回溯（backtrack）

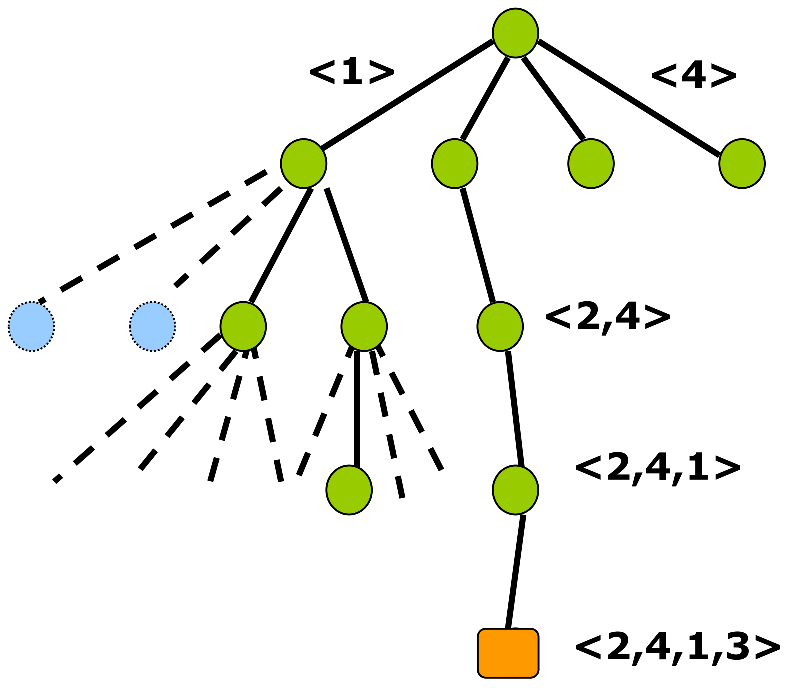
- 回溯算法的基本思想和适用条件
- 回溯算法的设计步骤
- 估计回溯算法的效率
- 改进回溯算法的途径
- 分支估界
- 应用实例

