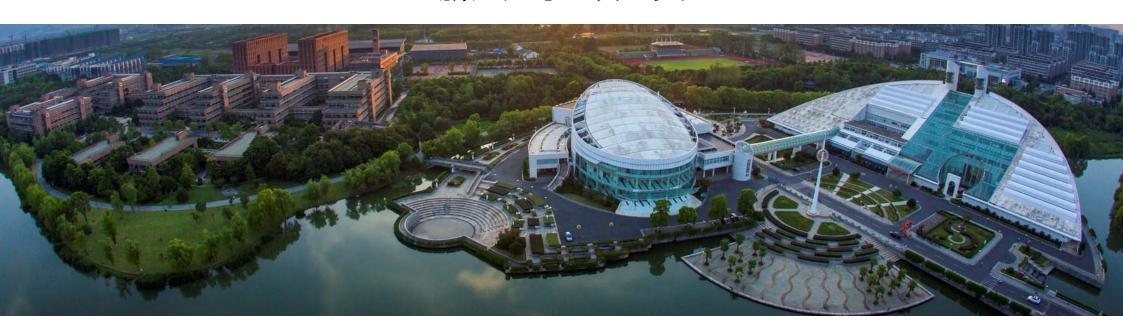


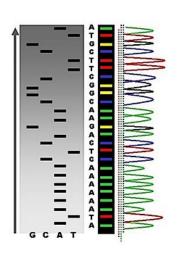
浙江大学 谈之奕



- 组合优化 (Combinatorial Optimization)
 - 应用于离散对象的,从有限多个可行解中 找出使某个目标函数达到最优的解的优化 问题
 - 组合优化是离散数学 (Discrete Mathematics) 与最优化的交叉学科分支
- 基因测序中的组合优化
 - Sanger测序法
 - 基因组组装 (assembly)



Frederick Sanger (1918-2013) 英国生物学家 1958, 1980年诺 贝尔化学奖得主









CACAGGGCTGCAATGA

GGCTG GCAATG CAG CACAGG CAGGG GGC CTGCA CAATGA GCTGC



数学 建模 MATH T

- 组合优化问题的求解
 - 组合优化问题丰富、类型多样,需要结合问题实际寻找合适的解决方案。组合优化问题有若干常用的求解思路,但尚不存在统一的求解步骤
 - 组合优化问题通常不能通过穷举 所有可能的解加以比较来求解, 因为可行解的数目可能是一很大 的数,以致于当前或相当长的一 段时间内人力或计算机不能承受

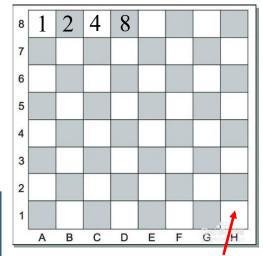
 $2^n \quad \ln n \quad n^3 \quad 2n^2 + 3n \quad n! \quad 2^{(\ln n)^2} \quad 2^{n^2} \quad n^n$



Grand Vizier Sissa Ben Dahir, a skilled mathematician, asks his reward from King Shirham of India.







$$2^{63} = 9223372036854775808$$
$$= 9.22 \times 10^{18}$$
$$2^{0} + 2^{1} + \dots + 2^{63} = 2^{64} - 1$$

Gamov G. One Two Three... Infinity: Facts and Speculations of Science, Viking Press, 1947 (中译本: 从一到无穷大: 科学中的事实与猜想, 张卜天译, 商务印书馆, 2019)



数学 建模 MATH T

 $x_{j}^{*} = 1, j = 1, 2, \dots, l-1,$

- 组合优化与连续优化
 - 相对决策变量为连续变量的<mark>连续优化</mark> (Continuous Optimization) 问题,组合优化^{s.t.} 问题的最优解缺少好的性质,求解缺少好的 工具
- 背包问题
 - 现有 n 件物品,物品 j 的价值为 p_i ,大小为 w_i 。
 - 将若干物品的全部或部分放入容量为 C 的背包中,在放入背包物品大小之和不超过背包容量前提下,使放入背包物品价值之和尽可能大









