Lorena Silva Sampaio, Samira Haddad

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

Brasil

2025

Lorena Silva Sampaio, Samira Haddad

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

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

Universidade

Faculdade

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. Mário Leston

Brasil

2025

Dedicatória (opcional).

Agradecimentos

Agradecimentos (opcional).

“Epígrafe (opcional).”

Resumo

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

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

Abstract

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

Keywords: Graphs. Arborescence. Algorithms. Visualization.

Lista de ilustrações

Sumário

1 Algoritmo de Chu–Liu/Edmonds

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

1.1 O problema dos ciclos e a solução por contração

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

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

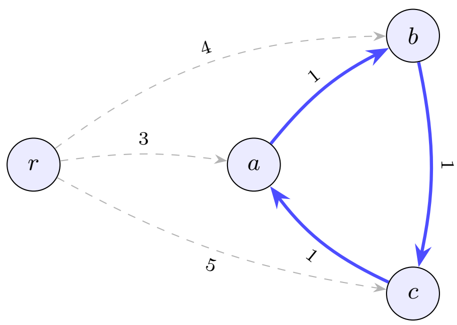


Figura 1 – Ciclo gerado pelas escolhas locais "mais baratas por vértice". Os arcos grossos (custo 1) entram em a, b, c e formam $a \to b \to c \to a$. Os arcos tracejados partindo de r existem, mas são mais caros e por isso não são escolhidos pelo critério local.

A solução consiste em *normalizar os custos por vértice*: para cada $v \neq r$, subtraímos de todo arco que entra em v o menor custo entre os arcos que chegam a v. Após esse ajuste (custos reduzidos), cada $v \neq r$ passa a ter ao menos um arco de custo reduzido zero. Se os arcos de custo zero forem acíclicos, já temos a r-arborescência ótima. Se formarem um ciclo C, *contraímos* C em um **supervértice** x_C, ajustamos os custos dos arcos externos e resolvemos recursivamente no grafo menor. Ao final, *expandimos* as contrações removendo exatamente um arco interno de cada ciclo para manter grau de entrada 1 e aciclicidade global.

1.1.1 Supervértices e contração de ciclos

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

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

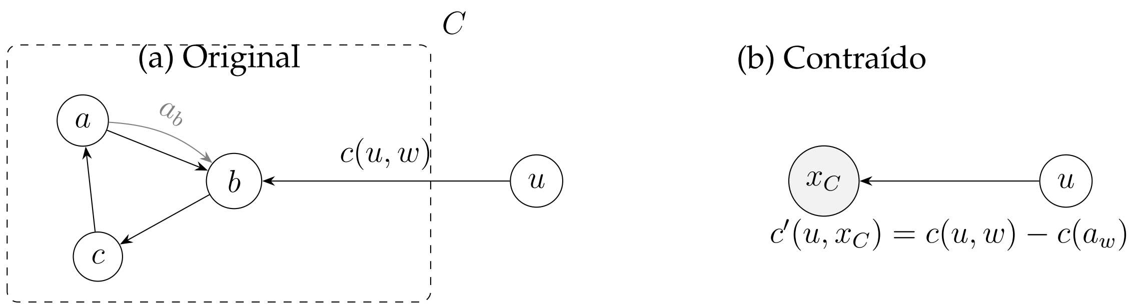


Figura 2 – Ajuste de custo reduzido para um arco entrando em um ciclo contraído: o arco (u, w) com $w \in C$ torna-se (u, x_C) com custo reduzido $c'(u, x_C) = c(u, w) - c(a_w)$, onde a_w é o arco de menor custo que entra em w.

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

1.2 Descrição do algoritmo

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

Construa A' escolhendo, para cada $v \neq r$, um arco de menor custo que entra em v. Se (V, A') é acíclico, então A' já é uma r-arborescência ótima, pois realizamos o menor custo de entrada em cada vértice e nenhuma troca pode reduzir o custo mantendo as restrições (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Sec. 4.9).

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

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

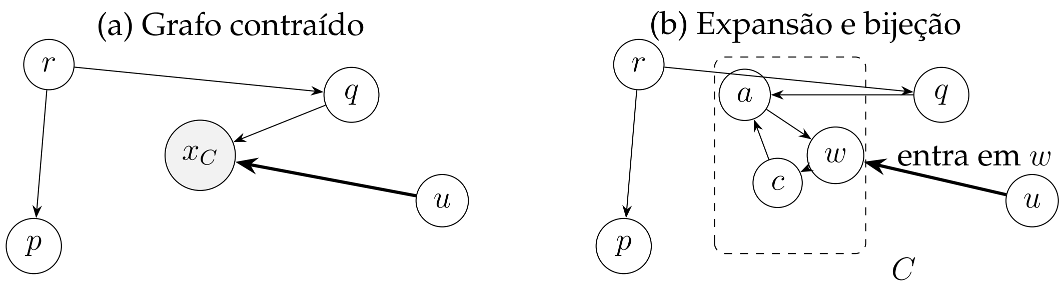


Figura 3 – Bijeção entre arborescências no grafo contraído e no original: toda arborescência em D' escolhe exatamente um arco que entra em x_C; ao expandir C, esse arco corresponde a um (u, w) que entra em algum $w \in C$ e os arcos internos (de custo reduzido zero) são mantidos, preservando o custo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

