo?"
- **Problemas de otimização**: problemas que envolvem encontrar a melhor solução possível entre várias opções. Ex.: "Qual é o caminho mais curto entre dois vértices em um grafo ponderado?"

• Problemas de contagem: problemas que envolvem contar o número de soluções possíveis. Ex.: "Quantos caminhos existem entre dois vértices em um grafo?"

Cada classe de problemas pode ter diferentes níveis de dificuldade, que avaliamos em termos de *complexidade computacional*, que mede os recursos necessários (tempo e espaço) para resolver o problema.

Problemas são considerados "fáceis" quando são resolvíveis em tempo polinomial, enquanto outros são "difíceis" quando não se conhece nenhum algoritmo eficiente para resolvê-los.

#### Classes de complexidade de problemas

Como regra prática, consideramos tratáveis os problemas que admitem soluções em tempo (ou espaço) polinomial no tamanho da entrada e intratáveis os que não admitem. Essa distinção é formalizada por meio de classes de complexidade, que agrupam problemas segundo sua dificuldade intrínseca. Abaixo apresentamos-as:

- P (tempo polinomial). "Resolver é fácil": existe um algoritmo que encontra a resposta em tempo que cresce como  $n^k$  para algum k. Exemplos: conectividade em grafos, árvore geradora mínima (MST), caminho mínimo com pesos não negativos, fluxo máximo.
- **NP** (verificação polinomial). "Conferir é fácil": se alguém propõe uma solução, conseguimos *verificar* em tempo polinomial se ela está correta (achar pode ser difícil). Exemplos: *SAT* (satisfatibilidade booleana), *Clique*, *Vertex Cover*.
- **co-NP**. Complementos dos problemas em NP "conferir o 'não' é fácil" em vez do "sim". Exemplo: *TAUT* (verificar se uma fórmula é tautologia) está em co-NP.
- NP-difícil. "Tão difíceis quanto o mais difícil de NP": todo problema de NP reduz-se (em tempo polinomial) a eles. Podem ser de decisão, otimização ou contagem e não precisam estar em NP. Em geral, não se espera algoritmo polinomial para todos os casos. Exemplos: versão de otimização do TSP (caixeiro-viajante), programação inteira, coloração mínima de grafos.
- **NP-completo**. "Os mais difíceis *dentro* de NP": problemas de decisão que estão em NP e são NP-difíceis. Se algum NP-completo tiver algoritmo polinomial, então P = NP. Exemplos: *SAT*, *3-SAT*, problema *Hamiltoniano* (existe ciclo hamiltoniano?).
- **PSPACE** (espaço polinomial). "Memória polinomial, tempo possivelmente enorme": resolvíveis usando memória que cresce polinomialmente com o tamanho da entrada. Exemplo: *QBF* (satisfatibilidade com quantificadores) é PSPACE-completo.

#### Reduções polinomiais

Para comparar dificuldades, usamos reduções de problemas, reduzimos o problema A ao problema B (escrevemos  $A \leq_p B$ ) quando conseguimos transformar qualquer instância de A em uma instância de B em tempo polinomial, de modo que resolver B nos dê a

resposta de A com apenas um sobrecusto polinomial. Logo: se  $A \leq_p B$ , então B é pelo menos tão difícil quanto A (um resolvedor para B resolveria A via redução).

#### Relações conhecidas

Temos inclusões básicas:  $P \subseteq NP$ ,  $P \subseteq co-NP$  e  $NP \subseteq PSPACE \subseteq EXP$ . Acredita-se que muitas dessas inclusões sejam estritas, mas isso não foi provado; em particular, o problema P vs NP permanece em aberto. Também não se sabe se NP = co-NP.

Essas classes não só categorizam problemas por sua dificuldade intrínseca, como também orientam a estratégia de solução. Em linhas gerais: (i) quando o problema está em P, preferimos algoritmos exatos com tempo polinomial; (ii) para problemas NP-completos/NP-difíceis, não se conhecem algoritmos exatos polinomiais (a menos que P = NP), e métodos gerais costumam ter pior caso exponencial. Por isso, são comuns heurísticas, algoritmos de aproximação e abordagens de complexidade parametrizada (FPT), além de algoritmos pseudo-polinomiais em casos numéricos. Muitas vezes, estruturas especiais (ex.: largura de árvore pequena, aciclicidade, graus limitados) também permitem soluções exatas polinomiais para subclasses. A seguir, explicitamos essa distinção entre algoritmos exatos e heurísticas.

## 2.7.3 Tipificando Algoritmos

É comum ouvirmos que "o ótimo é inimigo do bom". Essa frase, atribuída a Voltaire, expressa a ideia de que buscar a perfeição pode impedir que se alcance um resultado satisfatório. Essa tensão entre buscar o ideal do "ótimo" ou aceitar o "suficientemente bom" quando recursos e tempo são limitados<sup>8</sup> essa noção se materializa em uma forma de tipificação de algoritmos.

#### Algoritmos Exatos vs Heurísticos

Essa distinção é especialmente relevante em problemas de otimização, onde o objetivo é encontrar a melhor solução possível entre um conjunto de soluções viáveis. Existem dois tipos principais de algoritmos para abordar esses problemas: os algoritmos exatos e os algoritmos heurísticos.

 Algoritmos Exatos: são aqueles que garantem encontrar a solução ótima para um problema, se uma solução existe. Eles exploram todas as possibilidades ou utilizam técnicas matemáticas rigorosas para garantir a optimalidade. Exemplos incluem algoritmos de programação linear, algoritmos de busca exaustiva e algoritmos baseados em teoria dos grafos, como o algoritmo de Dijkstra para caminhos mínimos.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Consequência útil: se  $A \leq_p B$  e B tem algoritmo polinomial, então A também tem. Para mostrar que um problema C é NP-difícil, reduzimos de um NP-completo conhecido P para C (isto é,  $P \leq_p C$ ). Para provar que C é NP-completo, além disso precisamos que C ∈ NP. Exemplo: 3-SAT  $\leq_p$  Clique — resolver Clique eficientemente daria um método eficiente para 3-SAT.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Na teoria da decisão, essa postura pragmática é conhecida como *satisficing*, termo introduzido por Herbert A. Simon.

Algoritmos Heurísticos: são métodos que buscam soluções boas (mas não necessariamente ótimas) para problemas complexos, especialmente quando o espaço de soluções é muito grande ou quando o problema é NP-difícil. Eles utilizam regras práticas, aproximações ou estratégias de busca para encontrar soluções rapidamente. Exemplos incluem algoritmos genéticos, algoritmos de busca local e algoritmos de otimização por enxame de partículas.

Um tipo de algoritmo heurístico que merece destaque são os *algoritmos gulosos*, pois os algoritmos que estudaremos para encontrar r-arborescências de custo mínimo se enquadram nessa categoria.

#### Algoritmos Gulosos

Os algoritmos gulosos são uma classe de algoritmos heurísticos que tomam decisões locais ótimas em cada etapa, na esperança de que essas escolhas levem a uma solução globalmente ótima. Eles são frequentemente utilizados em problemas de otimização, onde uma solução ótima é desejada, mas encontrar essa solução pode ser computacionalmente inviável.

Os algoritmos gulosos são caracterizados por:

- 1. Escolha Local Ótima: Em cada etapa do algoritmo, uma escolha é feita com base em algum critério de otimização local. Essa escolha é feita sem considerar as consequências futuras, ou seja, o algoritmo "se contenta" com a melhor opção disponível no momento.
- 2. **Decisões defitivas**: Uma vez que uma escolha é feita, o algoritmo não reconsidera essa decisão. Isso significa que, se uma escolha levar a uma solução subótima, o algoritmo não tentará corrigir esse erro mais tarde.
- 3. **Eficiência**: Os algoritmos gulosos tendem a ser mais eficientes em termos de tempo de execução do que métodos exatos, pois não exploram todo o espaço de soluções. No entanto, essa eficiência pode vir à custa da qualidade da solução encontrada.

Exemplos clássicos de algoritmos gulosos incluem:

- Kruskal: seleciona as arestas de menor peso, evitando formar ciclos; produz uma árvore geradora mínima.
- **Prim**: inicia em um vértice e, a cada passo, adiciona a aresta mais leve que cruza o corte entre a árvore e o restante do grafo.
- Dijkstra: em dígrafos (ou grafos) com pesos não negativos, expande pelo vértice de menor distância conhecida e relaxa suas saídas.
- Kahn (ordenação topológica): em DAGs, remove repetidamente vértices de grau de entrada zero e elimina suas saídas, construindo uma ordem topológica.

- Chu–Liu/Edmonds (arborescência mínima): escolhe, para cada  $v \neq r$ , o arco de menor custo que entra em v; ao formar ciclos, contrai-os e usa custos reduzidos até obter a r-arborescência de custo mínimo.
- Frank (arborescência mínima em duas fases): na primeira fase, constrói uma arborescência qualquer; na segunda, ajusta os custos reduzidos e troca arcos para minimizar o custo total.

Com esses conceitos em mente, estamos prontos para explorar os algoritmos específicos para encontrar r-arborescências de custo mínimo, que serão detalhados no próximo capítulo.

# 3 Em busca da Arborescência Perdida

Vamos usar esse capítulo para situar a evolução do problema: começamos revisitando como se encontra conectividade de menor custo em grafos não dirigidos por meio de árvores geradoras mínimas (MST), onde estratégias gulosas são corretas graças aos princípios de corte e de ciclo. Em seguida veremos por que, ao passar para dígrafos e buscar uma **r-arborescência de custo mínimo**, essas mesmas receitas não se aplicam literalmente: surgem ciclos dirigidos e falta um "corte seguro" direto. Essa transição motiva as ferramentas certas — custos reduzidos e contração de ciclos — que aparecem no algoritmo de **Chu–Liu/Edmonds** e, adiante, no procedimento em duas fases de **Frank**.

