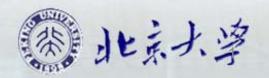


第5章 回溯与分支限界

- 5.1 回溯算法的基本思想和适用条件
- 5.2 回溯算法的设计步骤
- 5.3 回溯算法的效率估计和改进途径
- 5.4 分支限界
 - 5.4.1 背包问题
 - 5.4.2 最大团问题
 - 5.4.3 货郎问题
 - 5.4.4 圆排列问题
 - 5.4.5 连续邮资问题





5.1 回溯算法的基本思想和适用条件

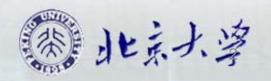
5.1.1 几个典型例子

四后问题

0-1背包问题

货郎问题 (TSP)

5.1.2 回溯算法的适用条件

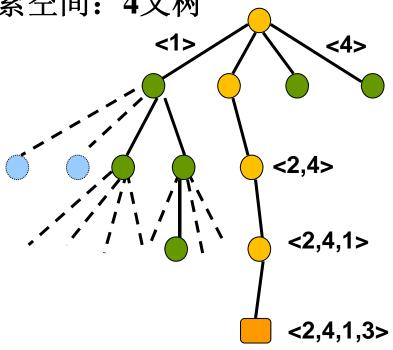


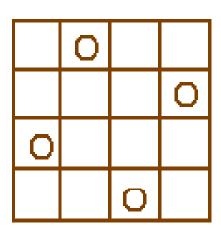
5.1.1几个典型例子

例1 n后问题

4后问题:解是一个4维向量, $\langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle$ (放置列号)

搜索空间: 4叉树





经不学不多

8后问题:解是一个8维向量, $<x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8>$

搜索空间: 8叉树, 一个解: <1,3,5,2,4,6,8,7>

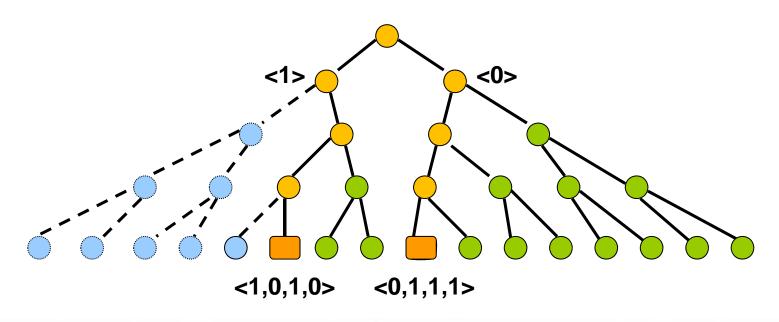


例2: 0-1背包问题

实例: V={12,11,9,8}, W={8,6,4,3}, B=13

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

搜索空间:子集树,2ⁿ片树叶



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

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

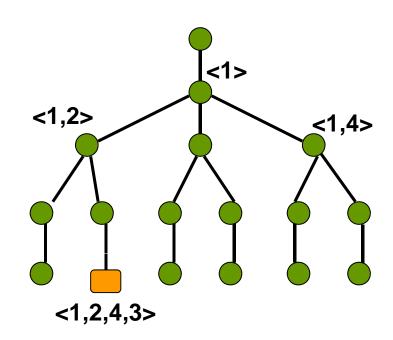


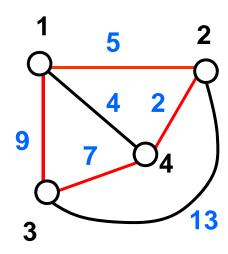
例3: 货郎问题

 $\langle i_1,i_2,...,i_n \rangle$ 为巡回路线

搜索空间:排列树,(n-1)!片树叶

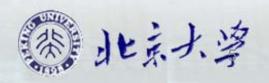
实例:





<1,2,4,3> 对应于巡回路线: 1→2 →4 →3 →1

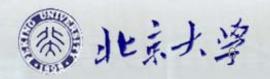
长度: 5+2+7+9=23





回溯算法的基本思想

- (1) 适用问题: 求解搜索问题和优化问题
- (2) 搜索空间: 树,结点对应部分解向量,树叶对应可行解
- (3) 搜索过程:采用系统的方法隐含遍历搜索树
- (4) 搜索策略: 深度优先, 宽度优先, 函数优先, 宽深结合等
- (5) 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
- (6) 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)
- (7) 存储: 当前路径



5.1.2 回溯算法的适用条件

设 $P(x_1, x_2, ..., x_i)$ 为真表示向量 $\langle x_1, x_2, ..., x_i \rangle$ 满足某个性质 (n后问题中i个皇后放置在彼此不能攻击的位置) 多米诺性质:

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

例4 求不等式的整数解

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

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

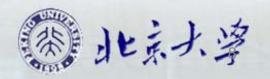
不满足多米诺性质

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



5.2 回溯算法的设计步骤

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





回溯算法的递归实现

算法 ReBack(k)

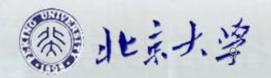
- 1. if k > n then $< x_1, x_2, ..., x_n >$ 是解
- 2. else while $S_k \neq \emptyset$ do
- 3. $x_k \leftarrow S_k$ 中最小值
- $4. S_k \leftarrow S_k \{x_k\}$
- 5. 计算 S_{k+1}
- 6. ReBack(k+1)

算法 ReBacktrack(n)

输入: n

输出: 所有的解

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





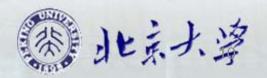
回溯算法的迭代实现

迭代算法 Backtrack

输入: n

输出: 所有的解

- 1. 对于i = 1, 2, ..., n 确定 X_i
- 2. $k\leftarrow 1$
- 3. 计算 S_k
- 4. while $S_k \neq \emptyset$ 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 $\langle x_1, x_2, ..., x_n \rangle$ 是解
- 9. if k>1 then $k\leftarrow k-1$; goto 4



例5 装载问题

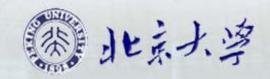
n个集装箱装上2艘载重分别为 c_1 和 c_2 的轮船, w_i 为集装箱i的重量,且 n

 $\sum_{i=1}^n w_i \le c_1 + c_2$

问是否存在一种合理的装载方案将n个集装箱装上轮船?如果有,给出一种方案.

求解思路:令第一船装载量为 W_1 ,用回溯算法求使 W_1 - c_1 达到最小的装载方案 $\langle x_1, x_2, ..., x_n \rangle$,如果 $\sum_{i=1}^n w_i - W_1 \leq c_2$ 回答 Yes, 否则回答No.

问题满足多米诺性质,搜索策略:深度优先





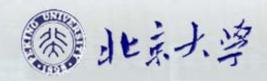
算法

算法5.4 Loading (W, c_1),

输入: 集装箱重量 $W=<w_1,w_2,...,w_n>$, c_1 是第一条船的载重

输出: 使船1装载量最大的方案< $x_1,x_2,...,x_n$ >, 其中 x_i =0,1,...,n

- 1. Sort(W); //对 $w_1, w_2, ..., w_n$ 按照从大到小排序
- 2. $B \leftarrow \infty$; $best \leftarrow \infty$; $i \leftarrow 1$;
- 3. while $i \le n$ do
- 4. if 装入 i 后重量不超过 c_1
- 5. then $B \leftarrow B w_i$; $x[i] \leftarrow 1$; $i \leftarrow i+1$;
- 6. else $x[i] \leftarrow 0$; $i \leftarrow i+1$;
- 7. if B < best then 记录解; $Best \leftarrow B$;
- 8. Backtrack(i);
- 9. if *i*=1 then return 最优解
- 10. else goto 3.