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

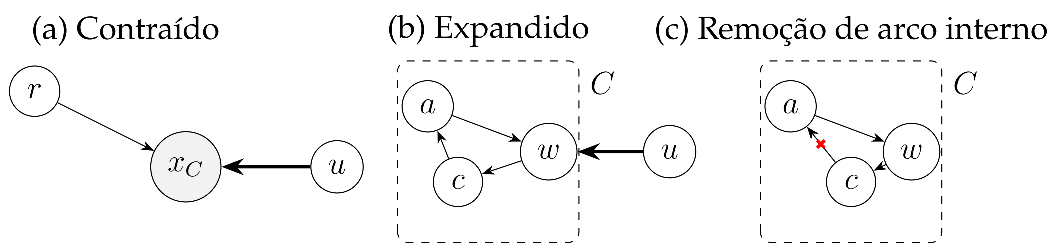


Figura 4 – Reexpansão de C: no grafo contraído seleciona-se um arco que entra em x_C; ao expandir, x_C é substituído por C e o arco selecionado entra em algum $w \in C$; remove-se exatamente um arco interno de C para eliminar o ciclo, preservando conectividade e custo total (arcos internos têm custo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

Abaixo, a descrição formal do algoritmo.

Abaixo, temos a descrição formal do algoritmo.

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

Entrada: digrafo $D = (V, A)$, custos $c : A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$, 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 (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.36), trata-se de uma r-arborescência de custo mínimo.
3. Caso contrário, seja C um ciclo dirigido de F^* (com $r \notin C$). **Contração:** contraia C em um supervértice x_C e defina custos c' por

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

   descartando laços em x_C e permitindo paralelos. Denote o digrafo contraído por $D' = (V', A')$.
4. **Recursão:** compute uma r-arborescência ótima T' de D' com custos c'.
5. **Expansão:** seja $(u, x_C) \in T'$ o único arco que entra em x_C. No grafo original, ele corresponde a (u, w) com $w \in C$. Forme

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

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

[a] Se algum $v \neq r$ não possui arco de entrada, não existe r-arborescência.

1.2.1 Corretude

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

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

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

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

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

2. *Caso acíclico:* se (V, F^*) é acíclico, então já é uma r-arborescência e, por realizar o mínimo custo de entrada em cada $v \neq r$, é ótima (KLEINBERG; TARDOS, 2006, Obs. 4.36).

3. *Caso com ciclo (contração/expansão):* se F^* contém um ciclo dirigido C, todos os seus arcos têm custo reduzido zero.

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

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

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

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

1.2.2 Complexidade

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

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

1.3 Implementação em Python

Esta seção apresenta uma implementação em Python do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds. A arquitetura segue os passos teóricos: recebe como entrada um digrafo ponderado, os custos das arestas e o vértice raiz. O procedimento seleciona, para cada vértice, o arco de menor custo de entrada, verifica se o grafo é acíclico e, se necessário, contrai ciclos e ajusta custos. Ao final, retorna como saída a r-arborescência ótima: um conjunto de arestas que conecta todos os vértices à raiz com custo mínimo.

1.3.1 Representação de Digrafos: NetworkX

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

1.3.1.1 Estrutura Interna

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

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

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

1.3.1.2 Operações Fundamentais

As operações básicas usadas na implementação incluem:

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

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

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

1.3.1.3 Busca em Profundidade (DFS)

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

1.3.1.3.1 Funcionamento básico:

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

1.3.1.3.2 Detecção de ciclos em digrafos:

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

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

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

1.3.1.3.3 Complexidade:

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

1.3.1.3.4 Implementação em NetworkX:

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

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

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

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

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

1.3.2 Especificação do Algoritmo

Com a representação estabelecida, especificamos formalmente o algoritmo implementado:

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

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

  – Os custos são não negativos: $c(a) \geq 0$ para todo $a \in A$.

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

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

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

1.3.3 Normalização por vértice

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

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

Não retorna nenhum valor (retorno implícito `None`), pois a operação é realizada in-place: o grafo `D` passado como parâmetro é modificado diretamente, e ao menos uma aresta de entrada de `node` terá custo reduzido zero após a execução. A complexidade é $O(\deg^-(v))$, pois cada operação percorre as arestas de entrada uma única vez.