#### 3.1 Contexto Histórico

O problema de encontrar uma r-arborescência de custo mínimo em um dígrafo ponderado é de certa forma uma evolução do problema de conectividade de menor custo em grafos não dirigidos, mas traz desafios adicionais que exigem novas ferramentas e estratégias.

#### A busca em grafos

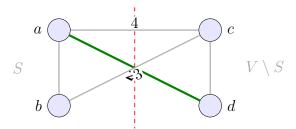
Antes de tratarmos do caso dirigido, vamos falar sobre a intuição dominante de como construir estruturas de conectividade de menor custo vinha do caso de grafos não dirigidos: as **árvores geradoras mínimas**<sup>9</sup> (Minimum Spanning Trees, MST).

De modo geral, funciona a seguinte regra para esse caso: "escolha sempre a aresta mais barata disponível e encontraremos uma estrutura ótima". Existem dois princípios que justificam essa intuição:

• Princípio do corte seguro. Um corte é uma separação do conjunto de vértices em duas partes S e  $V \setminus S$ . Dizemos que uma aresta "cruza" o corte se tem uma ponta em cada lado. O princípio afirma: a aresta de menor peso que cruza qualquer corte é segura, ou seja, pode ser incluída em alguma MST sem perder optimalidade. É o mesmo que dizer intuitivamente, que se alguma solução ótima usa uma aresta  $e^*$  que cruza um certo corte e existe outra aresta e mais barata cruzando o mesmo

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Definição. Em um grafo não dirigido, conexo e ponderado G=(V,E) com pesos  $w:E\to\mathbb{R}$ , uma árvore geradora mínima é um subconjunto de arestas  $T\subseteq E$  que forma uma árvore (conecta todos os vértices, é acíclica e tem |T|=|V|-1) e que minimiza  $\sum_{e\in T} w(e)$ .

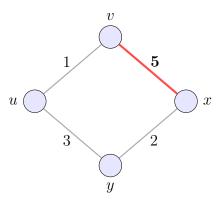
corte, podemos trocar  $e^*$  por e. A troca mantém o grafo conectado (o corte continua sendo cruzado) e não aumenta o custo. Portanto, a mais barata do corte é sempre segura.



A aresta mais barata que cruza o corte

Figura 48: Princípio do corte seguro: entre as arestas que cruzam  $(S, V \setminus S)$ , a de menor peso (em verde) é segura — pode ser incluída em alguma MST sem perder optimalidade.

• Princípio do uso da aresta mais pesada em um ciclo. Em qualquer ciclo, a aresta de maior peso não pode pertencer a uma MST, pois existe uma troca que reduz (ou não aumenta) o custo total removendo essa aresta pesada, podemos entender que em um ciclo C, remover a aresta mais pesada não desconecta o grafo (há caminho alternativo dentro do próprio ciclo). Como é a mais cara, retirá-la só pode reduzir (ou manter) o custo. Logo, nenhuma MST precisa conter a aresta mais pesada de um ciclo.



A aresta mais pesada do ciclo (vermelha) não precisa aparecer em nenhuma MST

Figura 49: Princípio do ciclo: em qualquer ciclo, a aresta mais pesada (em vermelho) pode ser removida sem desconectar o grafo, reduzindo (ou não aumentando) o custo. Portanto, nenhuma MST contém a aresta mais pesada de um ciclo.

Assim o problema de encontrar uma árvore geradora mínima (MST) consiste em dado um grafo (não dirigido), conexo e ponderado G=(V,E) com pesos  $w:E\to\mathbb{R}$ , queremos um subconjunto de arestas  $T\subseteq E$  que conecta todos os vértices sem ciclos (forma uma árvore) e minimiza  $\sum_{e\in T} w(e)$ . Com base nos princípios acima, duas soluções gulosas são propostas: **Kruskal** e **Prim**.

• Kruskal: ordena as arestas por peso e adiciona enquanto não formar ciclo; usa o princípio do ciclo para evitar carregar a aresta mais pesada de um ciclo.

 Prim: começa em um vértice e cresce a árvore; a cada passo escolhe a aresta mais leve que cruza o corte entre "dentro" e "fora" — aplicação direta do princípio do corte.

# Algoritmo 3.1: Kruskal (MST, guloso por peso crescente)

Entrada: grafo não dirigido G = (V, E), pesos w.

- 1. Ordene as arestas por peso crescente.
- 2. Inicialize um Union- $Find^a$  com cada vértice em seu próprio conjunto; comece com  $T=\emptyset$ .
- 3. Para cada aresta  $e = \{u, v\}$  na ordem: se u e v estão em componentes diferentes, una as componentes e adicione e a T.
- 4. Pare quando |T| = |V| 1. Devolva T.

Kruskal é correto pelos princípios de corte e ciclo; com Union-Find eficiente, roda em  $O(m \log m)$  (ou  $O(m \log n)$ ).

## Algoritmo 3.2: Prim (MST, expansão por corte mínimo)

Entrada: grafo não dirigido G = (V, E), pesos w, vértice inicial s.

- 1. Inicialize  $T = \{s\}$  e uma fila de prioridades<sup>a</sup> com as arestas que saem de T, chaveando pelo menor peso.
- 2. Enquanto |T| < |V|: extraia a aresta mais leve  $\{u, v\}$  com  $u \in T$  e  $v \notin T$ ; adicione v e  $\{u, v\}$  à árvore; atualize as chaves das arestas que cruzam o novo corte.
- 3. Devolva a árvore construída.

Prim também é correto pelo princípio do corte; com fila de prioridades binária, executa em  $O(m \log n)$  (ou em  $O(m + n \log n)$ ); em grafos densos com heaps de Fibonacci<sup>10</sup>, pode-se obter  $O(m + n \log n)$  [2, 6, 8, 3].

 $<sup>^</sup>a$ Também conhecido como Disjoint Set Union (DSU) ou estrutura de conjuntos disjuntos. Mantém uma partição dinâmica dos vértices em componentes, oferecendo operações  ${\tt find}$  (descobrir o representante do conjunto) e  ${\tt union}$  (unir dois conjuntos). Com as heurísticas de união por rank/tamanho e compressão de caminhos, ambas operam em tempo amortizado  $\alpha(n)$  (a função inversa de Ackermann), efetivamente constante na prática. Em Kruskal, essa estrutura detecta ciclos rapidamente ao verificar se as pontas de uma aresta pertencem a componentes distintas.

<sup>&</sup>lt;sup>a</sup>Estrutura que mantém elementos com chaves de prioridade e permite extrair rapidamente o de menor (ou maior) chave. Implementações típicas: heap binário (push/decrease-key/pop em  $O(\log n)$ ), heap de Fibonacci (decrease-key amortizado O(1), pop em  $O(\log n)$ ), e, em grafos com pesos pequenos, fila bucket (Dial) com tempos quase-lineares. No Prim, a fila é chaveada pelo menor peso de aresta que conecta o vértice fora da árvore ao conjunto T.

 $<sup>^{10}</sup>Heaps$  (montes) são implementações clássicas de filas de prioridades. O **heap binário** mantém uma árvore quase completa e executa insert/extract-min/decrease-key em  $O(\log n)$ . Já o **heap de Fibonacci** é uma estrutura amortizada com decrease-key e meld (união) em O(1) amortizado e

Os algoritmos gulosos de MST são corretos em grafos não dirigidos, mas a passagem para dígrafos não é direta. No caso dirigido, buscamos uma **r-arborescência de custo mínimo**: para cada  $v \neq r$ , exatamente um arco entra em v, e o conjunto deve ser acíclico e alcançável a partir de r. Se imitarmos a receita de MST (escolher sempre o arco de entrada mais barato), aparecem  $ciclos \ dirigidos$ , e não há um análogo imediato do "corte seguro".

Duas abordagens clássicas contornam essas dificuldades: (i) **Chu–Liu/Edmonds**, que mantém custos reduzidos (criando arcos de custo reduzido zero) e resolve conflitos por contração de ciclos; e (ii) o procedimento em duas fases de **Frank**, que parte de uma arborescência qualquer e a refina via ajustes de custos e trocas de arcos. Em ambos os casos, escolhas locais são acopladas a um mecanismo global de consistência, garantindo otimalidade no caso dirigido [7].

# 3.1.1 A busca em digrafos

O primeiro avanço significativo na busca por arborescências de custo mínimo em dígrafos foi feito por Y. Chu e T. Liu em 1965, que propuseram um algoritmo para encontrar a arborescência de custo mínimo em um dígrafo. Esse algoritmo foi posteriormente aprimorado por Jack Edmonds em 1967, que introduziu o conceito de custos reduzidos e a técnica de contração de ciclos, tornando o algoritmo mais eficiente e robusto.

Desde então, a pesquisa nessa área tem se concentrado em melhorar a eficiência dos algoritmos existentes, bem como em explorar novas técnicas e abordagens para lidar com diferentes tipos de dígrafos e restrições adicionais. A contribuição de András Frank, que propôs um procedimento em duas fases para encontrar arborescências de custo mínimo, é um exemplo notável dessa evolução contínua.