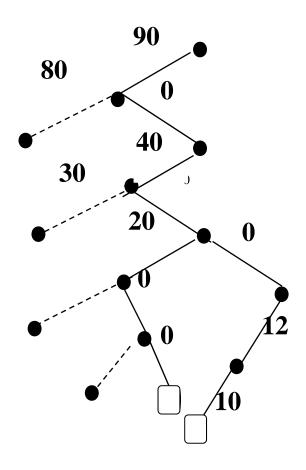
实例

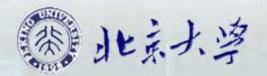
算法5.5 Backtrack(i)

- 1. while i>1 and x[i]=0 do
- 2. $i \leftarrow i-1$;
- 3. if x[i]=1
- 4. then $x[i] \leftarrow 0$; $B \leftarrow B + w_i$; $i \leftarrow i + 1$.

$$c_1$$
=152, c_2 =130

复杂性: $W(n)=O(2^n)$







例6图的着色问题

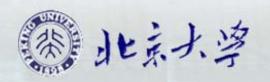
问题:给定无向连通图 *G*和 *m*种颜色,用这些颜色给图的顶点着色,每个顶点一种颜色.要求是:*G*的每条边的两个顶点着不同颜色.给出所有可能的着色方案;如果不存在着这样的方案,则回答"No".

则搜索空间为深度n 的m叉完全树. 将颜色编号为1,2,...,m,结点 $< x_1, x_2, ..., x_k >: x_1, x_2, ..., x_k \in \{1, 2, ..., m\}, 1 \le k \le n$,表示顶点1着颜色 x_1 ,顶点2着颜色 x_2 ,...,顶点k着颜色 x_k .

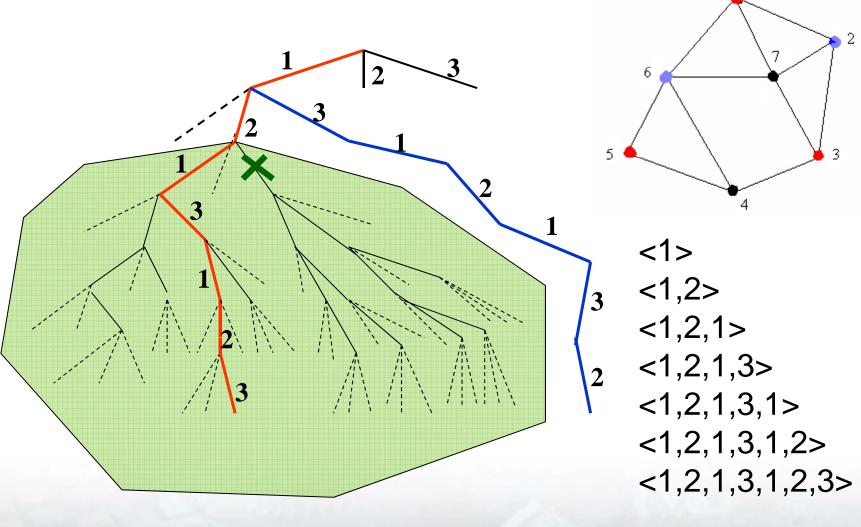
约束条件: 该顶点邻接表中的顶点与该顶点没有同色;

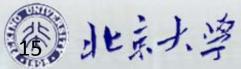
搜索策略: 深度优先

时间: $O(nm^n)$



实例



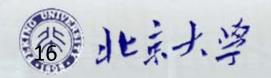




提高效率的途径

根据对称性,只需搜索1/3的解空间即可.当1和2确定,即 <1,2>以后,只有1个解,因此在<1,3>为根的子树中也只有1 个解.由于3个子树的对称性,总共有6个解.

进一步分析,在取定<1,2>以后,不可以扩张成<1,2,3>,因为可以检查是否有和1,2,3都相邻的顶点.如果存在,例如7,则没有解.所以可以从打叉的结点回溯,而不必搜索它的子树.



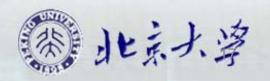


5.3搜索树结点数估计

计数搜索树中的结点,Monte Carlo方法

Monte Carlo方法

- 1. 从根开始,随机选择一条路经,直到不能分支为止,即从 $x_1,x_2,...$,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.