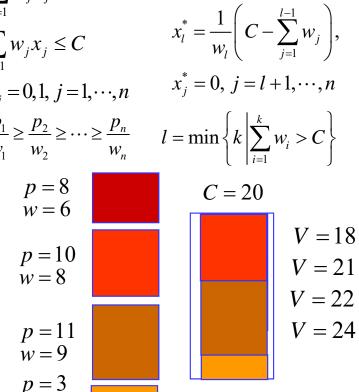
$$\max \sum_{j=1}^{n} p_{j} x_{j}$$

$$\sum_{j=1}^{n} w_{j} x_{j} \leq C$$

$$x_{j} = 0, 1, j = 1, \dots, n$$

$$\frac{p_{1}}{w_{1}} \geq \frac{p_{2}}{w_{2}} \geq \dots \geq \frac{p_{n}}{w_{n}}$$

w = 3



旅行售货商问题



- 旅行售货商问题 (Traveling Salesman Problem, TSP)
 - 一推销员想在若干个城市中推销自己的产品。计划从某个城市出发,经过每个城市恰好一次,最后回到出发的城市
 - 城市之间距离已知
 - 如何选择环游路线,使推销员走的路程最短
- •可行解(环游)
 - 每一条环游路线由 n 段两个城市之间 的旅行路线连接而成,对应于1,2,…,n 的一个圆周排列





iOS 13.5+



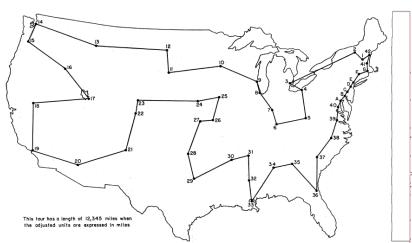


Cook, WJ, In Pursuit of the Traveling Salesman: Mathematics at the Limits of Computation, Princeton University Press, 2012. (中译本: 迷茫的旅行商: 一个无处不在的计算机算法问题, 隋春宁译, 人民邮电出版社, 2013)

Lawler EL, Lenstra JK, Rinnooy Kan AHG, Shmoys DB, (Eds.) *Traveling Salesman Problem: A Guided Tour of Combinatorial Optimization*, Wiley, 1985.

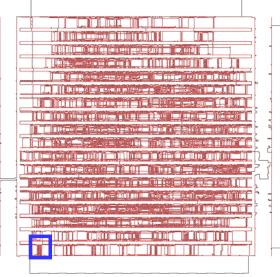
Gutin G, Punnen AP, (Eds.) The Traveling Salesman Problem and its Variations, Springer, 2002.

旅行售货商问题



美国49个城市的最优TSP环游

Dantzig G, Fulkerson R, Johnson S, Solution of a large-scale Traveling-Salesman Problem, *Journal of the Operations Research Society of America*, 2, 393-410, 1954.



nnnnnn





routingchallenge.mit.edu/ www.math.uwaterloo.ca/tsp/

20世纪80年代Bell实验室应用LaserLogic法制造芯片时形成的含85900个点的TSP问题,后被命名为pla85900收入TSP实例库

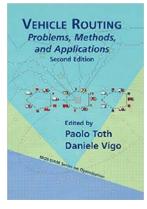
Applegate DL, Bixby RE, Chvátal V, Cook W, Espinoza DG, Goycoolea M, Helsgaun K, Certification of an optimal TSP tour through 85,900 cities, *Operations Research Letters*, 37, 11-15, 2009.

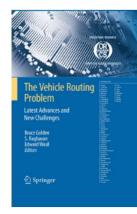
车辆路径问题

- 车辆路径问题 (Vehicle Routing Problem, VRP)
 - n 个顾客, 顾客 i 位于地点 i , 需求为 q_i , $i = 0,1,\dots,n$
 - K 辆相同的车,容量均为 Q
 - 仓库位于地点 0 。从地点 i 到地点 j 的距离为 $c_{ij}, i, j = 0, 1, \cdots, n$
 - 将顾客分配给各车,每车配送的顾客需求之和不超过 Q,确定每辆车自仓库出发,完成分配给该车的所有顾客的配送,最后回到仓库的路线,使得所有车行驶的总路程最短









Toth P, Vigo D (Eds.) Vehicle Routing: Problems, Methods, and Applications. SIAM, 2014. Golden BL, Subramanian R, Edward AW(Eds.) The Vehicle Routing Problem: Latest Advances and New Challenges. Springer, 2008.