Normalização por vértice: custos reduzidos

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

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

A Figura 5 ilustra o funcionamento da normalização:

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

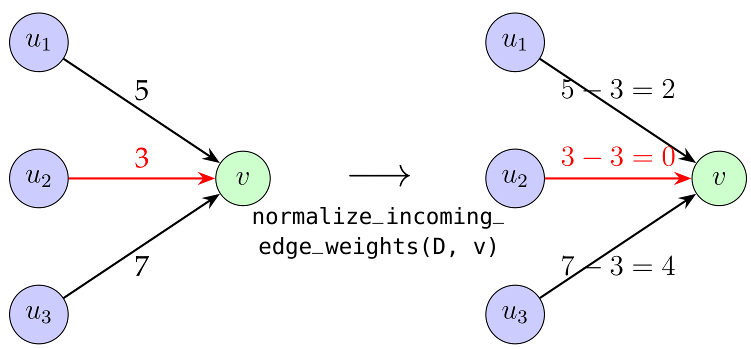


Figura 5 – Exemplo de normalização de custos reduzidos. À esquerda, vértice v com três arestas de entrada (pesos 5, 3 e 7). À direita, após aplicar `normalize_incoming_edge_weights(D, v)`: o menor peso $y(v) = 3$ é subtraído de todas as entradas, resultando em custos reduzidos 2, 0 e 4. A aresta (u_2,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

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

1.3.4 Construção de F^*:

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

Recebe como entrada um digrafo `D` (objeto `nx.DiGraph`) e o rótulo `r0` da raiz. A implementação cria um novo digrafo vazio `F_star` (linha 2) em vez de modificar `D` diretamente; essa escolha de criar uma estrutura separada é fundamental porque F^* é um subgrafo conceitual usado para detecção de ciclos, e preservar `D` inalterado permite que as operações subsequentes (como contração) trabalhem com o grafo original completo, evitando perda de informação sobre arestas não selecionadas que podem ser necessárias após reexpansões.

Em seguida, para cada vértice `v` diferente de `r0` (linhas 3–4), utilizando o método `D.nodes()`, coleta todas as arestas de entrada de `v` com seus pesos em uma lista e armazena na variável `in_edges` (linha 5); a materialização em lista é necessária porque a subsequente iteração sobre as arestas para encontrar aquela de peso zero poderia causar problemas se trabalhássemos diretamente com a visão retornada por `in_edges`, especialmente em cenários de modificação concorrente. Se não houver arestas de entrada, prossegue para o próximo vértice (linhas 6–7) usando `continue`, pois um vértice isolado ou inacessível não contribui para F^* e sua ausência será detectada posteriormente como violação das hipóteses de conectividade.

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

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

Construção de F star

Constrói o subdigrafo F^* a partir do digrafo D, selecionando para cada vértice (exceto a raiz r0) uma aresta de custo reduzido zero que entra nele.

```python
def get_Fstar(D: nx.DiGraph, r0: str):
    F_star = nx.DiGraph()
    for v in D.nodes():
        if v != r0:
            in_edges = list(D.in_edges(v, data="w"))
            if not in_edges:
                continue
            u = next((u for u, _, w in in_edges if w == 0), None)
            if u:
                F_star.add_edge(u, v, w=0)
    return F_star
```

A Figura 6 ilustra a construção de F^*:

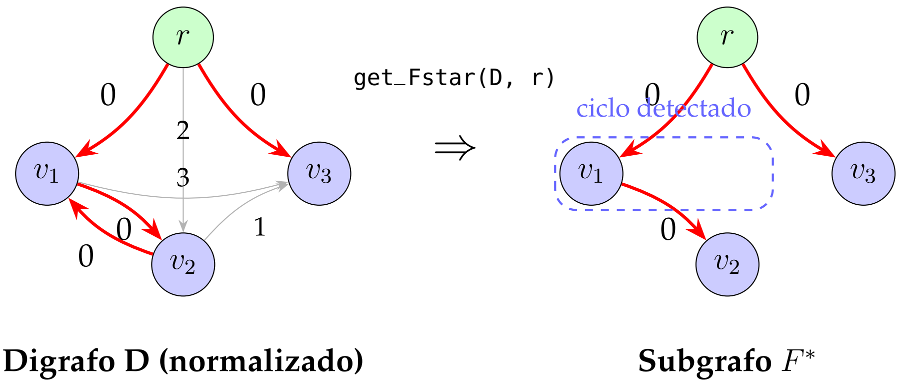


Figura 6 – Exemplo de construção de F^* a partir de um digrafo normalizado. À esquerda, o digrafo D após normalização, onde cada vértice não-raiz possui ao menos uma aresta de entrada com custo zero (em vermelho). À direita, o subgrafo F^* resultante contém apenas as arestas de custo zero selecionadas,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

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

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

Passo 1 do Algoritmo de Chu–Liu/Edmonds

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

1.3.5 Detecção de ciclo:

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

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

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

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

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

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

Detecção de ciclo dirigido em F^*

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

```
def find_cycle(F_star: nx.DiGraph):
    try:
        nodes_in_cycle = set()
        for u, v, _ in nx.find_cycle(F_star, orientation="original"):
            nodes_in_cycle.update([u, v])
        return F_star.subgraph(nodes_in_cycle).copy()
    except nx.NetworkXNoCycle:
        return None
```

A Figura 7 ilustra o processo de detecção de ciclo:

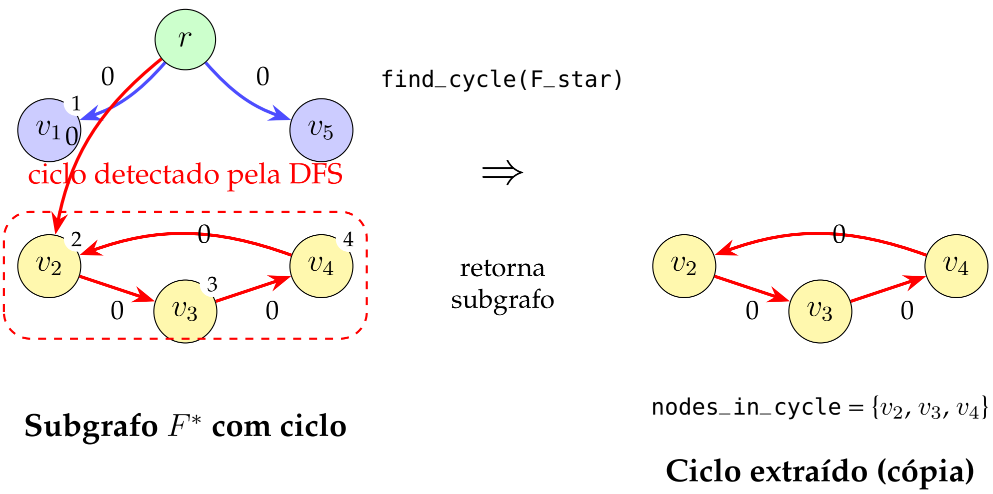


Figura 7 – Exemplo de detecção de ciclo em F^*. À esquerda, o subgrafo F^* contém um ciclo formado pelos vértices $\{v_2, v_3, v_4\}$ (destacados em amarelo). A DFS percorre o grafo e detecta o ciclo ao encontrar a aresta (v_4, v_2), onde v_2 já está na pilha de recursão. À direita, a função retorna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

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

1.3.6 Contração de ciclo:

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

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

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

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

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

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

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

Contração de ciclo

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

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

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

A Figura 8 ilustra o processo de contração de ciclo:

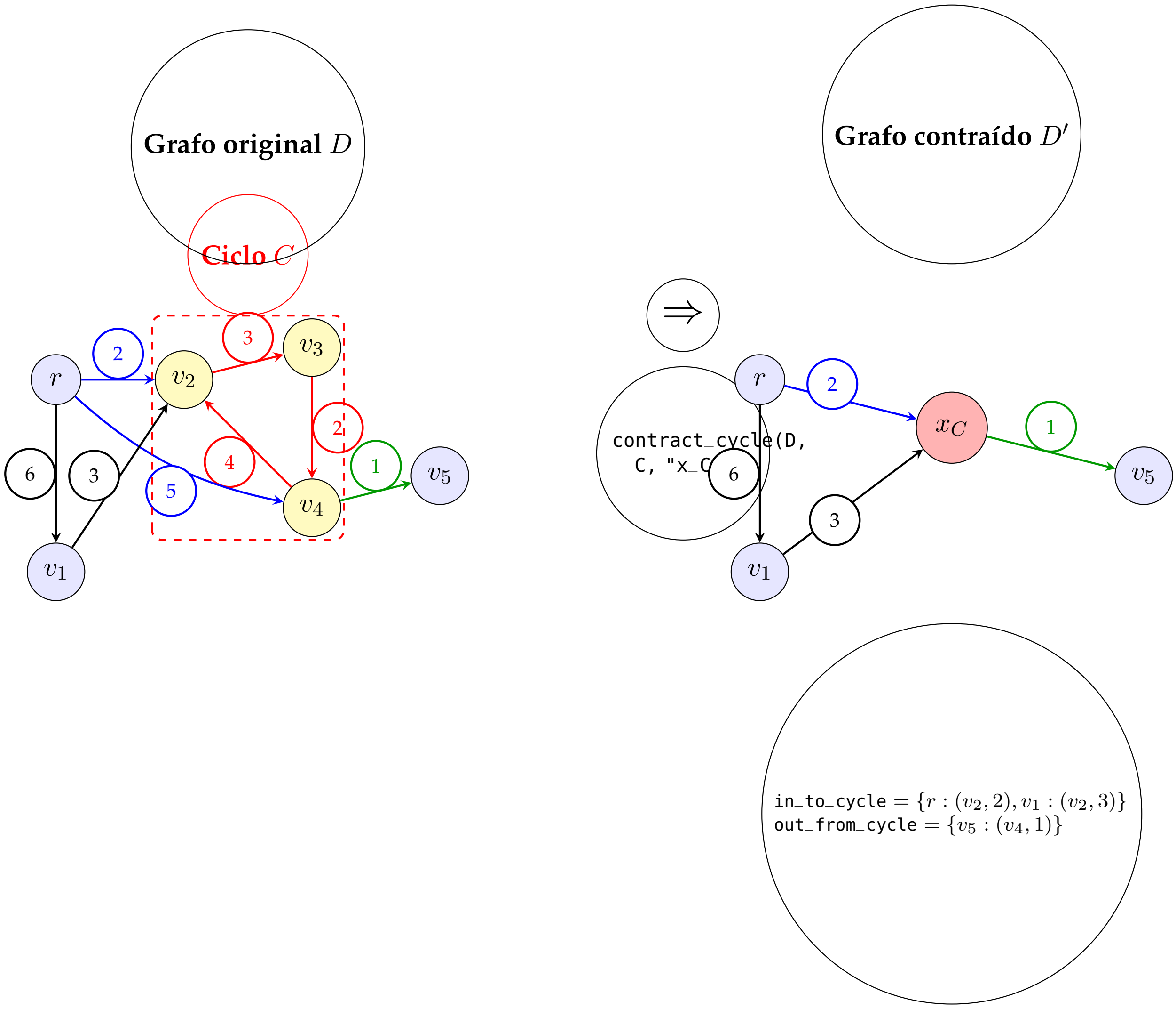


Figura 8 – Exemplo de contração de ciclo. À esquerda, grafo original D com ciclo $C = \{v_2, v_3, v_4\}$ (em amarelo). Vértices externos r, v_1 e v_5 têm arestas conectando ao ciclo: r envia aresta para v_2 (peso 2) e v_4 (peso 5); v_4 envia aresta para v_5 (peso 1). À direita, após a contração: o ciclo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

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

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

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

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

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

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

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

1.3.7 Remoção de arestas que entram na raiz:

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

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

Em detalhes, ela recebe como entrada um digrafo `D` (objeto `nx.DiGraph`) e o rótulo `r0` da raiz. A implementação armazena em uma lista todas as arestas que entram em `r0` usando o método `in_edges` (linha 2). Se a lista não estiver vazia (linha 3), remove todas essas arestas usando o método `remove_edges_from` (linha 4). Este método da biblioteca NetworkX recebe como parâmetro uma lista de tuplas representando arestas na forma `(u, v)` e remove cada uma delas do grafo. A operação é realizada em lote: NetworkX itera sobre a lista fornecida e, para cada tupla `(u, v)`, remove a aresta correspondente da estrutura interna de adjacência. Se alguma aresta especificada não existir no grafo, ela é silenciosamente ignorada sem gerar erro. A complexidade de `remove_edges_from` é $O(k)$, onde k é o número de arestas na lista de entrada, pois cada remoção individual tem custo $O(1)$ em média devido ao uso de dicionários aninhados para armazenar arestas.

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

Remoção de arestas que entram na raiz

Remove todas as arestas que entram na raiz `r0`, modificando `D` in-place e retornando o grafo atualizado.

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

1.3.8 Remoção de arco interno:

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

A função recebe como entrada o subgrafo do ciclo `C` (objeto `nx.DiGraph`) e o vértice de entrada `v`. A implementação utiliza uma compreensão de gerador combinada com `next` para encontrar o predecessor de `v` dentro do ciclo (linha 2): a expressão `(u for u, _ in C.in_edges(v))` itera sobre as arestas de entrada de `v`, extraindo apenas o vértice origem `u` (ignorando metadados com `_`), e `next` retorna o primeiro (e teoricamente único) predecessor. Em seguida, remove a aresta `(predecessor, v)` do ciclo usando o método `remove_edge` (linha 3).

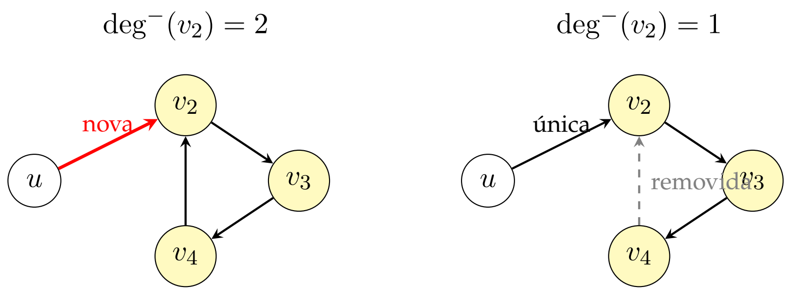
A função modifica o subgrafo `C` in-place e não retorna valor. A complexidade é $O(\deg^-(v))$, dominada pela operação de busca das arestas de entrada, embora em ciclos simples isso seja tipicamente $O(1)$ pois cada vértice tem exatamente um predecessor.