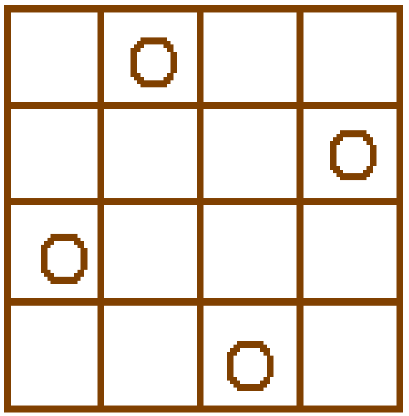
基本思想和适用条件

- 实例
- 基本思想
  - 搜索问题
  - 搜索空间
  - 搜索策略
  - 判定条件
  - 结点状态
  - 存储结构
- 必要条件

实例1: 四后问题

解表示成一个4维向量，$<x_1, x_2, x_3, x_4>$（放置列号）
搜索空间：4叉树



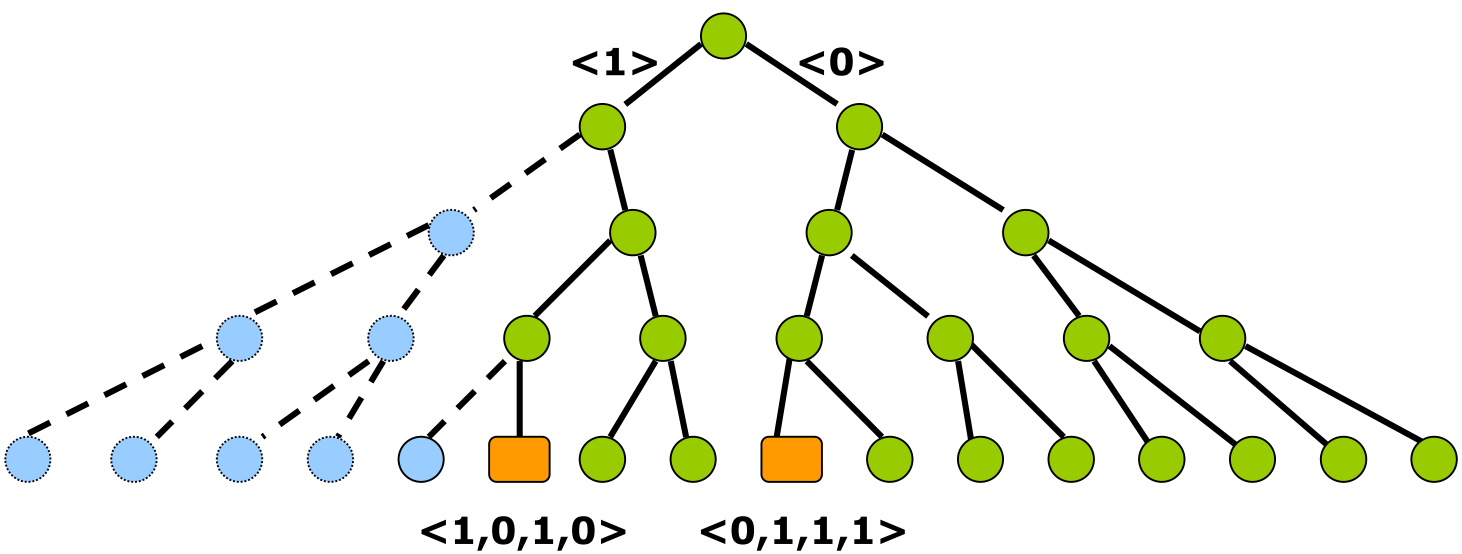


实例2：0-1背包问题

V={12,11,9,8}, W={8,6,4,3}, B=13

结点：向量$<x_1, x_2, x_3, \ldots, x_k>$（子集的部分特征向量）

搜索空间：子集树，2^n片树叶



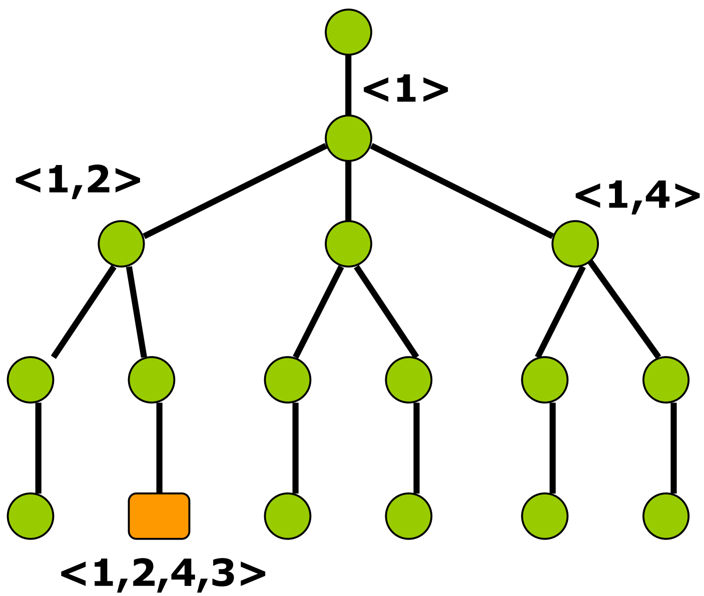
<0,1,1,1> 可行解： x_1=0, x_2=1, x_3=1, x_4=1. 重量：13，价值：28

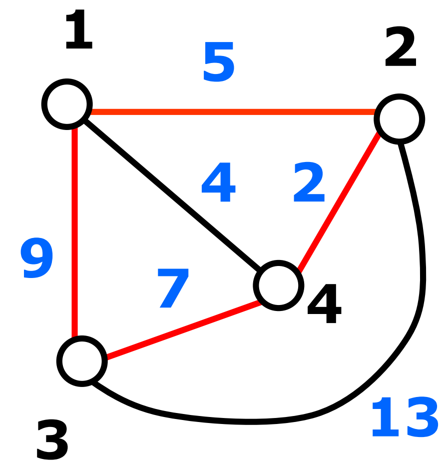
<1,0,1,0>可行解： x_1=1, x_2=0, x_3=1, x_4=0. 重量：12，价值：21

实例3：货郎担问题

$<i_1,i_2,\ldots,i_n>$为巡回路线

搜索空间：排列树, $(n\text{-}1)!$片树叶





<1,2,4,3> 对应于巡回路线：1→2 →4 →3 →1

长度：5+2+7+9=23

基本思想

- 适用问题：求解搜索问题
- 搜索空间：树，结点对应部分解向量，树叶对应可行解
- 搜索过程：采用系统的方法隐含遍历搜索树
- 搜索策略：深度优先，宽度优先，函数优先，宽深结合等
- 结点分支判定条件：
  - 满足约束条件---分支扩张解向量
  - 不满足约束条件，回溯到该结点的父结点
- 结点状态：动态生成
  - 白结点(尚未访问);
  - 灰结点(正在访问该结点为根的子树);
  - 黑结点(该结点为根的子树遍历完成)
- 存储：当前路径

