

# 算法设计与分析

刘安

苏州大学 计算机科学与技术学院  
<http://web.suda.edu.cn/anliu/>

# 蛮力（穷举）搜索

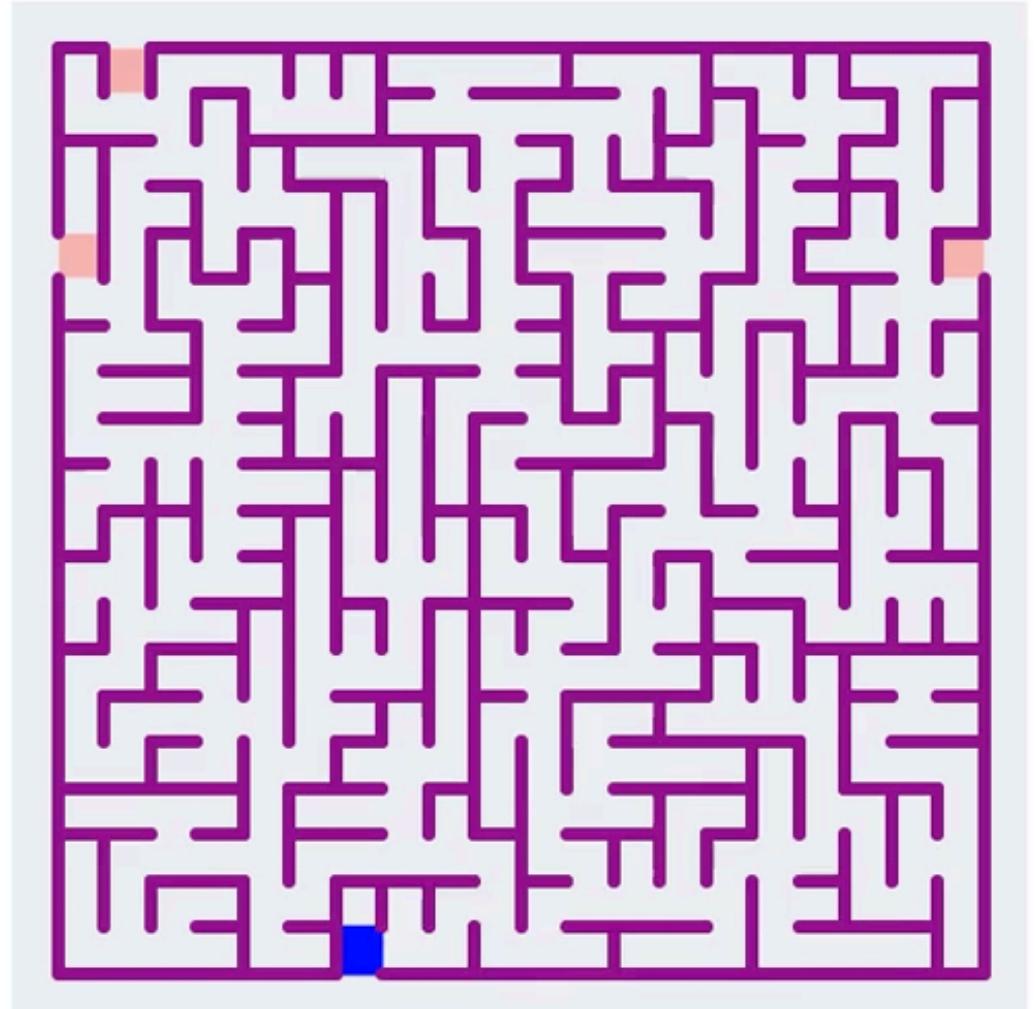
- 蛮力（穷举）搜索：brute-force (exhaustive) search
  - 系统地枚举所有可能的解并检查其合法性
  - 所有可能的解构成了问题的解空间
  - 独立集问题
    - 规模为k：穷举n个顶点所有规模为k的子集， $O(n^k)$
    - 最大独立集：穷举n个顶点所有的子集， $O(n^2 \cdot 2^n)$
    - 旅行商问题：穷举n个顶点所有的排列， $O(n \cdot n!)$
  - 目前主流CPU在1秒内可以进行100万次搜索
    - 20个元素的子集数
    - 10个元素的排列数

# 回溯 backtracking

- 一种在解空间中系统搜索可行解的方法
- 问题的解：一个长度最多为 $n$ 的决策序列 $A[1..n]$
- 如果 $A[1..i - 1]$ 已经是一个解，结束当前递归调用
- 否则，确定第 $i$ 步可用的候选方案 $C_i$ 
  - 注意： $C_i$ 的值可能取决于过去的决策，即 $A[1..i - 1]$
  - 如果 $C_i = \emptyset$ ，结束当前递归调用
    - 避免无效搜索，也称为剪枝 (pruning)
  - 否则依次尝试方案 $c \in C_i$ 
    - 第 $i$ 步采用的方案确定之后（即 $A[i] = c$ ），原问题就归约为一个新的子问题（确定长度最多为 $n - i$ 的决策序列），递归求解

# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 构造所有子集

- 如何构造集合 $\{1, 2, \dots, n\}$ 的所有子集
- 构造一个子集可以看成是一个长度为 $n$ 的决策序列
  - 第*i*步决定是否将整数*i*放入目标子集中
    - 每一步只有两种候选方案：放、不放
    - 每一步的候选方案与之前的决策没有关系
  - 每个长度为 $n$ 的决策序列对应一个子集
  - 考虑 $n = 3$ 
    - 决策序列：放， 不放， 放  $\Rightarrow \{1, 3\}$
    - 决策序列：不放， 不放， 不放  $\Rightarrow \emptyset$

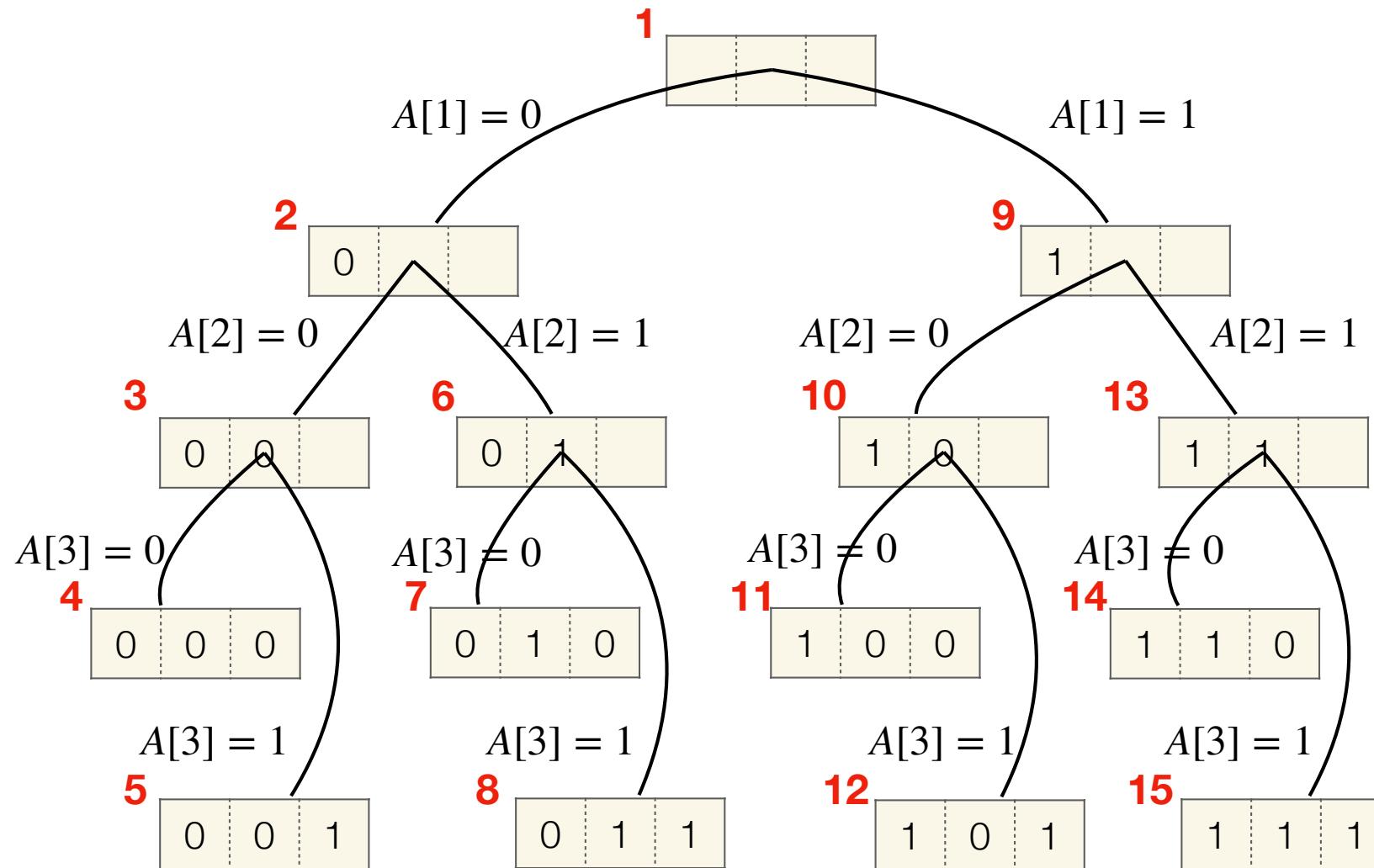
# 算法实现

- 全局数组  $A[1..n]$  存放所有的决策
  - $A[i] = 0$ , 不把元素  $i$  放入子集
  - $A[i] = 1$ , 把元素  $i$  放入子集
- $i > n$  时, 所有  $n$  个元素是否放入子集都已确定, 找到一个解

```
def generate_subset(i):
    if i > n:
        print(A[1:])
    else:
        for c in range(2):
            A[i] = c
            generate_subset(i + 1)

n = 3
A = [None] * (n + 1)
generate_subset(1)
```