算法实现

Monte Carlo

输入: n,t 为正整数, n为皇后数, t为抽样次数

输出: sum, 即t次抽样路径长度的平均值

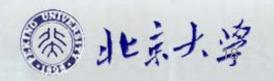
1. $sum \leftarrow 0$ //sum为 t 次结点平均数

2. for i ←1 to t do //取样次数 t

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

4. $sum \leftarrow sum + m$

5. $sum \leftarrow sum / t$

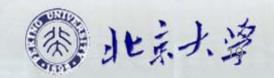


子过程

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 $S_k = \emptyset$ 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. $k \leftarrow k+1$





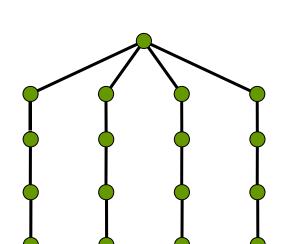
实例

估计四后搜索树的结点数

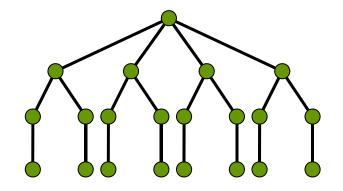
case1. $<1,4,2>: 1+4+4\times2+4\times2=21$

case2. <2,4,1,3>: 4×4+1=17

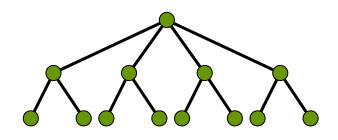
case3. <1,3>: 1+4×1+4×2=13



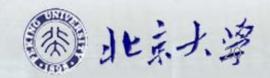
Case2: <2,4,1,3>



Case1: <1,4,2>



Case3: <1,3>





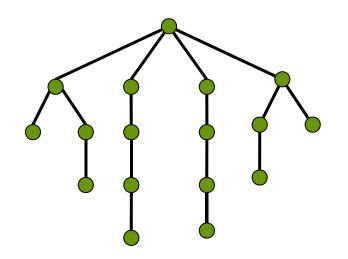
估计结果

假设 4 次抽样测试:

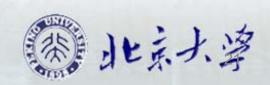
case1:1次, case2:1次, case3:2次,

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





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

影响回朔算法效率的因素

搜索树的结构

分支情况:分支均匀否

树的深度

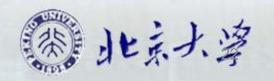
对称程度:对称适合裁减

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





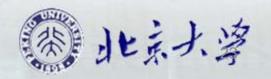
改进途径

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

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





5.4 分支限界

组合优化问题的相关概念

目标函数(极大化或极小化)

约束条件

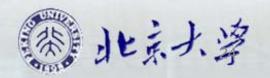
搜索空间中满足约束条件的解称为可行解 使得目标函数达到极大(或极小)的解称为最优解

5.4.1 背包问题

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

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

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





分支限界技术(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

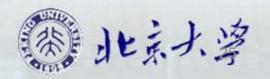
设立界

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





实例:背包问题

题北京大学

背包问题的实例:

$$\max x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 9x_4$$
$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 7x_4 \le 10$$
$$x_i \in \mathbb{N}, i = 1, 2, 3, 4$$

对变元重新排序使得

$$\frac{v_i}{w_i} \ge \frac{v_{i+1}}{w_{i+1}}$$

排序后实例 $\max 9x_1 + 5x_2 + 3x_3 + x_4$ $7x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 \le 10$ $x_i \in \mathbb{N}, i = 1, 2, 3, 4$

代价函数与分支策略确定

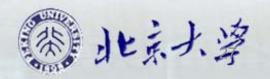
结点 $\langle x_1, x_2, ..., x_k \rangle$ 的代价函数

$$\sum_{i=1}^{k} v_i x_i + (b - \sum_{i=1}^{k} w_i x_i) \frac{v_{k+1}}{w_{k+1}}$$

