Design and Analysis of Algorithms

Part II: Dynamic Programming

Lecture 16: Chain Matrix Multiplication

童咏昕

北京航空航天大学
计算机学院

动态规划篇概述

- 在算法课程第二部分“动态规划”主题中，我们将主要聚焦于如下经典问题：
  - 0-1 Knapsack (0-1背包问题)
  - Maximum Contiguous Subarray II (最大连续子数组 II)
  - Longest Common Subsequences (最长公共子序列)
  - Longest Common Substrings (最长公共子串)
  - Minimum Edit Distance (最小编辑距离)
  - Rod-Cutting (钢条切割)
  - Chain Matrix Multiplication (矩阵链乘法)

问题背景：基本知识

- 矩阵
  - $p \times q$的矩阵$U_{p,q}$
  - 例
    - 4×3的矩阵$U_{4,3}$

$$U = \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 9 & 5 & 6 \\ 0 & 8 & 1 \\ 5 & 2 & 7 \end{bmatrix}}_{q=3} \left.\vphantom{\begin{bmatrix} 2 \\ 9 \\ 0 \\ 5 \end{bmatrix}}\right\} p = 4$$

    - 3×2的矩阵$V_{3,2}$

$$V = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}}_{r=2} \left.\vphantom{\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}}\right\} q = 3$$

问题：如何计算$U \cdot V$?

问题背景：基本知识

- 2个矩阵相乘
  - $U=\underbrace{\begin{bmatrix}2&1&3\\9&5&6\\0&8&1\\5&2&7\end{bmatrix}}_{q=3}\left.\vphantom{\begin{bmatrix}2\\9\\0\\5\end{bmatrix}}\right\}p=4$, $V=\underbrace{\begin{bmatrix}1&4\\2&5\\3&6\end{bmatrix}}_{r=2}\left.\vphantom{\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}}\right\}q=3$, $Z=UV=\underbrace{\begin{bmatrix}13&31\\37&97\\19&46\\30&72\end{bmatrix}}_{r=2}\left.\vphantom{\begin{bmatrix}1\\3\\1\\3\end{bmatrix}}\right\}p=4$

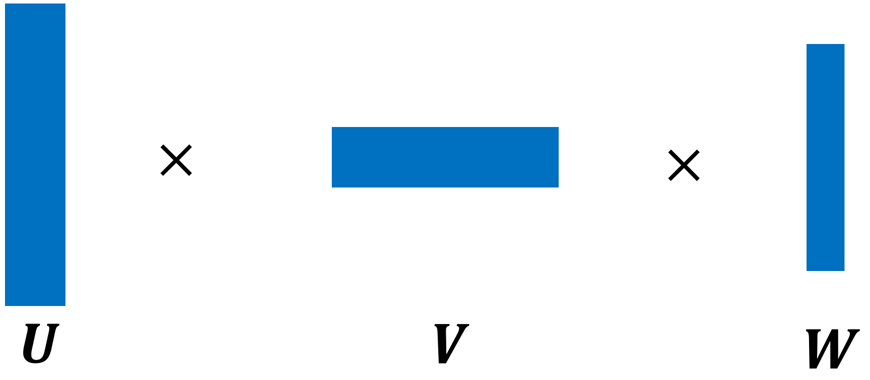
- 矩阵乘法的时间复杂度
  - 计算1个数字：q次标量乘法
  - 共$p\times r$个数：$\Theta(pqr)$
  - 上例中，标量乘法次数为：$p\times q\times r=4\times 3\times 2=24$

问题背景：基本知识

- **3个矩阵相乘**
  - 矩阵乘法结合率：$(UV)W = U(VW)$
  - 新问题：矩阵乘法结合的顺序

问题：顺序不同，效率是否明显不同？

  - 例如：矩阵维度数为$p = 40$，$q = 8$，$r = 30$，$s = 5$

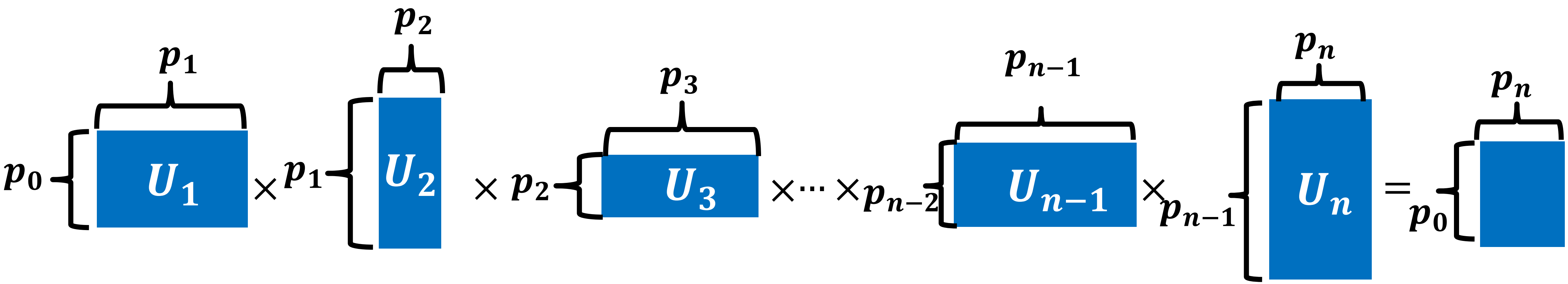


  - 按$(UV)W$计算，标量乘法次数：$pqr + prs = 15600$
  - 按$U(VW)$计算，标量乘法次数：$qrs + pqs = 2800$

差异显著

问题背景：基本知识

- n个矩阵相乘
  - 有一系列矩阵按顺序排列
  - 每个矩阵的行数=前一个矩阵的列数



- n个矩阵相乘也称为矩阵链乘法

问题：如何确定相乘顺序（给矩阵链加括号），提高计算效率?

