

算法设计与分析

动态规划 (二)

- ① 矩阵链乘法
- ② 最优二叉搜索树

目录

① 矩阵链乘法

② 最优二叉搜索树

矩阵链乘法

动机： 假设我们需要计算多个矩阵的乘积。这将涉及迭代地每次将两个矩阵相乘。

- 矩阵乘法不满足交换律（一般情况下 $A \times B \neq B \times A$ ），但满足结合律：

$$A \times (B \times C) = (A \times B) \times C$$

- 我们可以用许多不同的方式计算矩阵乘积，取决于如何加括号。

某些方式是否比其他方式更好？

$C_{ik} = A_{ij} \times B_{jk}$ 的复杂度

- C 中的每个元素需要 j 次乘法，共 ik 个元素 \Rightarrow 总复杂度 $\Theta(ijk)$

示例

假设我们要计算四个矩阵的乘积 $A \times B \times C \times D$ ，它们的维度分别为 50×20 、 20×1 、 1×10 和 10×100 。

加括号方式	计算	代价
$A \times ((B \times C) \times D)$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 20 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 20 \cdot 100$	120,200
$(A \times (B \times C)) \times D$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 50 \cdot 20 \cdot 10 + 50 \cdot 10 \cdot 100$	60,200
$(A \times B) \times (C \times D)$	$50 \cdot 20 \cdot 1 + 1 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 1 \cdot 100$	7,000

示例

假设我们要计算四个矩阵的乘积 $A \times B \times C \times D$ ，它们的维度分别为 50×20 、 20×1 、 1×10 和 10×100 。

加括号方式	计算	代价
$A \times ((B \times C) \times D)$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 20 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 20 \cdot 100$	120,200
$(A \times (B \times C)) \times D$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 50 \cdot 20 \cdot 10 + 50 \cdot 10 \cdot 100$	60,200
$(A \times B) \times (C \times D)$	$50 \cdot 20 \cdot 1 + 1 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 1 \cdot 100$	7,000

乘法顺序对最终复杂度有很大影响。

示例

假设我们要计算四个矩阵的乘积 $A \times B \times C \times D$ ，它们的维度分别为 50×20 、 20×1 、 1×10 和 10×100 。

加括号方式	计算	代价
$A \times ((B \times C) \times D)$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 20 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 20 \cdot 100$	120,200
$(A \times (B \times C)) \times D$	$20 \cdot 1 \cdot 10 + 50 \cdot 20 \cdot 10 + 50 \cdot 10 \cdot 100$	60,200
$(A \times B) \times (C \times D)$	$50 \cdot 20 \cdot 1 + 1 \cdot 10 \cdot 100 + 50 \cdot 1 \cdot 100$	7,000

乘法顺序对最终复杂度有很大影响。

自然的贪心策略——总是执行当前代价最小的矩阵乘法——不一定能得到最优解

- 参见第二种加括号方式作为反例

暴力算法

问：对于 $A_1 A_2 \dots A_n$ ，有多少种不同的加括号方式？

暴力算法

问：对于 $A_1 A_2 \dots A_n$ ，有多少种不同的加括号方式？

观察：一种特定的加括号方式可以自然地用一棵满二叉树表示

- 叶节点：单个矩阵
- 根节点：最终乘积
- 内部节点：中间乘积

[见原文第 8 页图示]

$$((A \times B) \times C) \times D$$

$$A \times ((B \times C) \times D)$$

估计可能顺序的数量

可能的顺序数对应于具有 n 个叶子的各种满二叉树的数量。

设 $C(n)$ 为具有 $n+1$ 个叶子（或等价地，共 n 个内部节点）的满二叉树的数量：

[见原文第 9 页图示： $C(0)$ 和 $C(1)$ 的树]

$$C(0) = 1, C(1) = 1, C(2) = C(0)C(1) + C(1)C(0)$$

$$C(3) = C(0)C(2) + C(1)C(1) + C(2)C(0)$$

$$C_n = \sum_{i=0}^{n-1} C_i C_{n-1-i} = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}$$

上述公式是卷积形式，可以通过生成函数计算。

- 结果是 **Catalan 数**，关于 n 是指数级的

Catalan 数

Catalan 数 (以比利时数学家 Eugène Charles Catalan 命名)。

- 最早由 Euler 在计算将 n 边凸多边形划分为 $(n-2)$ 个三角形的不同方式时发现。

[见原文第 10 页图示：多边形三角剖分]

$$\begin{aligned} C(n) &= \Omega\left(\frac{1}{n+1} \frac{(2n)!}{n!n!}\right) \quad // \text{ Stirling 公式} \\ &= \Omega\left(\frac{1}{n+1} \frac{\sqrt{2\pi 2n} \left(\frac{2n}{e}\right)^{2n}}{\sqrt{2\pi 2n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi 2n} \left(\frac{n}{e}\right)^n}\right) = \Omega(4^n / (n^{3/2} \sqrt{\pi})) \end{aligned}$$

