

**Дополнительные материалы к статье К. Гобунова, В. Любецкого**  
**«Быстрый алгоритм построения супердерева видов**  
**по набору белковых деревьев»**

**1. Описание подготовительного этапа к основному алгоритму.** При решении задачи Б нам потребуется для каждого дерева генов  $G_i$  и всех множеств  $V$  из  $P$  построить множество  $Ed(V, G_i)$ . При данном множестве  $V$  и дереве генов  $G_i$  множество  $Ed(V, G_i)$  можно построить с помощью следующего тривиального подготовительного этапа.

Подготовительный этап (при заданном наборе  $P$ ) включает: (1) построение для каждой вершины каждого дерева генов вектора из нулей и единиц длины  $|V_0|$ , представляющего кладу, заданную этой вершиной; таким образом, каждое множество из  $P$  представляется вектором из нулей и единиц длины  $|V_0|$ ; здесь же для каждого множества из  $P$  определяется число элементов в нем; (2) построение для каждой пары множеств (т.е. пары векторов) из  $P$  пометок, указывающих включено ли первое из них во второе, а также – пересекаются ли они; (3) построение множеств  $Ed(V, G_i)$  для всех множеств  $V \in P$  и деревьев  $G_i$  и определение их мощности,  $i = 1, \dots, n$ ; (4) для каждого множества из  $P$  построение списка всех его разбиений на два множества из  $P$ .

А именно, (1) построение векторов выполняется индукцией от корней деревьев к листьям; напомним: мы считаем, что среднее число листьев в дереве генов имеет порядок  $|V_0|$ , поэтому общее количество вершин, которые нужно просмотреть, порядка  $|V_0| \cdot n$ , время обработки одной вершины порядка  $|V_0|$ ; этот шаг требует времени порядка  $|V_0|^2 \cdot n$ . (2) Отношения включения и пересечения всех пар множеств из  $P$  строятся за время порядка  $|P|^2 \cdot |V_0|$ . (3) Построение множеств  $Ed(V, G_i)$  при данном множестве  $V$  для всех деревьев генов  $G_i$  выполняется обходом ребер каждого  $G_i$  в глубину. Если для очередного ребра  $e$  выполняется  $M_e \subseteq V$ , то зачисляем  $e$  в  $Ed(V, G_i)$  и переходим к первому (в смысле этого обхода) ребру  $e_1$ , для которого  $e_1$  следует после  $e$  при этом обходе и  $e_1$  несравнимо с  $e$  в смысле порядка  $<$ . Такой обход требует времени порядка  $|V_0| \cdot n$ , так как информация о включении  $M_e \subseteq V$  уже получена на шаге (2). Тем самым, общее время построения всех множеств  $Ed(V, G_i)$  для всех множеств  $V$  из  $P$  порядка  $|P| \cdot |V_0| \cdot n$ . (4) Разбиения всех множеств  $V$  из  $P$  на два множества из  $P$  можно построить за время порядка  $|P|^3$ , что для стандартного набора не превышает  $Cn^3 \cdot |V_0|^3$ . А именно, для каждой тройки множеств  $V_1, V_2, V$  из  $P$  нужно проверить, что  $V_1$  и  $V_2$  не пересекаются,  $V_1, V_2$  – подмножества  $V$  и  $|V_1| + |V_2| =$

$|V|$ . Для хранения всех разбиений всех множеств из  $P$  нужна память порядка  $|P|^2$ , так как для одного множества имеется не более  $|P|$  разбиений.

Таким образом для выполнения подготовительного этапа требуется время порядка  $|V_0|^2 \cdot n + |P|^2 \cdot |V_0| + |P| \cdot |V_0| \cdot n + |P|^3$ , что для стандартного набора не превышает  $Cn^3 \cdot |V_0|^3$ . Память, необходимая для хранения всех векторов, отношений и разбиений, множеств  $Ed(V, G_i)$  имеет порядок  $|P| \cdot |V_0| + |P|^2$ , что для стандартного набора не превышает  $Cn^2 \cdot |V_0|^2$ .