问题定义

矩阵链乘法问题

Matrix-chain Multiplication Problem

输入

- n个矩阵组成的矩阵链$U_{1..n} =< U_1, U_2, \dots, U_n >$
- 矩阵链$U_{1..n}$对应的维度数分别为$p_0, p_1, \dots, p_n$，U_i的维度为$p_{i-1} \times p_i$

输出

- 找到一种加括号的方式，以确定矩阵链乘法的计算顺序，使得

最小化矩阵链标量乘法的次数

问题示例

- 给定矩阵链：$U_{1..4} = U_1, U_2, U_3, U_4$
- 有如下加括号方式

$U_1U_2U_3U_4$

第1次加括号

$(U_1)(U_2U_3U_4)$　　$(U_1U_2)(U_3U_4)$　　$(U_1U_2U_3)(U_4)$

第2次加括号

$(U_1)((U_2)(U_3U_4))$　$(U_1)((U_2U_3)(U_4))$　$(U_1U_2)(U_3U_4)$　$((U_1U_2)(U_3))(U_4)$　$((U_1)(U_2U_3))(U_4)$

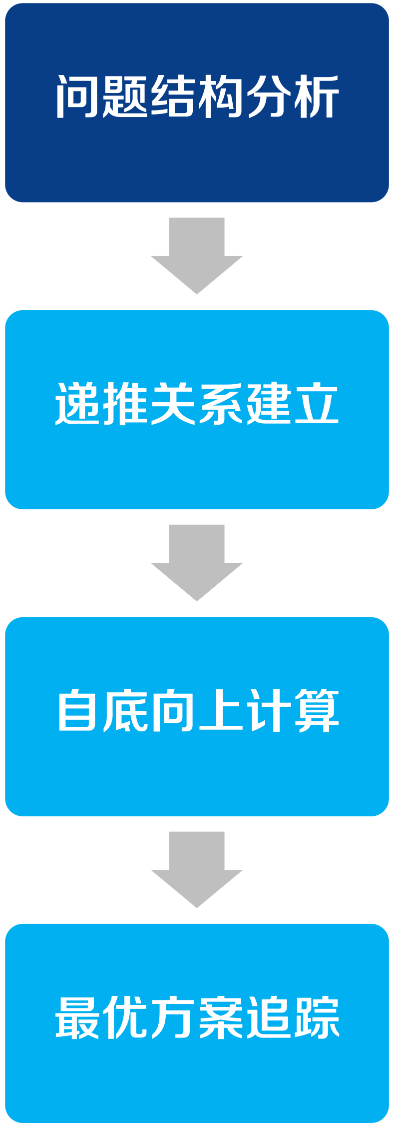
找到使标量乘法次数最小的加括号方式

问题结构分析

- 给出问题表示
  - $D[i,j]$：计算矩阵链$U_{i..j}$所需标量乘法的**最小次数**

$$U_{i..j} = p_{i-1}\underbrace{\overbrace{\boxed{U_i}}^{p_i} \times \cdots \times p_{j-1}\overbrace{\boxed{U_j}}^{p_j}}_{D[i,j]}$$

- 明确原始问题
  - $D[1,n]$：计算矩阵链$U_{1..n}$所需标量乘法的**最小次数**



递推关系建立：分析最优（子）结构

- 对矩阵链$U_{i..j}$，求解$D[i,j]$

$$U_i \dots U_k U_{k+1} \dots U_j$$

某位置$k(i \le k < j)$

$$\left(U_i \dots U_k \right) \times \left(U_{k+1} \dots U_j \right)$$

问题：如何保证不遗漏最优分割位置?

答案：枚举所有可能位置$i..j-1$，共$j-i$种

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

递推关系建立：分析最优（子）结构

- 对矩阵链$U_{i..j}$，求解$D[i,j]$

$$U_i \dots U_k U_{k+1} \dots U_j$$

某位置$k(i \le k < j)$

$$(U_i \dots U_k) \times (U_{k+1} \dots U_j)$$

$p_{i-1}p_kp_j$次标量乘法

$$p_{i-1} \times p_k \qquad \times \qquad p_k \times p_j$$

$D[i,k]$ $\qquad$ $D[k+1,j]$

- 乘法次数：$D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_kp_j$

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

递推关系建立：构造递推公式

- 对每个位置$k(i \le k < j)$
  - 乘法次数：$D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_k p_j$

- 枚举所有k，得到递推式
  - $\boxed{D[i,j]} = \min\limits_{i \le k < j}(\underbrace{\boxed{D[i,k] + D[k+1,j]}} + p_{i-1}p_k p_j)$

最优子结构

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

自底向上计算：确定计算顺序

- 初始化
  - $i = j$时，矩阵链只有一个矩阵，乘法次数为0

$D[i,j]$	$j = 1$	2	3	$\dots$	$\dots$	$n-1$	n
$i = 1$	0						
2		0					
3			0				
$\dots$				0			
$\dots$					0		
$n-1$						0	
n							0

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

自底向上计算：确定计算顺序

- 递推公式
  - $D[i,j] = \min\limits_{i \le k < j}(D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_kp_j)$

$D[i,j]$	$j=1$	2	3	…	…	$n-1$	n
$i=1$	0						
2		0					
3			0				
…				0			
…					0		
$n-1$						0	
n							0

$i<j$ 只用上三角

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

自底向上计算：确定计算顺序

- 递推公式
  - $D[i,j] = \min\limits_{i \le k < j} \left(\boxed{D[i,k]} + \boxed{D[k+1,j]} + p_{i-1} p_k p_j \right)$

$j=1$	2	3	$\dots$	$\dots$	$n-1$	n	$D[i,j]$
0							$i=1$
	0						2
		0	$D[i,k]$		$D[i,j]$		3
			0		$D[k+1,j]$		$\dots$
				0			$\dots$
					0		$n-1$
						0	n

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

自底向上计算：确定计算顺序

- 递推公式
  - $D[i,j] = \min\limits_{i \le k < j}(D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_kp_j)$
- 观察枚举过程

长链

$U_{i..j}$

枚举所有$k(i \le k < j)$

$U_{i..k}$ | $U_{k+1..j}$

短链　短链

计算顺序：链长从小到大

问题结构分析

递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

自底向上计算：依次计算问题

- 递推公式
  - $D[i,j] = \min\limits_{i \le k < j}(D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_k p_j)$

$j=1$	2	3	…	…	$n-1$	n	$D[i,j]$
0						★	$i=1$
	0						2
		0					3
			0				…
				0			…
					0		$n-1$
						0	n