指派问题



数学 建模 MATH T

- 指派问题 (Assignment Problem)
 - 有 n 项任务需分配给 n 位员工,每人完成其中一项, 员工 i 完成任务 j 所需时间为 c_{ij}
 - 如何分配可使完成所有任务所用总时间最少
- 指派问题的算法
 - 1955年,Kuhn在两位匈牙利数学家对图匹配问题研究的基础上,给出了指派问题时间复杂度为 $O(n^4)$ 的匈牙利算法

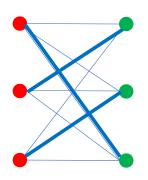
Kuhn HW. The Hungarian method for the assignment problem. *Naval Research Logistics Quarterly*, 2, 83-97, 1955



a paper representing the best of NRL in its first 50 years

Burkard RE, Dell'Amico M, Martello S, Assignment Problems, SIAM, 2009.

封面题图: Jan van Eyck, Portrait of Giovanni Arnolfini and his Wife, 1434, 现藏英国伦敦国家美术馆











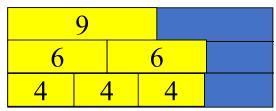
Jenő Egerváry 匈牙利数学家 (1891-1958)

排序问题

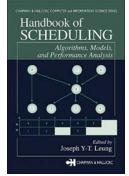
- •排序 (scheduling) 问题
 - 研究如何利用有限资源,在给定的限制条件下, 将一批任务安排在某些时间段内完成,并使效 益最大
 - 早期研究的排序问题背景源自工业生产,习惯上把可用的资源称为机器(machine),需要完成的任务称为工件(job)
 - 对部分排序问题,可行解由工件加工的顺序决定,这类问题最早也被称作sequencing
 - 广义排序(调度)问题
 - 课程表、时刻表、排班表、赛程等

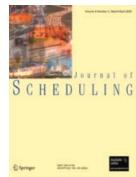
Leung, JY. (Eds.) Handbook of Scheduling: Algorithms, Models, and Performance Analysis. CRC, 2004.





甘特图 (Gantt chart)





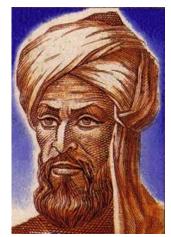


Journal of Henry Laurence Scheduling Gantt (1861-1919) 美国管理学家

算法与计算复杂性



- 算法 (algorithm)
 - 在有限步骤内求解某一问题的一组含义明确的可以完全机械执行的规则
 - 一系列将输入转换为输出的计算步骤
- 算法的品质
 - 衡量算法品质的主要因素是其执行时间的长短和所需存储容量的多少
- 计算复杂性 (computational complexity)
 - 确定一个问题的所有可能的算法解的最优效率或最优效率的界限
 - 理论计算机科学的一个重要分支,主要研究如何确定一个问题的所有可能的算法解的最优效率或最优效率的界限

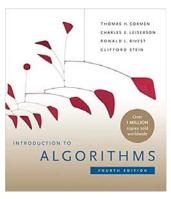


Muḥammad ibn Mūsā al-Khwārizmī (中译名:花拉子米) (拉丁译名: Algorithmi) (约780-约850) 波斯数学家

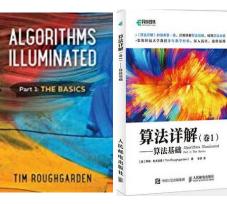
参考资料







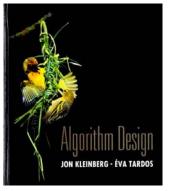


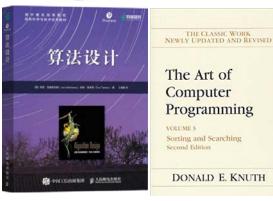




Roughgarden T. Algorithms Illuminated (I-IV). Soundlikeyourself Publishing, 2017. (中译本: 算法详解, 徐波译, 人民邮电出版社, 2019.)

