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

5.1.1 几个典型例子

四后问题

0-1背包问题

货郎问题（TSP）

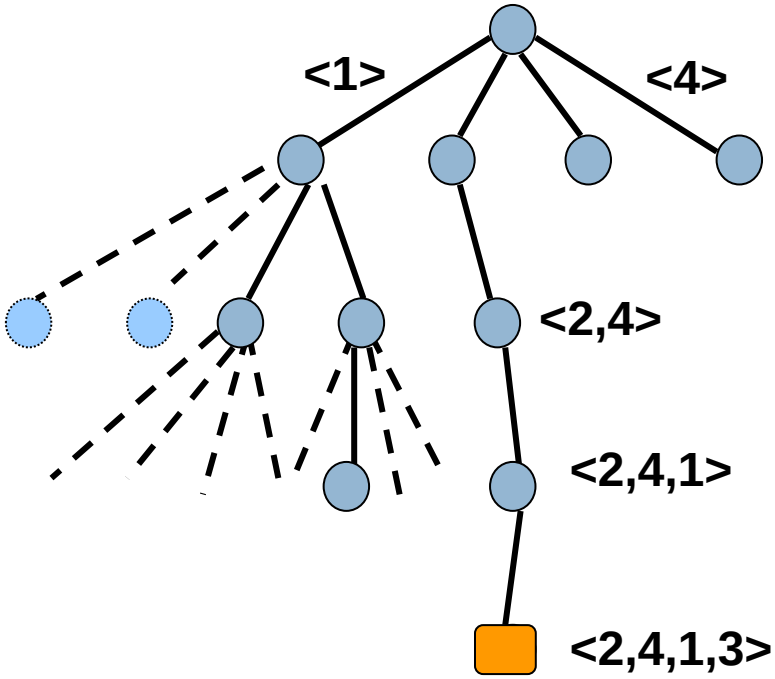
5.1.2 回溯算法的适用条件

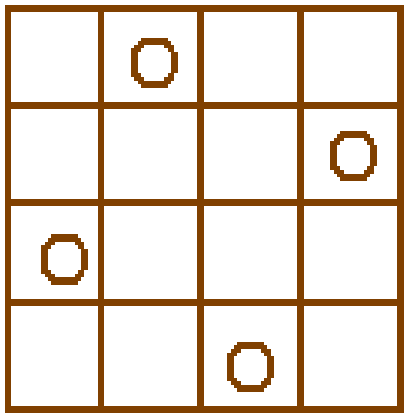
5.1.1几个典型例子

例5.1 ***n*后问题：同一行、列、45度斜线最多1个.**

4后问题：解是一个4维向量，<x_1, x_2, x_3, x_4>（放置列号）

搜索空间：4叉树





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>

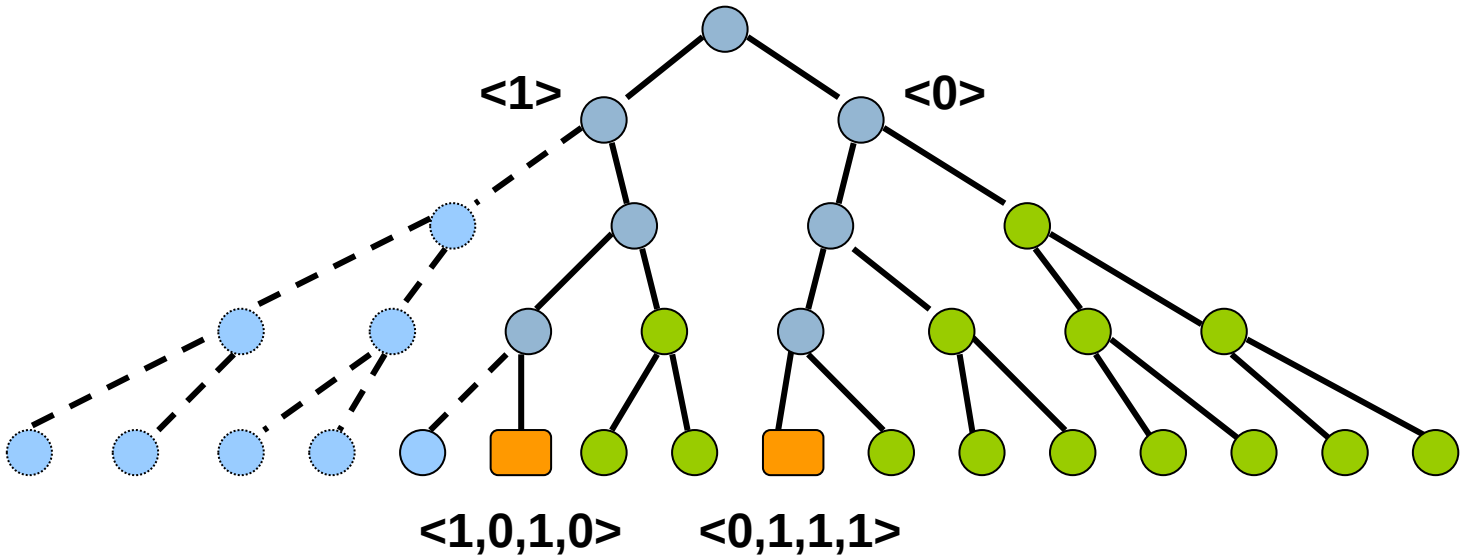
搜索空间：8叉树， 一个解：<1,5,8,6,3,7,2,4>

例5.2 0-1背包问题

实例：n个物品价值V={12,11,9,8}, 重量W={8,6,4,3}, 限重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，2^n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