矩阵链长：$j-i+1$

问题结构分析

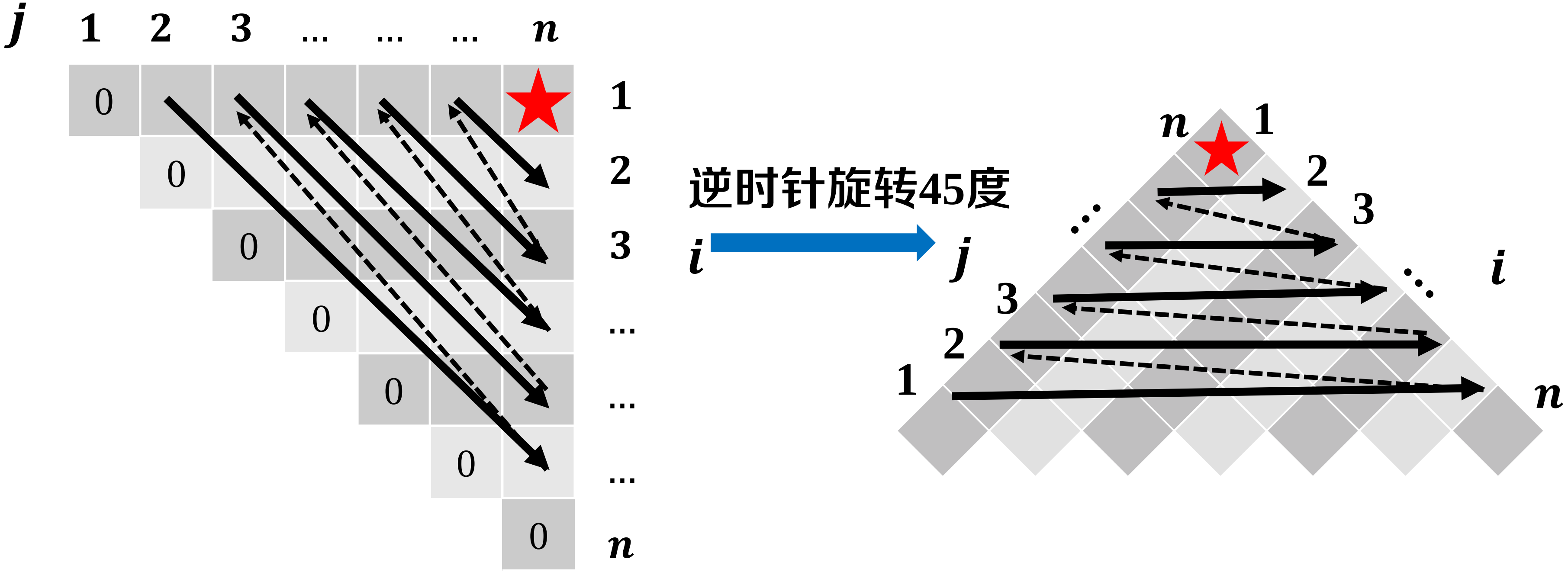
递推关系建立

自底向上计算

最优方案追踪

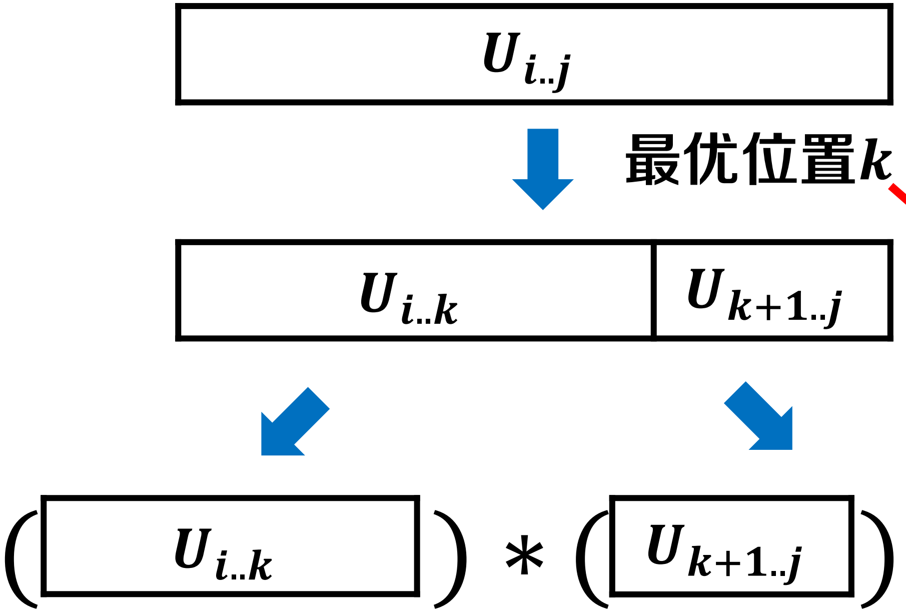
自底向上计算：依次计算问题

- 递推公式
  - $D[i,j] = \min\limits_{i \le k < j} (D[i,k] + D[k+1,j] + p_{i-1}p_kp_j)$

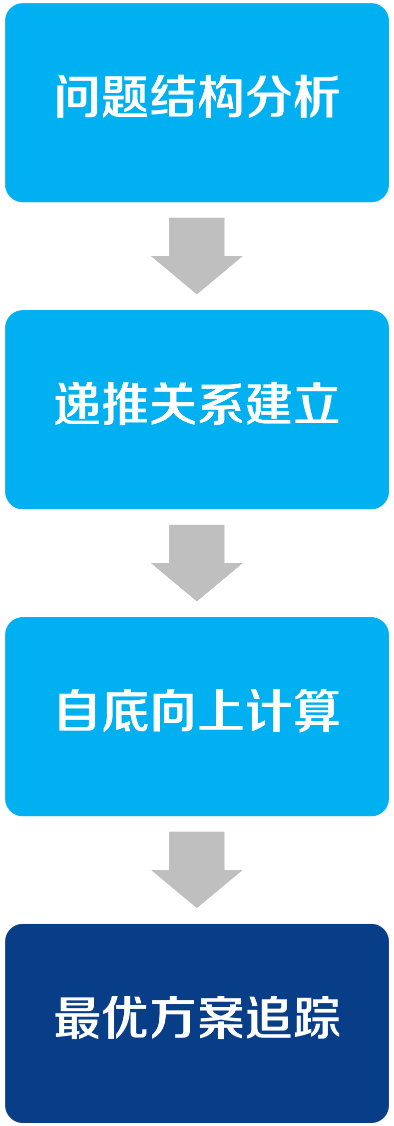


最优方案追踪：记录决策过程

- 构造追踪数组$Rec[1..n, 1..n]$
- $Rec[i,j]$：矩阵链$U_{i..j}$的最优分割位置



Rec	1	…	j	…	n
1					
…					
i			k		
…					
n					



最优方案追踪：输出最优方案

- 根据追踪数组，递归输出方案
  - 递归出口：矩阵链长为1

$$((U_1 \dots U_s)(U_{s+1} \dots U_k))((U_{k+1} \dots U_t)(U_{t+1} \dots U_{n-1}U_n))$$