**2. Схема алгоритма построения базисных деревьев (основного алгоритма).** Подробно алгоритм изложен, как и его обоснование, в [6]. Здесь приведем его общий план.

На подготовительном этапе для каждого дерева генов  $G_i$  и всех множеств  $V$  из  $P$  и каждого множества  $V$  из  $P$  строится множество  $Ed(V, G_i)$ . Затем для каждого множества  $V$  вычисляются все его разбиения в  $P$ . Затем, как указано ниже, методом динамического программирования выделяются базисные множества  $V$  из  $P$  и для каждого базисного множества  $V$  по индукции определяется его *цена*  $c(V)$  и минимальное разбиение  $V$  на два множества из набора  $P$ . Это разбиение для каждого базисного множества  $V$  задает дерево  $S(V)$ , которое мы будем называть *базисным* деревом множества  $V$ . Вершины дерева  $S(V)$  соответствуют множествам из набора  $P$ , корень соответствует множеству  $V$ . Множество видов в листьях базисного дерева  $S(V)$  совпадает с множеством  $V$  и все клады  $S(V)$  принадлежат набору  $P$ . Если множество  $V_0$  не является базисным, то задача Б, очевидно, не имеет решения. В противном случае дерево  $S(V_0)$  является решением этой задачи. Одновременно строится сценарий для всех деревьев генов  $G_i$  и дерева видов  $S(V_0)$ .

Будем называть поддерево  $T$  дерева генов  $G$  *согласованным* с множеством видов  $V$ , если (1) множество видов в листьях  $T$  – подмножество в  $V$  и (2) никакое наддерево дерева  $T$  в дереве генов  $G$  не обладает свойством (1). Говоря неформально, суперкорни всех под-деревьев деревьев  $G_i$ , согласованных с  $V$ , при искомом вложении будут отображаться в корневую трубу  $S(V)$ , а  $c(V)$  – суммарная цена этих вложений. Одновременно с вычислением цены будут вычисляться дополнительные данные, которые позволят восстановить сами вложения (см. пример ниже).

Итак, опишем индукцию, по которой обрабатываются множества из набора  $P$ .

Начальный шаг – одноэлементные множества  $V$  из  $P$ . В этом случае, по определению,  $c(V)=0$  и соответствующее *базисное* дерево  $S(V)$  состоит из одного листа.

Пусть  $V$  – множество из  $P$ , причем все множества меньшего размера уже обработаны. Опишем, в чем состоит обработка пары  $(V_1, V_2)$ , которая образует разбиение множества  $V$  (если ни одной такой пары не найдено, то множество  $V$  помечается, как не базисное и его обработка заканчивается). По индукционному предположению, уже известны цены  $c(V_1)$ ,  $c(V_2)$  и деревья  $S(V_1)$ ,  $S(V_2)$ .

В произвольном порядке переберем все деревья  $G_i$ . В текущем  $G_i$  переберем все вершины и определим число  $k(V, V_1, V_2, G_i)$  вершин в  $G_i$ , для которых ребро одного сына принадлежит  $Ed(V_1, G_i)$ , а ребро другого сына принадлежит  $Ed(V_2, G_i)$ . Положим

$$l(V, V_1, V_2, G_i) = |Ed(V_1, G_i)| + |Ed(V_2, G_i)| - 2k(V, V_1, V_2, G_i)$$

и

$$d(V, V_1, V_2, G_i) = |Ed(V_1, G_i)| + |Ed(V_2, G_i)| - |Ed(V, G_i)| - k(V, V_1, V_2, G_i).$$

Напомним: мощности всех множеств  $Ed(V, G_i)$  определены на подготовительном этапе.