暴力算法

Catalan 数出现在各种计数问题中（通常涉及递归定义的对象）

- 加括号方式的数量
- 满二叉树的数量
- 单调格路径的数量

由于 Catalan 数关于 n 是指数级的 \rightsquigarrow 我们当然不能尝试每一棵树，因此排除暴力方法。
我们转向动态规划。

动态规划

与二叉树的对应关系给出启示：要使一棵树最优，其子树也必须最优 \Rightarrow 满足**最优子结构**（具有某种局部性） \rightsquigarrow **不必从头尝试每一棵树**

- 子问题对应于子树：形如 $A_i \times A_{i+1} \times \cdots A_j$ 的乘积

优化函数：

$C(i, j)$ = 计算 $A_i \times A_{i+1} \times \cdots A_j$ 的最小代价

对应的维度是 m_{i-1}, m_i, \dots, m_j

迭代关系：

$$C(i, j) = \begin{cases} 0 & i = j \\ \min_{i \leq k < j} \{ \underline{C(i, k)} + \underline{C(k+1, j)} + m_{i-1} m_k m_j \} & i < j \end{cases}$$

A_i	\dots	A_k	A_{k+1}	\dots	A_j
$m_{i-1} \times m_k$			$m_k \times m_j$		

一些说明

动态规划的关键点

- 定义子问题
- 找到子问题之间的迭代最优子结构
- 按正确的顺序计算子问题

有时子问题之间的关系可能会产生误导。应该用正确的方式来解释和计算，即迭代方式。

递归方法（低效）

Algorithm 1 MatrixChain(C, i, j) // 子问题 $[i, j]$

```
1:  $C(i, i) = 0, C(i, j) \leftarrow \infty$ 
2:  $s(i, j) \leftarrow \perp$  // 记录分割位置
3: for  $k \leftarrow i$  to  $j - 1$  do
4:    $t \leftarrow \text{MatrixChain}(C, i, k) + \text{MatrixChain}(C, k + 1, j) + m_{i-1}m_km_j$ 
5:   if  $t < C(i, j)$  then
6:      $C(i, j) \leftarrow t$  // 找到更好的解
7:      $s(i, j) \leftarrow k$ 
8:   end if
9: end for
10: return  $C(i, j)$ 
```

复杂度分析

递推关系为：

$$T(n) = \begin{cases} O(1) & n = 1 \\ \sum_{k=1}^{n-1} (T(k) + T(n-k) + O(1)) & n > 1 \end{cases}$$

- $O(1)$ ：求和与比较

$$T(n) = \sum_{k=1}^{n-1} T(k) + \sum_{k=1}^{n-1} T(n-k) + O(n) = 2 \sum_{k=1}^{n-1} T(k) + O(n)$$

断言： $T(n) = \Omega(2^{n-1})$

- 归纳基础： $n = 2$, $T(2) \geq c = c_1 2^{2-1}$, 令 $c_1 = c/2$ 。
- 归纳步骤： $P(k < n) \Rightarrow P(n)$ 。

$$\begin{aligned} T(n) &= O(n) + c_1 2 \sum_{k=1}^{n-1} 2^{k-1} \quad // \text{ 归纳假设} \\ &\geq O(n) + c_1 2(2^{n-1} - 1) = \Omega(2^{n-1}) \quad // \text{ 等比级数} \end{aligned}$$

本质上与暴力算法相同

低效的根源 ($n = 5$ 的情况)

[见原文第 16 页图示：递归树]

15 个不同的子问题 vs. 计算 81 个子问题

低效的根源 ($n = 5$ 的情况)

[见原文第 17 页图示：递归树]

15 个不同的子问题 vs. 计算 81 个子问题

Those who cannot remember the past are
condemned to repeat it.