# 3.2 Os meios para um fim

Maquiável é conhecido por uma de suas citações: "Os fins justificam os meios". Essa frase ficou famosa, porque tem uma interpretação polêmica: em certas circunstâncias, qualquer ação pode ser justificada se o resultado final for considerado positivo ou benéfico. Muitos, não concordam com essa visão, argumentando que os meios também importam e que ações imorais não podem ser justificadas por bons resultados.

Por um lado, na matemática essa frase pode ser validada quando falamos em duas formas distintas de construir algoritmos: por *iteratividade* ou *recursividade*.

#### Iteratividade

Muitos algoritmos — incluindo os gulosos — são construídos por *iteração*: repetimos um bloco de instruções enquanto uma condição não é satisfeita. Para projetar e analisar laços com clareza, três ideias são centrais:

extract-min em  $O(\log n)$ . Em algoritmos como Prim e Dijkstra, onde decrease-key é frequente, isso leva a  $O(m + n \log n)$ . Apesar da melhor garantia assintótica, constantes e implementação mais simples fazem heaps binários (ou pairing heaps) serem frequentemente competitivos na prática.

- Invariante de laço: uma propriedade que é verdadeira antes do laço e permanece verdadeira a cada iteração. Ela explica o que está sendo mantido correto durante a construção.
- Variante (medida de progresso): uma quantidade que melhora estritamente a cada iteração (ex.: aumenta |T|, diminui |V|, reduz um potencial). Garante terminação.
- Critério de parada e pós-condição: quando o laço termina, o invariante implica a especificação desejada.

 $Na\ prática$ . Em **Kruskal**, o invariante é "T é uma floresta acíclica e cada componente foi conectado por arestas seguras"; a variante é |T|, que cresce até |V|-1. Em **Prim**, "T conecta um conjunto de vértices e as chaves refletem o menor corte atual"; a variante é o tamanho de T. Muitas análises usam custo por iteração ou análise amortizada 11 para capturar o desempenho agregado.

#### Recursão

Recursão resolve instâncias grandes chamando o próprio algoritmo em subinstâncias menores. Um projeto claro inclui:

- Casos base: instâncias mínimas resolvidas diretamente.
- Passo recursivo: como decompor e combinar soluções dos subproblemas.
- Medida decrescente: uma grandeza que estritamente diminui a cada chamada (ex.: número de vértices após contração), assegurando terminção.
- Corretude por indução: assumimos corretas as chamadas recursivas (hipótese indutiva) e provamos que a combinação produz uma solução correta.
- Custo por recorrência: tempo expresso por T(n) e resolvido por árvore de recursão ou Teorema Mestre<sup>12</sup>.

 $Na\ prática$ . Em Chu–Liu/Edmonds, o passo recursivo contrai um ciclo dirigido e ajusta custos; a medida decrescente é |V| (a cada contração reduzimos o número de vértices do problema), e a expansão final preserva otimalidade. No procedimento em duas fases de Frank, a primeira fase produz uma arborescência inicial; a segunda aplica refinamentos iterativos guiados por custos reduzidos — um exemplo de mistura entre recursão estrutural e iteração local.

Para ilustrar, resolvemos o mesmo problema — calcular o fatorial n! — de forma iterativa e recursiva.

 $<sup>^{11}</sup>$ A análise amortizada distribui o custo de operações caras sobre uma sequência, garantindo um custo médio por operação (ex.: decrease-key em heaps de Fibonacci).

 $<sup>^{12}</sup>$ Esboço: quando  $T(n)=a\,T(n/b)+f(n),$  com  $a\geq 1,\ b>1,$  comparamos f(n) a  $n^{\log_b a}.$  Não é necessário aqui, mas a técnica guia estimativas assintóticas.

# Algoritmo 3.3: Fatorial (iterativo)

Entrada: inteiro  $n \ge 0$ 

- 1. Se n = 0, devolva 1.
- 2. Defina  $r \leftarrow 1$ .
- 3. Para i de 1 até n:  $r \leftarrow r \cdot i$ .
- 4. Devolva r.

# Algoritmo 3.4: Fatorial (recursivo)

Entrada: inteiro  $n \ge 0$ 

1. Se  $n \le 1$ , devolva 1. (caso base)

2. Caso contrário, devolva  $n \cdot \text{FATORIAL}(n-1)$ . (passo recursivo)

Ambas as versões computam a mesma função. A iterativa evidencia a variante (o contador i) e um invariante simples (r = i! ao fim da iteração i); a recursiva explicita o caso base e o passo indutivo, e corresponde, operacionalmente, a empilhar chamadas com parâmetros decrescentes até n = 1.

Existe inclusive uma prova matemática<sup>13</sup> que diz que qualquer algoritmo iterativo pode ser reescrito de forma recursiva, e vice-versa. Ou seja, os fins justificam os meios: a escolha entre iteração e recursão é muitas vezes uma questão de preferência ou conveniência, já que ambos podem alcançar o mesmo objetivo. Porém, algoritmos recursivos podem ser mais elegantes e fáceis de entender, enquanto algoritmos iterativos podem ser mais eficientes em termos de uso de memória (evitando a sobrecarga da pilha de chamadas). Ou seja, os meios também importam. E os trabalhos de Chu–Liu/Edmonds e Frank ilustram bem essa tensão:

- Chu-Liu/Edmonds é um algoritmo recursivo que contrai ciclos e resolve o problema em subinstâncias menores, usando custos reduzidos para manter a otimalidade.
- O procedimento em **Frank** é iterativo, começando com uma arborescência qualquer e refinando-a por trocas locais guiadas por custos reduzidos, até alcançar a otimalidade.

Ambos os algoritmos são corretos e eficientes, mas adotam meios diferentes para alcançar o mesmo fim: encontrar uma r-arborescência de custo mínimo em um dígrafo ponderado.

Antes de entrar nos detalhes, faremos uma breve revisão dos conceitos e técnicas que utilizaremos adiante, para uniformizar a notação e tornar a leitura mais fluida.

 $<sup>^{13}{\</sup>rm Em}$  modelos padrão de computação (máquinas de Turing, RAM), iteração e recursão têm o mesmo poder expressivo: laços podem ser reescritos como recursão (sobre um contador/estado) e chamadas recursivas podem ser eliminadas por uma simulação explícita da pilha (iteração com uma estrutura stack). Demonstrações e variantes aparecem em textos clássicos de teoria da computação e projeto de algoritmos; ver, por exemplo, [2] (eliminação de recursão via pilha explícita). Aqui registramos apenas a equivalência conceitual, sem apresentá-la.

#### Revisão: conceitos fundamentais e técnicas

Antes de mergulharmos nos algoritmos específicos, é importante revisitar alguns conceitos fundamentais que serão cruciais para nossa compreensão:

#### Conceitos Fundamentais:

- **Dígrafo**: um grafo direcionado onde os arcos têm uma direção específica, indo de um vértice a outro.
- Arborescência: uma árvore direcionada onde todos os caminhos partem de um vértice raiz e alcançam todos os outros vértices.
- Custo dos Arcos: cada arco em um dígrafo pode ter um custo associado, representando, por exemplo, o custo de transporte ou a distância.
- r-Arborescência de Custo Mínimo: uma arborescência enraizada em um vértice r que minimiza a soma dos custos dos arcos que a compõem.
- Cortes e Conectividade: a importância dos cortes em dígrafos para garantir a conectividade e a existência de arborescências.
- Condicionalidade de Fulkerson: as condições necessárias e suficientes para a existência de uma r-arborescência de custo mínimo.

# Técnicas e Abordagens:

Para encontrar r-arborescências de custo mínimo, utilizaremos algumas técnicas e abordagens específicas:

- Normalização de Custos: ajustaremos os custos dos arcos para facilitar a identificação de arcos de custo reduzido zero.
- Contração de Ciclos: quando formos encontrar ciclos de arcos de custo reduzido zero, os contrairemos para simplificar o dígrafo.
- Custos Reduzidos: utilizaremos custos reduzidos para identificar arcos que podem ser incluídos na arborescência sem aumentar o custo total.
- Estratégias Gulosas: aplicaremos estratégias gulosas para selecionar arcos de forma eficiente, garantindo que cada escolha local contribua para a solução global ótima.
- Recursão e Expansão: usaremos recursão para resolver subproblemas em dígrafos contraídos e expandiremos as soluções para o dígrafo original.
- Análise de Complexidade: avaliaremos a eficiência dos algoritmos em termos de tempo e espaço, garantindo que sejam viáveis para grandes dígrafos.
- Provas de Corretude: forneceremos argumentos formais para garantir que os algoritmos realmente produzem a r-arborescência de custo mínimo.

No capítulo seguinte, detalharemos o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds, bem como os detalhes da implementação em Python; o subsequente será dedicado ao procedimento em duas fases de Frank e à respectiva implementação.

# 4 Algoritmo de Chu-Liu/Edmonds

O algoritmo de Chu–Liu/Edmonds é um método clássico para encontrar uma rarborescência de custo mínimo em um dígrafo ponderado. Ele combina estratégias gulosas com técnicas de normalização de custos e contração de ciclos para garantir a otimalidade da solução.

Se tentarmos copiar a receita das MSTs — dar a cada vértice  $v \neq r$  o arco de entrada mais barato — corremos o risco de fechar um *ciclo dirigido* que não chega à raiz r.

Por que isso é proibido? Em uma r-arborescência cada  $v \neq r$  deve ter exatamente um arco de entrada e r tem grau de entrada zero. Se houvesse um ciclo dirigido C, todos os vértices de C já receberiam seu único arco de entrada de dentro do próprio C, logo nenhum arco entraria em C a partir de  $V \setminus C$  (o corte  $\delta^-(C)$  ficaria vazio). Como  $r \notin C$ , não existe caminho de r para os vértices de C, contrariando a alcançabilidade exigida. Portanto, ciclos dirigidos são incompatíveis com a estrutura de r-arborescência.