Kleinberg J, Tardos É. *Algorithm Design*. Pearson Education India, 2006(中译本:算法设计,张立昂、屈婉玲译,清华大学出版社,2007)





Knuth DE. *The Art of Computer Programming*. Addison-Wesley, 1968-2011.

Vol. 1. Fundamental Algorithms

Vol. 2. Seminumerical Algorithms

Vol. 3. Sorting and Searching

Vol. 4. Combinatorial Algorithms



Donald Ervin Knuth(高德纳) (1938-) ·国认签把学官,1974年周司次组

美国计算机学家、1974年图灵奖得主

P vs. NP 问题

- P 与 NP 的 通俗解释
 - P: 有 (确定性) 多项式时间算法的问题
 - $\mathcal{N}P$: 有非确定性多项式时间算法的问题
 - 确定性算法是一种特殊的非确定性算法,故 $P \subseteq \mathcal{NP}$
- *P* vs. *NP* 问题
 - 所谓 \mathcal{P} vs. \mathcal{NP} 问题指 $\mathcal{P} = \mathcal{NP}$ 与 $\mathcal{P} \subset \mathcal{NP}$ 中 何者成立
 - P vs. $\mathcal{N}P$ 问题是数学和计算机科学中的重大 未解决难题之一
 - 目前多数人相信 $P \subset \mathcal{N}P$ 。此时背包问题等,不存在多项式时间内求得最优解的算法



最短路	Dijkstra算法				
最小生成树	Kruskal算法				
指派问题	匈牙利算法				
最大流、最小 割	Edmonds–Karp 算 法、Dinic算法				
素数判定	AKS算法				

Millennium Problems

- 1 Yang-Mills and Mass Gap
- 2 Riemann Hypothesis
- 3 P vs NP Problem
- 4 Navier-Stokes Equation
- **5 Hodge Conjecture**
- 6 Poincaré Conjecture $\sqrt{}$
- 7 Birch and Swinnerton-Dyer Conjecture



NP-完全性理论

数学 建模 MATH T

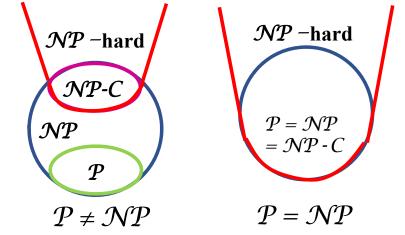
- $\mathcal{N}P$ -完全与 $\mathcal{N}P$ -难的通俗解释
 - $\mathcal{N}P C$: $\mathcal{N}P$ 类中最难的问题
 - 若一个 \mathcal{NP} -C 问题有多项式时间算法,所有 \mathcal{NP} 问题都有多项式时间算法
 - $\mathcal{N}P$ -hard: 不比 $\mathcal{N}P$ -C 问题容易的问题
 - 在 $P \neq NP$ 假设下,NP-难问题不存在多项式时间最优算法
 - 在 $P \neq NP$ 假设下,多数组合优化问题分属 P 问题和NP-难问题

*外*P 问题是没有多项式时间算法的问题

背包问题是一个*外*卫 问题,**这此**难解



Fortnow L, *The Golden Ticket: P*, *NP*, *and the Search for the Impossible*, Princeton University Press, 2013. (中译本:可能与不可能的边界: P/NP问题趣史, 杨帆译, 人民邮电出版社, 2014.





http://www.jsjkx.com DOL10.11896/isikx.19120017

哈密顿图判定问题的多项式时间算法

湘潭大学计算机学院。网络空间安全学院 湖南 湘潭 411105 国防科技大学计算机学院 长沙 410073

国的行政大学订异机学统 宏罗 4100/3 智能计算和信息处理教育部重点实验室 湖南 湘潭 41110;