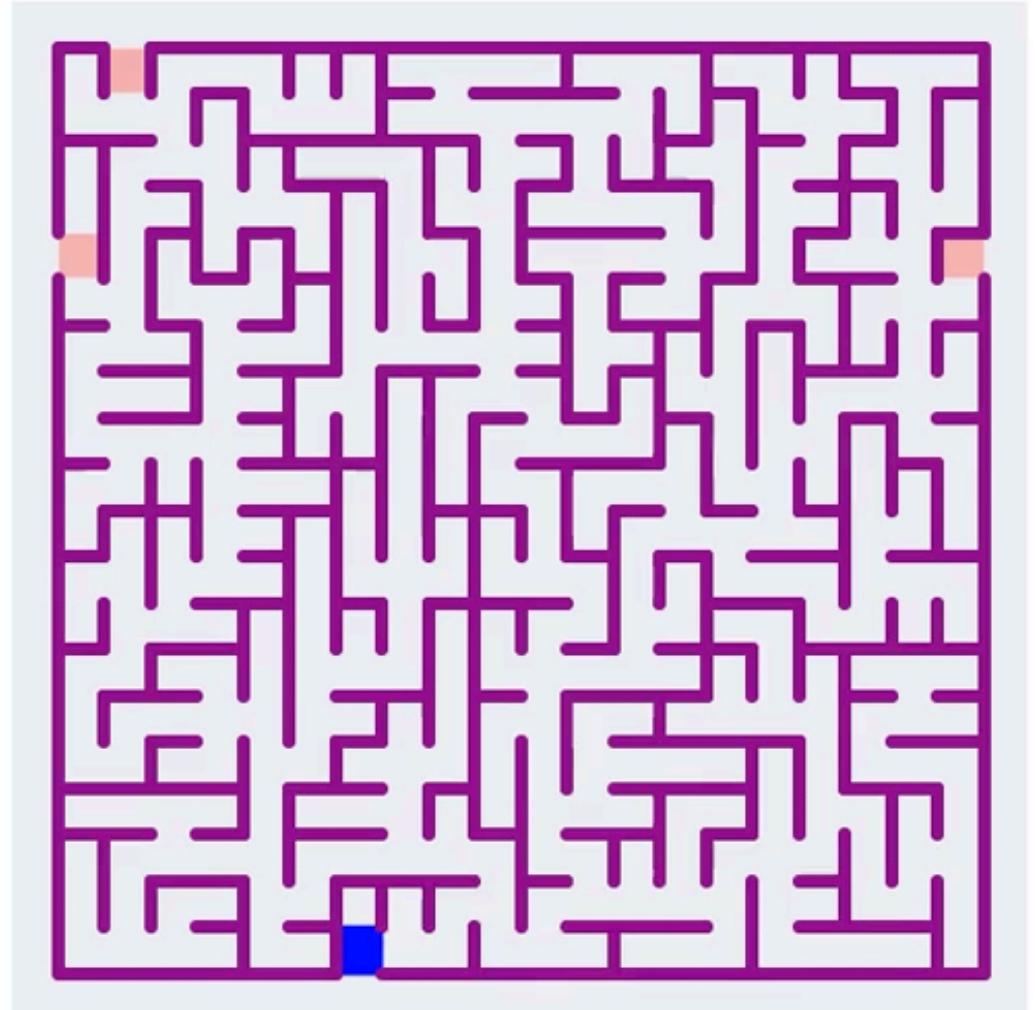
# generate\_subset()的递归树



红色数字代表函数调用顺序

# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 构造所有排列

- 如何构造 $1, 2, \dots, n$ 的所有排列
- 构造一个排列可以看成是一个长度为 $n$ 的决策序列
  - 第 $i$ 步决定将哪个数放入排列的第 $i$ 个位置
    - $n - i + 1$ 种候选方案，具体值取决于前 $i - 1$ 步的决策
    - 如何快速判断数字 $c \in \{1, 2, \dots, n\}$ 属于候选方案？
      - 全局数组 $\text{used}[1..n]$ ,  $\text{used}[c]$ 表示数字 $c$ 在之前的决策 $A[1..i - 1]$ 中是否已经使用
  - 每个长度为 $n$ 的决策序列对应一个排列

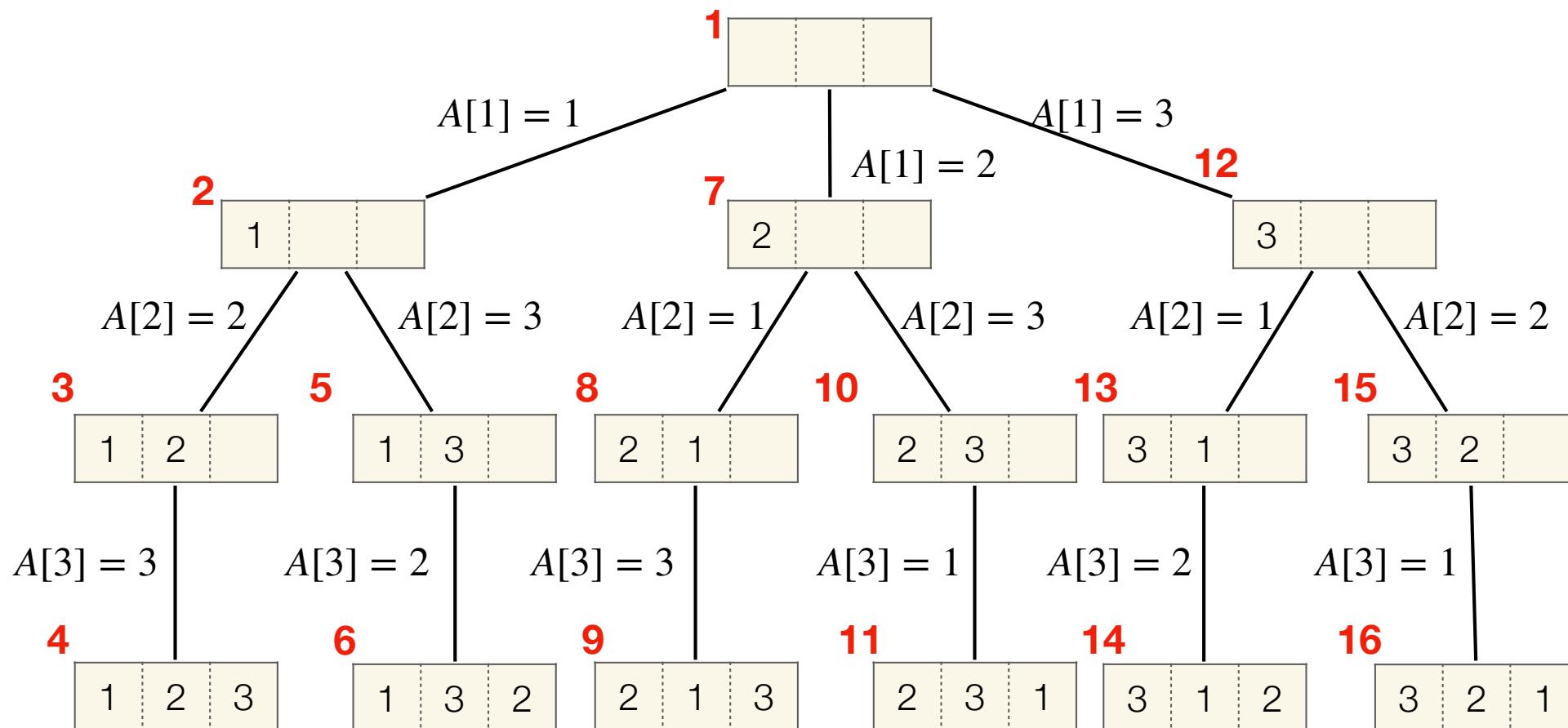
# 算法实现

- 全局数组 $A[1..n]$ 存放所有的决策
- 全局数组 $used[1..n]$ 用来快速确定每一步的候选方案
- $i > n$ 时，排列的 $n$ 个位置上都有确定的数字，找到一个解

```
def generate_permutation(i):
    if i > n:
        print(A[1:])
    else:
        for c in range(1, n + 1):
            if not used[c]:
                used[c] = True
                A[i] = c
                generate_permutation(i + 1)
                used[c] = False

n = 4
A = [None] * (n + 1)
used = [None] * (n + 1)
generate_permutation(1)
```