必要条件：多米诺性质

设 $P(x_1, x_2, \ldots, x_i)$ 为真表示向量 $<x_1, x_2, \ldots, x_i>$ 中 i 个皇后放置在彼此不能攻击的位置

$$P(x_1, x_2, \ldots, x_{k+1}) \rightarrow P(x_1, x_2, \ldots, x_k) \qquad 0 < k < n$$

例4　求不等式的整数解

$$5x_1+4x_2-x_3 \le 10, \quad 1 \le x_i \le 3, \; i=1,2,3$$

$P(x_1, \ldots, x_k)$：意味将 $x_1, x_2, \ldots, x_k$ 代入原不等式的相应部分使得左边小于等于10

不满足多米诺性质

变换：　令 $x_3=3-x_3'$,

$$5x_1+4x_2+x_3' \le 13, \quad 1 \le x_1, x_2 \le 3, \; 0 \le x_3' \le 2$$

回溯算法的设计要素

- 定义搜索问题的解向量和每个分量的取值范围
  - 解向量为 $<x_1, x_2, \ldots, x_n>$
  - 确定 x_i 的可能取值的集合为 X_i , $i = 1, 2, \ldots, n$.
- 当 $x_1, x_2, \ldots, x_{k-1}$ 确定以后计算 x_k 取值集合S_k, $S_k \subseteq X_k$
- 确定结点儿子的排列规则
- 判断是否满足多米诺性质
- 搜索策略----深度优先、宽度优先等
- 确定每个结点分支约束条件
- 确定存储搜索路径的数据结构

递归实现

算法 ReBack(k)

1. if $k>n$ then $<x_1, x_2, \ldots, x_n>$是解
2. else while $S_k \neq \varnothing$ do
3. $x_k \leftarrow S_k$中最小值
4. $S_k \leftarrow S_k - \{x_k\}$
5. 计算S_{k+1}
6. ReBack(k+1)

算法 ReBacktrack(n)

1. for $k \leftarrow 1$ to n 计算 X_k
2. ReBack(1)

迭代实现

迭代算法 Backtrack

1. 对于i =1, 2, … , n 确定X_i
2. $k \leftarrow 1$
3. 计算S_k
4. while $S_k \neq \varnothing$ do
5. $x_k \leftarrow S_k$中最小值; $S_k \leftarrow S_k - \{x_k\}$
6. if $k<n$ then
7. $k \leftarrow k+1$; 计算S_k
8. else $<x_1,x_2,\ldots,x_n>$是解
9. if $k>1$ then $k \leftarrow k-1$; goto 4

估计搜索树的结点数

计数搜索树中遍历的结点，**Monte Carlo**方法

Monte Carlo方法

1. 从根开始，随机选择一条路径，直到不能分支为止，即从$x_1, x_2, \ldots$，依次对x_i赋值，每个x_i的值是从当时的S_i中随机选取，直到向量不能扩张为止.
2. 假定搜索树的其他$|S_i|-1$个分支与以上随机选出的路径一样，计数搜索树的点数.
3. 重复步骤 1 和 2，将结点数进行概率平均.

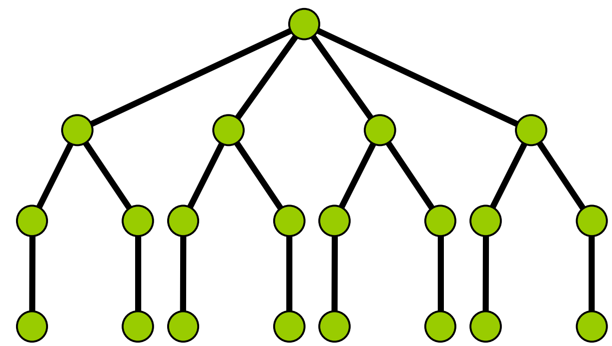
实例

例5　估计四后问题的效率

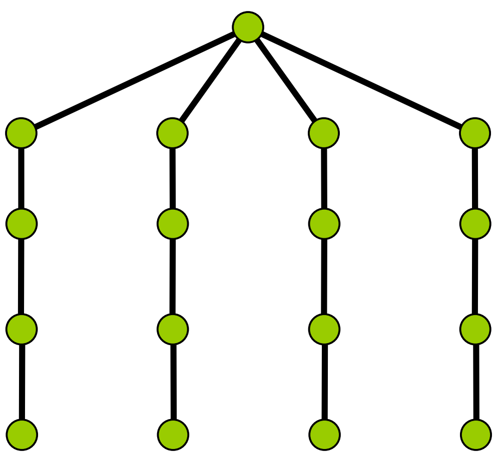
case1．<1,4,2>：$1+4+4\times2+4\times2=21$