Remover arco interno na reexpansão

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

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

A Figura 9 ilustra o objetivo da função:



Ciclo C após adicionar aresta externa (u, v_2)

Após remover aresta interna (v_4, v_2)

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

1.3.9 Procedimento principal (recursivo):

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

Recebe como entrada um digrafo ponderado `D` (objeto `nx.DiGraph`), o vértice raiz `r0`, e um parâmetro `level` (padrão 0) usado para rotular supervértices em níveis recursivos distintos. A estrutura da implementação espelha a formulação teórica:

Passo 1: Normalização e construção de F^*

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

Implementação (linhas 2–6): Primeiro, cria uma cópia do grafo original `D_copy` (linha 2) para preservar os pesos originais. *Justificativa:* A cópia é essencial porque a normalização modifica os pesos in-place; sem preservar os valores originais, seria impossível restaurar os custos corretos na arborescência final retornada (linhas 28–29), violando a correção do algoritmo. Em seguida, normaliza os custos de todas as arestas que entram em cada vértice $v \neq r_0$ (linhas 3–5): para cada vértice, chama `normalize_incoming_edge_weights`, que implementa a definição de potencial $y(v) := c(a_v)$ onde $a_v \in \arg\min_{(u,v)\in A} c(u,v)$, subtraindo este valor mínimo de cada aresta de entrada para criar custos reduzidos $c'(u,v) = c(u,v) - y(v)$. *Justificativa:* A normalização garante que cada vértice tenha pelo menos uma entrada de custo zero, propriedade fundamental que permite construir F^* selecionando arestas de custo reduzido zero sem perder otimalidade (pela teoria de dualidade). Após a normalização, constrói o grafo funcional F^* (linha 6) chamando `get_Fstar`, que implementa exatamente $F^* := \{a_v : v \neq r\}$, selecionando uma aresta de custo reduzido zero entrando em cada vértice não-raiz. *Justificativa:* Selecionar apenas arestas de custo reduzido zero (ao invés de simplesmente o mínimo) é crucial porque garante que a solução seja ótima em relação aos custos normalizados, e a normalização preserva a estrutura de otimalidade do problema original.

Passo 2: Verificação de aciclicidade

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

Implementação (linhas 7–10): Verifica se F^* é uma arborescência válida usando `nx.is_arborescence` (linha 7), que testa se o grafo é conexo, acíclico e possui exatamente uma entrada por vértice (exceto a raiz). *Justificativa:* O uso de `nx.is_arborescence` (ao invés de apenas verificar aciclicidade) garante não apenas ausência de ciclos, mas também conectividade e grau de entrada correto, todas propriedades necessárias para certificar que F^* é uma r-arborescência válida. Se F^* for uma arborescência, o algoritmo alcançou o caso base. A implementação restaura os pesos originais de `D` para cada aresta de F^* (linhas 8–9) e retorna F^* como a r-arborescência de custo mínimo (linha 10). *Justificativa:* A restauração dos pesos originais é obrigatória porque o algoritmo trabalha com custos reduzidos internamente, mas deve retornar uma solução expressa nos custos do problema original; a Observação 4.36 de Kleinberg garante que a estrutura ótima encontrada com custos reduzidos corresponde à solução ótima nos custos originais.

Passo 3: Contração, recursão e reexpansão

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

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

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

Implementação (linhas 11–30): Caso F^* contenha um ciclo, entra no caso recursivo (linha 11). Detecta um ciclo C chamando `find_cycle` (linha 12), correspondendo a "*seja C um ciclo dirigido de F^**". Cria um rótulo único `contracted_label` para o supervértice x_C usando o nível de recursão (linha 13), e contrai o ciclo chamando `contract_cycle` (linhas 14–15), que implementa a operação "*contraia C em um supervértice x_C*"e os ajustes de custos reduzidos especificados nas fórmulas $c'(u, x_C) := c(u, w) - y(w)$ e $c'(x_C, v) := c(w, v)$. *Justificativa:* O rótulo baseado em `level` garante que supervértices em diferentes níveis de recursão tenham identificadores únicos, evitando colisões; a contração reduz o problema a uma instância menor preservando a estrutura de otimalidade (provado pela teoria de dualidade), permitindo resolver recursivamente. A função modifica `D_copy` in-place criando o digrafo contraído $D' = (V', A')$ e retorna os dicionários `in_to_cycle` e `out_from_cycle` que armazenam os mapeamentos necessários para a reexpansão. *Justificativa:* A modificação in-place (ao invés de criar nova cópia) reduz significativamente o uso de memória em grafos grandes ou com múltiplos níveis recursivos; os dicionários são essenciais para a reexpansão correta, pois armazenam qual vértice do ciclo original deve receber cada conexão externa. Chama-se recursivamente (linha 16) no grafo contraído com `level+1`, obtendo a arborescência ótima F' da instância reduzida D'.