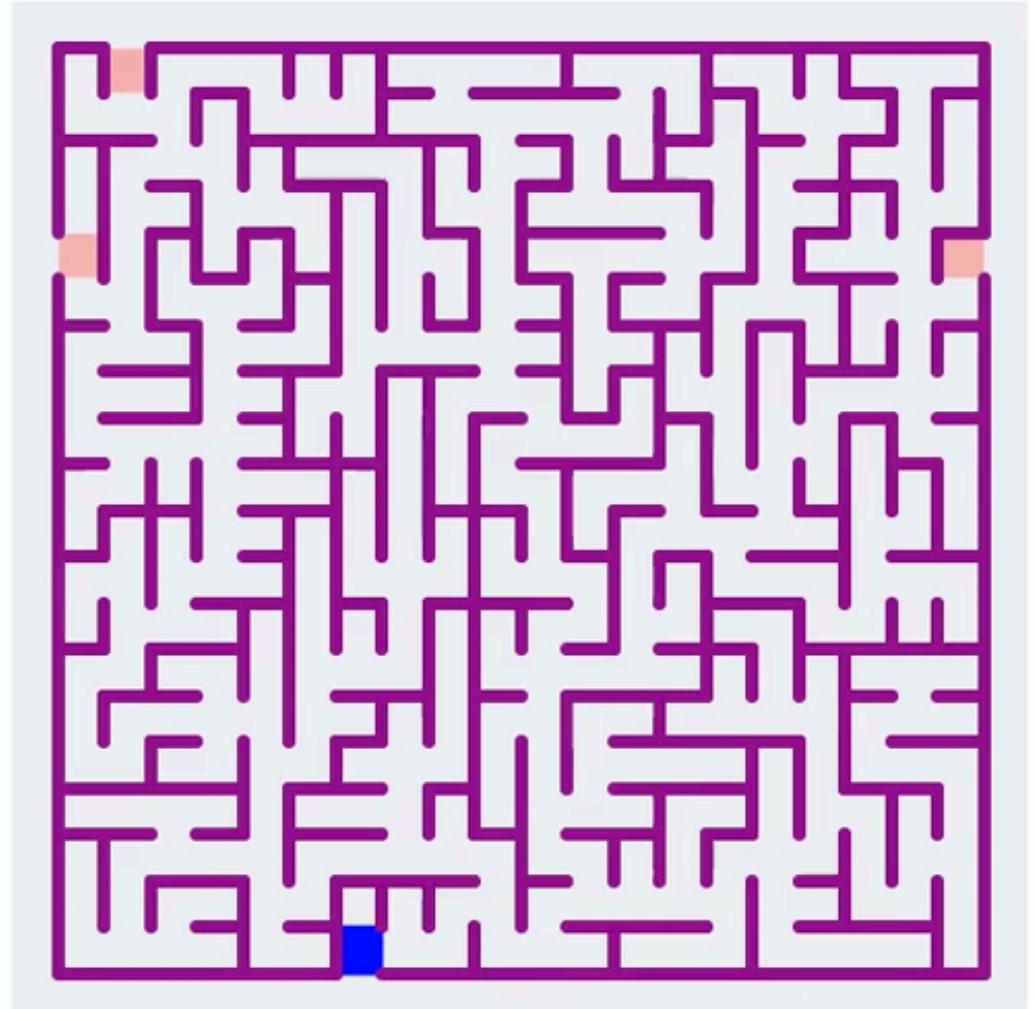
# generate\_permutation()的递归树



红色数字代表函数调用顺序

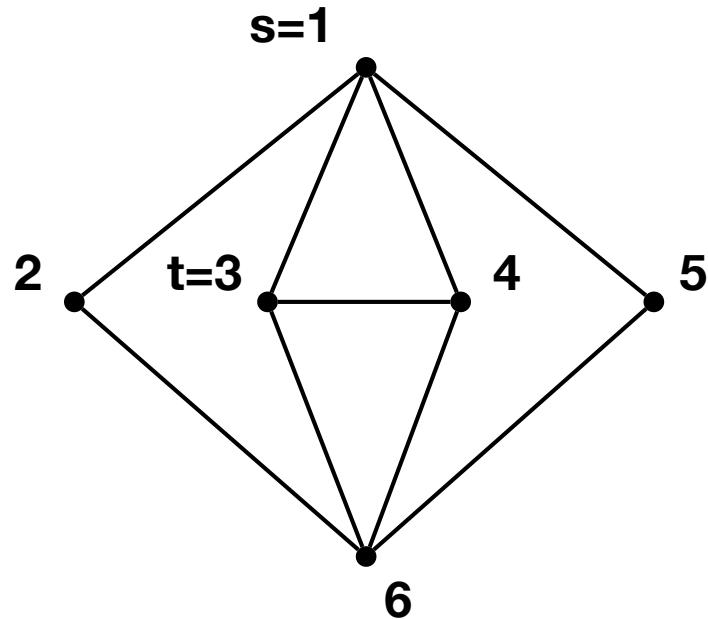
# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 构造所有路径

- 如何在给定图  $G = (V, E)$  中构造所有从  $s$  到  $t$  的简单路径
  - 简单路径中所有顶点互不相同



$$p_1 = 1, 3$$

$$p_2 = 1, 4, 3$$

$$p_3 = 1, 4, 6, 3$$

$$p_4 = 1, 2, 6, 3$$

$$p_5 = 1, 2, 6, 4, 3$$

$$p_6 = 1, 5, 6, 3$$

$$p_7 = 1, 5, 6, 4, 3$$

# 构造所有路径

- 如何在给定图 $G = (V, E)$ 中构造所有从 $s$ 到 $t$ 的简单路径
  - 简单路径中所有顶点互不相同
  - 一条路径可以看成一个长度最多为 $n = |V|$ 的决策序列
    - 第*i*步决定将哪个顶点放入路径的第*i*个位置
      - 第1步只有一种候选方案，即将顶点 $s$ 加入路径
      - 第2步的候选方案包括 $s$ 的所有邻接点
      - 第*i*步的候选方案取决于第*i* - 1步的决策 $A[i - 1]$ ，即它的所有未放入当前路径的邻接点
    - 如果 $A[i - 1] = t$ ，那么已经找到 $s$ 到 $t$ 的简单路径
    - 每个长度为 $n \leq |V|$ 的决策序列对应一条长度为 $n$ 的路径

# 算法实现

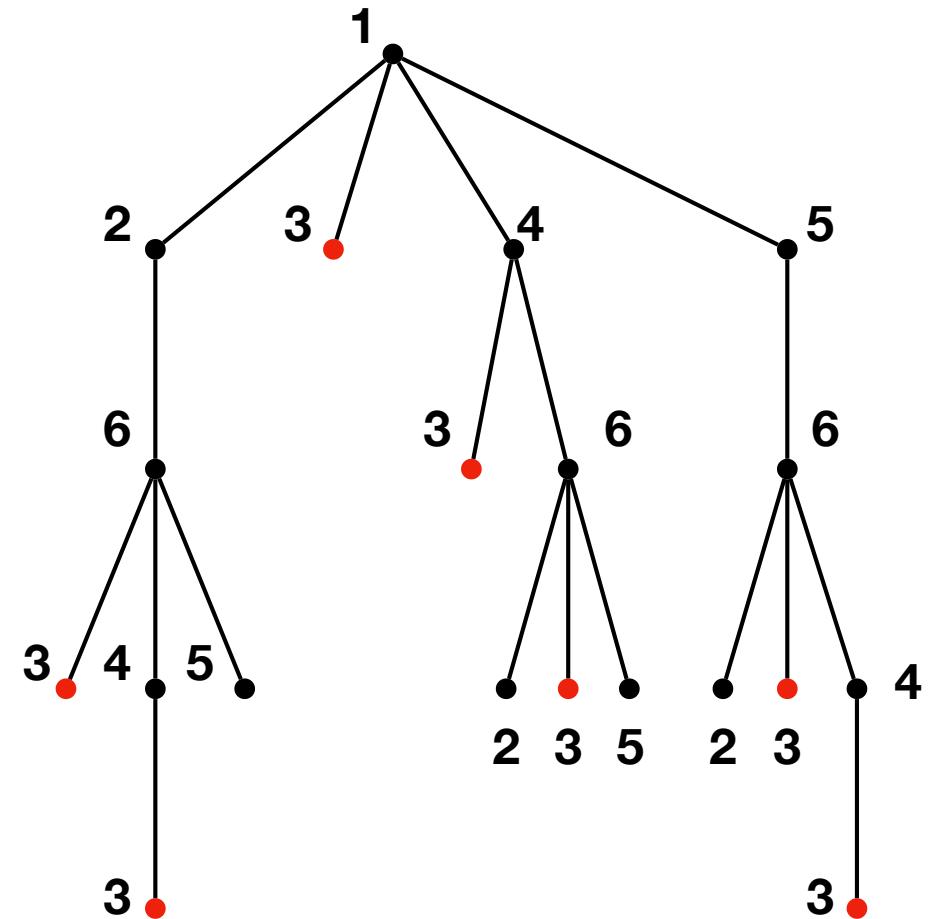
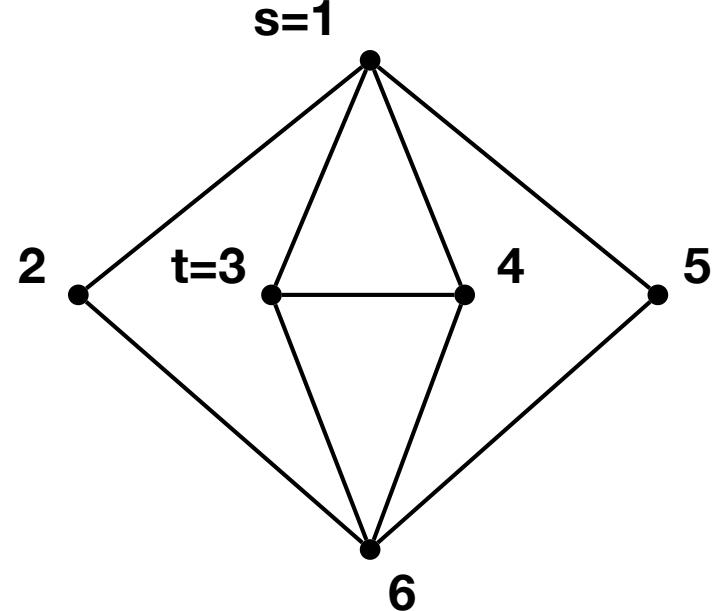
- 全局数组 $A[1..n]$ 存放所有的决策
- 全局数组 $used[1..n]$ 用来快速确定每一步的候选方案
- $A[i - 1] = t$ 时，找到一条从 $s$ 到 $t$ 的路径，即 $A[1..i - 1]$

```
def generate_path(i):
    if i == 1:
        A[i] = s
        used[s] = True
        generate_path(i+1)
    else:
        if A[i-1] == t:
            print(A[1:i])
        else:
            for c in g[A[i-1]]:
                if not used[c]:
                    used[c] = True
                    A[i] = c
                    generate_path(i+1)
                    used[c] = False
```

```
g = {1:{2,3,4,5}, 2:{1,6},
      3:{1,4,6}, 4:{1,3,6},
      5:{1,6}, 6:{2,3,4,5}}
s = 1
t = 3
n = len(g)
A = [None] * (n + 1)
used = [False] * (n + 1)
generate_path(1)
```