- Dynamic Programming

[见原文第 17 页图片]

迭代方法（高效）

size = 1: n 个不同的子问题

- $C(i, i) = 0$ 对于 $i \in [n]$ （无计算代价）

size = 2: $n - 1$ 个不同的子问题

- $C(1, 2), C(2, 3), C(3, 4), \dots, C(n - 1, n)$

...

size = i : $n - i + 1$ 个不同的子问题

...

size = $n - 1$: 2 个不同的子问题

- $C(1, n - 1), C(2, n)$

size = n : 原问题

- $C(1, n)$

$n = 8$ 的演示

[见原文第 19 页图示：子问题计算顺序]

A_1 A_2 A_3 A_4 A_5 A_6 A_7 A_8

size = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

算法

复杂度分析

根据算法

- 第 2 行：子问题规模
- 第 3-4 行：子问题的边界
- 第 5 行：尝试所有分割位置以找到最优断点
- 第 2、3-4、5 行构成三重循环，每层循环的长度为 $O(n)$ ；内层循环的代价为 $O(1) \rightsquigarrow$ 复杂度 $O(n^3)$

复杂度分析

根据算法

- 第 2 行：子问题规模
- 第 3-4 行：子问题的边界
- 第 5 行：尝试所有分割位置以找到最优断点
- 第 2、3-4、5 行构成三重循环，每层循环的长度为 $O(n)$ ；内层循环的代价为 $O(1) \rightsquigarrow$ 复杂度 $O(n^3)$

根据备忘录

- 备忘录中共有 n^2 个元素，确定每个元素的值需要 $O(n)$ 的尝试和比较代价 \rightsquigarrow 复杂度 $O(n^3)$

复杂度分析

根据算法

- 第 2 行：子问题规模
- 第 3-4 行：子问题的边界
- 第 5 行：尝试所有分割位置以找到最优断点
- 第 2、3-4、5 行构成三重循环，每层循环的长度为 $O(n)$ ；内层循环的代价为 $O(1) \rightsquigarrow$ 复杂度 $O(n^3)$

根据备忘录

- 备忘录中共有 n^2 个元素，确定每个元素的值需要 $O(n)$ 的尝试和比较代价 \rightsquigarrow 复杂度 $O(n^3)$

回溯复杂度： $n - 1$ （内部节点的数量）

示例

矩阵链: $A_1 A_2 A_3 A_4 A_5$, $A_1 : 30 \times 35$, $A_2 : 35 \times 15$, $A_3 : 15 \times 5$, $A_4 : 5 \times 10$, $A_5 : 10 \times 20$

$\ell = 2$	$C(1, 2) = 15750$	$C(2, 3) = 2625$	$C(3, 4) = 750$	$C(4, 5) = 1000$
$\ell = 3$	$C(1, 3) = 7875$	$C(2, 4) = 4375$	$C(3, 5) = 2500$	
$\ell = 4$	$C(1, 4) = 9375$	$C(2, 5) = 7125$		
$\ell = 5$	$C(1, 5) = 11875$			

$\ell = 2$	$s(1, 2) = 1$	$s(2, 3) = 2$	$s(3, 4) = 3$	$s(4, 5) = 4$
$\ell = 3$	$s(1, 3) = 1$	$s(2, 4) = 3$	$s(3, 5) = 3$	
$\ell = 4$	$s(1, 4) = 3$	$s(2, 5) = 3$		
$\ell = 5$	$s(1, 5) = 3$			

$$s(1, 5) \Rightarrow (A_1 A_2 A_3)(A_4 A_5)$$

$$s(1, 3) \Rightarrow A_1(A_2 A_3)$$

- 最优计算顺序: $(A_1(A_2 A_3))(A_4 A_5)$
- 最小乘法次数: $C(1, 5) = 11875$

目录

① 矩阵链乘法

② 最优二叉搜索树

二叉搜索树

设 S 是一个有序集合，元素为 $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ 。为了支持高效搜索，我们将它们存储在二叉树的节点上。

搜索：如果 $x \in S$ ，输出索引。否则，输出所在区间。

[见原文第 26 页图示：二叉搜索树]

x 与根比较

- $x < \text{根}$ ，进入左子树；
- $x > \text{根}$ ，进入右子树；
- $x = \text{根}$ ，停止并输出 x ；

x 到达叶节点，停止，输出 \perp 。

搜索元素的分布

当 $x \stackrel{R}{\leftarrow} S$ 时 \Rightarrow 平衡二叉树是最优的

如果 x 的分布不是均匀的呢?