若对某个
$$j > k$$
有 $b - \sum_{i=1}^{k} w_i x_i \ge w_j$

$$\sum_{i=1}^{k} v_i x_i$$
 否则

分支策略----深度优先

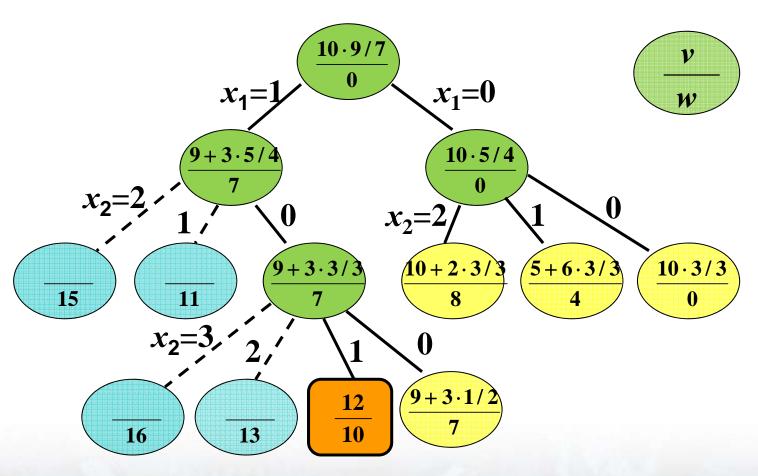


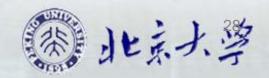


$$\max 9x_1 + 5x_2 + 3x_3 + x_4$$

$$7x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 \le 10, \ x_i \in \mathbb{N}, i = 1, 2, 3, 4$$

实例







5.4.2 最大团问题

问题:给定无向图G=<V,E>,求G中的最大团.

相关知识:

无向图 $G = \langle V, E \rangle$,

G的子图: $G'=\langle V',E'\rangle$, 其中 $V'\subseteq V,E'\subseteq E$,

G的补图: $\check{G} = \langle V, E' \rangle$, $E' \in E$ 关于完全图边集的补集

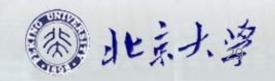
G中的 \mathbf{d} : G的完全子图

G 的点独立集: G 的顶点子集A,且 $\forall u,v \in A$, $\{u,v\} \notin E$.

最大团:顶点数最多的团

最大点独立集:顶点数最多的点独立集

命题: $U \neq G$ 的最大团当且仅当 $U \neq G$ 的最大点独立集





算法设计

结点 $\langle x_1, x_2, \dots, x_k \rangle$ 的含义:

已检索 k 个顶点,其中 $x_i=1$ 对应的顶点在当前的团内搜索树为子集树

约束条件: 该顶点与当前团内每个顶点都有边相连

界: 当前图中已检索到的极大团的顶点数

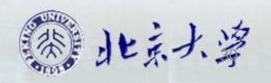
代价函数: 目前的团扩张为极大团的顶点数上界

 $F = C_n + n - k$

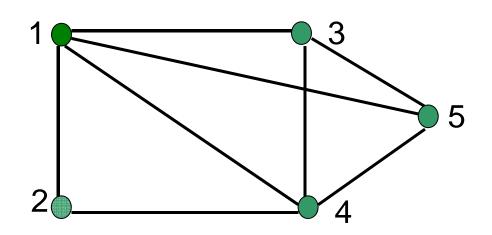
其中 C_n 为目前团的顶点数(初始为0),

k 为结点层数

时间: $O(n2^n)$



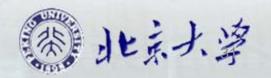




顶点编号顺序为 1, 2, 3, 4, 5,

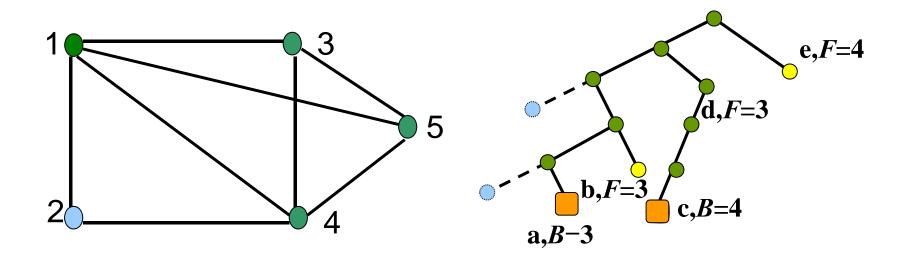
对应 $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_i=1$ 当且仅当 i 在团内分支规定左子树为1,右子树为0.