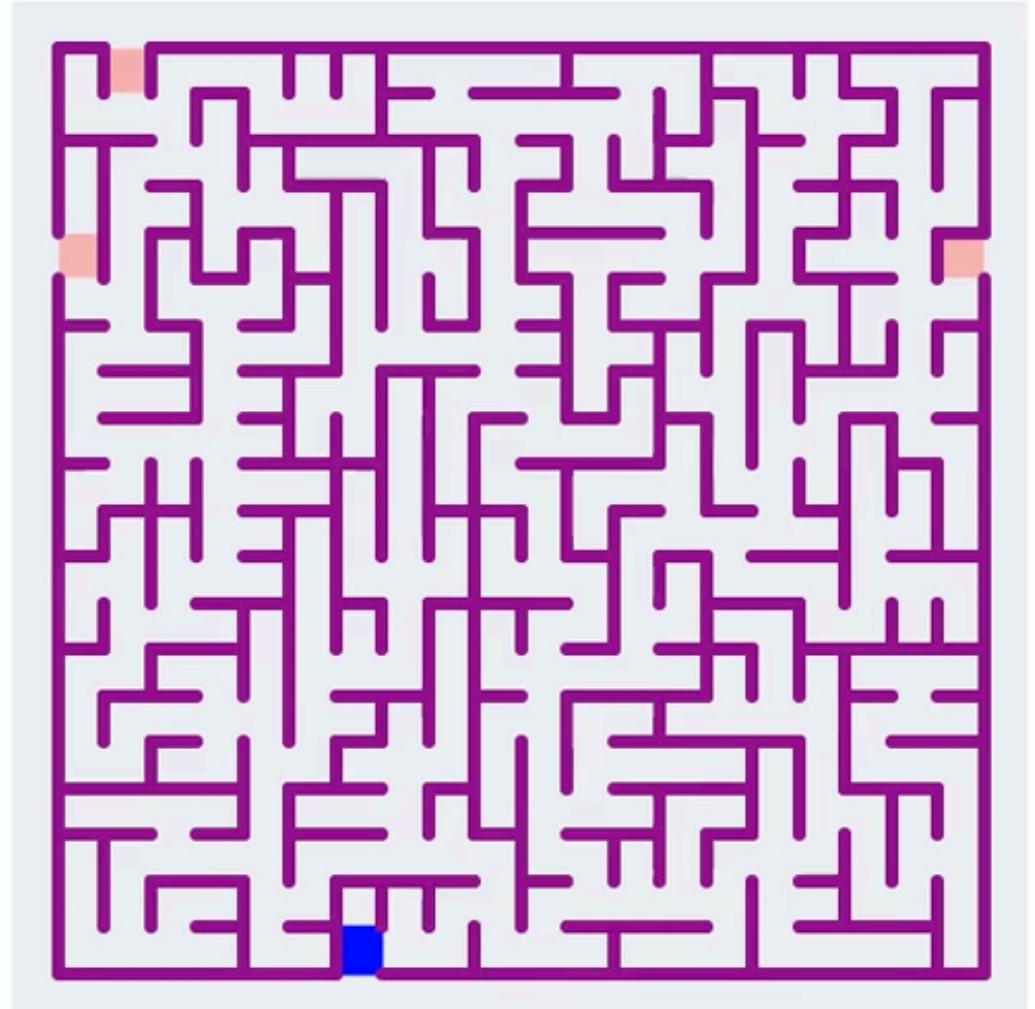
# generate\_path()的递归树

- 如何在给定图 $G = (V, E)$ 中构造所有从 $s$ 到 $t$ 的简单路径
  - 简单路径中所有顶点互不相同



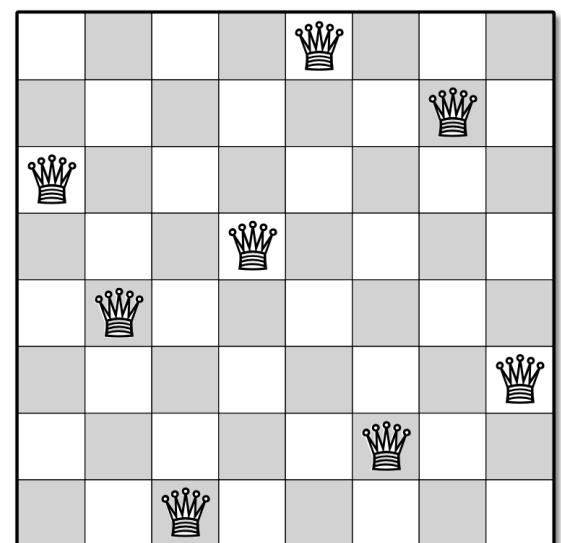
# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



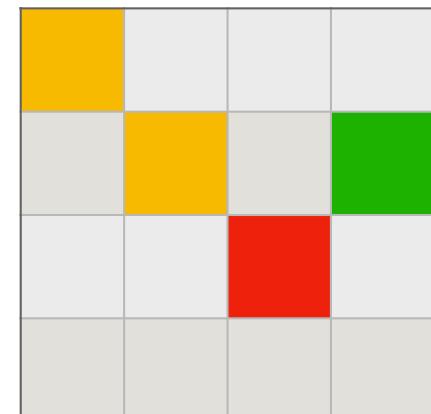
# $n$ 皇后

- 如何将 $n$ 个皇后放置在一个 $n \times n$ 的棋盘上，使得任意两个皇后都不在同一行或同一列或同一对角线上
- 穷举法 (8皇后)
  - 没有2个在皇后在同一位置： $\binom{64}{8} = 4426165368$
  - 没有2个皇后在同一行： $8^8 = 16777216$
  - 没有2个皇后在同一行或同一列： $8! = 40320$
- 回溯
  - 8皇后：2057次递归调用
  - 4皇后：17次递归调用



# 回溯法求解n皇后

- $n$ 皇后的一个解可以看成一个长度为 $n$ 的决策序列
  - 第*i*步决定将第*i*个皇后放在第*i*行的那一列上
    - 第*i*步的候选方案取决于前*i* - 1步的决策 $A[1..i - 1]$ 
      - $A[j]$ 表示第*j*个皇后所在的列数 (其所在行数是*j*)
      - 对于列*c*, 如果存在一个皇后*j*,  $1 \leq j \leq i - 1$ , 使得 $A[j] = c$ 或 $|A[j] - c| = |j - i|$ , 那么它不是候选方案
    - 每个长度为 $n$ 的决策序列对应一个解