设 $S = (x_1, \dots, x_n)$ 。考虑区间 $(x_0, x_1), (x_1, x_2), \dots, (x_{n-1}, x_n), (x_n, x_{n+1})$, 其中 $x_0 = -\infty$, $x_{n+1} = +\infty$

- $\bullet \Pr[x = x_i] = b_i, \Pr[x \in (x_i, x_{i+1})] = a_i$

x 在 $S \cup \bar{S}$ 上的分布为

$$P = (a_0, b_1, a_1, b_2, a_2, \dots, b_n, a_n)$$

示例: $S = (1, 2, 3, 4, 5, 6)$ 。 x 的分布 P 为

$$(0.04, 0.1, 0.01, 0.2, 0.05, 0.2, 0.02, 0.1, 0.02, 0.1, 0.07, 0.05, 0.04)$$

- $\bullet x = 1, 2, 3, 4, 5, 6$: 0.1, 0.2, 0.2, 0.1, 0.1, 0.05
- $\bullet x$ 落在区间内: 0.04, 0.01, 0.05, 0.02, 0.02, 0.07, 0.04

二叉搜索树 1

[见原文第 28 页图示：二叉搜索树 T_1]

$S = (1, 2, 3, 4, 5, 6)$

$(0.1, 0.2, 0.2, 0.1, 0.1, 0.05)$

$(0.04, 0.01, 0.05, 0.02, 0.02, 0.07, 0.04)$

平均搜索次数：

$$\begin{aligned} A(T_1) &= [1 \times 0.1 + 2 \times (0.2 + 0.05) + 3 \times (0.1 + 0.2 + 0.1)] \\ &\quad + [3 \times (0.04 + 0.01 + 0.05 + 0.02 + 0.02 + 0.07) + 2 \times 0.04] \\ &= 1.8 + 0.71 = 2.51 \end{aligned}$$

二叉搜索树 2

[见原文第 29 页图示：二叉搜索树 T_2]

$S = (1, 2, 3, 4, 5, 6)$

$(0.1, 0.2, 0.2, 0.1, 0.1, 0.05)$

$(0.04, 0.01, 0.05, 0.02, 0.02, 0.07, 0.04)$

平均搜索次数：

$$\begin{aligned} A(T_2) = & [1 \times 0.1 + 2 \times 0.2 + 3 \times 0.1 + 4 \times (0.2 + 0.05) + 5 \times 0.1] \\ & + [1 \times 0.04 + 2 \times 0.01 + 4 \times (0.05 + 0.02 + 0.04) \\ & + 5 \times (0.02 + 0.07)] = 2.3 + 0.95 = 3.25 \end{aligned}$$

平均搜索时间公式

集合 $S = (x_1, x_2, \dots, x_n)$

分布 $P = (a_0, b_1, a_1, b_2, \dots, a_i, b_{i+1}, \dots, b_n, a_n)$

- x_i 在 T 中的深度为 $d(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$ 。
 - ▶ 深度从 0 开始计数
 - ▶ 第 k 层节点需要 $k+1$ 次比较
- 区间 I_j 的深度为 $d(I_j)$, $j = 0, 1, \dots, n$ 。

平均搜索时间

$$A(T) = \sum_{i=1}^n b_i(1 + d(x_i)) + \sum_{j=0}^n a_j d(I_j)$$

当所有节点的深度增加 1 时，平均搜索时间增加：

$$\sum_{i=1}^n b_i + \sum_{j=0}^n a_j$$

最优搜索树建模

问题： 给定集合 $S = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 和搜索元素的分布 $P = (a_0, b_1, a_1, b_2, a_2, \dots, b_n, a_n)$

目标： 找到一棵最优二叉搜索树（平均搜索次数最小）

[见原文第 31 页图示]

Dynamic Programming

动态规划

子问题：由 (i, j) 定义， i 是左边界， j 是右边界

- 数据集： $S[i, j] = (x_i, x_{i+1}, \dots, x_j)$
- 分布： $P[i, j] = (a_{i-1}, b_i, a_i, b_{i+1}, \dots, b_j, a_j)$

输入实例： $S = (A, B, C, D, E)$

$P = (0.04, 0.1, 0.02, 0.3, 0.02, 0.1, 0.05, 0.2, 0.06, 0.1, 0.01)$

子问题： $(2, 4)$

- $S[2, 4] = (B, C, D)$
- $P[2, 4] = (0.02, 0.3, 0.02, 0.1, 0.05, 0.2, 0.06)$

分解为子问题

以 x_k 为根，将一个问题分解为两个子问题：

- $S[i, k-1], P[i, k-1]$
- $S[k+1, j], P[k+1, j]$

示例：选择节点 B 为根，将原问题分解为以下两个子问题：

子问题：(1, 1)

- $S[1, 1] = (A), P[1, 1] = (0.04, 0.1, 0.02)$

子问题：(3, 5)

- $S[3, 5] = (C, D, E), P[3, 5] = (0.02, 0.1, 0.05, 0.2, 0.06, 0.1, 0.01)$

[见原文第 33 页图示：以 B 为根的分解]