B 为界,F 为代价函数值.





实例求解



a: 得第一个极大团 { 1, 2, 4 }, 顶点数为3, 界为3;

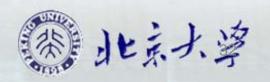
b: 代价函数值 F=3, 回溯;

c: 得第二个极大团{1,3,4,5}, 顶点数为4, 修改界为4;

d: 不必搜索其它分支, 因为F = 4, 不超过界;

e: F = 4, 不必搜索.

最大团为 {1, 3, 4, 5}, 顶点数为 4.





5.4.3 货郎问题

问题: 给定n个城市集合 $C=\{c_1,c_2,...,c_n\}$,从一个城市到另一个城市的距离 d_{ij} 为正整数,求一条最短且每个城市恰好经过一次的巡回路线.

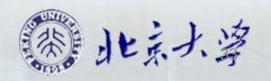
货郎问题的类型:有向图、无向图.

设巡回路线从1开始,

解向量为 $< i_1, i_2, \ldots, i_{n-1}>$,

其中 $i_1, i_2, \ldots, i_{n-1}$ 为{ 2, 3, ..., n }的排列.

搜索空间为排列树,结点 $\langle i_1, i_2, \ldots, i_k \rangle$ 表示得到 k 步路线





算法设计

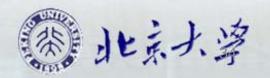
约束条件: $令 B = \{i_1, i_2, \dots, i_k\}, 则$ $i_{k+1} \in \{2, \dots, n\} - B$

界: 当前得到的最短巡回路线长度

代价函数:设顶点 c_i 出发的最短边长度为 l_i , d_j 为选定巡回路线中第j段的长度,则

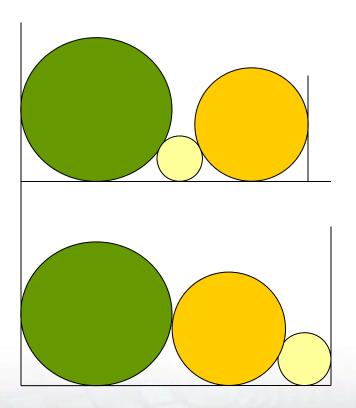
$$L = \sum_{j=1}^{k} d_j + \sum_{i_j \notin B} l_{i_j}$$

为部分巡回路线扩张成全程巡回路线的长度下界时间 O(n!): 计算O((n-1)!)次,代价函数计算O(n)



5.4.4 圆排列问题

问题:给定n个圆的半径序列,将各圆与矩形底边相切排列,求具有最小长度 l_n 的圆的排列顺序.

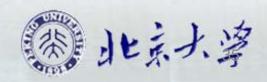


解为 $\langle i_1, i_2, \ldots, i_n \rangle$ 为1,2,...,n的排列,解空间为排列树.

部分解向量 $\langle i_1, i_2, \ldots, i_k \rangle$: 表示前 k 个圆已排好. 令 $B=\{i_1, i_2, \ldots, i_k \}$,下一个园选择 i_{k+1} .