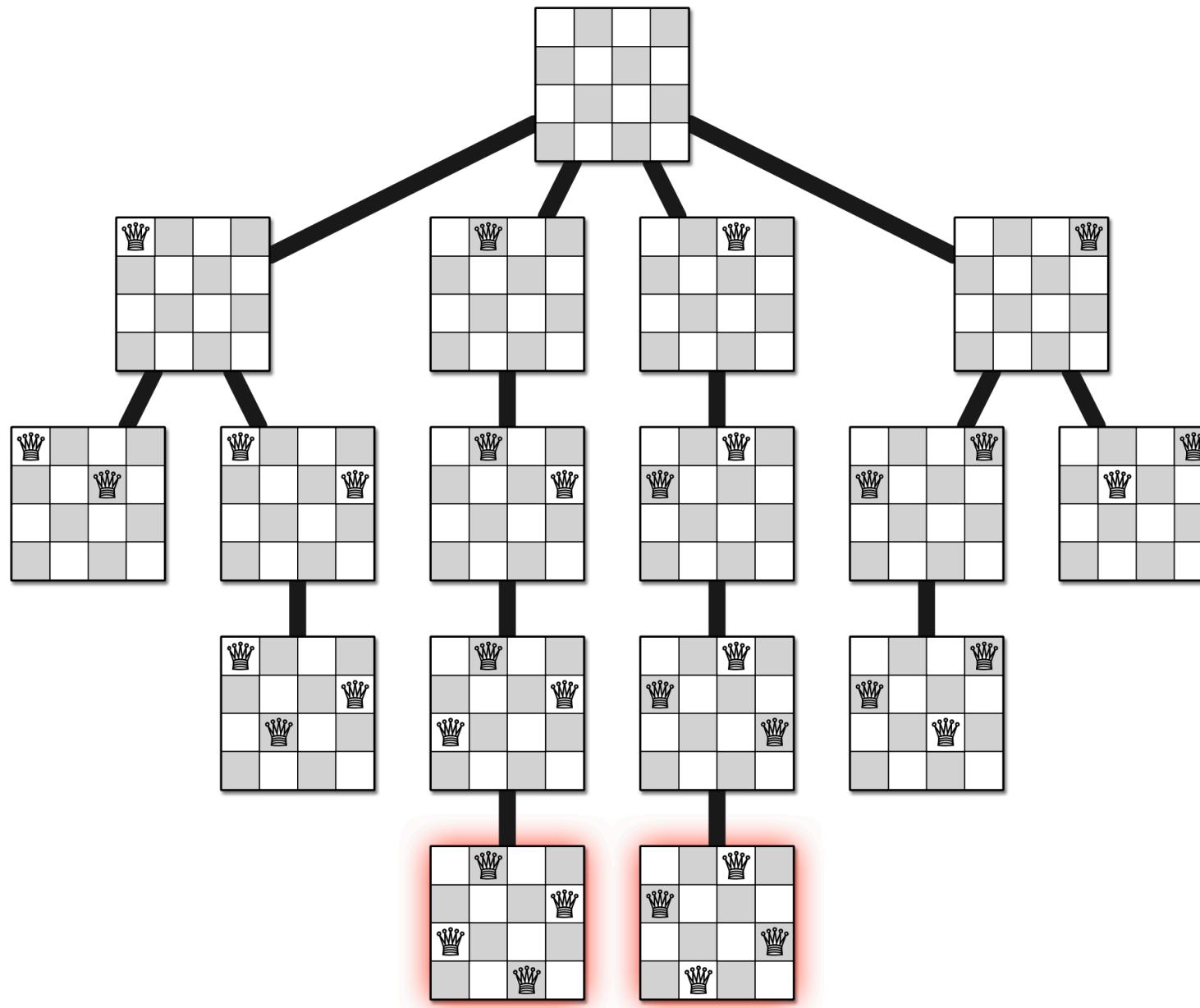


# 算法实现

```
def place_queens(i):
    if i > n:
        print(A[1:])
    else:
        for c in range(1, n + 1):
            legal = True
            for j in range(1, i):
                if A[j] == c or abs(A[j] - c) == abs(j - i):
                    legal = False
            if legal:
                A[i] = c
                place_queens(i + 1)

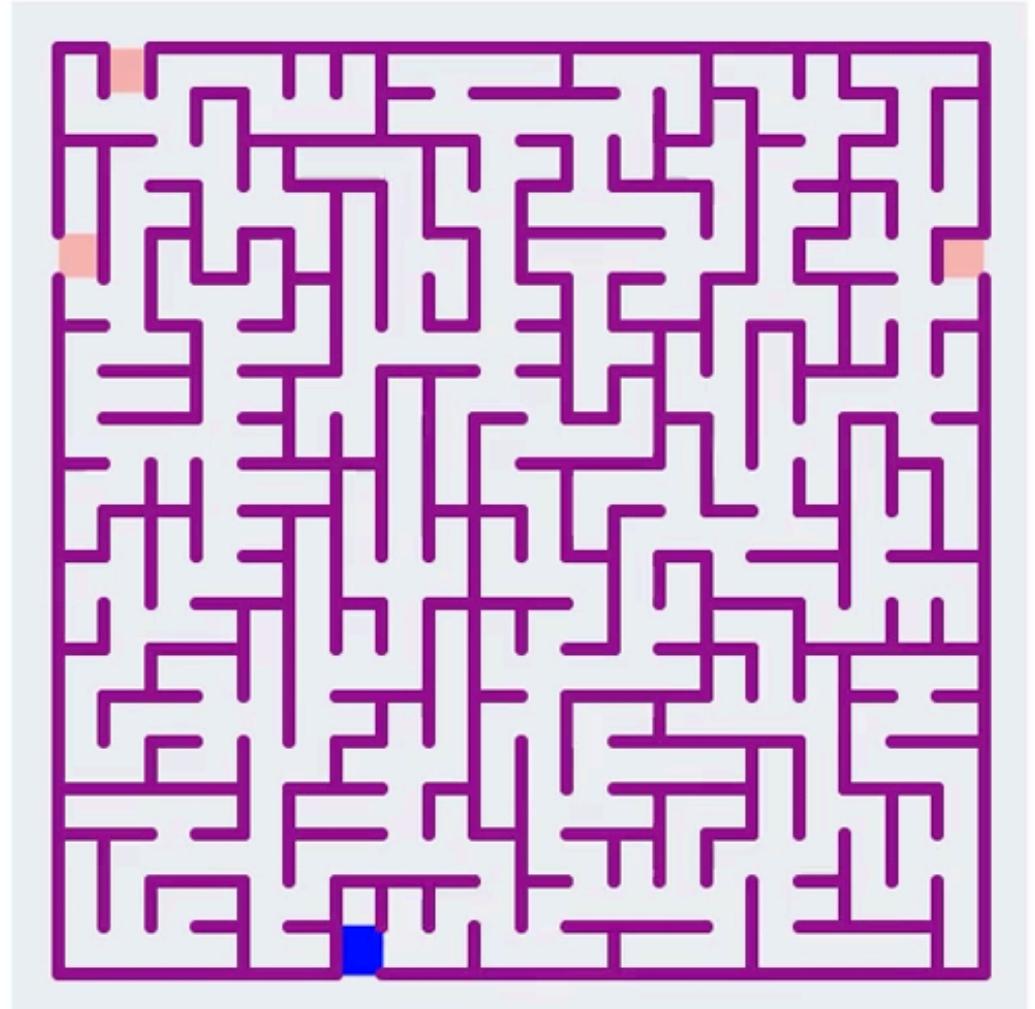
n = 8
A = [None] * (n + 1)
place_queens(1)
```

# 4皇后问题的递归树



# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 子集和

- 令 $X$ 是一个包含 $n$ 个正整数的集合， $t$ 是一个正整数
- 是否存在 $X$ 的一个子集 $Y$ ，其中所有元素的和等于 $t$ 
  - 如果存在，返回True；否则返回False
  - 比如 $X = \{8,6,7,5,3,10,9\}$ ,  $t = 15$ 时，返回True
    - 集合 $\{8,7\}$ ,  $\{7,5,3\}$ ,  $\{6,9\}$ ,  $\{10,5\}$ 都满足条件
    - 比如 $X = \{11,6,5,1,7,13,12\}$ ,  $t = 15$ 时，返回False
- 假设存在子集 $Y$ ，其中所有元素的和等于 $t$ ，对于 $\forall y \in Y$ 
  - $Y \setminus \{y\}$ 必然有一个子集，其中所有元素的和等于 $t - y$

# 回溯法求解子集和

- 子集和的一个解可以看成一个长度不超过 $n$ 的决策序列
- 第1步： $X[1..n]$ 中是否存在一个子集，其所有元素的和等于 $t$
- 第 $i$ 步： $X[i..n]$ 中是否存在一个子集，其所有元素的和等于 $d$ 
  - 决定是否将元素 $X[i]$ 放入子集 $Y$ （只有如下两种方案，与之前的决策无关）
    - 不放： $X[i + 1..n]$ 中是否存在一个子集，其所有元素的和等于 $d$
    - 放： $X[i + 1..n]$ 中是否存在一个子集，其所有元素的和等于 $d - X[i]$
  - 如何判断 $A[1..i - 1]$ 是否是一个解
    - $d = 0$ ：是一个解，因为 $\emptyset$ 是 $X[i..n]$ 的一个子集，其所有元素的和等于0
    - $d < 0$ ：不是一个解，且没有必要扩展（考虑是否放入 $X[i]$ ）
    - $d > 0$ 
      - 如果 $i > n$ ，当前决策序列不是一个解
      - 否则，考虑是否将元素 $X[i]$ 放入子集 $Y$