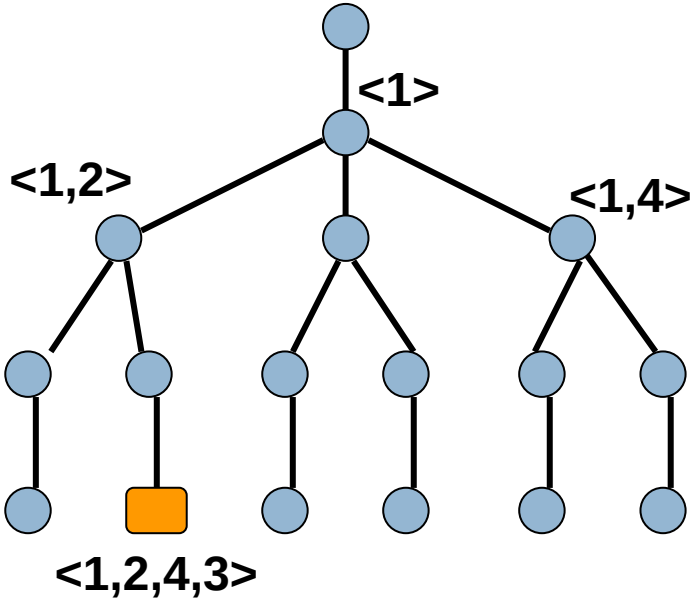
<1,0,1,0> 可行解： x_1=1, x_2=0, x_3=1, x_4=0. 价值:21， 重量:12

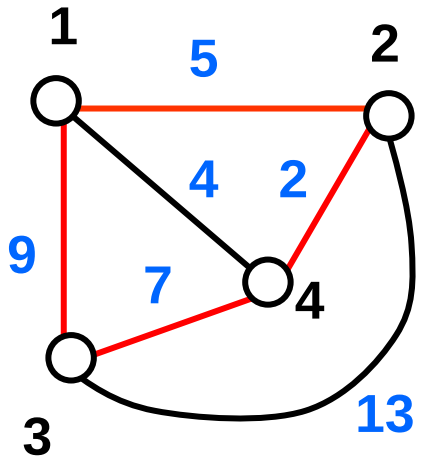
例5.3 货郎问题

$< i_1, i_2, \cdots, i_n >$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 $P(x_1, x_2, \ldots, x_i)$ 为真表示向量$<x_1, x_2, \ldots, x_i>$ 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：

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

例5.4 求不等式的整数解

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

$P(x_1, \ldots, x_k)$：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.

通过变换使得该问题满足多米诺性质.

变换： 令 $x_3=3-x_3'$,

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

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 $<x_1, x_2, \dots, x_n>$

① 确定 x_i 的可能取值的集合为 X_i , $I = 1, 2, \dots, n.$

② 当 $x_1, x_2, \dots, x_{k-1}$ 确定以后计算 x_k 取值集合S_k, $S_k \subseteq X_k$

(2) 确定结点儿子的排列规则

(3) 判断是否满足多米诺性质

(4) 搜索策略----深度优先、宽度优先等

(5) 确定每个结点分支约束条件

(6) 确定存储搜索路径的数据结构

回溯算法的递归实现

算法5.1 ReBack(k)

1. if $k>n$ then $<x_1, x_2, \dots, x_n>$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5.2 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

算法5.3 **Backtrack(*n*)**

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 $S_k \neq \varnothing$ do
5. $\quad x_k \leftarrow S_k$中最小值; $S_k \leftarrow S_k - \{x_k\}$
6. $\quad$ if $k<n$ then
7. $\quad\quad k \leftarrow k+1$; 计算$S_k$
8. $\quad$ else $<x_1,x_2,\ldots,x_n>$是解
9. if $k>1$ then $k \leftarrow k-1$； goto 4

装载问题

例5.5 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

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

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$c_1 - W_1$达到最小的装载方案$<x_1, x_2, \ldots, x_n>$， 如果 $\sum_{i=1}^{n} w_i - W_1 \le c_2$ 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$W=<w_1,w_2,\ldots,w_n>$, c_1是第一条船的载重

输出：使第一条船装载最大的方案$<x_1,x_2,\ldots,x_n>$，其中x_i=0,1

1. Sort(W);　　//对$w_1,w_2,\ldots,w_n$按照从大到小排序

2. $B \leftarrow c_1$; $best \leftarrow c_1$; $i \leftarrow 1$;

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；$Best \leftarrow B$; $i \leftarrow i-1$;

8.　Backtrack(i);

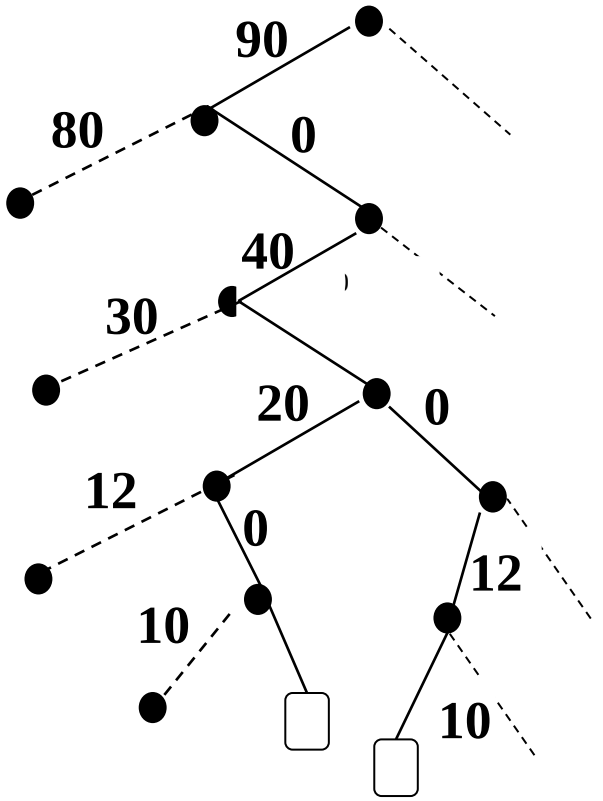
9.　if $i=1$ then return 最优解

10. else goto 3.