Dessa forma, o desafio é duplo: preservar a informação local de "mais barato por vértice" (que é valiosa) e, ao mesmo tempo, impedir que essas escolhas locais se combinem em ciclos.

Uma maneira direta de enxergar isso é com um microexemplo: tome três vértices a, b, c (todos fora de r). Se o arco mais barato que entra em b vem de a, o de c vem de b e o de a vem de c, então as escolhas "mais baratas" formam o ciclo  $a \to b \to c \to a$ . Note que, entre essas escolhas locais, nenhum deles recebe o arco vindo de r (mesmo que existam  $r \to a, r \to b, r \to c$  mais caros); ficamos presos dentro do ciclo e não alcançamos a raiz. É exatamente esse impasse que o algoritmo resolve ao zerar custos por vértice e contrair ciclos, deixando para decidir qual arco interno remover apenas na expansão.

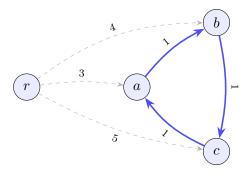


Figura 50: Ciclo gerado pelas escolhas locais "mais baratas por vértice". Os arcos grossos (custo 1) entram em a, b, c e formam  $a \to b \to c \to a$ . Os arcos tracejados partindo de r existem, mas são mais caros e por isso não são escolhidos pelo critério local.

Partindo desse cenário, a ideia é normalizar os custos por vértice: para cada  $v \neq r$ , "descontamos" de todo arco que entra em v o menor custo que chega a v. Após esse ajuste (custos reduzidos), cada  $v \neq r$  passa a ter ao menos um arco de custo reduzido zero entrando. Se os arcos de custo zero forem acíclicos, já temos a r-arborescência. Se formarem um ciclo C, isso indica que, dentro de C, todos os vértices atingiram seus

mínimos locais; então contraímos C em um **supervértice**  $x_C$  e repetimos o processo no grafo menor. Ao final, expandimos as contrações e, em cada ciclo expandido, removemos exatamente um arco para manter grau de entrada 1 e a aciclicidade global.

#### 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  $x_C$ :

- $arcos(u, w) com u \notin C, w \in C tornam-se(u, x_C);$
- $\operatorname{arcos}(w,v) \operatorname{com} w \in C, v \notin C \operatorname{tornam-se}(x_C,v);$
- arcos com as duas pontas em C tornam-se laços em  $x_C$  e são descartados.

Quando trabalhamos com custos reduzidos, ajustamos em particular os arcos que entram em C para preservar a comparação relativa: 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, ao resolver no grafo contraído, decisões ótimas podem ser traduzidas de volta na etapa de expansão.

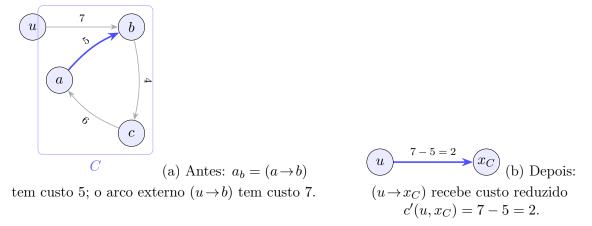


Figura 51: Ajuste de custo reduzido para um arco entrando em C. Para (u, w) com  $w \in C$ , define-se  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , onde  $a_w$  é o arco mais barato que entra em w. No exemplo,  $c'(u, x_C) = 7 - 5 = 2$ .

Para cada arco (u, w) com  $w \in C$ , ajustamos o custo reduzido para  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ , onde  $a_w$  é o arco mais barato que entra em w. No exemplo da Figura 51, 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. Arcos que saem de C ou laços internos não são ajustados.

# 4.1 Descrição do algoritmo

Em computação falamos em linguagem de alto nível quando uma linguagem de programação é próxima da linguagem humana, com abstrações que facilitam o entendimento. Em contraste, linguagens de baixo nível são mais próximas do código de máquina, exigindo detalhes explícitos.

Podemos falar também em visão operacional de alto nível quando descrevemos um algoritmo focando na lógica e nos passos principais, sem entrar em detalhes de implementação específicos.

Aqui, apresentamos o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds em uma visão operacional de alto nível, focando na lógica e nos passos principais, sem entrar em detalhes de implementação específicos. E dedicaremos a próxima subseção apenas para discutir detalhes práticos de implementação.

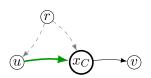
# Visão Operacional - Chu-Liu/Edmonds

Denotamos por A' o conjunto de arcos escolhidos na construção da r-arborescência.

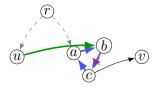
Construa A' escolhendo, para cada  $v \neq r$ , um arco de menor custo que entra em v. Se (V, A') é acíclico, então, pela caracterização de arborescências (grau de entrada 1 para todo  $v \neq r$  e ausência de ciclos), A' já é uma r-arborescência; e é  $\delta tima$ , pois realizamos o menor custo de entrada em cada vértice e nenhuma troca pode reduzir o custo mantendo as restrições [6, Sec. 4.9].

Se A' contiver um ciclo dirigido C (que não inclui r), normalizamos os custos de entrada (custos reduzidos) e contraímos C em um supervértice  $x_C$ , ajustando apenas arcos que entram em C por  $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$ .

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 de C têm custo reduzido zero, os custos são preservados na ida e na volta.



(a) Grafo contraído: arborescência com um único arco entrando em  $x_C$ .

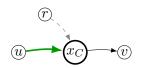


(b) Grafo original: expansão de C; mantém-se o arco que entra em C e remove-se um arco interno para quebrar o ciclo.

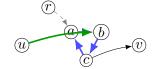
Figura 52: Bijeção entre arborescências após contração e no grafo original. (a) No grafo contraído, toda arborescência seleciona exatamente um arco que entra no supervértice  $x_C$ . (b) Ao expandir C, escolhe-se o arco correspondente (u,w) que entra em algum  $w \in C$  e mantêm-se os arcos internos de custo reduzido zero, removendo exatamente um para quebrar o ciclo. Como  $c'(u,x_C) = c(u,w) - c(a_w)$  e os arcos internos têm custo reduzido zero, o custo total é preservado na ida e na volta.

A Figura 52 ilustra a bijeção entre arborescências no grafo contraído e no grafo original, destacando a preservação de custos e a manutenção das propriedades estruturais necessárias.

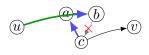
Na expansão, reintroduzimos C e removemos exatamente um arco interno para manter grau de entrada 1 e aciclicidade global [7, 6].



(a) Antes: grafo contraído com o arco que entra em  $x_C$  selecionado.



(b) Expansão:  $x_C$  é substituído por C, mantendo o arco que entra em C.



(c) Final: remove-se um arco interno de C para quebrar o ciclo (mantendo grau de entrada 1).

Figura 53: Reexpansão de C. (a) No grafo contraído, seleciona-se um único arco que entra em  $x_C$ . (b) Ao expandir,  $x_C$  é substituído pelo ciclo C e o arco selecionado passa a entrar em algum  $w \in C$ . (c) Remove-se exatamente um arco interno de C para eliminar o ciclo, preservando conectividade a partir de r e o custo total, pois os arcos internos têm custo reduzido zero.

A Figura 53 detalha o processo de expansão e remoção de um arco interno para quebrar o ciclo, garantindo que a estrutura de r-arborescência seja mantida.

Abaixo, temos a descrição formal do algoritmo.

# Algoritmo 4.1: Chu-Liu/Edmonds (visão operacional)

Entrada: dígrafo D=(V,A), custos  $c:A\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ , raiz  $r.^a$ 

- 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 [6, 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

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

descartando laços em  $x_C$  e permitindo paralelos. Denote o dígrafo 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 [6, 7, Sec. 4.9].

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

#### Corretude

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  $\sum c'$  [6, 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 [6, 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 [6, 7, 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.

# 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.

# 4.2 Implementação em Python

Esta seção apresenta uma implementação em Python do algoritmo de Chu-Liu/Edmonds, baseada no código do trabalho. A arquitetura segue os passos teóricos:

- seleção dos arcos de menor custo que entram em cada vértice (formação de  $F^*$ );
- verificação de aciclicidade (se acíclico, retorno imediato);
- se houver ciclo, normalização dos custos por vértice (custos reduzidos);
- construção do grafo funcional  $F^*$  com arcos de custo reduzido zero;
- detecção de ciclo em  $F^*$ ;
- contração do ciclo em um supervértice, com ajuste de custos;
- recursão no grafo contraído;
- expansão do ciclo e remoção de um arco interno para quebrar o ciclo.
- retorno da r-arborescência ótima.

### Especificação da interface (entradas, saídas e hipóteses)

- Entrada: dígrafo ponderado D = (V, A), custos  $c : A \to \mathbb{R}$ , raiz  $r \in V$ .
- Hipóteses:
  - D é representado como um objeto networkx. DiGraph, com pesos armazenados no atributo de arestas 'w'.
  - -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 [7]).
  - Os custos são não negativos:  $c(a) \ge 0$  para todo  $a \in A$ .
- Saída: conjunto  $A^* \subseteq A$  com  $|A^*| = |V| 1$ , tal que cada  $v \neq r$  tem grau de entrada 1, todos os vértices são alcançáveis a partir de r e  $\sum_{a \in A^*} c(a)$  é mínimo.
- Convenções: arcos paralelos (múltiplos arcos entre o mesmo par de vértices) são permitidos após contrações; laços (self-loops) são descartados.