Reexpansão: Na fase de reexpansão, a implementação desfaz a substituição do supervértice pelo ciclo original. Identifica a aresta externa que entra no supervértice em F' (linha 17), extrai o vértice externo `u` dessa aresta (linha 18), consulta `in_to_cycle[u]` para determinar o vértice `v` dentro do ciclo original que deve receber essa conexão (linha 19), implementando o mapeamento inverso da contração. Remove a aresta interna que entrava em `v` chamando `remove_internal_edge_to_cycle_entry` (linha 20), "quebrando" o ciclo C no ponto de entrada v e garantindo que cada vértice mantenha exatamente uma entrada (propriedade fundamental de arborescência). *Justificativa:* A remoção da aresta interna é obrigatória porque o vértice v recebe uma nova entrada vinda do exterior; manter ambas violaria a propriedade de arborescência ($\deg^-(v) = 1$ para todo $v \neq r$); a escolha de qual aresta remover é determinada univocamente pela solução recursiva em D'. Adiciona a aresta externa `(u,v)` a F' (linha 21), reintegra todas as arestas restantes do ciclo C (linhas 22–23), processa as arestas de saída do supervértice consultando `out_from_cycle` (linhas 24–26), e remove o supervértice `contracted_label` de F' (linha 27), completando a substituição de x_C pelo ciclo modificado. *Justificativa:* A reintegração do ciclo (menos uma aresta) combina a solução recursiva no grafo contraído com a estrutura cíclica original, preservando otimalidade: o ciclo reduzido contribui com $n_C - 1$ arestas (onde n_C é o tamanho do ciclo), e a aresta externa estabelece a conexão correta com o resto da arborescência. Por fim, restaura os pesos originais de `D` para todas as arestas de F' (linhas 28–29), desfazendo os custos reduzidos e retornando aos custos do problema original, e retorna F' como a r-arborescência de custo mínimo (linha 30). *Justificativa:* Como no caso base, a restauração é necessária para que a solução retornada reflita os custos originais do problema, não os custos reduzidos usados internamente pelo algoritmo.

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

Essa correspondência direta entre implementação e teoria, agora destacada nas caixas verdes acima com justificativas explícitas, demonstra como os três passos abstratos do algoritmo de Chu–Liu/Edmonds se traduzem em operações concretas: o Passo 1 se manifesta na normalização e construção de F^* (linhas 2–6), o Passo 2 na verificação de aciclicidade e retorno (linhas 7–10), e o Passo 3 na contração, recursão e reexpansão (linhas 11–30). A estratégia primal do método — induzir custos reduzidos zero, extrair estrutura funcional, e resolver ciclos por contração/expansão — emerge naturalmente dessa correspondência entre formulação teórica e código, com cada escolha de implementação fundamentada em necessidades de correção, eficiência ou clareza algorítmica.

Procedimento principal (recursivo)

Implementa o algoritmo de Chu–Liu/Edmonds de forma recursiva para encontrar a r-arborescência de custo mínimo em um digrafo ponderado `D` *com raiz* `r0`*. Normaliza custos, constrói F^*, detecta ciclos e, se houver, contrai em supervértice, resolve recursivamente no grafo reduzido e reexpande, restaurando a arborescência ótima no grafo original. Retorna um* `nx.DiGraph` *contendo exatamente $|V| - 1$ arestas com grau de entrada 1 para cada vértice exceto a raiz.*

```
def find_optimum_arborescence_chuliu(D: nx.DiGraph,r0: str,level=0,):
    D_copy = D.copy()
    for v in D_copy.nodes:
        if v != r0:
            normalize_incoming_edge_weights(D_copy, v)
    F_star = get_Fstar(D_copy, r0)
    if nx.is_arborescence(F_star):
        for u, v in F_star.edges:
            F_star[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
        return F_star
    else:
        C: nx.DiGraph = find_cycle(F_star)
        contracted_label = f"\n n*{level}"
        in_to_cycle, out_from_cycle = contract_cycle(
        D_copy, C, contracted_label)
        F_prime = find_optimum_arborescence_chuliu(D_copy,r0,level + 1)
        in_edge = next(iter(F_prime.in_edges(contracted_label, data="w")),
           None)
        u, _, _ = in_edge
        v, _ = in_to_cycle[u]
        remove_internal_edge_to_cycle_entry(C, v)
        F_prime.add_edge(u, v)
        for u_c, v_c in C.edges:
            F_prime.add_edge(u_c, v_c)
        for _, z, _ in F_prime.out_edges(contracted_label, data=True):
            u_cycle, _ = out_from_cycle[z]
            F_prime.add_edge(u_cycle, z)
        F_prime.remove_node(contracted_label)
```

```
        for u, v in F_prime.edges:
            F_prime[u][v]["w"] = D[u][v]["w"]
        return F_prime
```

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

1.3.9.1 Exemplo de execução do algoritmo

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

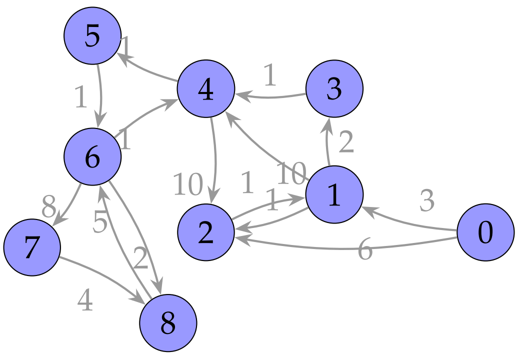


Figura 10 – Grafo direcionado ponderado inicial com raiz no vértice 0. O grafo contém 9 vértices e múltiplas arestas com pesos variados. O primeiro passo do algoritmo seria remover arestas que entram na raiz, porém não há nenhuma neste caso, logo não existe necessidade de alterar o grafo.