中围法分类号 TP301.6



$\mathcal{N}P$ -完全问题



- 可满足性问题 (Satisfiability, SAT)
 - 给定一合取范式,是否存在其变量的一种赋值,使得该表达式值为真

$$(x_1 \lor x_3) \land (\neg x_2 \lor x_3)$$
 是
$$(x_1 \lor x_2) \land (x_1 \lor \neg x_2) \land \neg x_1$$
 否

• Cook-Levin定理: SAT ∈ NP-C 1971年, Cook运用图灵机语言,通过 NP问题的一种等价定义,证明了SAT问题的 NP-完全性。SAT问题被认为是第一个 NP-完全问题

苏联数学家Leonid Anatolievich Levin在相近时间内独立证明了包括SAT问题在内的若干问题的*NP-*完全性



Stephen Arthur Cook (1939-) 美国计算机学家 1982年图灵奖得主



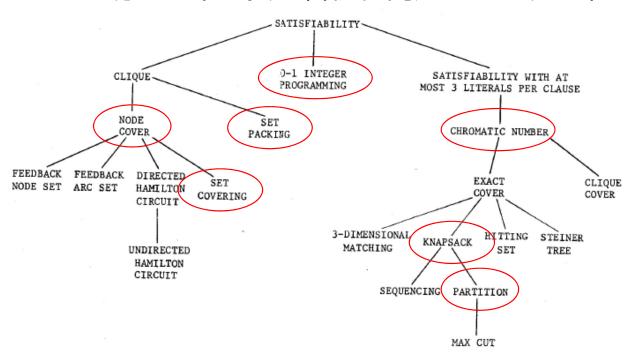
Leonid Anatolievich Levin (1948-) 苏联计算机学家

Cook SA. The complexity of theorem-proving procedures, *Proceedings of the 3rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, 151-158, 1971.

Levin LA, Universal Sequential Search Problems, *Problems of Information Transmission*, 9, 115–116, 1973

$\mathcal{N}P$ -完全问题

- 组合优化问题的 $\mathcal{N}P$ -完全性
 - 1972年,Karp从SAT问题出发构造归约,证明了20个重要组合优化问题的*NP*-完全性







Richard Manning Karp (1935—) 美国计算机学家 1985年图灵奖得主

Karp RM. Reducibility among combinatorial problems, *Proceedings of a Symposium on the Complexity of Computer Computations*, 85-103, 1972

$\mathcal{N}P$ -完全问题



- 三个外尸问题
 - 线性规划
 - 素性测试 *P*
 - 图同构

OMPUTERS AND INTRACTABILITY

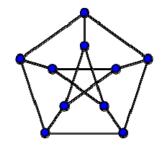


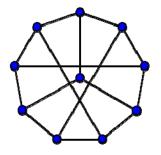


Garey MR, Johnson DS. Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness. Freeman, 1979. (中译本:计算机和难解性: \mathcal{NP} 完全性理论导引. 张立昂, 沈泓译, 科学出版社, 1990.)

- 图同构
 - 称图 G = (V, E) 与图 G' = (V', E') 同构 (isomorphic) , 若存在双射 $\sigma: V \to V'$, 使 得G 中两顶点 u,v 相邻 (adjacent) 当且仅当 G' 中两顶点 $\sigma(u),\sigma(v)$ 相邻
 - 图同构问题 (Graph Isomorphism, GI) : 给定 图G与图G', 判断G与G'是否同构

$$O(2^{\sqrt{n\log n}})$$





Babai L, Luks EM, Canonical labeling of graphs, *Proceedings* of the 15th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 171-183, 1983.

组合优化问题求解方法



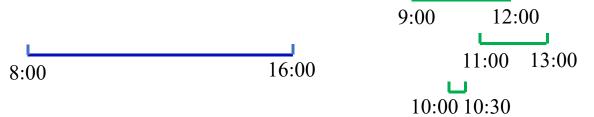
组合优化问题

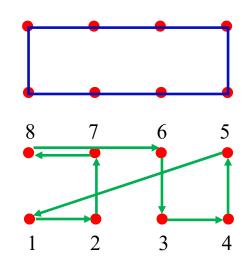
设计多项式 复杂性 证明问题为 时间算法 **外**P -难 未决问题 (**P**问题) 研究特殊 设计指数时间 设计多项式时间 最优算法 求近似解算法 可解性 改进算法性能 设计与分析 设计与测试 建立数学 设计动态 启发式算法 近似算法 寻找最一般的 规划模型 规划算法 多项式时间可 设计近似方案 Metaheuristic 设计分枝 解子问题和最 特殊的 \mathcal{NP} -难 定界算法 证明难近似性 机器学习 子问题