#### 4.2.1 Funções principais

O código a seguir implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds em Python, utilizando a biblioteca NetworkX para manipulação de grafos. A implementação segue a estrutura descrita na seção anterior, com funções auxiliares para cada etapa do algoritmo.

A seguir, detalhamos as implementações das funções auxiliares e as principais, começando pela normalização dos custos por vértice.

Normalização por vértice: para um vértice alvo v, a função normaliza<sup>14</sup> os custos das arestas que *entram* em v: calcula  $y(v) = \min\{w(u,v)\}$  e substitui cada peso w(u,v) por w(u,v) - y(v).

Com isso, ao menos uma entrada em v passa a ter custo reduzido zero e a ordem relativa entre as entradas é preservada. A função modifica o grafo  $in\text{-}place^{15}$ , ou seja, sem criar uma cópia.

A função executa em  $O(\deg^-(v))$ . Pois, dado o vértice v, obtemos suas arestas de entrada em  $O(\deg^-(v))$ ; calcular o mínimo e ajustar os pesos também leva  $O(\deg^-(v))$ .

Função 4.1: Normalização por vértice: custos reduzidos

1 def normalize\_incoming\_edge\_weights(D: nx.DiGraph, node: str, lang="pt"): 0.00 2 3 Altera os pesos das arestas que entram em 'node' subtraindo de cada uma o menor peso de entrada no grafo D 4 5 Parâmetros: 6 7 - D: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph) 8 - node: O vértice alvo cujas arestas de entrada serão ajustadas - lang: Idioma das mensagens de erro ("en" para inglê 9 s, "pt" para português) 10 11 Retorno: 12 - Nada (o grafo D é modificado no próprio lugar - inplace) 13 14 15 if lang == "en": 16 assert ( 17 node in D ), f"\nnormalize\_incoming\_edge\_weights: The vertex '{ 18 node}' does not exist in the graph." elif lang == "pt": 19

node}' não existe no grafo."

), f"\nnormalize\_incoming\_edge\_weights: O vértice '{

assert (

node in D

20 21

22

23

 $<sup>^{14}</sup>$ Aqui, "normalizar" significa subtrair do peso de cada aresta que entra em v o menor peso de entrada de v (custos reduzidos), preservando a ordem relativa entre as entradas; assim, ao menos uma entrada em v passa a ter custo 0, sem afetar a comparação entre soluções.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>No jargão de programação, significa "no próprio lugar": a estrutura de dados original é alterada diretamente, sem criar uma cópia. Isso economiza memória e tempo, mas introduz efeitos colaterais — outras referências ao mesmo objeto verão as mudanças.

```
24
       # Get the incoming edges of the node with their weights
25
       predecessors = list(D.in_edges(node, data="w"))
26
27
       if not predecessors:
28
           return
29
30
       # Calculate the minimum weight among the incoming edges
31
       yv = min((w for _, _, w in predecessors))
32
33
       # Subtract Yv from each incoming edge
34
       for u, _, _ in predecessors:
35
           D[u][node]["w"] -= yv
```

Construção de  $F^*$ : a função constrói o subdígrafo  $F^*$  selecionando, para cada vértice  $v \neq r_0$ , uma única aresta de menor custo que entra em v (isto é, um  $\underset{(u,v)\in A}{\operatorname{argmin}} w(u,v)$ ).

Se os custos já foram normalizados por vértice, o arco escolhido tem custo reduzido zero; caso contrário, ele devolve None. O resultado é um dígrafo com exatamente uma aresta entrando em cada  $v \neq r_0$  e nenhuma aresta entrando em  $r_0$ . A função executa em O(m), onde m é o número de arestas.

Isso ocorre porque a função itera sobre todos os vértices do grafo e, para cada vértice, verifica suas arestas de entrada para encontrar a de menor peso. Como cada aresta é considerada no máximo uma vez durante essa iteração, o tempo total é proporcional ao número de arestas, ou seja, O(m). A função não modifica o grafo original, mas cria um novo grafo direcionado  $F^*$ .

```
Função 4.2: Construção de F^*
1 def get_Fstar(D: nx.DiGraph, r0: str, lang="pt"):
2
3
      Constrói o subgrafo funcional F* a partir do grafo D e da
           raiz r0.
4
      Retorna um grafo direcionado F_star com exatamente uma
          aresta de entrada
      para cada v != r0 e nenhuma aresta entrando em r0.
5
6
7
      Parâmetros:
           - D: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
8
9
           - r0: Vértice raiz (rótulo)
10
           - lang: Idioma das mensagens de erro ("en" para inglê
              s, "pt" para português)
11
12
      Retorno:
13
           - F_star: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph) que
               representa F*
```

```
0.00
14
15
16
       if lang == "en":
17
           assert (
18
               r0 in D
19
           ), f"\nget_Fstar: The root vertex '{r0}' does not
              exist in the graph."
20
       elif lang == "pt":
21
           assert r0 in D, f"\nget_Fstar: O vértice raiz '{r0}'
              não existe no grafo."
22
23
       # Create an empty directed graph for F_star
24
       F_star = nx.DiGraph()
25
26
       for v in D.nodes():
27
           if v != r0:
28
               in_edges = list(D.in_edges(v, data="w"))
29
               if not in_edges:
30
                    continue # No edges entering v
31
               u = next((u for u, _, w in in_edges if w == 0),
                  None)
32
               if u:
33
                    F_star.add_edge(u, v, w=0)
34
       return F_star
```

**Detecção de ciclo:** a função detecta um ciclo dirigido em  $F^*$  (se existir) e retorna um subgrafo contendo o ciclo. Caso contrário, retorna None. A função utiliza a função find\_cycle do NetworkX, que implementa um algoritmo eficiente de detecção de ciclos.

A função executa em O(m). Isso ocorre porque a função find\_cycle do NetworkX utiliza uma abordagem baseada em busca em profundidade (DFS) para detectar ciclos em grafos direcionados.

A complexidade dessa abordagem é linear em relação ao número de vértices e arestas do grafo, ou seja, O(m), onde m é o número de arestas. A função não modifica o grafo original, mas cria um subgrafo contendo apenas os vértices e arestas que fazem parte do ciclo detectado.

Função 4.3: Detecção de ciclo dirigido em F\*

1 def find\_cycle(F\_star: nx.DiGraph):
2 """
3 Encontra um ciclo dirigido no grafo.
4 Retorna um subgrafo contendo o ciclo, ou None caso não exista.
5

```
6
       Parâmetros:
           - F_star: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
7
8
9
       Retorno:
10
           - Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
              representando o ciclo, ou None se nenhum ciclo for
               encontrado.
       0.00
11
12
13
       try:
14
           nodes_in_cycle = set()
15
           # Extract nodes involved in the cycle
           for u, v, _ in nx.find_cycle(F_star, orientation="
16
              original"):
17
               nodes_in_cycle.update([u, v])
18
           # Create a subgraph containing only the cycle
19
           return F_star.subgraph(nodes_in_cycle).copy()
20
21
       except nx.NetworkXNoCycle:
22
           return None
```

Contração de ciclo: a função contrai um ciclo dirigido simples C em um supervértice  $x_C$ , redirecionando arcos incidentes a C e ajustando custos de acordo com a regra de custos reduzidos. O grafo é modificado in-place e a rotina devolve dicionários auxiliares para permitir a reexpansão correta do ciclo.

Em alto nível, a rotina:

- Pré-condições:
  - (i) C induz um ciclo dirigido em D;
  - (ii) a raiz  $r_0$  não pertence a C;
  - (iii) o rótulo label não existe como vértice em D (é o nome de  $x_C$ ).
- Ajuste de custos (entradas em C): para cada arco (u, w) com  $u \notin C$ ,  $w \in C$ , cria  $(u, x_C)$  com custo  $c'(u, x_C) := c(u, w) y(w) = c(u, w) c(a_w)$ , onde  $a_w$  é a entrada mais barata em w. Mantém-se, para cada u, apenas o mínimo entre paralelos  $(u, x_C)$ .
- Arcos que saem de C: para cada arco (w, v) com  $w \in C$ ,  $v \notin C$ , cria  $(x_C, v)$  com o mesmo custo c(w, v); se surgirem paralelos, conserva-se o menor.
- Laços e arcos internos: arcos com ambas as pontas em C tornam-se laços em  $x_C$  e são descartados (não influenciam a solução).
- Mapeamentos para reexpansão: devolve dicionários

- in\_to\_cycle[u] =  $(w^*, c'(u, x_C))$ : o vértice  $w^* \in C$  que recebeu, de u, a entrada mínima ao contrair (após o ajuste), e o custo reduzido correspondente; usado para substituir  $(u, x_C)$  por  $(u, w^*)$  na expansão e remover  $a_{w^*}$  de C.
- out\_from\_cycle[v] = ( $w^*$ ,  $c(w^*, v)$ ): o vértice  $w^* \in C$  que envia a v o arco de menor custo antes da contração; útil para reconstruir paralelos e decidir empates.
- Efeitos colaterais: remove todos os vértices de C de D, insere  $x_C$  e adiciona os arcos redirecionados com os custos apropriados.
- Complexidade: O(m) no tamanho do grafo atual: cada aresta incidente a C é examinada no máximo uma vez; a manutenção de mínimos entre paralelos é feita em tempo total linear.
- Casos de borda: (i) se não houver arco entrando em C,  $x_C$  ficará sem entradas, impossibilitando uma r-arborescência (instância inviável);
  - (ii) se não houver arco saindo de C,  $x_C$  ficará sem saídas (permitido, mas pode isolar componentes);
  - (iii) pesos negativos são suportados a normalização por custos reduzidos preserva comparações relativas.