# 算法实现

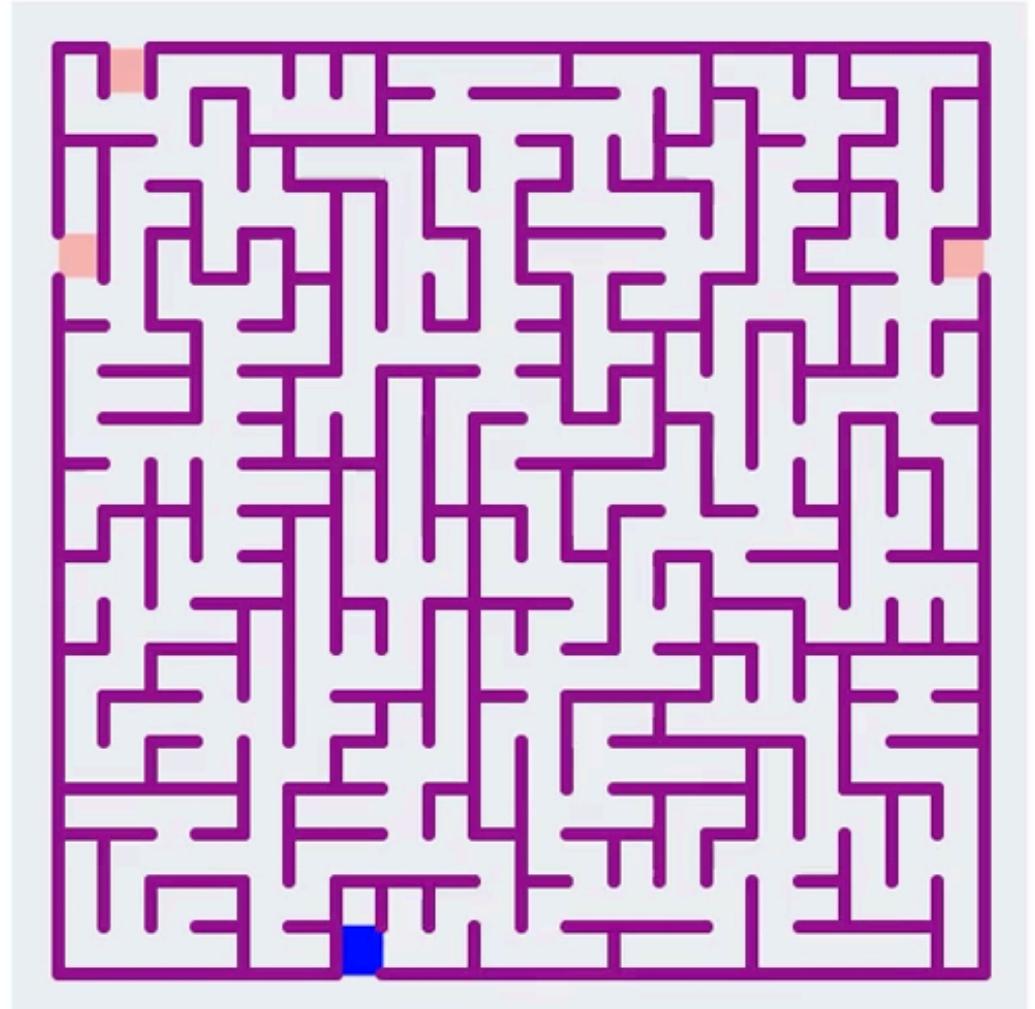
```
def generate_subset_sum(i, d):
    if d == 0:
        print(A[1:i])
    elif d > 0:
        if i <= n:
            for c in range(2):
                A[i] = c
                if c == 0: #skip
                    generate_subset_sum(i+1, d)
                else: #take
                    generate_subset_sum(i+1, d-X[i])

X = [None, 8, 6, 7, 5, 3, 10, 9]
t = 15
A = [None] * len(X)
n = len(X) - 1
generate_subset_sum(1, t)
```

$$T(n) = 2T(n - 1) + O(1) \Rightarrow T(n) = O(2^n)$$

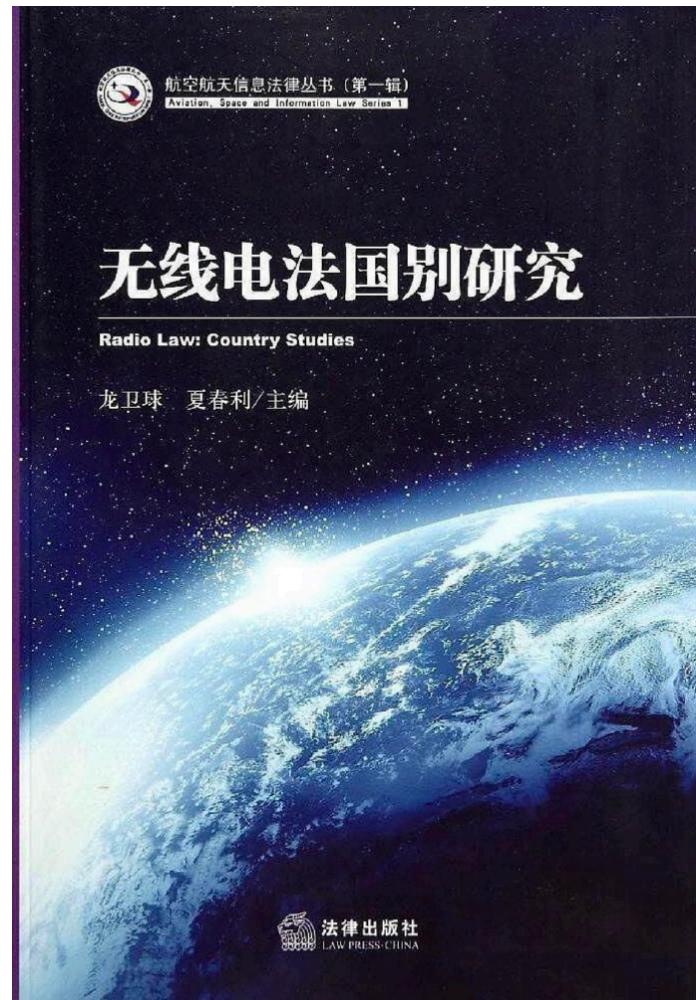
# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 文本分割

- 给定一串字符，能否将其分割成若干单词？
- 比如：无线电法国别研究
  - 无线电 + 法国 + 别 + 研究
  - 无线电 + 法 + 国别 + 研究



# 文本分割

- 辅助函数 $\text{is\_word}(w)$ 
  - 输入： $w$ 是一个字符串
  - 输出：如果 $w$ 是一个单词，返回True，否则返回False
  - 如果定义回文串是单词
    - $\text{is\_word}(\text{refer})$ 返回True,  $\text{is\_word}(\text{bad})$ 返回False
  - 如果定义质数是单词
    - $\text{is\_word}(31)$ 返回True,  $\text{is\_word}(314)$ 返回False
- 问题：31415926535能否分割成一个质数单词序列？



# 回溯法求解文本分割

- 文本分割的一个解可以看成一个长度不超过 $n$ 的决策序列
- 第1步确定第1个单词 $w_1$ 
  - 候选方案： $\{s[1..j] \mid is\_word(s[1..j]) = True, 1 \leq j \leq n\}$
- 第*i*步确定第*i*个单词 $w_i$ 
  - $w_i$ 的起始位置取决于第*i* - 1步确定的单词 $w_{i-1}$ 的结束位置
    - 将 $w_i$ 的结束位置放入决策数组 $A[i]$
  - 候选方案： $\{s[A[i-1]+1..j] \mid is\_word(s[A[i-1]+1..j]) = True, A[i-1]+1 \leq j \leq n\}$
- 如何判断 $A[1..i-1]$ 是否是一个解
  - $A[i-1] = n$ ：单词 $w_{i-1}$ 已经包含最后一个字符，找到一个解
  - 否则，确定第*i*个单词 $w_i$

# 算法实现

```
def generate_segmentation(i):
    if A[i-1] == n:
        print(A[1:i])
    else:
        for c in range(A[i-1]+1, n+1):
            if is_word(s[A[i-1]+1 : c+1]):
                A[i] = c
                generate_segmentation(i+1)
```

```
s = '31415926535'
n = len(s) - 1
A = [0] * n
generate_segmentation(1)
```

- $T(n)$  : 算法`generate_segmentation(n)`中函数`is_word`的调用次数

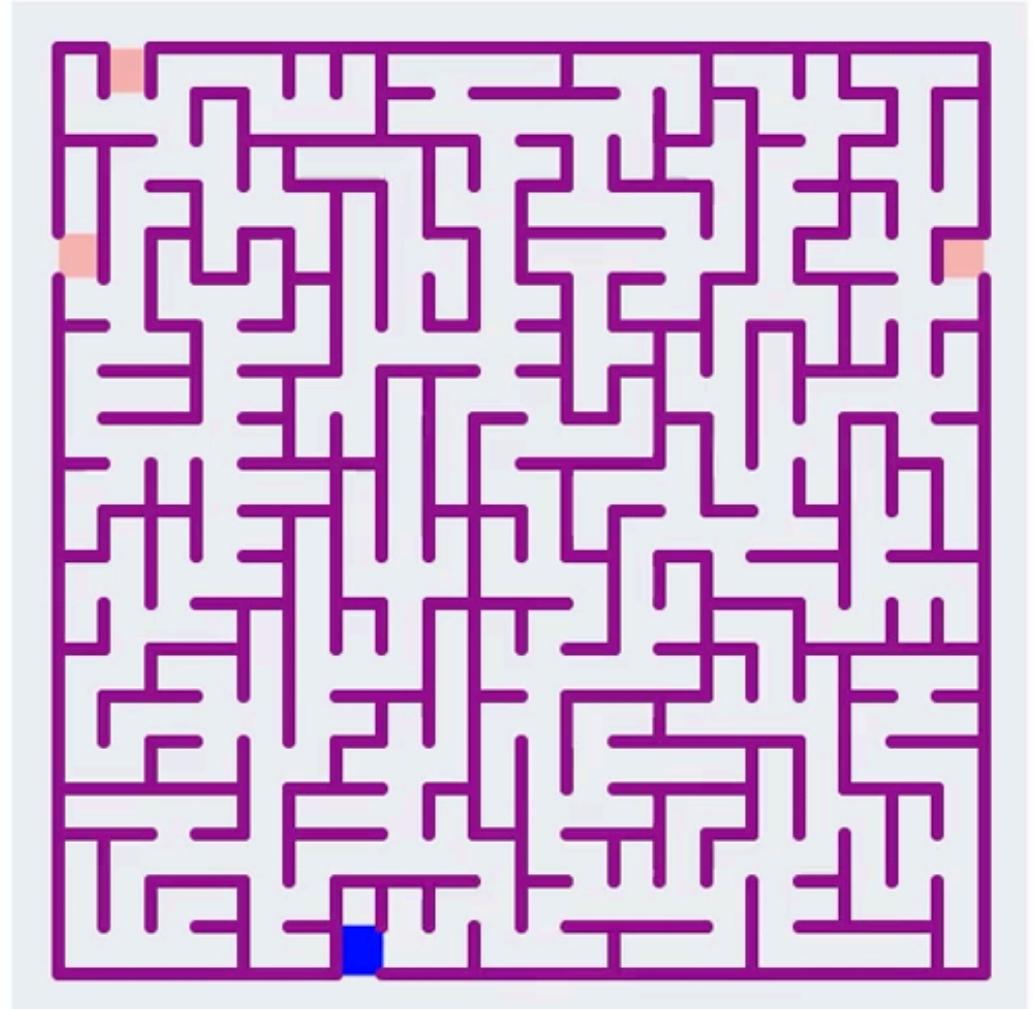
$$T(n) \leq \sum_{i=0}^{n-1} T(i) + n$$

- 假设对于任意的*i*和*j*, `is_word(i, j)`均返回True

$$\left. \begin{array}{l} T(n) = \sum_{i=0}^{n-1} T(i) + n \\ T(n-1) = \sum_{i=0}^{n-2} T(i) + (n-1) \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} T(n) - T(n-1) &= T(n-1) + 1 \\ \Rightarrow T(n) &= 2T(n-1) + 1 \Rightarrow T(n) = O(2^n) \end{aligned}$$

# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 最长递增子序列

- 子序列：对于任意序列S，它的子序列是通过删除其中零个或多个元素得到的另一个序列（注意：剩余元素的顺序并不改变）
  - backtracking的子序列包括：bring, tracking, 空串, backtracking
- 子串：如果一个子序列的所有元素在原始串中是连续的，那么它就是一个子串，比如tracking
- 给定一个整数序列，找出其中最长的递增子序列



# 回溯法求解最长递增子序列

- 最长递增子序列的一个解可以看成一个长度为 $n$ 的决策序列
- 第*i*步：决定是否将元素 $X[i]$ 放入子序列
  - 不放， $A[i] = 0$ ：始终可行的决策，和之前的决策无关
  - 放， $A[i] = 1$ ：该决策是否可行取决于最后一个放入子序列的元素 $t$ ，如果 $X[i] > t$ ，可以放入，并更新 $t$ 的值
    - 令 $t$ 的初始值为 $-\infty$ ，便于第1步处理
- 如何判断 $A[1..i - 1]$ 是否是一个解
  - 当 $i > n$ 时，找到一个新的无法扩展的递增子序列，如果其长度大于之前找到的递增子序列，更新目前找到的解

# 算法实现

```
def generate_lis(i, t, l): # l: length of current increasing list
    global m #length of longest increasing list so far
    if i > n:
        if l > m: # find a new longer increasing list
            sol.clear()
            sol.add(tuple(A[1:]))
            m = l
    elif l == m: # find another list that is longest so far
        sol.add(tuple(A[1:]))
    else:
        for c in range(2): #
            if c == 0: # skip
                A[i] = 0
                generate_lis(i+1, t, l)
            else: # want to take
                if X[i] > t:
                    A[i] = 1
                    generate_lis(i+1, X[i], l+1)

X = [None, 3, 1, 4, 1, 5, 9, 2, 6, 5, 3, 5, 8]
A = [None] * len(X)
n = len(X) - 1
m = 0
sol = set()
generate_lis(1, float('-inf'), 0)
print(sol)
```

# 另一种决策方案

- 最长递增子序列的一个解可以看成一个长度不超过 $n$ 的决策序列
- 第*i*步：决定选择哪个元素放入子序列的第*i*个位置
  - 取决于最后一个放入子序列的元素 $X[j]$
  - 候选方案： $\{X[k] \mid k > j \text{ and } X[k] > X[j]\}$
  - 记录所选元素的索引 $k$ ： $A[i] = k$
  - 候选方案可能为空，意味着目前的子序列已经不能再扩展，决策序列到此结束
    - $X$ 的最后一个元素已经放入子序列
    - 剩余元素均小于 $X[j]$

# 算法实现

```
def generate_lis_1(i):
    global m
    candidates = [c for c in range(A[i-1]+1, n+1) if X[c] > X[A[i-1]]]
    if not candidates:
        if i-1 > m: #i-1 is the length of current increasing list
            sol.clear()
            sol.add(tuple(A[1:i]))
            m = i-1
    elif i-1 == m:
        sol.add(tuple(A[1:i]))
    else:
        for c in candidates:
            A[i] = c
            generate_lis_1(i+1)

X = [float('-inf'), 3, 1, 4, 1, 5, 9, 2, 6, 5, 3, 5]
A = [0] * len(X)
n = len(X) - 1
m = 0
sol = set()
generate_lis_1(1)
print(sol)
```

# 两种回溯算法的效率比较

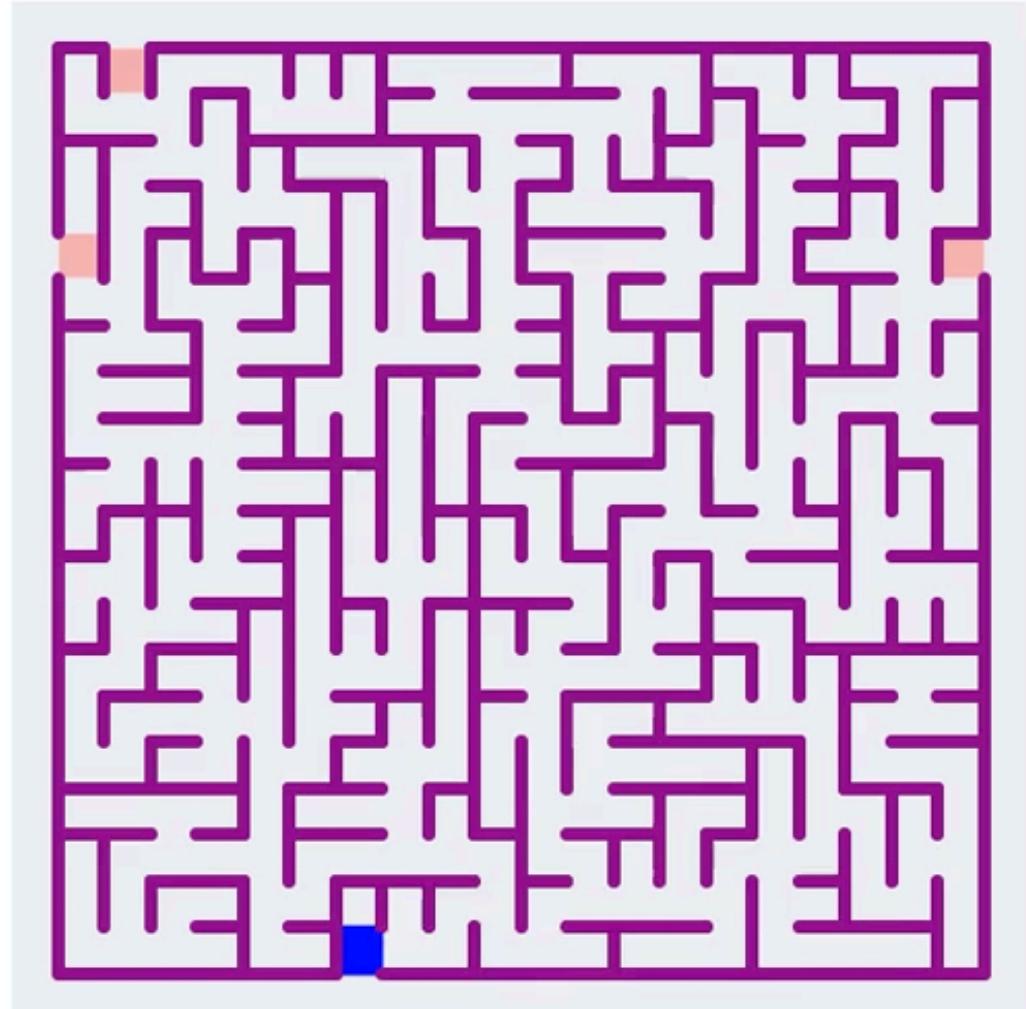
算法	generate_lis()	generate_lis_1()
策略	第 <i>i</i> 步决定是否将元素X[i]放入子序列	第 <i>i</i> 步决定选择哪个元素放入子序列的第 <i>i</i> 个位置
候选方案数量	O(1)	O( <i>n</i> )
递归调用次数	多	少

两种算法递归调用次数的比较

	generate_lis()	generate_lis_1()	
[3, 1, 4, 1, 5, 9, 2, 6, 5, 3, 5, 8]	488	146	30%
[100, 99, ..., 2, 1]	5151	101	2%
大小为30的随机列表	第1次实验	16474	2797
	第2次实验	11792	2045
	第3次实验	17658	3594
	第4次实验	12954	2019
	第5次实验	30256	4785

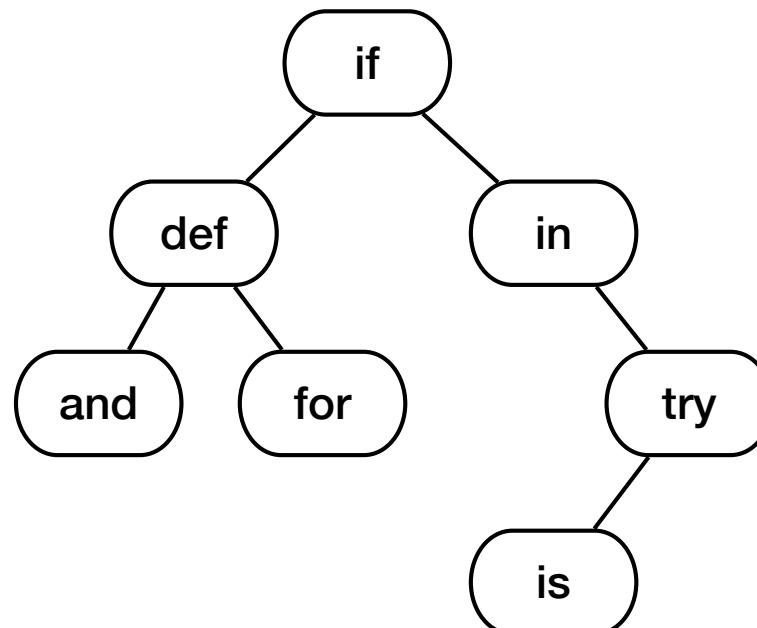
# 回溯

- 构造所有子集
- 构造所有排列
- 构造所有路径
- $n$ 皇后
- 子集和
- 文本分割
- 最长递增子序列
- 最优二叉搜索树



# 二叉搜索树

- 二叉搜索树是指一棵空树或者具有下列性质的二叉树
  - 若左子树不空，则其所有节点的值均小于根节点的值
  - 若右子树不空，则其所有节点的值均大于根节点的值
  - 左子树和右子树都是二叉搜索树