Rec	$j=1$	2	$\dots$	k	$\dots$	$n-1$	n
$i=1$				s			k
2							
$\dots$							
k							t
$\dots$							
$n-1$							
n							

问题结构分析

递推关系建立

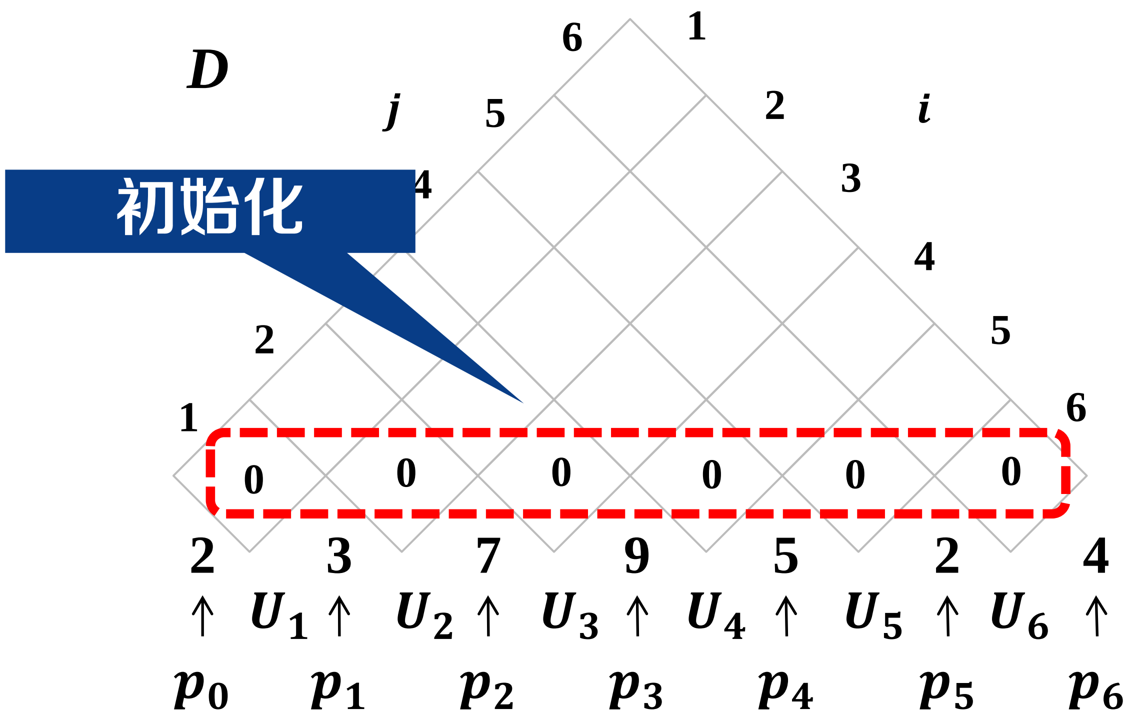
自底向上计算

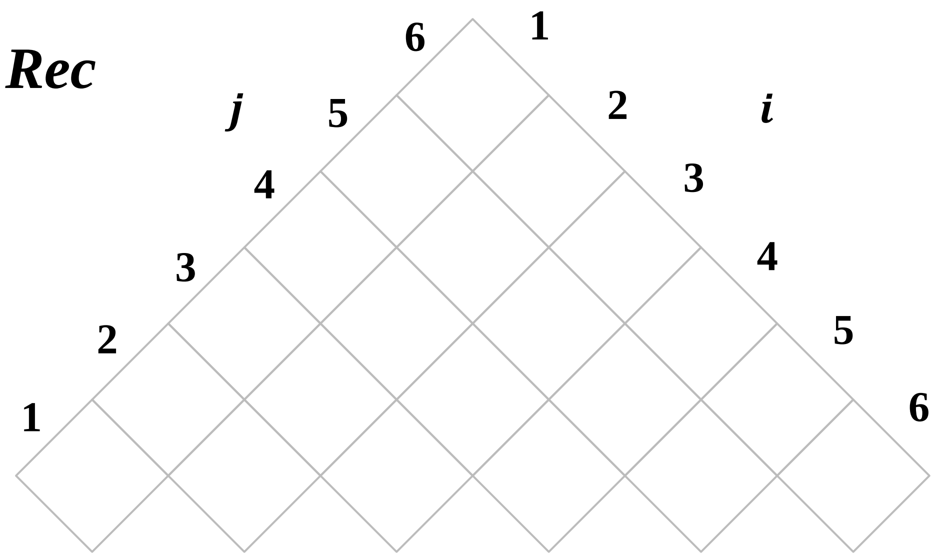
最优方案追踪

算法实例

- 给定矩阵链：$U_1U_2U_3U_4U_5U_6$
- 对应行列数

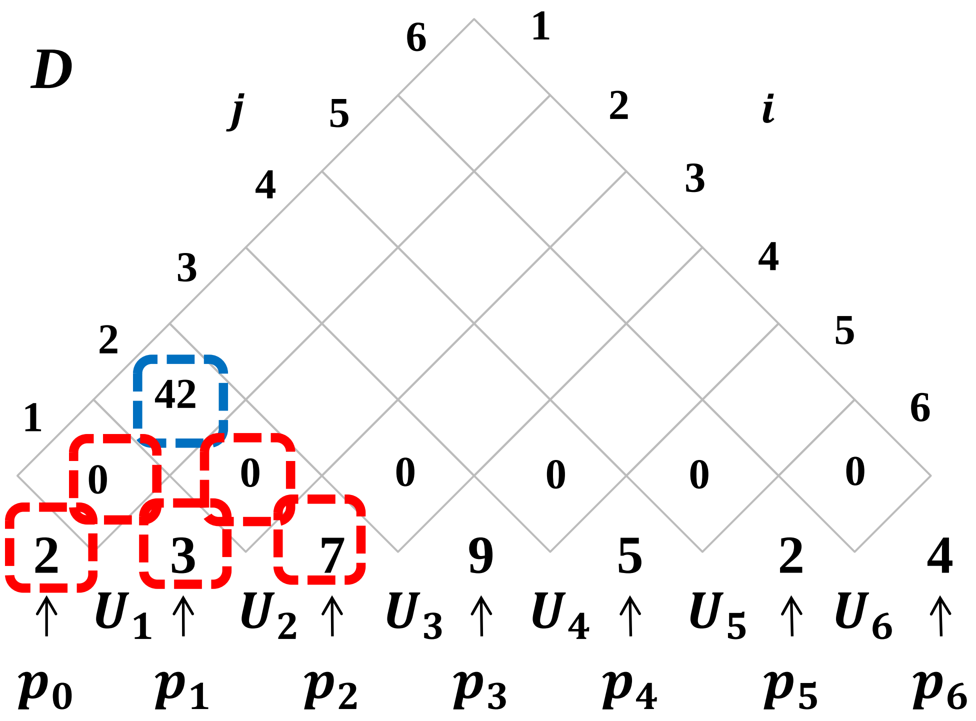
p_0	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6
2	3	7	9	5	2	4