Essas escolhas garantem a equivalência de custo entre soluções ótimas no grafo contraído e no original após a reexpansão: os arcos internos de C têm custo reduzido zero e apenas as entradas em C recebem o desconto y(w), mantendo a bijeção entre arborescências descrita anteriormente.

A expressão "no próprio lugar (inplace)" no docstring abaixo $^{16}$  indica que o grafo D é modificado diretamente.

```
Função 4.4: Contração de ciclo
1 def contract_cycle(D: nx.DiGraph, C: nx.DiGraph, label: str,
     lang="pt"):
2
3
      Contrai um ciclo C no grafo D, substituindo-o por um
         supervértice rotulado 'label'.
      Modifica o grafo D no próprio lugar (in-place) e devolve
4
         dicionários auxiliares para a reexpansão.
5
6
      Parâmetros:
7
          - D: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
8
          - C: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph) que
             representa o ciclo a ser contraído
9
          - label: O rótulo do novo supervértice
```

 $<sup>\</sup>overline{\phantom{a}}^{164}$ Inplace" significa que a função altera diretamente a estrutura de dados existente, sem criar uma cópia. Assim, após a chamada, o grafo D já refletirá as remoções, inserções e ajustes feitos. Isso reduz alocações e pode ser mais eficiente, mas exige cuidado com aliasing/referências ativas, pois o estado anterior não é preservado a menos que seja salvo explicitamente.

```
10
           - lang: Idioma das mensagens de erro ("en" para inglê
              s, "pt" para português)
11
12
      Retorno:
13
           - in_to_cycle: Dicionário que mapeia nós fora do
              ciclo para tuplas (no_do_ciclo, peso) das arestas
              que entram no ciclo após o ajuste
14
           - out_from_cycle: Dicionário que mapeia nós fora do
              ciclo para tuplas (no_do_ciclo, peso) das arestas
              que saem do ciclo
15
       0.00
16
17
      if lang == "en":
18
           assert (
               label not in D
19
20
           ), f"\ncontract_cycle: The label '{label}' already
              exists as a vertex in G."
21
       elif lang == "pt":
22
           assert (
23
               label not in D
24
           ), f"\ncontract_cycle: O rótulo '{label}' já existe
              como vértice em G."
25
26
      cycle_nodes: set[str] = set(C.nodes())
27
28
       \# Stores the vertex u outside the cycle and the vertex v
          inside the cycle that receives the minimum weight edge
29
      in_to_cycle: dict[str, tuple[str, float]] = {}
30
31
      for u in D.nodes:
32
           if u not in cycle_nodes:
33
               # Find the minimum weight edge that u has to any
                  vertex in C
34
               min_weight_edge_to_cycle = min(
35
                   ((v, w) for _, v, w in D.out_edges(u, data="w
                      ") if v in cycle_nodes),
36
                   key=lambda x: x[1],
37
                   default=None,
38
               )
39
               if min_weight_edge_to_cycle:
40
                   in_to_cycle[u] = min_weight_edge_to_cycle
41
42
      for u, (v, w) in in_to_cycle.items():
43
           D.add_edge(u, label, w=w)
44
45
      # Stores the vertex v outside the cycle that receives the
           minimum weight edge from a vertex u inside the cycle
46
      out_from_cycle: dict[str, tuple[str, float]] = {}
47
```

```
48
       for v in D.nodes:
49
           if v not in cycle_nodes:
               # Find the minimum weight edge that v receives
50
                  from any vertex in C
51
               min_weight_edge_from_cycle = min(
52
                   ((u, w) for u, _, w in D.in_edges(v, data="w"
                      ) if u in cycle_nodes),
53
                   key=lambda x: x[1],
54
                   default=None,
55
               )
56
               if min_weight_edge_from_cycle:
57
                   out_from_cycle[v] =
                      min_weight_edge_from_cycle
58
59
       for v, (u, w) in out_from_cycle.items():
60
           D.add_edge(label, v, w=w)
61
62
       # Remove all nodes in the cycle from G
63
       D.remove_nodes_from(cycle_nodes)
64
65
       return in_to_cycle, out_from_cycle
```

Remoção de arestas que entram na raiz a função remove todas as arestas que entram no vértice raiz  $r_0$  do grafo G. A função modifica o grafo in-place e executa em  $O(\deg^-(r_0))$ .

Isso ocorre porque a função obtém todas as arestas que entram em  $r_0$  usando o método in\_edges do NetworkX, que tem complexidade  $O(\deg^-(r_0))$ .

Em seguida, a função remove essas arestas usando o método remove\_edges\_from, que também opera em tempo linear em relação ao número de arestas sendo removidas. Portanto, o tempo total de execução da função é  $O(\deg^-(r_0))$ . A função não cria uma cópia do grafo original, mas altera diretamente a estrutura de dados do grafo fornecido.

```
- D: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
10
           - r0: O vértice raiz
           - log: Função opcional de logging para registrar
11
              informações
12
           - boilerplate: Se True, habilita mensagens de logging
13
           - lang: Idioma das mensagens de logging ("en" para
              inglês, "pt" para português)
14
15
       Retorno:
16
           - D: O grafo direcionado (networkx.DiGraph)
              atualizado, sem as arestas que entram em r0
       0.00
17
18
19
       # Verify that r0 exists in G
20
       if lang == "en":
21
           assert (
22
               r0 in D
23
           ), f"\nremove_edges_to_r0: The root vertex '{r0}'
              does not exist in the graph."
24
       elif lang == "pt":
25
           assert (
26
               r0 in D
27
           ), f"\nremove_edges_to_r0: O vértice raiz '{r0}' não
              existe no grafo."
28
29
       # Remove all edges entering r0
30
       in_edges = list(D.in_edges(r0))
31
       if not in_edges:
32
           if boilerplate and log:
33
               if lang == "en":
34
                   log(f"\nremove_edges_to_r0: No edges entering
                        '{r0}' to remove.")
               elif lang == "pt":
35
36
                   log(
37
                        f"\nremove_edges_to_r0: Nenhuma aresta
                           entrando em '{r0}' para remover."
38
                   )
39
       else:
40
           D.remove_edges_from(in_edges)
41
           if boilerplate and log:
42
               if lang == "en":
43
                   log(
44
                        f"\nremove_edges_to_r0: Removed {len(
                           in_edges)} edges entering '{r0}'."
45
46
               elif lang == "pt":
47
                   log(
48
                        f"\nremove_edges_to_r0: Removidas {len(
                           in_edges)} arestas entrando em '{r0}'.
```

```
49 )
50 return D
```

Remoção de arco interno ao expandir o ciclo C, a função remove o arco interno que entra no vértice de entrada v do ciclo, já que v agora recebe um arco externo do grafo. A função modifica o subgrafo do ciclo in-place e executa em  $O(\deg^-(v))$ .

Função 4.6: Remover arco interno na reexpansão 1 def remove\_internal\_edge\_to\_cycle\_entry(C: nx.DiGraph, v): 2 Remove a aresta interna que entra no vértice de entrada ' 3 v' do ciclo C, pois 'v' passa a receber uma aresta externa do grafo. 4 5 6 Parâmetros: 7 - C: subgrafo do ciclo (networkx.DiGraph) 8 - v: vértice de entrada no ciclo que receberá a aresta externa 9 10 Retorno: - Nada (o subgrafo do ciclo é modificado no próprio 11 lugar - in-place) 0.00 12 13 14 predecessor = next((u for u, \_ in C.in\_edges(v)), None) 15 16 C.remove\_edge(predecessor, v)

**Procedimento principal (recursivo):** A função principal implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds de forma recursiva e atua como um orquestrador das fases do método. Em alto nível, ela mantém a seguinte lógica:

- (i) prepara a instância (opcionalmente removendo entradas em  $r_0$  e emitindo logs);
- (ii) normaliza, para cada  $v \neq r_0$ , os custos das arestas que *entram* em v para induzir pelo menos uma entrada de custo reduzido zero;
- (iii) constrói o grafo funcional  $F^*$  selecionando, para cada  $v \neq r_0$ , uma única entrada de menor custo reduzido (preferencialmente zero);
  - (iv) verifica aciclicidade de  $F^*$ ; se acíclico, devolve  $F^*$  como r-arborescência;

(v) caso haja ciclo, contrai o ciclo em um supervértice, ajusta custos que *entram* no componente contraído e chama-se recursivamente na instância reduzida; ao retornar, expande o componente e remove exatamente uma aresta interna do ciclo para restaurar grau de entrada igual a 1 e aciclicidade.