实例

算法5.5 Backtrack(*i*)

1. **while *i*>1 and *x*[*i*]=0 do**
2. **　　*i* ←*i*–1;**
3. **if *x*[*i*]=1**
4. **then *x*[*i*]←0; *B*←*B*+w_i; *i*←*i*+1;**



实例 ***W*=<90,80,40,30,20,12,10>,**

c_1=152, c_2=130

复杂性：*W*(*n*)=*O*(2^n)

图的着色问题

例5.6 着色问题：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$<x_1, x_2, \ldots, x_k>$：$x_1, x_2, \ldots, x_k \in \{1, 2, .., m\}$, $1 \le k \le n$，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.

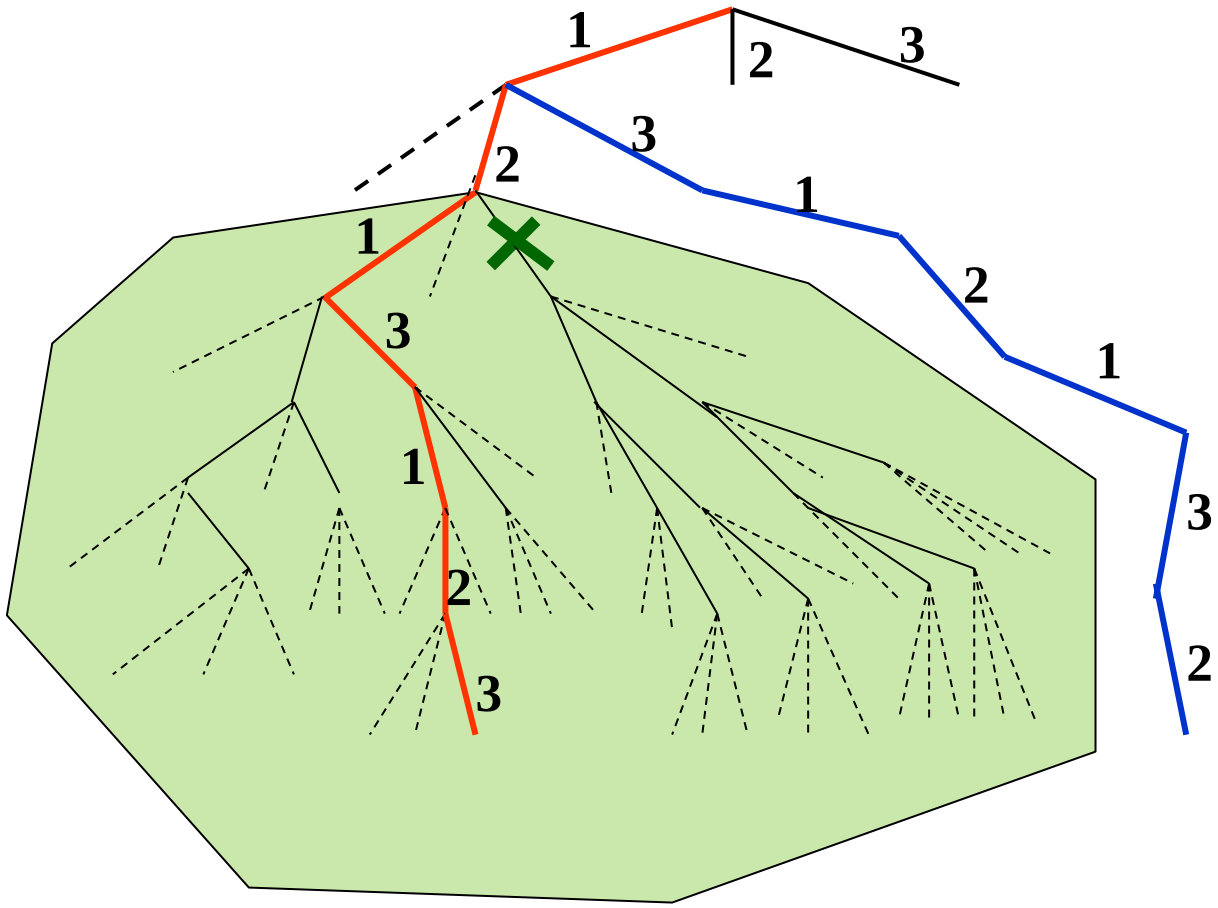
约束条件：该顶点邻接表中的顶点与该顶点没有同色；

搜索策略：深度优先

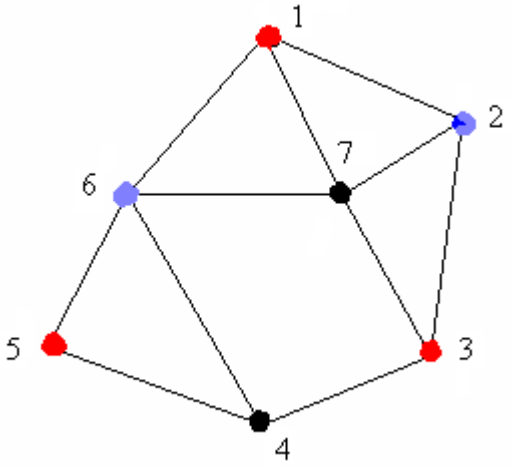
时间：$O(nm^n)$

实例

$N = 7, m = 3$



<1>
<1,2>
<1,2,1>
<1,2,1,3>
<1,2,1,3,1>
<1,2,1,3,1,2>
<1,2,1,3,1,2,3>



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 回溯算法的效率

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 $x_1, x_2, \ldots,$ 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.