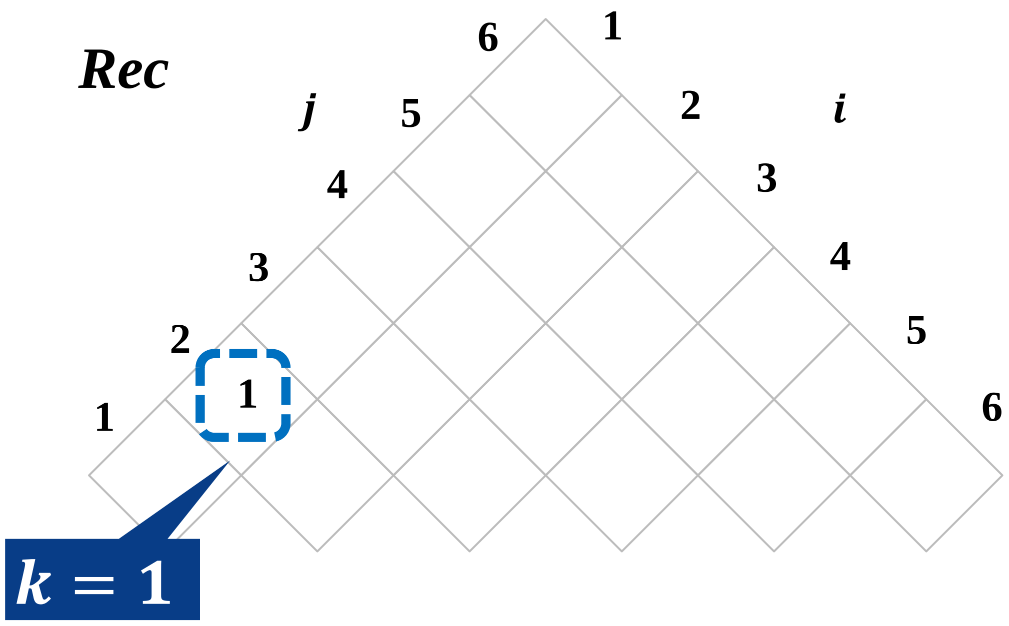




算法实例

- $D[1,2] = \min_{1\le k<2}(0+0+{\color{red}2\times 3\times 7}) = 42$

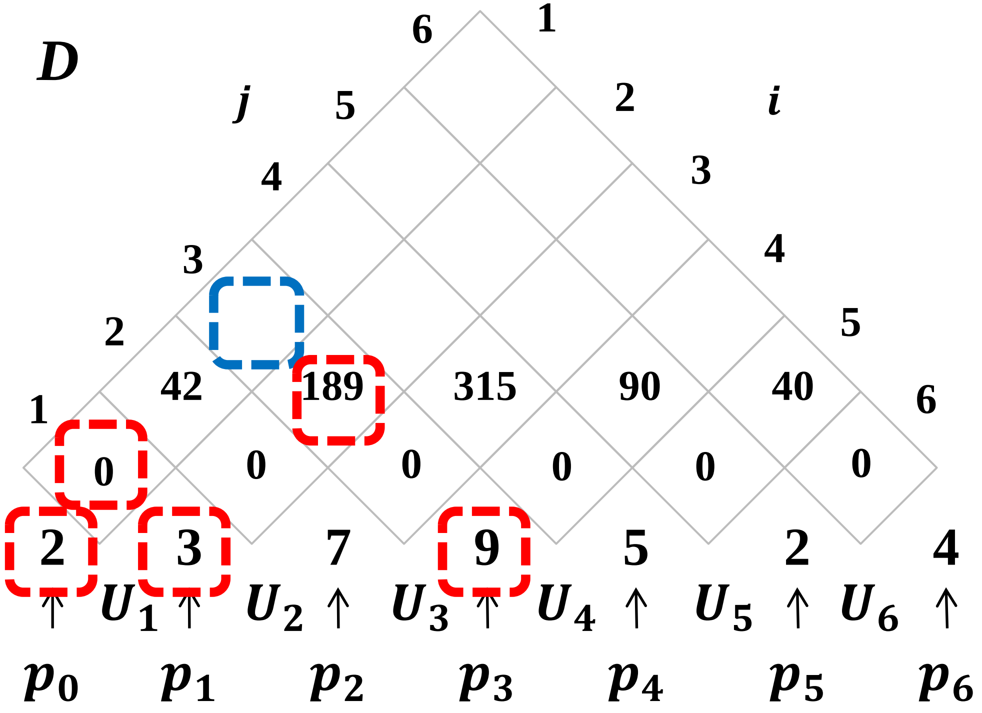


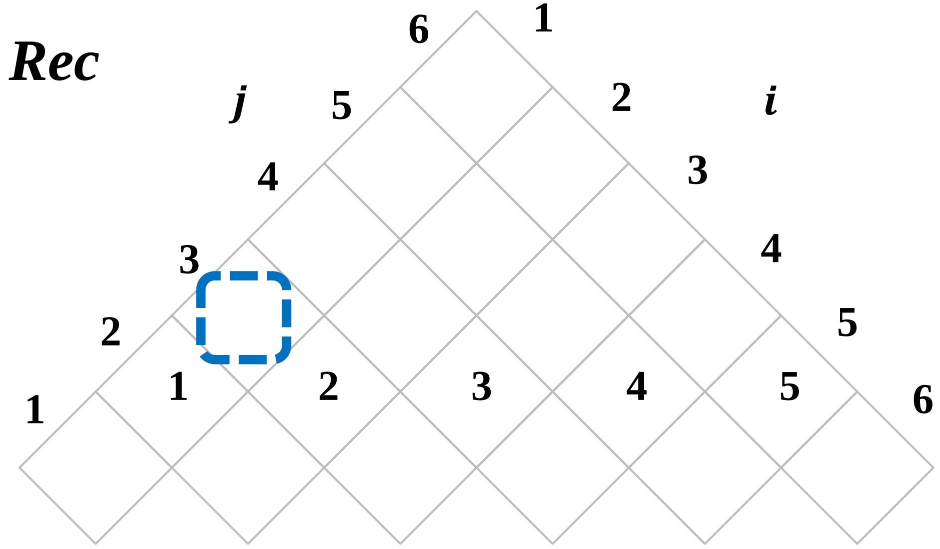


算法实例

- $D[1,3] = \min\limits_{1 \le k < 3} (D[1,k] + D[k+1,3] + p_0 p_k p_3)$

$$= \min \begin{cases} D[1,1] + D[2,3] + p_0 p_1 p_3 = 243 \\ D[1,2] + D[3,3] + p_0 p_2 p_3 = \end{cases}$$