Mais especificamente, o procedimento garante as seguintes propriedades e passos:

- Função (entradas/saídas). Entrada: dígrafo ponderado D = (V, A), raiz  $r_0$ , e, opcionalmente, funções draw\_fn e log para visualização e registro. Saída: um subdígrafo dirigido T de D com |V|-1 arcos em que todo  $v \neq r_0$  tem grau de entrada 1, todos os vértices alcançam  $r_0$  e o custo total  $\sum_{a \in T} c(a)$  é mínimo.
- Invariantes. Após a normalização por vértice, cada  $v \neq r_0$  tem pelo menos uma entrada de custo reduzido zero; o conjunto  $F^*$  contém exatamente uma entrada por vértice distinto de  $r_0$ ; em toda contração, apenas arcos que entram no componente têm seus custos reduzidos ajustados por  $c'(u, x_C) = c(u, w) c(a_w)$ , preservando comparações relativas.
- Detecção de ciclo e contração. Se  $F^*$  contém um ciclo C, todos os seus arcos têm custo reduzido zero. O procedimento forma o supervértice  $x_C$ , reescreve arcos incidentes (descarta laços internos) e prossegue na instância menor. Essa etapa pode manter arcos paralelos e ignora laços.
- Recursão e expansão. Ao obter T' ótimo no grafo contraído, o método mapeia T' de volta para D: substitui o arco  $(u, x_C)$  por um (u, w) apropriado (com  $w \in C$ ) e remove uma única aresta interna de C, restaurando a propriedade "uma entrada por vértice" e a aciclicidade.
- Empates e robustez. Empates de custo são resolvidos de modo determinístico/local, sem afetar a otimalidade. Arcos paralelos podem surgir após contrações e são tratados normalmente; laços são descartados por construção.
- Logs e desenho (opcionais). Se fornecidos, log recebe mensagens estruturadas por nível de recursão, e draw\_fn pode ser chamado para ilustrar passos relevantes (normalização, detecção/contração de ciclos, retorno da recursão e expansão).
- Casos-limite. Se algum  $v \neq r_0$  não possui arco de entrada na instância corrente, detecta-se inviabilidade (não existe r-arborescência). Se  $F^*$  já é acíclico, retorna imediatamente (base da recursão).
- Complexidade. Em uma implementação direta, cada nível de recursão executa seleção/checagem/ajustes em tempo proporcional a O(m), e há no máximo O(n) níveis devido às contrações, totalizando O(mn) e memória O(m+n).

Essa rotina encapsula, portanto, a estratégia primal do método: induzir arestas de custo reduzido zero por normalização local, extrair uma estrutura funcional  $F^*$  de uma entrada por vértice, e resolver conflitos cíclicos por contração/expansão, preservando custos e correção em todas as etapas.

#### Função 4.7: Procedimento principal (recursivo)

```
1 def find_optimum_arborescence_chuliu(
      D: nx.DiGraph,
3
      r0: str,
4
      level=0,
5
       draw_fn=None,
6
       log=None,
7
       boilerplate: bool = True,
8
       lang="pt",
9):
       0.00
10
11
       Encontra a arborescência ótima em um dígrafo D com raiz
          rO usando o algoritmo de Chu-Liu/Edmonds.
12
13
      Parâmetros:
14
           - D: Um grafo direcionado (networkx.DiGraph)
15
           - r0: O vértice raiz
16
           - level: Nível atual da recursão (usado para logs e
              visualização)
17
           - draw_fn: Função opcional para visualizar o grafo em
               cada etapa
18
           - log: Função opcional de logging para registrar
              informações
19
           - boilerplate: Se True, habilita logging e visualizaç
              ão
20
           - lang: Idioma das mensagens de logging ("en" para
              inglês, "pt" para português)
21
22
       Retorno:
23
           - Um grafo direcionado (networkx.DiGraph) que
              representa a arborescência ótima
24
25
       Exceções:
           - AssertionError: Se o vértice raiz r0 não estiver
26
              presente no grafo D
           - AssertionError: Se nenhum ciclo for encontrado em
27
              F_star quando esperado
28
           - AssertionError: Se o rótulo contraído já existir no
               grafo D
29
           - AssertionError: Se não houver aresta de entrada
              para o vértice contraído em F_prime
30
           - AssertionError: Se nenhum vértice do ciclo for
              encontrado para receber a aresta de entrada
31
           - AssertionError: Se o rótulo contraído não for
              encontrado em F_prime
32
           - AssertionError: Se os vértices u ou v não forem
              encontrados no grafo original D
       0.00
33
```

```
34
35
       indent = " " * level
36
37
       if boilerplate and log:
           if lang == "en":
38
39
               log(f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                  Starting level {level}")
40
           elif lang == "pt":
               log(f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
41
                  Iniciando nível {level}")
42
43
       if lang == "en":
44
           assert (
45
               r0 in D
46
           ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: The root
              vertex '{r0}' is not present in the graph."
47
       elif lang == "pt":
           assert (
48
49
               r0 in D
50
           ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: O vértice
              raiz '{r0}' não está presente no grafo."
51
52
       D_{copy} = D.copy()
53
54
       if boilerplate and log:
55
           if lang == "en":
56
               log(
57
                    f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                       Removing edges entering '{r0}'"
58
59
           elif lang == "pt":
60
               log(
61
                    f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                       Removendo arestas que entram em '{r0}'"
62
63
           if draw_fn:
64
               if lang == "en":
65
                    draw_fn(
66
                        D_copy,
67
                        f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                           indent} After removing incoming edges",
68
69
               elif lang == "pt":
70
                    draw_fn(
71
72
                        f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                           indent}Após remoção de entradas",
73
                    )
74
```

```
75
       for v in D_copy.nodes:
76
            if v != r0:
77
                normalize_incoming_edge_weights(D_copy, v, lang=
                   lang)
78
79
            if boilerplate and log:
80
                if lang == "en":
81
                    log(
82
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent } Normalizing weights of incoming
                             edges to '{v}'"
83
84
                elif lang == "pt":
85
                    log(
86
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}Normalizando pesos de arestas
                            de entrada para '{v}'"
87
88
                if draw_fn:
89
                    if lang == "en":
90
                         draw_fn(
91
                             D_copy,
92
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}After weight adjustment",
93
94
                    elif lang == "pt":
95
                         draw_fn(
96
                             D_copy,
97
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}Após ajuste de pesos",
98
                         )
99
100
       # Build F_star
       F_star = get_Fstar(D_copy, r0, lang=lang)
101
102
103
       if boilerplate and log:
104
            if lang == "en":
105
                log(f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                   Building F_star")
            elif lang == "pt":
106
107
                log(f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                   Construindo F_star")
108
            if draw_fn:
109
                if lang == "en":
110
                    draw_fn(F_star, f"\
                       nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                       F_star")
111
                elif lang == "pt":
112
                    draw_fn(F_star, f"\
```

```
nfind_optimum_arborescence_chuliu:{indent}
                       F_star")
113
114
       if nx.is_arborescence(F_star):
115
            for u, v in F_star.edges:
116
                F_star[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
117
            return F_star
118
119
       else:
120
            if boilerplate and log:
121
                if lang == "en":
122
                    log(
123
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}F_star is not an arborescence.
                            Continuing..."
124
125
                elif lang == "pt":
126
                    log(
127
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}F_star não é uma arborescência.
                             Continuando..."
128
                    )
129
130
            C: nx.DiGraph = find_cycle(F_star)
131
            if lang == "en":
132
133
                assert C, f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:
                   No cycle found in F_star."
134
            elif lang == "pt":
135
                assert (
136
                    C
                ), f " \n optimum_arborescence_chuliu: Nenhum
137
                   ciclo encontrado em F_star."
138
139
            contracted_label = f"\n n*{level}"
            in_to_cycle, out_from_cycle = contract_cycle(
140
141
                D_copy, C, contracted_label, lang=lang
142
            )
143
144
            # Recursive call
145
            F_prime = find_optimum_arborescence_chuliu(
146
                D_copy,
147
                r0,
148
                level + 1,
149
                draw_fn=None,
150
                log=None,
151
                boilerplate=boilerplate,
152
                lang=lang,
153
            )
```

```
154
155
            # Identify the vertex in the cycle that received the
               only incoming edge from the arborescence
            in_edge = next(iter(F_prime.in_edges(contracted_label
156
               , data="w")), None)
157
158
            if lang == "en":
159
                assert (
160
                    in_edge
161
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: No
                   incoming edge found for vertex '{
                   contracted_label}'."
162
            elif lang == "pt":
163
                assert (
164
                    in_edge
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: Nenhuma
165
                   aresta encontrada entrando no vértice '{
                   contracted_label}'."
166
167
           u, _, _ = in_edge
168
169
           v, _ = in_to_cycle[u]
170
171
            if lang == "en":
172
                assert (
173
                    v is not None
174
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: No
                   vertex in the cycle found to receive the
                   incoming edge from '{u}'."
175
            elif lang == "pt":
176
                assert (
177
                    v is not None
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: Nenhum v
178
                   értice do ciclo encontrado que recebeu a
                   aresta de entrada de '{u}'."
179
            # Remove the internal edge entering vertex 'v' from
180
               cycle C
181
            remove_internal_edge_to_cycle_entry(
182
183
               # Note: w is coming from F_prime, not from G
184
185
            # Add the external edge entering the cycle (
               identified by in_edge), the weight will be
               corrected at the end using G
186
            F_prime.add_edge(u, v)
187
            if boilerplate and log:
188
                if lang == "en":
189
                    log(
```

```
190
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent } Adding incoming edge to cycle:
                            (\{u\}, \{v\})"
191
                    )
192
                elif lang == "pt":
193
                    log(
194
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}Adicionando aresta de entrada
                            ao ciclo: ({u}, {v})"
195
                    )
196
197
            # Add the remaining edges of the modified cycle C
198
            for u_c, v_c in C.edges:
199
                F_prime.add_edge(u_c, v_c)
200
                if boilerplate and log:
201
                    if lang == "en":
202
                         log(
203
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}Adding cycle edge: ({u_c
                                }, {v_c})"
204
                         )
205
                    elif lang == "pt":
206
                         log(
207
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}Adicionando aresta do
                                ciclo: ({u_c}, {v_c})"
208
                         )
209
210
            # Add the external edges leaving the cycle
            for _, z, _ in F_prime.out_edges(contracted_label,
211
               data=True):
212
213
                if lang == "en":
214
                    assert (
215
                         z in out_from_cycle
216
                    ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: No
                        outgoing edge found for vertex '{z}'."
217
                elif lang == "pt":
218
                    assert (
219
                         z in out_from_cycle
220
                    ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:
                        Nenhuma aresta de saída encontrada para o
                       vértice '{z}'."
221
222
                u_cycle, _ = out_from_cycle[z]
223
                F_prime.add_edge(u_cycle, z)
224
225
                if boilerplate and log:
226
                    if lang == "en":
```

```
227
                         log(
228
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}Adding outgoing edge from
                                 cycle: ({u_cycle}, {z})"
229
                         )
230
                    elif lang == "pt":
231
                         log(
232
                             f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu
                                :{indent}Adicionando aresta
                                externa de saída: ({u_cycle}, {z})
233
                         )
234
235
            # Remove the contracted node
236
            if lang == "en":
237
                assert (
238
                    contracted_label in F_prime
239
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: Vertex
                   '{contracted_label}' not found in the graph."
240
            elif lang == "pt":
241
                assert (
242
                    contracted_label in F_prime
243
                ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: Vértice
                   '{contracted_label}' não encontrado no grafo."
244
            F_prime.remove_node(contracted_label)
245
246
            if boilerplate and log:
247
                if lang == "en":
248
                    log(
249
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}Contracted vertex '{
                            contracted_label}' removed."
250
                    )
251
                elif lang == "pt":
252
                    log(
253
                         f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:{
                            indent}Vértice contraído '{
                            contracted_label}' removido."
                    )
254
255
256
            # Update the edge weights with the original weights
               from G
257
            for u, v in F_prime.edges:
258
                if lang == "en":
259
                    assert (
260
                         u in D and v in D
261
                    ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu:
                       Vertex '{u}' or '{v}' not found in the
                       original graph."
```

```
262
                 elif lang == "pt":
263
                     assert (
264
                         u in D and v in D
265
                     ), f"\nfind_optimum_arborescence_chuliu: Vé
                        rtice '{u}' ou '{v}' não encontrado no
                        grafo original."
266
                F_{prime}[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
267
268
            if boilerplate and log:
269
                 if lang == "en":
270
                     log(
271
                         f"\n\{indent}Final arborescence: {list(
                             F_prime.edges)}"
272
273
                elif lang == "pt":
274
                     log(
                         f"\n√{indent}Arborescência final: {list(
275
                             F_prime.edges)}"
276
277
                if draw_fn:
278
                     if lang == "en":
279
                         draw_fn(
280
                              F_prime,
281
                              f"\n{indent}Final Arborescence.",
282
                     elif lang == "pt":
283
284
                         draw_fn(
285
                              F_prime,
286
                              f"\n{indent}Arborescência final.",
287
288
            return F_prime
```