约束条件: $i_{k+1} \in \{1, 2, ..., n\} - B$

界: 当前得到的最小园排列长度





代价函数符号说明

k: 算法完成第k步,已经选择了第1-k个圆

 r_k : 第 k 个圆的半径

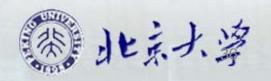
 d_k : 第 k-1 个圆到第 k 个圆的圆心水平距离,k>1

 x_k : 第 k 个圆的圆心坐标,规定 $x_1=0$,

 l_k : 第 1— k 个圆的排列长度

 L_k : 放好 1—k 个圆以后,对应结点的代价函数值

 $L_k \leq l_n$



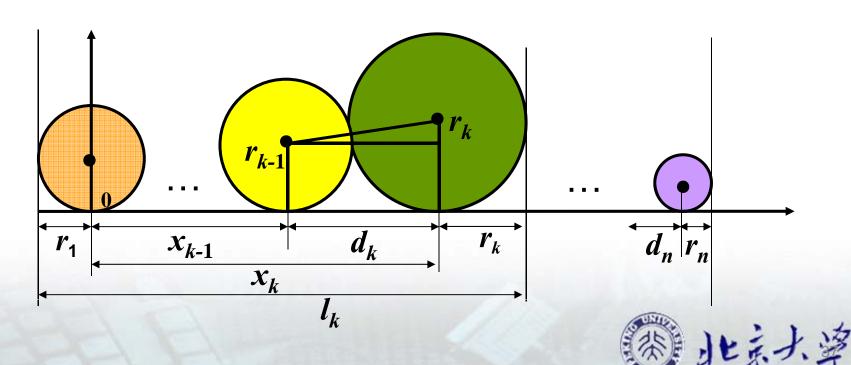
有关量的计算

$$d_{k} = \sqrt{(r_{k-1} + r_{k})^{2} - (r_{k-1} - r_{k})^{2}} = 2\sqrt{r_{k-1}r_{k}}$$

$$x_{k} = x_{k-1} + d_{k}, \qquad l_{k} = x_{k} + r_{k} + r_{1}$$

$$L_{k} = x_{k} + d_{k+1} + d_{k+2} + \dots + d_{n} + r_{n} + r_{1}$$

$$= x_{k} + 2\sqrt{r_{k}r_{k+1}} + 2\sqrt{r_{k+1}r_{k+2}} + \dots + 2\sqrt{r_{n-1}r_{n}} + r_{n} + r_{1}$$



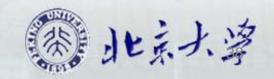
代价函数

排列长度是 l_n ,L是代价函数:

$$\begin{split} l_n &= x_k + 2\sqrt{r_k r_{k+1}} + 2\sqrt{r_{k+1} r_{k+2}} + \dots + 2\sqrt{r_{n-1} r_n} + r_n + r_1 \\ &\geq x_k + 2(n-k)r + r + r_1 \\ L &= x_k + (2n-2k+1)r + r_1 \\ r &= \min(r_{i_j}, r_k) \quad i_j \in \{1, 2, \dots, n\} - B \end{split}$$

$$B &= \{i_1, i_2, \dots, i_k\},$$

时间: O(n n!)=O((n+1)!)





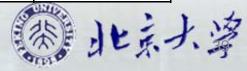
实例: 计算过程

 $R = \{1, 1, 2, 2, 3, 5\}$

取排列 <1, 2, 3, 4, 5, 6>,

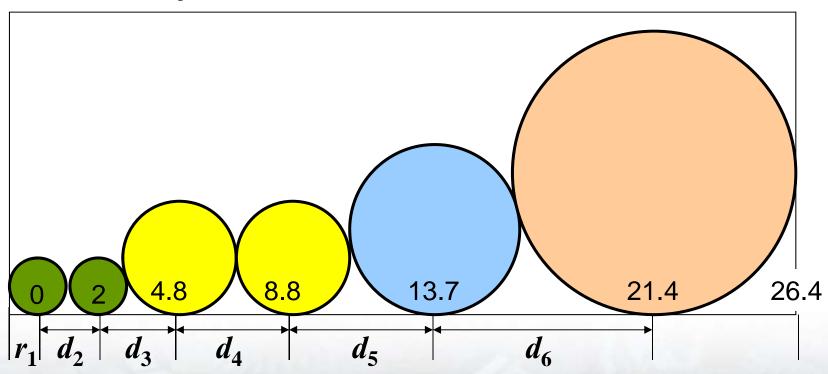
半径排列为: 1,1,2,2,3,5,结果见下表和下图

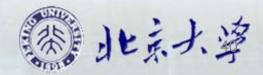
k	r_k	d_k	x_k	l_k	L_k
1	1	0	0	2	12
2	1	2	2	4	12
3	2	2.8	4.8	7.8	19.8
4	2	4	8.8	11.8	19.8
5	3	4.9	13.7	17.7	23.7
6	5	7.7	21.4	27.4	27.4