算法实现

算法5.6 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* ← 0　　//*sum*为 *t* 次结点平均数

2. for *i* ←1 to *t* do　　//取样次数 *t*

3. *m* ← Estimate(*n*)　　//*m*为本次抽样结点总数

4. *sum* ← *sum* + *m*

5. *sum* ← *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5.7 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. $k \leftarrow k+1$

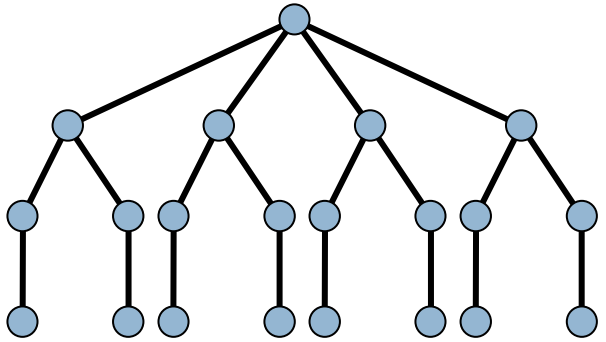
实例

估计四后搜索树的结点数

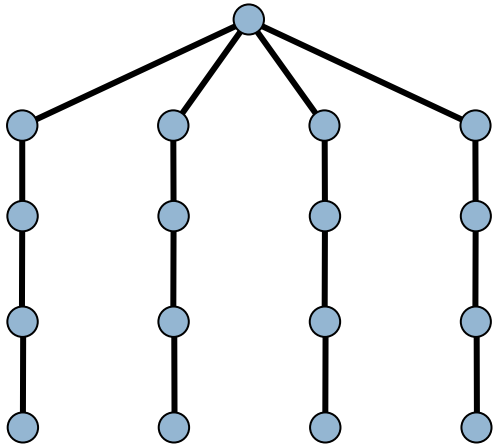
case1．<1,4,2>：1+4+4×2+4×2=21

case2．<2,4,1,3>：4×4+1=17

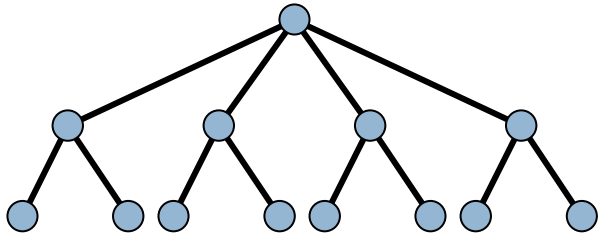
case3．<1,3>：1+4×1+4×2=13



case1：　<1, 4, 2>



case2：　<2, 4, 1, 3>



case3：　<1, 3>

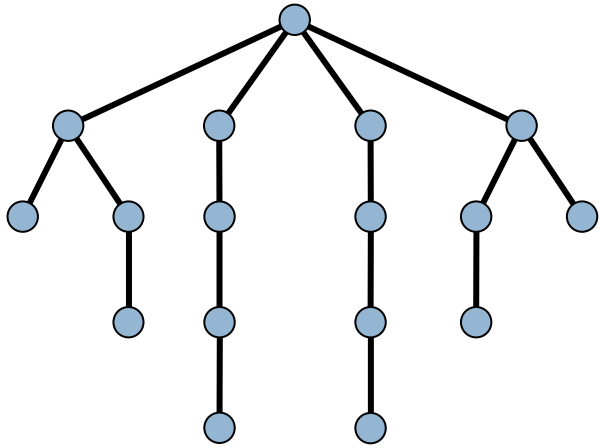
估计结果

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 $W(n) = O(p(n)f(n))$

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
  - 在不同子树中分布解的个数是否均匀
  - 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，

如果分解为 k 个子问题，每个子问题大小为 n/k

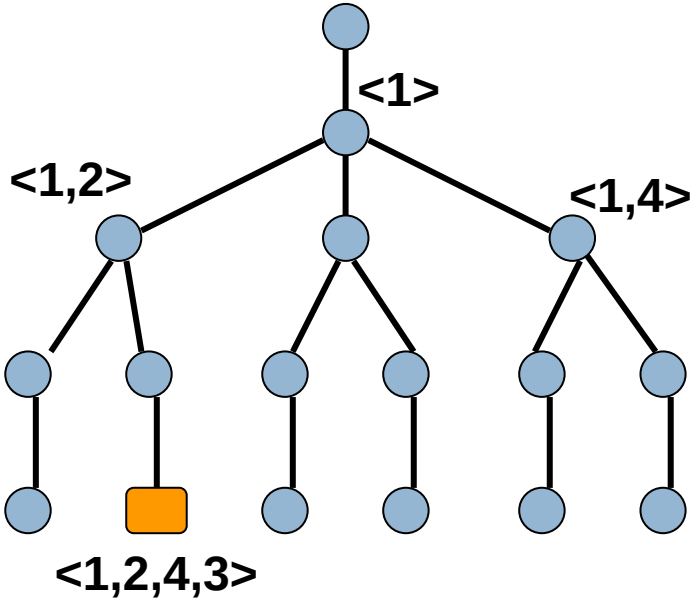
求解时间为 $kc2^{n/k} + T$.

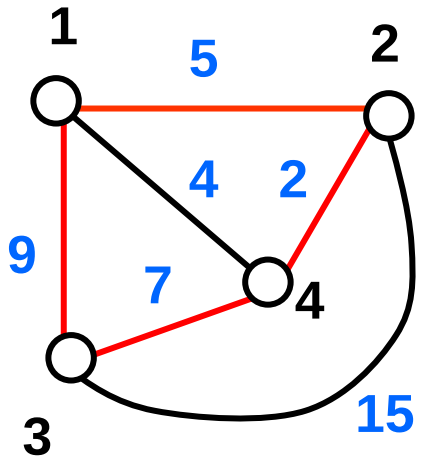
例5.3 货郎问题

$< i_1, i_2, \cdots, i_n >$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

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

例5.8 实例

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

目标函数

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

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

约束条件

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

5.4.3 货郎问题

例5.10 货郎问题：给定n个城市集合$C=\{c_1, c_2, \dots, c_n\}$, 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 $<i_1, i_2, \dots, i_{n-1}>$,

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

搜索空间为排列树，结点 $<i_1, i_2, \dots, i_k>$ 表示得到 k 步路线

算法设计

约束条件：令$B=\{i_1, i_2, \ldots, i_k\}$, 则

$$i_{k+1} \in \{2, \ldots, n\} - B$$

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$O(n)$

预处理计算每个结点出发的最短边，时间为 $O((n-1)!)$

实例：背包问题

背包问题的实例：

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

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

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

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

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

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

代价函数与分支策略确定

结点 $< x_1, x_2, \ldots, x_k >$ 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$b - \sum_{i=1}^{k} w_i x_i \geq w_j$