case2．<2,4,1,3>：$4\times4+1=17$

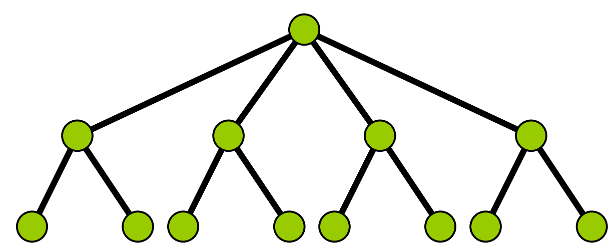
case3．<1,3>：$1+4\times1+4\times2=13$



Case1:　<1,4,2>



Case2:　<2,4,1,3>



Case3:　<1,3>

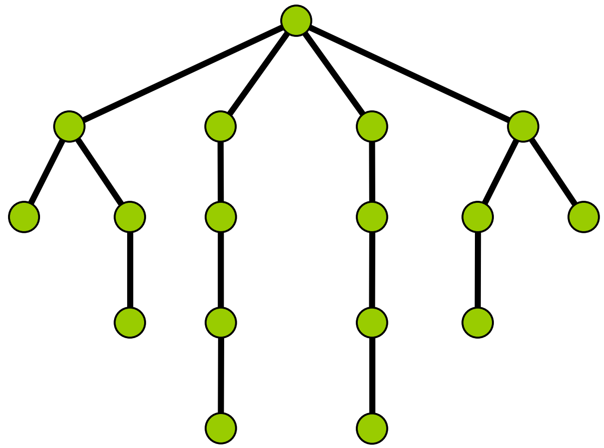
估计结点数

假设 4 次抽样测试:

case1:1次，case2:1次，case3:2次，

平均结点数＝(21×1+17×1+13×2)/4=16

搜索空间访问的结点数为17



搜索空间

算法实现

Monte Carlo

1． $sum \leftarrow 0$ //sum为 t 次结点平均数

2． for $i \leftarrow 1$ to t do //取样次数 t

3. $m \leftarrow$ Estimate(n) //m为本次结点总数

4. $sum \leftarrow sum + m$

5. $sum \leftarrow sum / t$

结点数计算

m为输出——本次取样结点总数，k 为层数，r_1为本层分支数, r_2为上层分支数，n为树的层数

算法Estimate(n)

1. $m \leftarrow 1$; $r_2 \leftarrow 1$; $k \leftarrow 1$　　//m为结点总数
2. While $k \le n$ do
3. 　　if $S_k = \varnothing$ then return m
4. 　　$r_1 \leftarrow |S_k| * r_2$　　//r_1为扩张后结点总数
5. 　　$m \leftarrow m + r_1$　　// r_2为扩张前结点总数
6. 　　$x_k \leftarrow$ 随机选择 S_k 的元素
7. 　　$r_2 \leftarrow r_1$
8. 　　$k \leftarrow k+1$

影响算法效率的因素

最坏情况下的时间$W(n)=(p(n)f(n))$

- 其中 $p(n)$ 为每个结点时间，$f(n)$为结点个数

影响回溯算法效率的因素

- 搜索树的结构
  - 分支情况：分支均匀否
  - 树的深度
  - 对称程度：对称适合裁减
- 解的分布
  - 在不同子树中分布多少是否均匀
  - 分布深度
- 约束条件的判断：计算简单

改进途径

- 根据树分支设计优先策略：
  结点少的分支优先，解多的分支优先
- 利用搜索树的对称性剪裁子树
- 分解为子问题：
  求解时间 $f(n)=c2^n$，组合时间$T=O(f(n))$
  如果分解为 k 个子问题，每个子问题大小为 n/k
  求解时间为

$$kc2^{\frac{n}{k}}+T$$

组合优化问题

- 相关概念
  - 目标函数（极大化或极小化）
  - 约束条件
  - 搜索空间中满足约束条件的解称为可行解
  - 使得目标函数达到极大(或极小)的解称为最优解
- 实例：背包问题

$$\max \quad x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 9x_4$$

$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 7x_4 \le 10$$

$$x_i \in N, i = 1,2,3,4$$

分支估界技术（极大化）

- 设立代价函数
  - 函数值以该结点为根的搜索树中的所有可行解的目标函数值的上界
  - 父结点的代价不小于子结点的代价
- 设立界
  - 代表当时已经得到的可行解的目标函数的最大值
  - 界的设定初值可以设为0
  - 可行解的目标函数值大于当时的界，进行更新
- 搜索中停止分支的依据
  - 不满足约束条件或者其代价函数小于当时的界