贪心

数学 建模 MATH T

- 贪心 (greedy)
 - 在每一次决策时,选择当前可行且最有利的决策
- 场馆安排问题
 - 某场馆收到 n 项借用申请,第 i 项申请的活动开始时间为 s_i ,结束时间为 t_i ,持续时间为 $d_i = t_i s_i$
 - 场馆在同一时刻只能进行一项活动,一项活动开始 后必须连续进行直至结束
 - 希望选择接受部分申请,使得场馆能开展的活动数量尽可能多



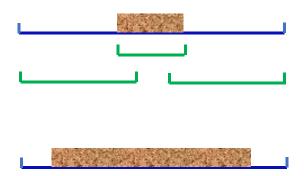


局部最优解未必是 全局最优解

贪心算法



- 场馆安排问题的贪心算法
 - 将所有申请按某种顺序排列,依次考虑各项申请
 - 若当前申请涉及的活动所需时段未被已接受的申请涉及的活动占用,则接受该申请,否则拒绝该申请
- 申请排列的顺序
 - 按持续时间从小到大的顺序排列
 - 按开始时间从小到大的顺序排列
 - 按结束时间从小到大的顺序排列 ~

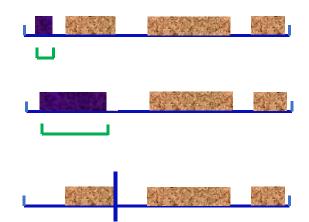


可行性

贪心算法



- 最优性证明
 - 存在一个最优解 σ ,接受结束时间最早的申请 i_0
 - 反证法。假设 σ 中 i_0 被拒绝
 - 若在 i₀ 的持续时间内, 场馆空闲
 - 增加接受 i_0 ,接受申请数增加,与 σ 是最优解的假设矛盾
 - 若在 i_0 的持续时间内,场馆在一段时间内被其他接受的申请 i 占用
 - 由于 i_0 是结束时间最早的申请, i 的结束时间晚于 i_0
 - 接受 i_0 , 拒绝 i , 接受申请数不变。场馆提早空闲,不会影响其他已接受申请,仍是最优解
 - 考虑开始时间晚于 ½ 的结束时间的所有申请,继续运用上述性质



排序悖论

- 排序悖论
 - 带序约束工件的平行机排序问题, 目标为最大完工时间最小
 - 基于贪婪思想的算法
 - 可以加工的工件尽早开工
 - 工件加工时间减小或机器数增加后, 算法给出的排序最大完工时间可能 增加。基于贪婪思想的算法不是最 优算法 2

1

5

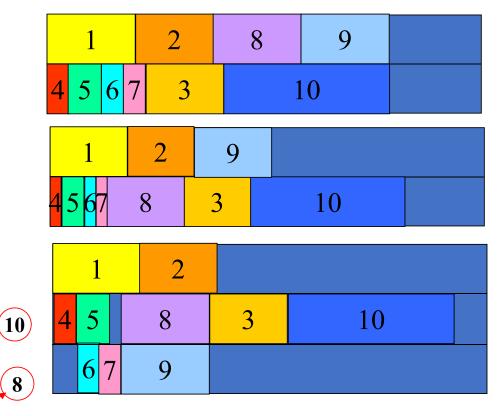
3

8

9

工件	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
加工	8	7	7	2	3	2	2	8	8	15	
时间	7	6	6	1	2	1	1	7	7	14	4)





动态规划



- 动态规划 (dynamic programming, DP)
 - 动态规划是求解多阶段决策优化问题的一种数学方法和算法思想
 - 动态规划求解组合优化问题
 - 将需求解的实例转化为一系列互有联系、规模较小的实例,并导出不同实例最优解之间的关系,从而可由初始条件出发逐步递推求得最优解