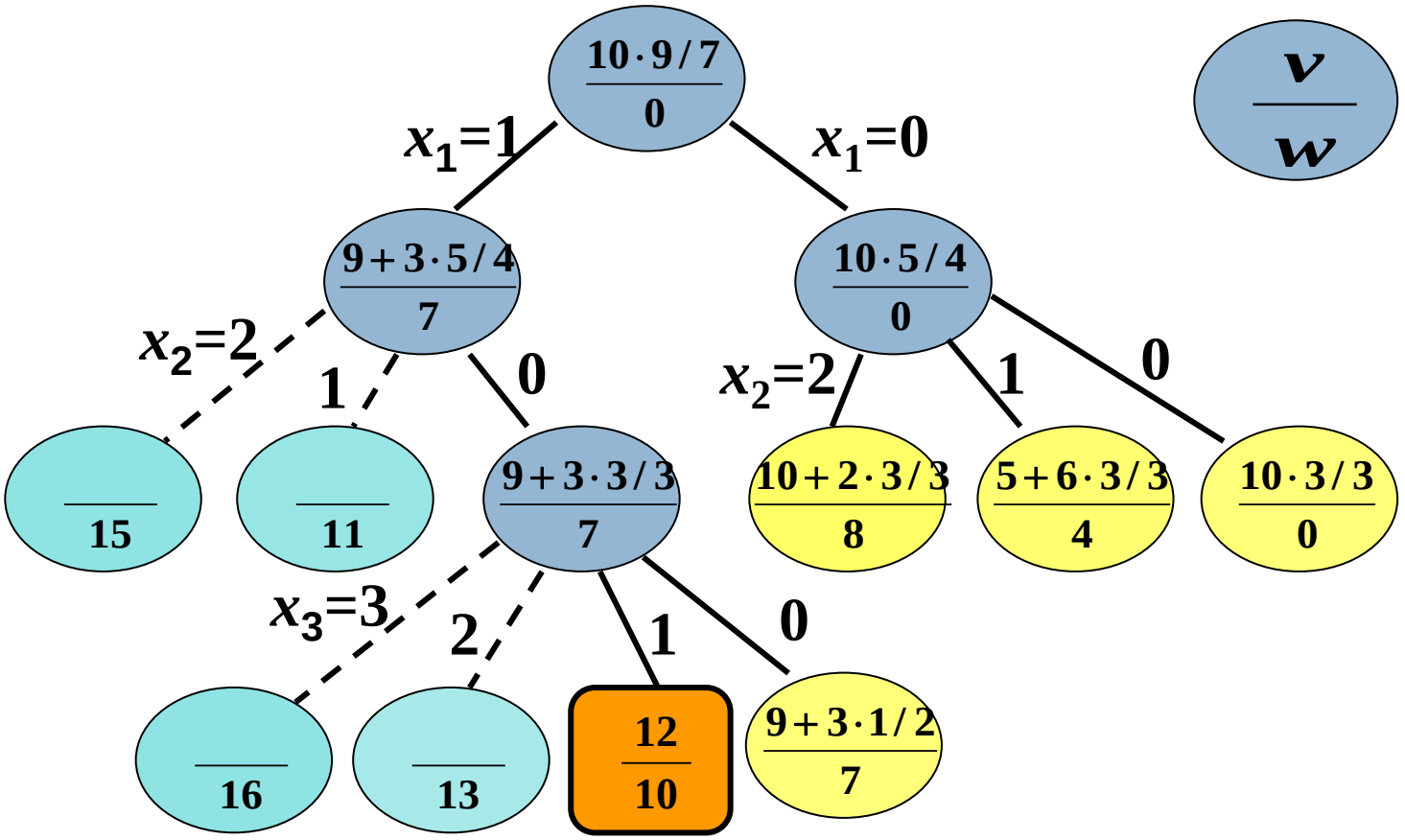
$\sum_{i=1}^{k} v_i x_i$ 否则

分支策略----深度优先

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

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

实例



5.4.2 最大团问题

例5.9 最大团问题：给定无向图$G=<V, E>$, 求G中的最大团.

相关知识：

无向图 $G = <V, E>$,

G的子图：$G'= <V', E'>$, 其中$V' \subseteq V$, $E' \subseteq E$,

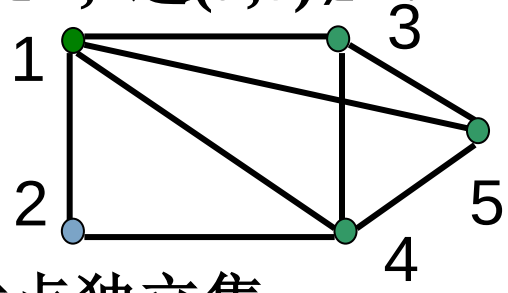
G的补图：$\overline{G} =<V, E'>$, E'是E关于完全图边集的补集

G中的团：G 的完全子图

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

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是G 的最大团当且仅当U是$\overline{G}$的最大点独立集.

算法设计

结点 $< x_1, x_2, \ldots, x_k >$ 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：该分支处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