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

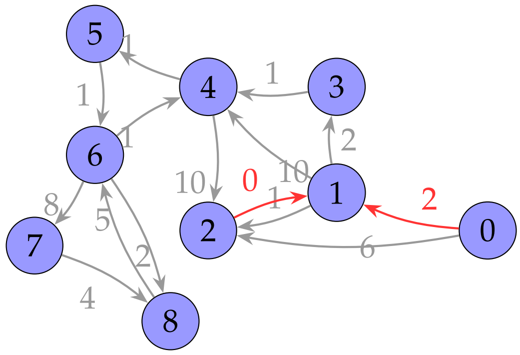


Figura 11 – Normalização parcial das arestas de entrada para o vértice 1. As arestas de entrada são $(0 \to 1)$ com peso original 3 e $(2 \to 1)$ com peso original 1. Elegendo a aresta $(2 \to 1)$ como a de menor peso (peso mínimo = 1), subtraímos este valor de todas as arestas de entrada: $(0 \to 1)$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

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

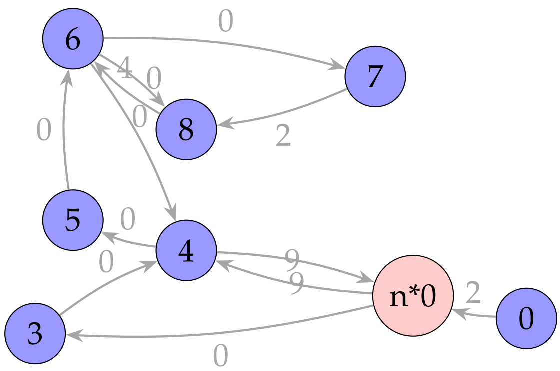


Figura 12 – Grafo contraído após detecção do ciclo $C = \{1, 2\}$ em F^*. O ciclo foi contraído no supervértice $n * 0$ (destacado em vermelho). As arestas que entravam ou saíam do ciclo foram redirecionadas para o supervértice, com custos ajustados segundo as fórmulas $c'(u, x_C) := c(u, w) - y(w)$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

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

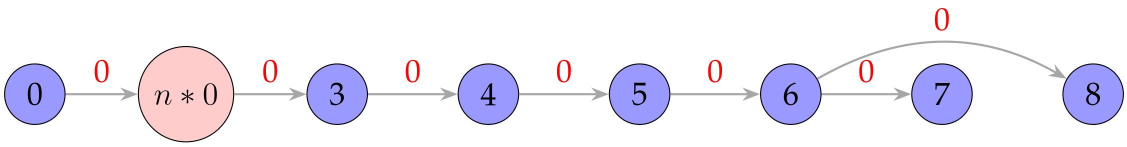


Figura 13 – Arborescência ótima F' obtida no grafo contraído. Todas as arestas selecionadas têm custo reduzido 0 (destacados em vermelho), e o grafo forma uma arborescência válida enraizada em 0: cada vértice (exceto a raiz) tem exatamente uma aresta de entrada, não há ciclos, e todos os vértices são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

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

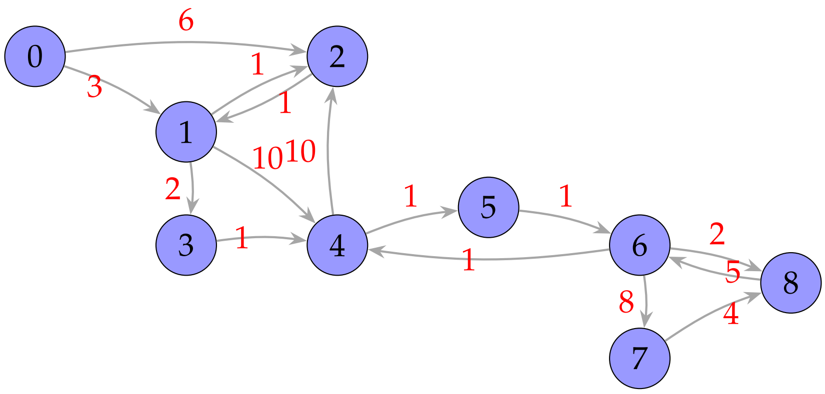


Figura 14 – Arborescência ótima final no grafo original com pesos restaurados. O supervértice $n * 0$ foi expandido de volta para os vértices 1 e 2, com a aresta externa $(0, 1)$ escolhida pela solução recursiva conectando ao ciclo. A aresta interna $(2, 1)$ do ciclo original foi removida para manter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

1.3.10 Transição para a abordagem primal-dual

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

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

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

Referências

KLEINBERG, J.; TARDOS, É. *Algorithm Design*. [S.l.]: Addison-Wesley, 2006. Citado 5 vezes nas páginas 13, 14, 15, 28 e 32.

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

Anexos

ANEXO A – Anexo A

Conteúdo do anexo A.