3 4

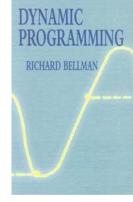
 $\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \hline & 3 \\ \hline \end{array}$

1 2 4

从4件物品中选择哪 些物品放入背包 3件物品,容量不 变背包的最优解 3件物品,容量减 小背包的最优解

未放入背包 放入背包 最优解是否把第4件物品放入背包





Richard Ernest Bellman (1920-1984) 美国运筹学家 Bellman RE, *Dynamic Programming*, Princeton University Press, 1957

动态规划



- 背包问题的动态规划
 - 由物品集中的前 $k(k \le n)$ 个物品和容量为 $w(w \le C)$ 的背包组成的实例,记为 I(k,w) ,其最优值为 V(k,w)
 - *I(k,w)* 的最优解
 - 若物品 k 未放入背包,背包中放入的物品均为前 k-1 个物品中的部分物品,价值 之和的最大值为 V(k-1,w)
 - 若物品 k 放入背包,背包剩余容量为 $w-w_k$,可放入前 k-1 个物品中的部分物品,价值之和的最大值为 $V(k-1,w-w_k)$
 - $V(k, w) = \max \{ V(k-1, w), V(k-1, w-w_k) + p_k \}$
 - 若 $W_k > W$, 则物品 k 不能放入容量为 W 的背包中, V(k, w) = V(k-1, w)
 - 初始条件 $V(0,w)=0, w=0,\dots,C$, 最优值 V(n,C)

动态规划



 $p_1 = 3$ $p_2 = 4$ $p_3 = 5$ $p_4 = 6$

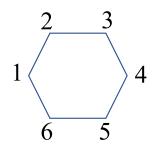
• 背包问题的动态规划

•
$$V(k, w) = \begin{cases} \max \{ V(k-1, w), V(k-1, w-w_k) + p_k \} & \text{ } \exists w_k \le w \\ V(k-1, w) & \text{ } \exists w_k > w \end{cases}$$

• 实例
$$n=4, C=5$$

 $p_1=3, p_2=4, p_3=5, p_4=6$
 $w_1=2, w_2=3, w_3=4, w_4=5$

- 最优值: 7
- 最优解:物品1,2放入背包



从1至4的最短路为1-2-3-4 从2至4的最短路为2-3-4 从1至4的最长路为1-2-3-4 从2至4的最长路不为2-3-4

 $w_1 = 2$

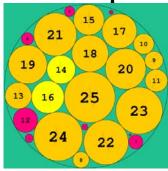
启发式算法

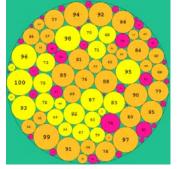


- 基于某种直观想法、合理假定,或者借助物理、化学、生命科学中的一些原理而设计的算法
- 体现了在求解的最优性、精确性与求解资源之间的权衡
- 启发式算法的有效性一般需通过计算机模拟验证

Metaheuristic

• A metaheuristic is a high-level problem-independent algorithmic framework that provides a set of guidelines or strategies to develop heuristic optimization algorithms





TSPLIB

TSPLIB is a library of sample instances for the TSP (and related problems) from various sources and of various types.



μετά εὑρίσκω
Meta- heuristic
(beyond in the (search)
sense of high-level)

遗传算法
(genetic algorithm)
模拟退火算法
(simulated annealing)
禁忌搜索
(tabu search)
蚁群算法
(ant colony optimization)
粒子群优化算法

(partial swarm optimization)