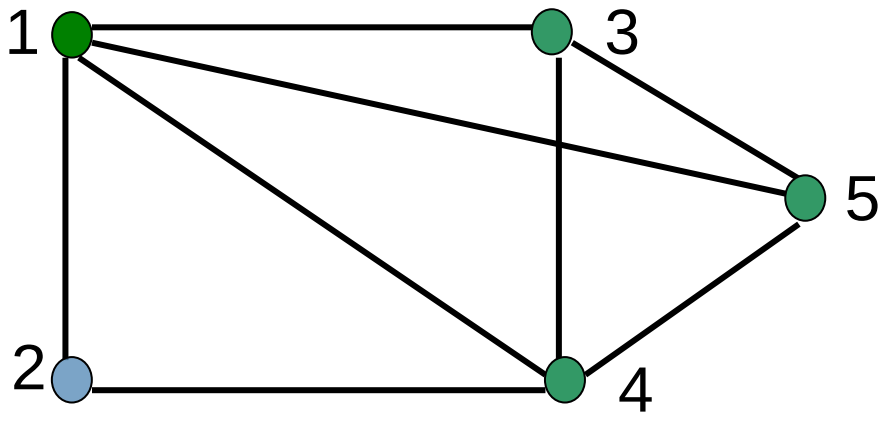
$$F = C_n + n - k$$

其中 C_n 为目前团的顶点数（初始为 0），

k 为结点层数

时间：$O(n2^n)$

最大团的实例



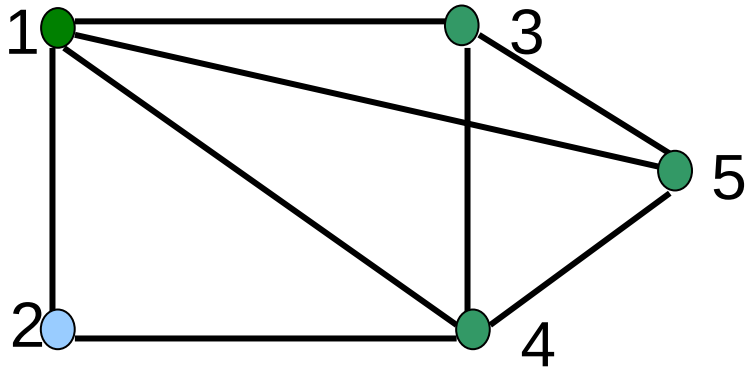
顶点编号顺序为 **1, 2, 3, 4, 5,**

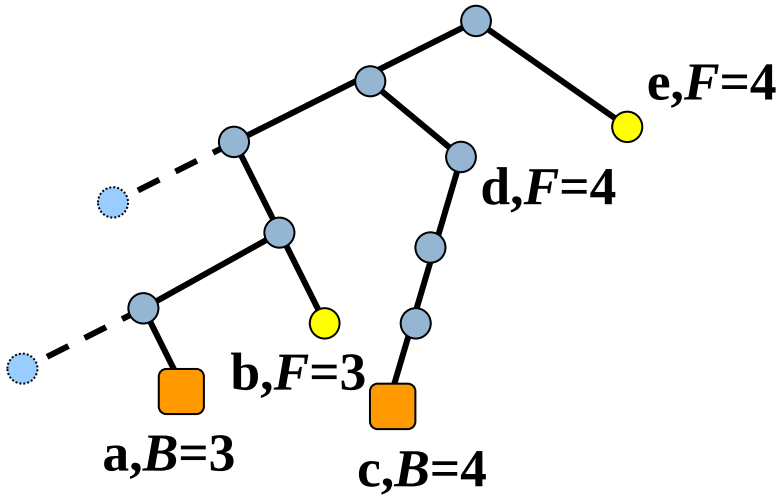
对应 x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_i **=1** 当且仅当 ***i*** 在团内

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；

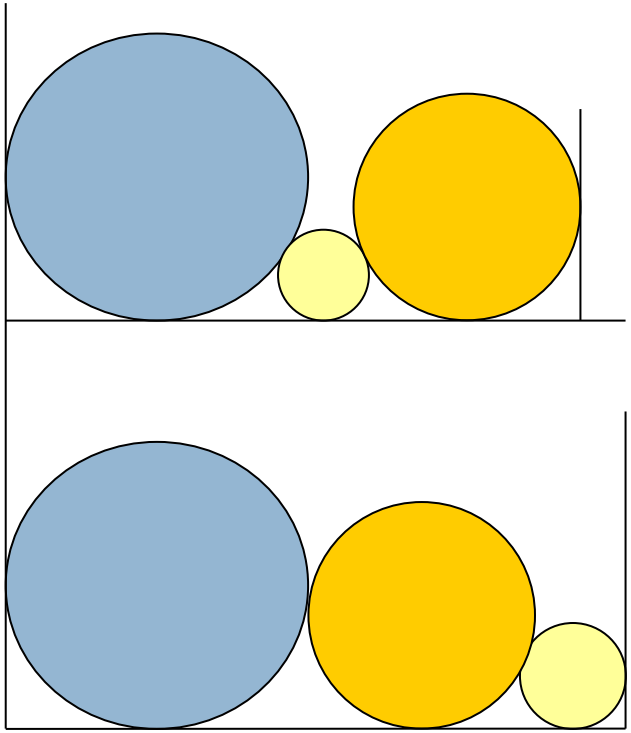
d： 不必搜索其它分支, 因为 F = 4, 不超过界；

e： F = 4, 不必搜索.

最大团为 {1, 3, 4, 5}, 顶点数为 4.

5.4.4 圆排列问题

例5.11 圆排列问题：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$<i_1, i_2, \dots, i_n>$为$1, 2, \dots, n$的排列，解空间为排列树.

部分解向量 $<i_1, i_2, \dots, i_k>$：表示前 k 个圆已排好. 令$B=\{ i_1, i_2, \dots, i_k \}$,下一个圆选择$i_{k+1}$.