#### Notas finais

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.

Para fechar este capítulo, vale destacar algumas decisões de projeto e implicações práticas:

- 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.

No capítulo seguinte revisitaremos o método sob uma *ótica primal-dual* em duas fases, proposta por András Frank. Essa perspectiva organiza a normalização via *potenciais*  $^{17}$   $y(\cdot)$ , 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.

### 5 Procedimento em Duas Fases de András Frank

Motivação e visão dual O método de András Frank organiza o raciocínio anterior em um esquema primal-dual em duas fases que torna explícitos os papéis dos custos reduzidos e dos cortes apertados (tight cuts). Em alto nível, mantemos potenciais y(v) nos vértices e trabalhamos com custos reduzidos c'(u,v) = c(u,v) - y(v). A Fase I ajusta os potenciais até garantir, para cada  $v \neq r$ , a existência de pelo menos um arco de custo reduzido zero que entra em v. A Fase II extrai dentre os arcos de custo reduzido zero uma r-arborescência, tratando ciclos por contração/expansão. Ver [5, 7].

Conexão com condições de corte As condições clássicas de existência dizem que, para todo subconjunto não vazio  $X \subseteq V \setminus \{r\}$ , deve existir ao menos um arco que entra em X (corte  $\delta^-(X)$  não vazio). No método de Frank, cortes "apertados" (aqueles cuja entrada disponível a custo reduzido é mínima) formam uma família laminar que guia as contrações, garantindo que, ao final, uma arborescência de custo mínimo emerge entre os arcos de custo reduzido zero.

 $<sup>^{-17}</sup>$ 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.

#### Esqueleto do método

- 1. Fase I (normalização primal—dual). Inicialize  $y \equiv 0$ . Enquanto existir  $v \neq r$  sem arco de custo reduzido zero entrando em v, aumente y(v) (diminuindo c'(u,v)) até que algum arco que entra em v atinja custo reduzido zero. Se aparecer ciclo entre arcos de custo reduzido zero, contraia-o e continue.
- 2. Fase II (extração). No grafo (possivelmente contraído), selecione uma r-arborescência usando apenas arcos de custo reduzido zero; se um ciclo surgir, contraia e prossiga. Ao término, expanda as contrações em ordem inversa, escolhendo, em cada expansão, o arco que entra no componente com custo reduzido zero para quebrar o ciclo interno.

#### Algoritmo 5.1: Frank: método em duas fases (resumo)

Entrada: dígrafo D = (V, A), custos c, raiz r.

- 1. (Fase I) Mantenha potenciais y. Enquanto existir  $v \neq r$  sem arco (u, v) com c(u, v) y(v) = 0, aumente y(v) até algum entrar a zero. Mantenha contrações para ciclos de zeros.
- 2. (Fase II) Entre arcos de custo reduzido zero, construa uma r-arborescência; trate ciclos por contração e, no retorno, expanda escolhendo o arco que entra no componente com custo zero.
- 3. Devolva a arborescência construída. Pela dualidade implícita, seu custo é mínimo.

Corretude e complexidade Ao manter custos reduzidos e uma família laminar de cortes apertados, o método garante que sempre existe uma escolha local consistente com a otimalidade global. A análise de complexidade é alinhada à do Chu-Liu/Edmonds: implementações diretas ficam em O(mn) e versões eficientes, em  $O(m \log n)$ ; ver [5, 7].

Quando usar Além de fornecer uma forma limpa de provar corretude, a abordagem de Frank é útil quando queremos evidenciar a estrutura dual (custos reduzidos, cortes apertados) ou quando estendemos o problema para variantes com restrições adicionais.

## 6 Considerações Finais

# A Notas sobre matroides e sua interseção

Nesta breve nota, registramos definições mínimas para dar contexto às menções a interseção de matroides no corpo do texto. Para referências e desenvolvimento completo, ver, por exemplo, Schrijver [7].

Um **matroide**  $M = (E, \mathcal{I})$  é dado por um conjunto finito E e uma família  $\mathcal{I} \subseteq 2^E$  de conjuntos *independentes* que satisfazem: (i)  $\varnothing \in \mathcal{I}$ ; (ii) se  $I \in \mathcal{I}$  e  $J \subseteq I$ , então  $J \in \mathcal{I}$  (hereditariedade); (iii) se  $I, J \in \mathcal{I}$  e |I| < |J|, então existe  $e \in J \setminus I$  com  $I \cup \{e\} \in \mathcal{I}$  (troca).

Exemplos clássicos incluem: (a) o matroide gráfico, em que E é o conjunto de arestas de um grafo e  $\mathcal{I}$  são os conjuntos acíclicos; (b) o matroide de partição, que impõe no máximo uma escolha por parte; (c) o matroide linear, em que E é um conjunto de vetores e  $\mathcal{I}$  são subconjuntos linearmente independentes.

A interseção de matroides pergunta por um conjunto  $X \subseteq E$  de maior cardinalidade (ou de menor custo no caso ponderado) que seja independente simultaneamente em dois matroides  $M_1 = (E, \mathcal{I}_1)$  e  $M_2 = (E, \mathcal{I}_2)$ , isto é,  $X \in \mathcal{I}_1 \cap \mathcal{I}_2$ . O problema admite algoritmos polinomiais gerais, e muitas formulações clássicas em grafos se enquadram nesse arcabouço.

No contexto de arborescências dirigidas, estruturas do tipo "no máximo um arco entrando em cada vértice" podem ser modeladas por matroides de partição, enquanto restrições que evitam ciclos dirigidos aparecem via matroide gráfico orientado e técnicas afins. Isso motiva a citação no corpo do texto quando discutimos o empacotamento de múltiplas arborescências e condições por cortes.

## Referências

- [1] Y. J. Chu e T. H. Liu. "On the Shortest Arborescence of a Directed Graph". Em: Scientia Sinica 14 (1965), pp. 1396–1400.
- [2] T. H. Cormen et al. Introduction to Algorithms. 3rd. MIT Press, 2009.
- [3] Reinhard Diestel. Graph Theory. 5th. Springer, 2017. ISBN: 978-3662536216.
- [4] J. Edmonds. "Optimum Branchings". Em: Journal of Research of the National Bureau of Standards 71B (1967), pp. 233–240.
- [5] A. Frank e G. Hajdu. "A Simple Algorithm and Min–Max Formula for the Inverse Arborescence Problem". Em: Algorithms 7.4 (2014), pp. 637–647. DOI: 10.3390/ a7040637.
- [6] J. Kleinberg e É. Tardos. Algorithm Design. Addison-Wesley, 2006.
- [7] A. Schrijver. Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency. Springer, 2003.
- [8] Douglas B. West. *Introduction to Graph Theory*. 2nd. Prentice Hall, 2001. ISBN: 978-0130144003.