子问题的概率和

对于子问题 $S[i, j]$ 和 $P[i, j]$, $P[i, j]$ 中的概率和（包括元素和区间）为：

$$w[i, j] = \sum_{s=i-1}^j a_s + \sum_{t=i}^j b_t$$

子问题 (2, 4) 的示例

- $S[2, 4] = (B, C, D)$
- $P[2, 4] = (0.02, 0.3, 0.02, 0.1, 0.05, 0.2, 0.06)$
- $w[2, 4] = (0.3 + 0.1 + 0.2) + (0.02 + 0.02 + 0.05 + 0.06) = 0.75$

优化函数

优化函数 $\text{OPT}(i, j)$: 对于 $S[i, j]$, $P[i, j]$, 子问题 (i, j) 的最优平均比较次数。

参数化优化函数: $\text{OPT}_k(i, j)$: 以 x_k 为根时的最优平均比较次数

初始值: $\text{OPT}(i, i-1) = 0$ 对于 $i = 1, 2, \dots, n, n+1$, 对应空子问题。

示例: $S = (A, B, C, D, E)$

- ① 选择 A 为根 ($k = 1$), 产生子问题 $(1, 0)$ 和 $(2, 5)$, $(1, 0)$ 是空子问题: 对应 $S[1, 0]$, $\text{OPT}(1, 0) = 0$
- ② 选择 E 为根 ($k = 5$), 产生子问题 $(1, 4)$ 和 $(6, 5)$, $(6, 5)$ 是空子问题: 对应 $S[6, 5]$, $\text{OPT}(6, 5) = 0$

优化函数的迭代关系

$$\begin{aligned}\text{OPT}(i, j) &= \min_{i \leq k \leq j} \{\text{OPT}_k(i, j)\}, \quad 1 \leq i \leq j \leq n \\ &= \min_{i \leq k \leq j} \{\underbrace{\text{OPT}(i, k-1)} + \underbrace{\text{OPT}(k+1, j)} + w[i, j]\}\end{aligned}$$

[见原文第 36 页图示：以 x_k 为根的子树结构]

- 左子树和右子树中所有节点的深度都增加 1

$$w[i, k-1] + b_k + w[k+1, j] = w[i, j]$$

OPT_k(i, j) 的证明

$$\begin{aligned} & \text{OPT}_k(i, j) \\ &= (\text{OPT}(i, k-1) + w[i, k-1]) + (\text{OPT}(k+1, j) + w[k+1, j]) + b_k \\ &= (\text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j)) + (w[i, k-1] + b_k + w[k+1, j]) \\ &= (\text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j)) \\ &\quad + \left(\sum_{s=i-1}^{k-1} a_s + \sum_{t=i}^{k-1} b_t \right) + b_k + \left(\sum_{s=k}^j a_s + \sum_{t=k+1}^j b_t \right) \\ &= (\text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j)) + \sum_{s=i-1}^j a_s + \sum_{t=i}^j b_t \quad // \text{ 化简} \\ &= \text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j) + w[i, j] \end{aligned}$$

伪代码

演示

$$\text{OPT}(i, j) = \min_{i \leq k \leq j} \{ \text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j) + w[i, j] \}$$

对于 $1 \leq i \leq j \leq n$

$$\text{OPT}(i, i-1) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, n+1$$

[见原文第 39 页图示：最优二叉搜索树示例]

选择 B 为根， $k = 2$

$$\text{OPT}(1, 1) = 0.16, \quad \text{OPT}(3, 5) = 0.88$$

$$\text{OPT}(3, 3) = 0.17, \quad \text{OPT}(5, 5) = 0.17$$

$$w[3, 5] = 0.54$$

$$\begin{aligned} \text{OPT}(1, 5) &= 1 + \min_{k \in [5]} \{ \text{OPT}(1, k-1) + \text{OPT}(k+1, 5) \} \\ &= 1 + (\text{OPT}(1, 1) + \text{OPT}(3, 5)) = 1 + (0.16 + 0.88) = 2.04 \end{aligned}$$

复杂度分析

$$\text{OPT}(i, j) = \min_{i \leq k \leq j} \{ \text{OPT}(i, k-1) + \text{OPT}(k+1, j) + w[i, j] \}$$

对于 $1 \leq i \leq j \leq n$

$\text{OPT}(i, i-1) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, n+1$

(i, j) 组合的数量为 $O(n^2)$

对于每个 $\text{OPT}(i, j)$, 计算需要计算 k 项并找最小值。每项计算的代价是常数时间。

- 时间复杂度: $T(n) = O(n^3)$
- 空间复杂度: $S(n) = O(n^2)$