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

界：当前得到的最小圆排列长度

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

$L_k \leq l_n$

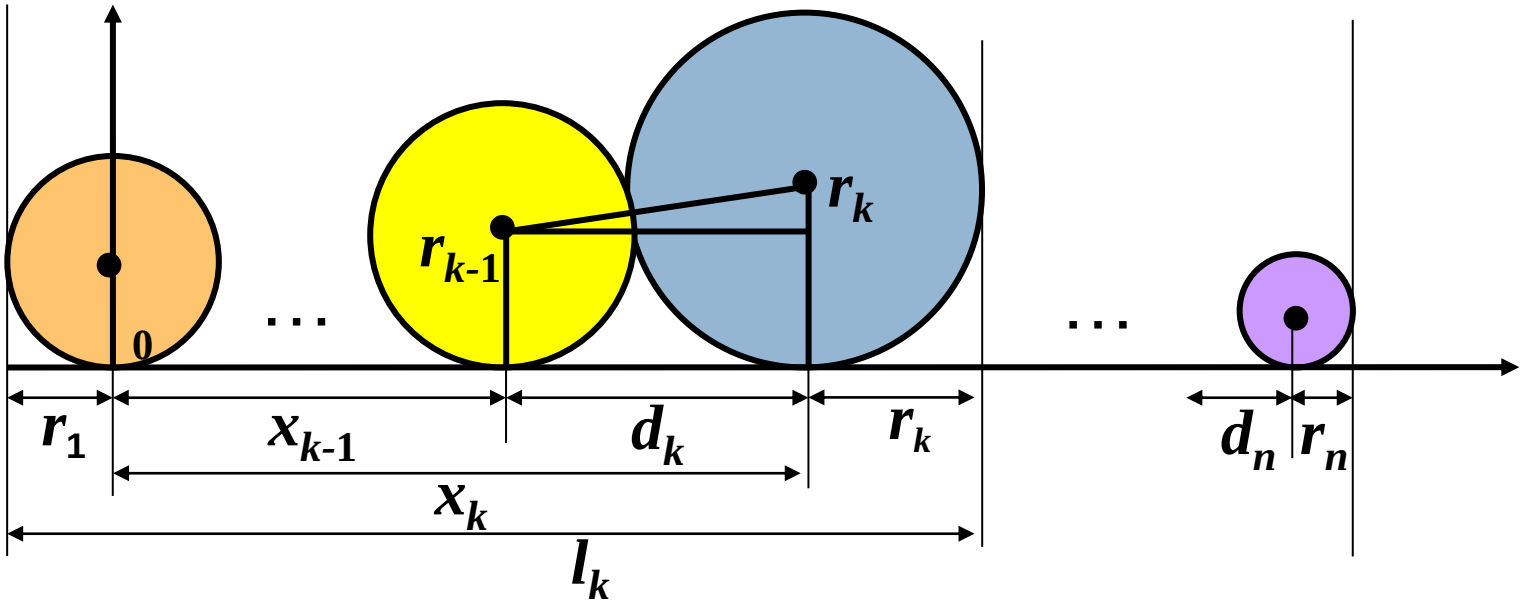
有关量的计算

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

$$x_k = x_{k-1} + d_k, \qquad l_k = x_k + r_k + r_1$$

$$l_n = x_k + d_{k+1} + d_{k+2} + \ldots + d_n + r_n + r_1$$

$$= x_k + 2\sqrt{r_k r_{k+1}} + 2\sqrt{r_{k+1}r_{k+2}} + \ldots + 2\sqrt{r_{n-1}r_n} + r_n + r_1$$



代价函数

排列长度是 l_n，L是代价函数：

$$l_n = x_k + 2\sqrt{r_k r_{k+1}} + 2\sqrt{r_{k+1} r_{k+2}} + \ldots + 2\sqrt{r_{n-1} r_n} + r_n + r_1$$

$$\geq x_k + 2(n-k)r + r + r_1$$

$$L_k = x_k + (2n - 2k + 1)r + r_1$$

$$r = \min(r_{i_j}, r_k) \quad i_j \in \{1, 2, \ldots, n\} - B$$

$$B = \{ i_1, i_2, \ldots, i_k \},$$

时间：$O(n\, n!) = O((n+1)!)$

实例：计算过程

$$L_k = x_k + (2n - 2k + 1)\,r + r_1$$

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

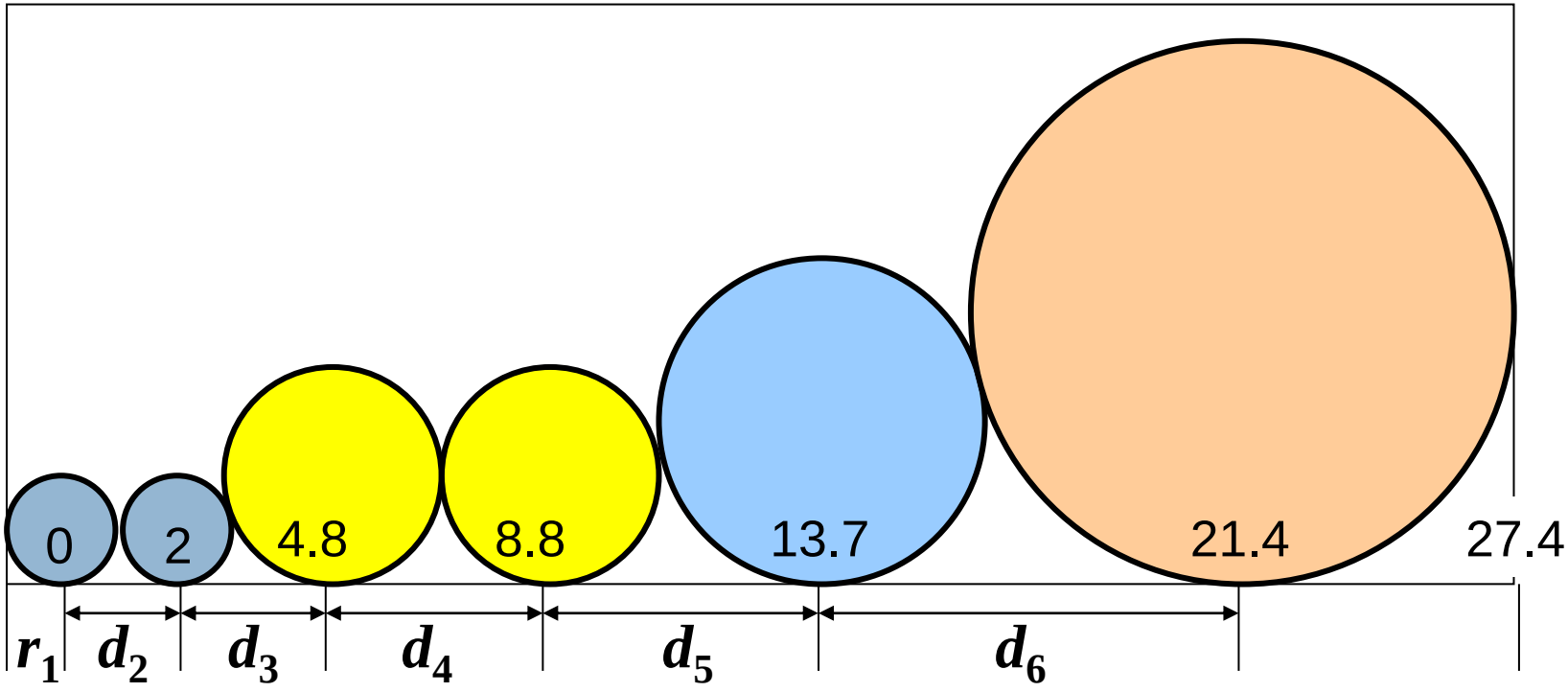
k	r_k	d_k	x_k	l_k	L_k
1	1	0	0	2	12
2	1	2	2	4	12
3	2	2.8	4.8	7.8	19.8
4	2	4	8.8	11.8	19.8
5	3	4.9	13.7	17.7	23.7
6	5	7.7	21.4	27.4	27.4