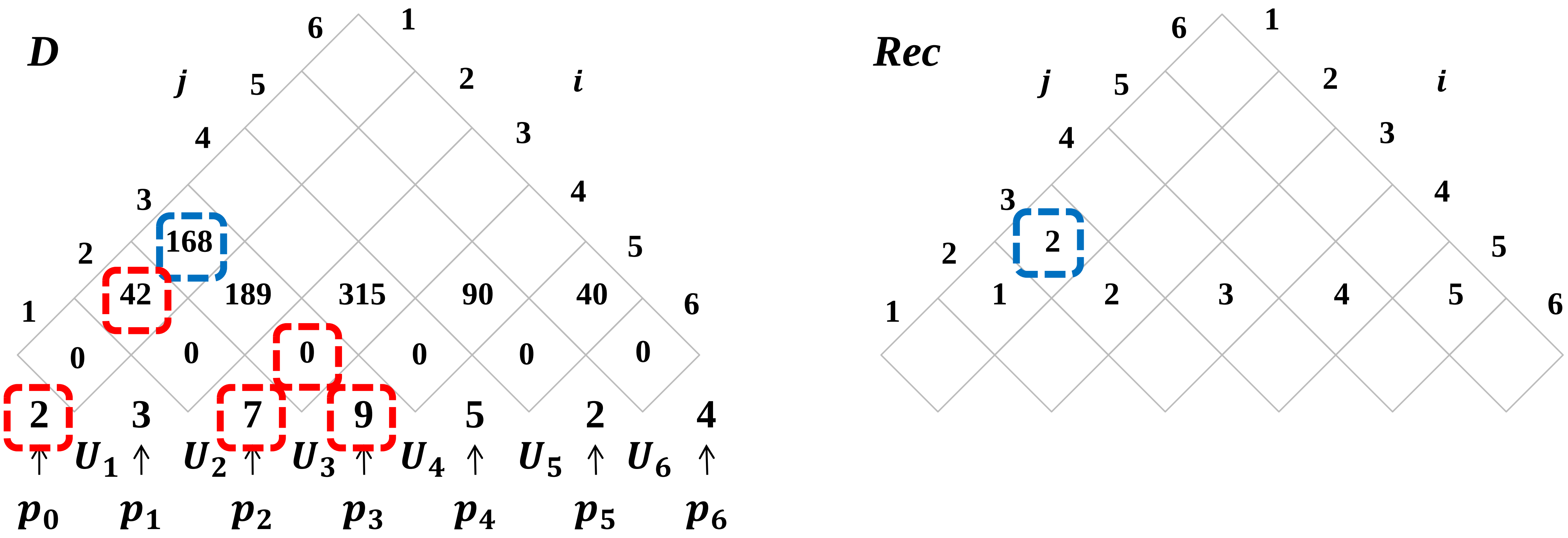




算法实例

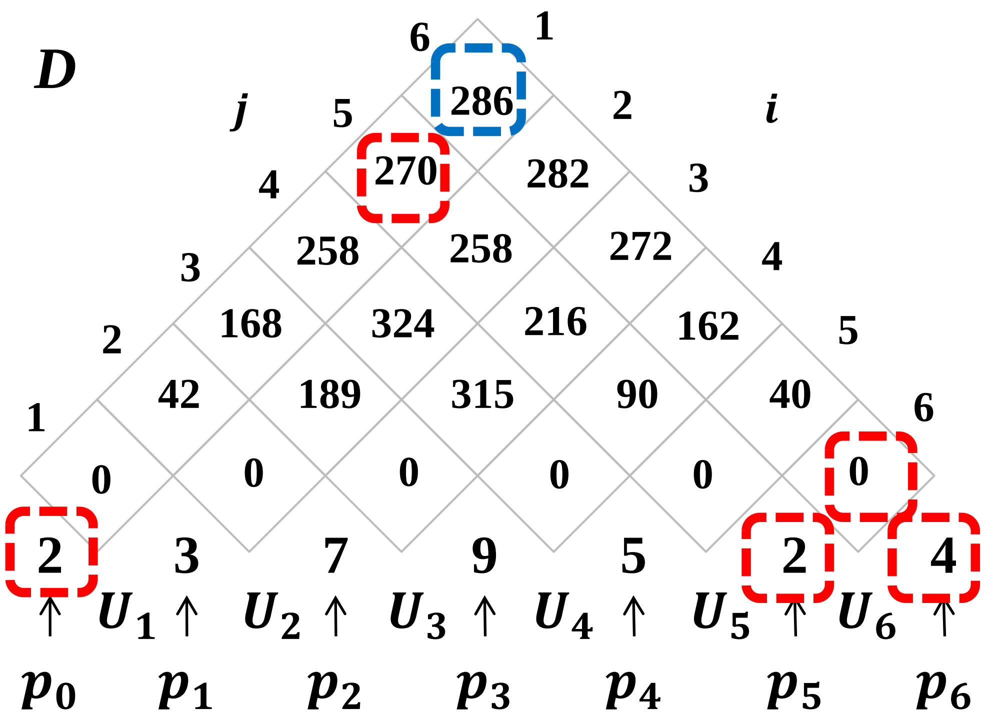
- $D[1,3] = \min\limits_{1 \le k < 3} (D[1,k] + D[k+1,3] + p_0 p_k p_3)$