实例:图示

 $R = \{1, 1, 2, 2, 3, 5\}$ 取排列 <1, 2, 3, 4, 5, 6>, 半径排列为: 1, 1, 2, 2, 3, 5, 最短长度 $l_6 = 27.4$







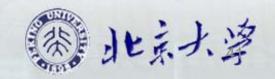
5.4.5 连续邮资问题

问题: 给定n种不同面值的邮票,每个信封至多m张, 试给出邮票的最佳设计,使得从1开始,增量为1的连续邮资区间达到最大?

实例: *n*=5, *m*=4,

面值 X_1 =<1,3,11,15,32>,邮资连续区间为{ 1, 2, ...,70 } 面值 X_2 =<1,6,10,20,30>,邮资连续区间为{1, 2, 3, 4}

可行解: $\langle x_1, x_2, ..., x_n \rangle$, $x_1=1$, $x_1 \langle x_2 \langle ... \langle x_n \rangle$ 约束条件:在结点 $\langle x_1, x_2, ..., x_r \rangle$ 处,邮资最大连续区间为 $\{1, ..., r_i\}$, x_{i+1} 的取值范围是 $\{x_i+1, ..., r_i+1\}$



r_i 的计算

 $y_i(j)$: 用至多m张面值 x_i 的邮票加上 $x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}$ 面值的邮票贴j邮资时的最少邮票数,则

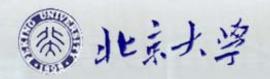
$$y_{i}(j) = \min_{1 \le t \le m} \{t + y_{i-1}(j - tx_{i})\}$$

$$y_{1}(j) = j$$

$$r_{i} = \min\{j \mid y_{i}(j) \le m, y_{i}(j+1) > m\}$$

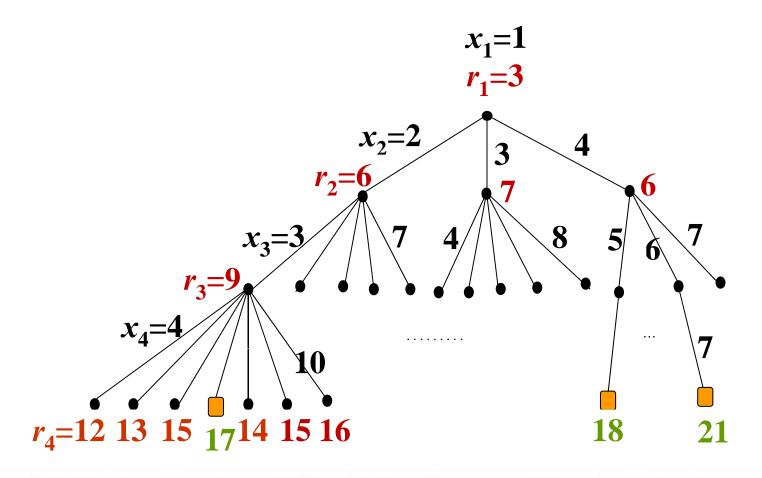
搜索策略: 深度优先

界: max, m张邮票可付的连续区间的最大邮资

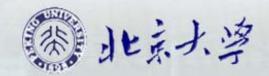




实例: n=4, m=3



解: X=<1,4,6,7>, 最大连续区间为{1,...,21}





回溯算法小结

- (1) 适应于求解组合搜索问题(含组合优化问题)
- (2) 求解条件:满足多米诺性质
- (3) 解的表示:解向量,求解是不断扩充解向量的过程
- (4) 回溯条件: 搜索问题-约束条件 优化问题-约束条件+代价函数
- (5) 算法复杂性: 最坏情况为指数,空间代价小
- (6) 降低时间复杂性的主要途径: 利用对称性裁减子树 划分成子问题
- (7) 分支策略(深度优先、宽度优先、宽深结合、优先函数)