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，

当前解长度 l_6 = 27.4.　最优解：<1,3,5,6,4,2>, 最短长度26.5



5.4.5 连续邮资问题

例5.12 连续邮资问题：给定n种不同面值的邮票，每个信封至多贴 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 ：$< x_1, x_2, \ldots, x_n >$，$x_1=1$，$x_1< x_2< \ldots < x_n$

约束条件：在结点$< x_1, x_2, \ldots, x_i >$处，邮资最大连续区间为$\{ 1, \ldots , r_i \}$，$x_{i+1}$ 的取值范围是$\{ x_i+1, \ldots , r_i+1\}$

r_i 的计算

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

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

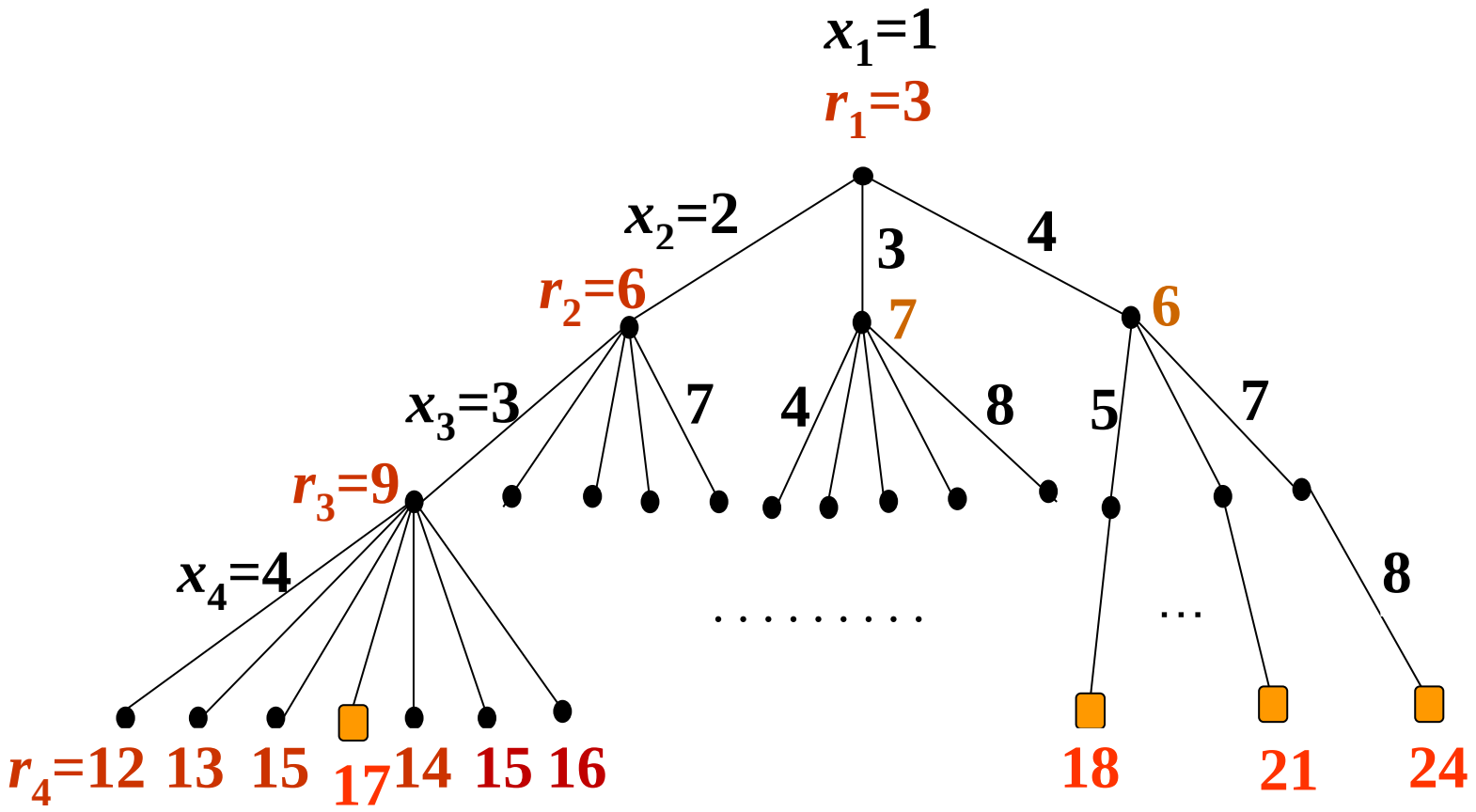
$$y_1(j) = j$$

$$r_i = \min\{\, j \mid y_i(j) \le m, y_i(j+1) > m\}$$

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 = <1,4,7,8>, 最大连续区间为 {1, 2, … , 24}

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）