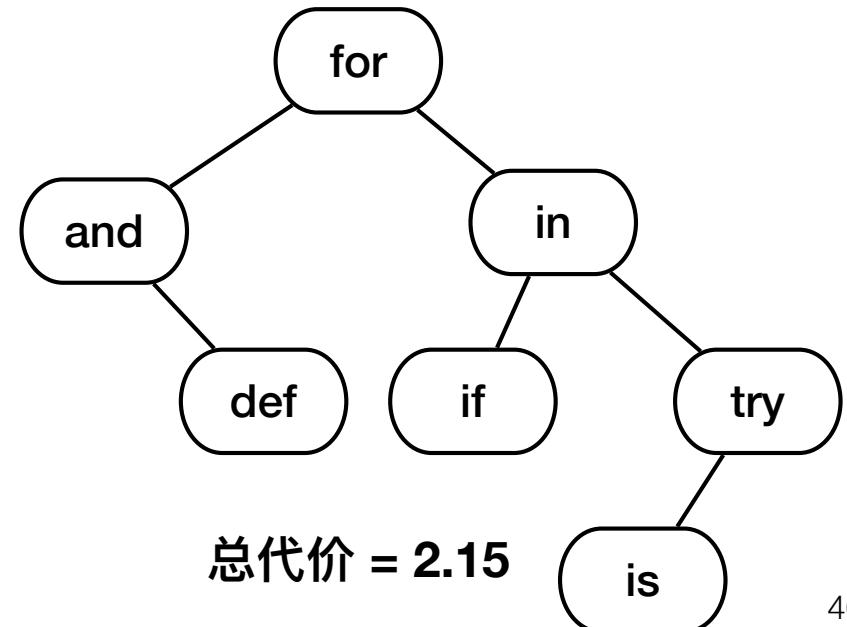
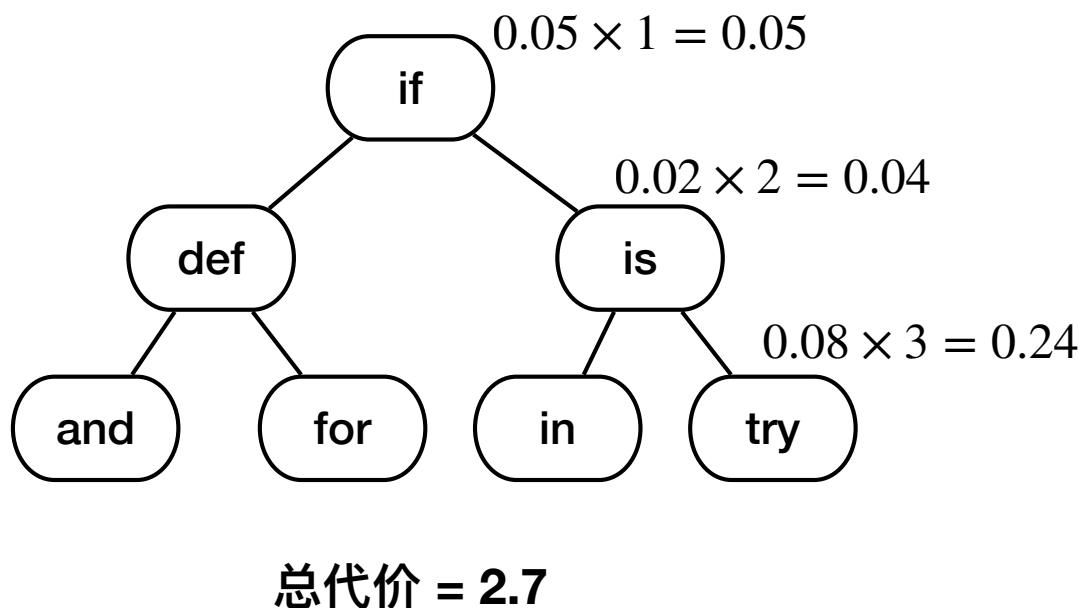


# 最优二叉搜索树

- 给定  $n$  个节点  $v_1, \dots, v_n$ , 它们具有不同的搜索概率 :  $f[1..n]$

and	def	for	if	in	is	try
0.22	0.18	0.20	0.05	0.25	0.02	0.08

- 节点  $v_i$  的搜索代价  $c(v_i) = d(v_i) + 1$
- 二叉搜索树  $T$  的总搜索代价  $\text{Cost}(T, f[1..n]) = \sum_{i=1}^n f[i] \cdot c(v_i)$

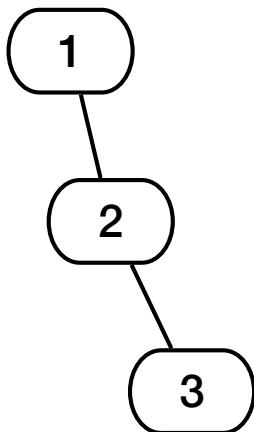


# 构造所有二叉搜索树

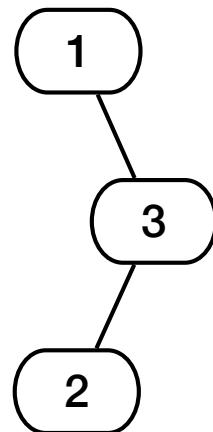
- 一棵二叉搜索树可以看成一个长度为 $n$ 的决策序列
- 第1步：从 $V[1..n]$ 中选择一个节点 $v_k$ 作为根节点，其左子树的节点集合是 $V[1..k - 1]$ ，右子树的节点集合是 $V[k + 1..n]$ 
  - 显然有 $n$ 种候选方案
- 第 $i$ 步：从 $V[i..j]$ 中选择一个节点
- 回溯 + 分治
  - 问题：给定 $n$ 个节点 $V[1..n]$ ，构造所有的二叉搜索树
  - 分解：从 $V[1..n]$ 中选择一个节点 $v_k$ 作为根节点，其左子树的节点集合是 $V[1..k - 1]$ ，右子树的节点集合是 $V[k + 1..n]$
  - 解决：递归求解 $V[1..k - 1]$ 可以构造的二叉搜索树 $L$ 以及 $V[k + 1..n]$ 可以构造的二叉搜索树 $R$
  - 合并： $v_k + L$ 中的每一棵树  $\times R$  中的每一棵树

# 算法实现

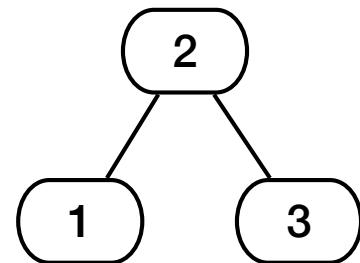
```
def generate_bst(low, high):
    if low > high:
        return [[]] #an empty tree
    elif low == high:
        return [[low]] #a tree with only one node
    else:
        bst = []
        for c in range(low, high + 1):
            L = generate_bst(low, c-1)
            R = generate_bst(c+1, high)
            ts = [[c, l, r] for l in L for r in R]
            bst.extend(ts)
    return bst # a list of all possible trees
```



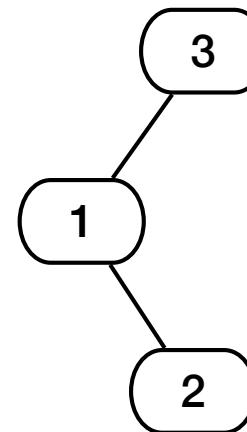
[1, [ ], [2, [ ], [3]]]



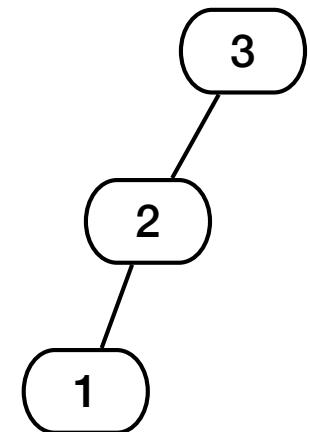
[1, [ ], [3, [2], [ ]]]



[2, [1], [3]]



[3, [1, [ ], [2]], [ ]]



[3, [2, [1], [ ]], [ ]]

# 最优二叉搜索树

- 通过回溯+分治构造出所有的二叉搜索树
- 遍历求出最优二叉搜索树
- 时间复杂度取决于具有 $n$ 个节点的二叉搜索树的数量
- $T_0 = 0, T_1 = 1, T_2 = 2, T_3 = 5$

$$T_n = \sum_{1 \leq k \leq n} T_{k-1} T_{n-k}$$

$$\Rightarrow T_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n} \quad \xleftarrow{\text{Catalan数}}$$