近似算法



- 近似算法 (approximation algorithm)
 - 算法的时间复杂性可通过分析确定(一般要求多项式时间),且算法给出的近似解与最优解目标值之间的差距可通过证明严格估计
- 最坏情况比 (worst-case ratio)
 - 算法 A 的最坏情况比为 $r_A = \sup_{I} \left\{ \frac{C^A(I)}{C^*(I)} \right\}$, 其中 $C^A(I)$ 为用算法 I 求解实例 所得目标值, $C^*(I)$ 为实例 I 的最优值
 - 对问题的不同实例,算法给出的近似解目标值与最优值的比值不全相同,最坏情况比是这些比值的最大值
 - 若算法 A 的最坏情况比为 r_A ,则对该问题的任意实例 I ,均有 $C^A(I) \le r_A C^*(I)$
 - 最坏情况比越接近于 1 , 算法给出的可行解目标值越接近于最优值 , 近似性能越好

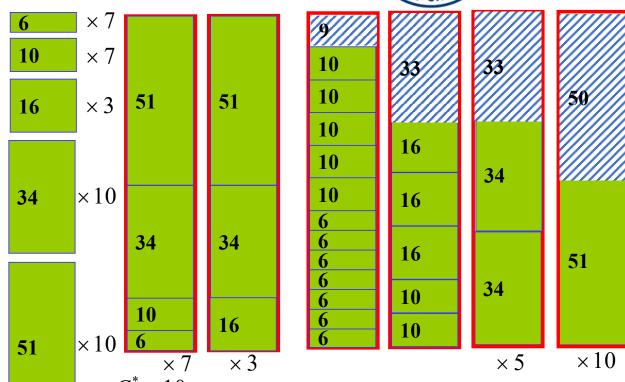
装箱问题

- 装箱问题的First Fit算法
 - 将物品放在按箱子启用顺序第一个能放下的箱子中
 - 最坏情况比 $\frac{7}{4} \rightarrow \frac{12}{7} \rightarrow \frac{17}{10}$

Simchi-Levi D, New worst case results for the bin-packing problem. *Naval Research Logistics*, 41:579–585, 1994

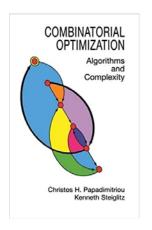
Xia BZ, Tan ZY, Tighter bounds of the First Fit algorithm for the binpacking problem. *Discrete Applied Mathematics*, 158:1668–1675, 2010 Dósa G, Sgall J, First Fit bin packing: A tight analysis. *Proceeding of 30th Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science*, 538-549, 2013

C = 101



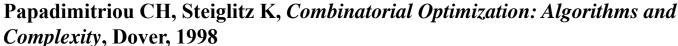
Johnson DS, Demers A, Ullman JD, Garey MR, Graham RL, Worst-case performance bounds for simple one-dimensional packing algorithms, *SIAM Journal on Computing*, 3, 299-325, 1974

参考资料









Cook WJ, Cunningham WH, Pulleyblank WR, Schrijver A, *Combinatorial Optimization*, Wiley, 1997

(中译本:组合优化,李学良、史永堂译,高等教育出版社,2011)

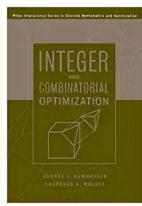
Korte B, Vygen J, Combinatorial Optimization: Theory and Algorithms (6th), Springer, 2017.

(中译本:组合最优化:理论与算法,越民义、林诒勋、姚恩瑜、张国川译,科学出版社,2021)









Schrijver A, Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency. Springer, 2003.

Wolsey LA, Nemhauser GL, Integer and Combinatorial Optimization, Wiley, 1999.

思考题



• 麦子收集

- 一 n 行 m 列的棋盘,在棋盘的部分格子中各放有一颗麦子
- 一机器人从棋盘左上角的格子出发收集麦子。机器人只能从当前所在格子向下或向右移动一格,到达放有麦子的格子后,即能收集该格子中的麦子
- 如何使机器人到达棋盘右下角的格子时,收集的麦子数量尽可能多

• 动态规划

- 记第 i 行第 j 列格子为 (i,j), $c_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{第} i$ 行第 j 列格子中有麦子
- 定义P(i,j) 为机器人到达(i,j) 格时可收集到的麦子数量的最大值
 - $P(i, j) = \max \{P(i-1, j), P(i, j-1)\} + c_{ij}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m$
 - $P(0, j) = 0, j = 0, \dots, m, P(i, 0) = 0, i = 1, \dots, n$