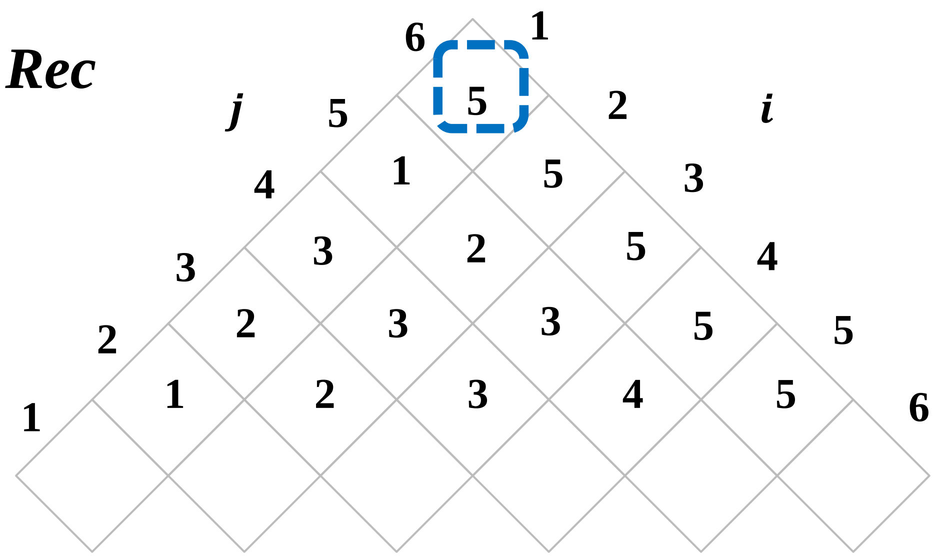
$$= \min \begin{cases} D[1,1] + D[2,3] + p_0 p_1 p_3 = 243 \\ D[1,2] + D[3,3] + p_0 p_2 p_3 = 168 \end{cases}$$



算法实例

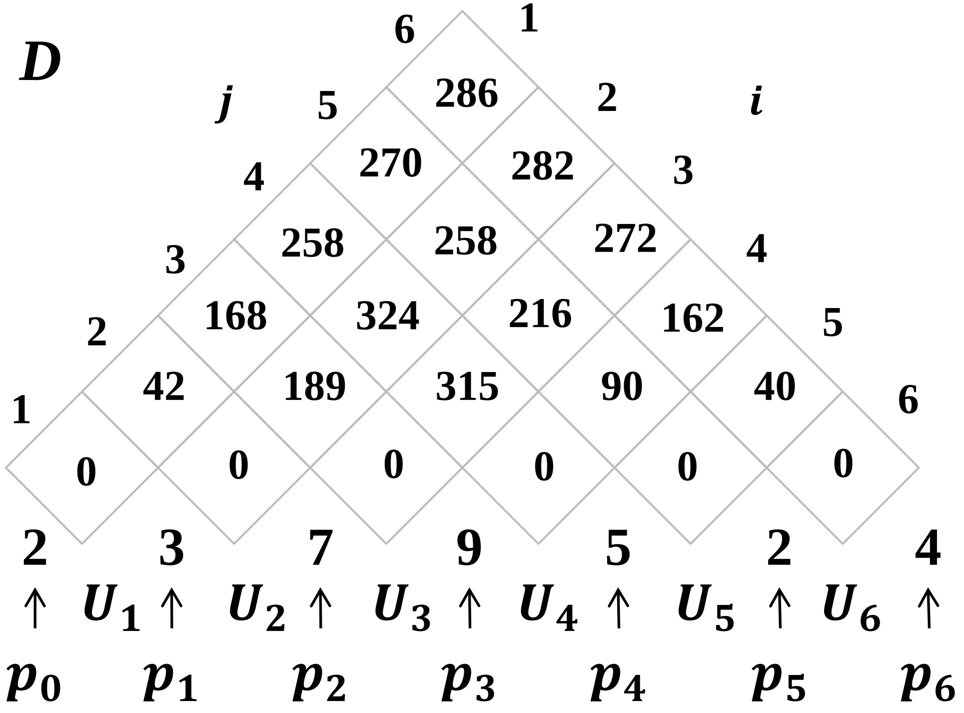
- $$D[1,6] = \min \begin{cases} D[1,1] + D[2,6] + p_0p_1p_6 = 306 \\ D[1,2] + D[3,6] + p_0p_2p_6 = 370 \\ D[1,3] + D[4,6] + p_0p_3p_6 = 402 \\ D[1,4] + D[5,6] + p_0p_4p_6 = 338 \\ D[1,5] + D[6,6] + p_0p_5p_6 = 286 \end{cases}$$

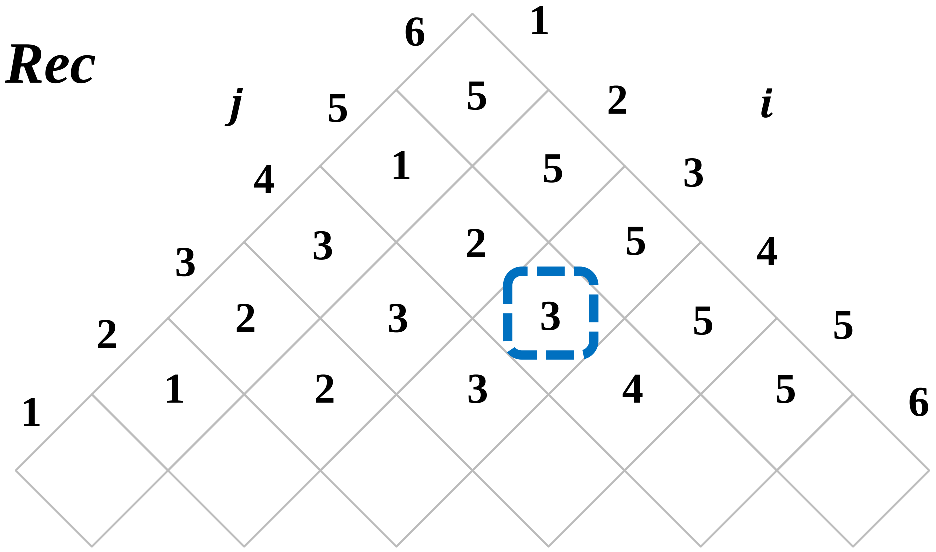




算法实例

- $U_1U_2U_3U_4U_5U_6$
- $\rightarrow (U_1U_2U_3U_4U_5)(U_6)$
- $\rightarrow (U_1(U_2U_3U_4U_5))(U_6)$
- $\rightarrow (U_1(U_2(U_3U_4U_5)))(U_6) \rightarrow (U_1(U_2((U_3)(U_4U_5))))(U_6)$





动态规划：伪代码

- **Matrix-Chain-Multiply(p, n)**

输入: 矩阵维度数组p, 矩阵的个数n
输出: 最小标量乘法次数, 分割方式追踪数组Rec
新建二维数组$D[1...n, 1...n]$, $Rec[1...n, 1...n]$
//初始化
$D \leftarrow \infty$
for $i \leftarrow 1$ *to* n **do**
  $D[i, i] \leftarrow 0$
end

初始化

动态规划：伪代码

- **Matrix-Chain-Multiply(p, n)**

```
//动态规划
for l ← 2 to n do
    for i ← 1 to n − l + 1 do
        j ← i + l − 1
        for k ← i to j − 1 do
            q ← D[i, k] + D[k + 1, j] + p[i − 1] ∗ p[k] ∗ p[j]
            if q < D[i, j] then
                D[i, j] ← q
                Rec[i, j] ← k
            end
        end
    end
end
return D[1, n], Rec
```

最优方案追踪：伪代码

- **Print-Matrix-Chain**$(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{Rec}, \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j})$

初始调用：Print-Matrix-Chain$(U, Rec, 1, n)$

输入: **矩阵链**$\boldsymbol{U_{1..n}}$**,追踪数组**$\boldsymbol{Rec[1..n, 1..n]}$**,位置索引**$\boldsymbol{i, j}$
输出: **矩阵链的加括号方式**

```
if i = j then
    print U_i
    return
end
print "("
Print-Matrix-Chain(U, Rec, i, Rec[i, j])
print ")("
Print-Matrix-Chain(U, Rec, Rec[i, j] + 1, j)
print ")"
return
```

时间复杂度分析

- **Matrix-Chain-Multiply(p, n)**

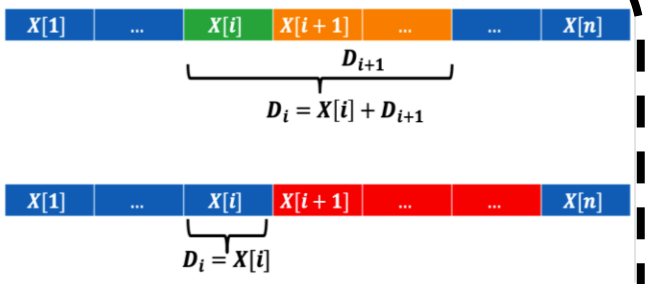
```
//动态规划
for l ← 2 to n do
    for i ← 1 to n − l + 1 do
        j ← i + l − 1
        D[i, j] ← ∞
        for k ← i to j − 1 do
            q ← D[i, k] + D[k + 1, j] + p[i − 1] ∗ p[k] ∗ p[j]
            if q < D[i, j] then
                D[i, j] ← q
                Rec[i, j] ← k
            end
        end
    end
end
return D[1, n], Rec
```

$O(n)$ $O(n^2)$ $O(n^3)$

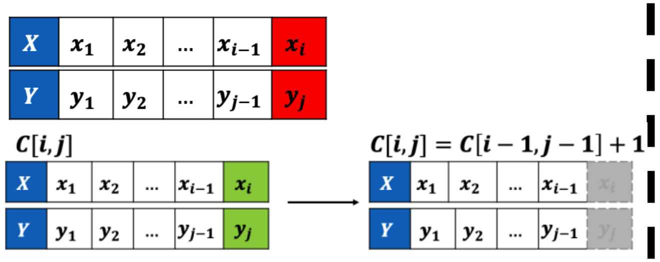
时间复杂度：$O(n^3)$

总结

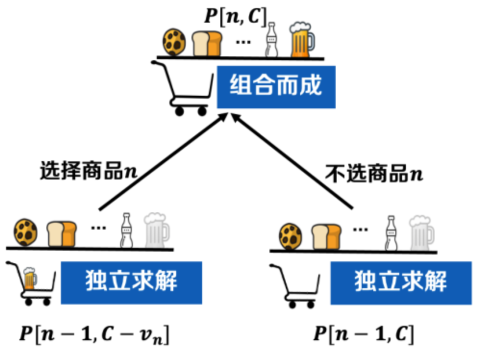
- 问题最优解依赖的子问题数量各不相同



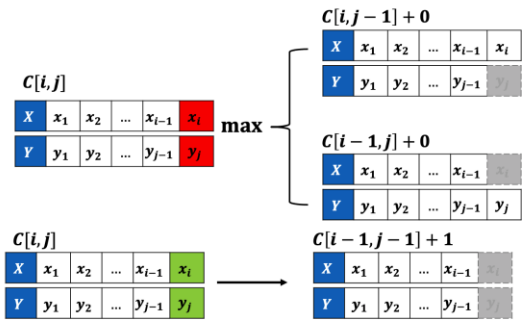
最大字数组问题



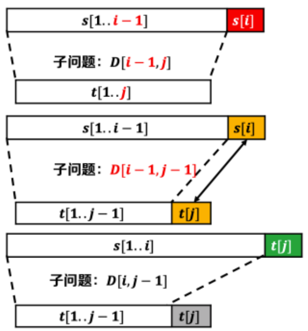
最长公共子串问题



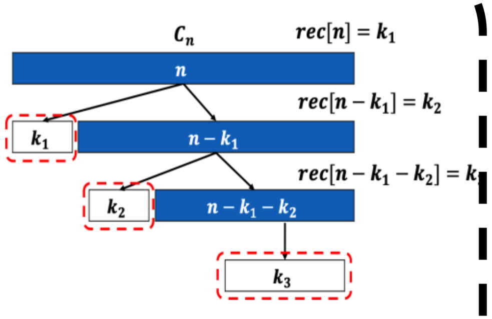
0-1背包问题



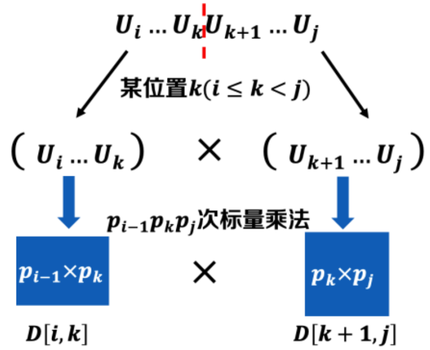
最长公共子序列问题



最小编辑距离问题



钢条切割问题



矩阵链乘法问题

依赖一个子问题

依赖常数个子问题

依赖枚举子问题

谢谢

BDA

Beihang University