Найдем разбиение  $V$  на  $V_1^*$  и  $V_2^*$ , для которого величина

$$c(V, V_1, V_2) = \sum_i [c_i \cdot l(V, V_1, V_2, G_i) + c_d \cdot d(V, V_1, V_2, G_i)] + c(V_1) + c(V_2) \quad (2)$$

достигает минимума по всем разбиениям  $V$  на различные базисные множества  $V_1$  и  $V_2$ . Тогда по определению  $c(V)$  – значение величины (2) на минимальном разбиении  $\langle V_1^*, V_2^* \rangle$ . После этого базисное дерево  $S(V)$  получается добавлением корня к базисным деревьям  $S(V_1^*)$  и  $S(V_2^*)$ ; корень соответствует  $V$ , а его сыновья соответствуют  $V_1^*$  и  $V_2^*$ . Конец описания основного алгоритма. Строгое и довольно сложное обоснование формулы (2) приведено в [6]. Читатель может обратиться к этой работе или рассматривать основной алгоритм как эвристический.

Неформально поясним эту оценку сложности. Для каждого множества из  $P$  перебирается не более  $|P|$  вариантов его разбиения, а для каждого варианта просматриваются все вершины во всех деревьях генов, что соответствует времени порядка  $|P|^2 \cdot |V_0| \cdot n$ .

Построение отношений включения и пересечения множеств из  $P$  требует времени порядка  $|P|^2 \cdot |V_0|$ , построение множеств  $Ed(V, G_i)$  для всех  $V$  из  $P$  – времени порядка  $|V_0|^2 \cdot n + |P|^2 \cdot |V_0| + |P| \cdot |V_0| \cdot n$ ; построение всех разбиений множеств из  $P$  на две части из  $P$  – порядка  $|P|^3$ . Поэтому оценка времени работы основного алгоритма вместе с подготовительным этапом порядка  $|V_0|^2 \cdot n + |P|^2 \cdot |V_0| + |P| \cdot |V_0| \cdot n + |P|^3 + |P|^2 \cdot |V_0| \cdot n$ , что для стандартного набора не превышает  $Cn^3 \cdot |V_0|^3$ . Память, необходимая для хранения всех векторов, отношений и разбиений, множеств  $Ed(V, G_i)$  имеет порядок  $|P| \cdot |V_0| + |P|^2$ , что для стандартного набора не превышает  $Cn^2 \cdot |V_0|^2$ .

В заключение этого пункта приведем интуитивные соображения, которые лежат в основе формулы (2) и формализованы в [6]. Пусть фиксированы вложения  $f_i$  каждого  $G_i$  в некоторое дерево видов  $S$  с множеством листьев  $V_0$  и в  $S$  имеется поддереву  $S'$  с множеством листьев  $V$ . Местом дубликации  $g$  из  $G_i$  или видообразования  $g$  из  $G_i$  называется  $f_i(g)$ , если соответственно  $f_i(g)$  труба или вершина дерева видов. Местом потери  $\langle e, s \rangle$  назовем вершину  $s$ . Из Леммы 2а следует, что суммарная по всем деревьям генов стоимость  $c(V, S')$  дубликаций и потерь, имеющих место в поддереве  $S'$ , начиная с корневой трубы  $d$  поддерева, зависит только от  $S'$ . Действительно,  $c(V, S')$  определяется множеством  $\bigcup_i (\text{Ed}(V, G_i))$  и топологией поддерева  $S'$ . Корневая развилка  $S'$  задает разбиение множества  $V$  на множества  $V_1$  и  $V_2$ . Поскольку в алгоритме перебираются все возможные разбиения множества  $V$  на два множества из  $P$ , то достаточно показать, что формула (2) правильно подсчитывает минимальную стоимость  $c(V, S')$  по всем таким  $S'$ , что все клады в  $S'$  принадлежат  $P$  и в корневой развилке дерева  $S'$  происходит разбиение  $V$  на  $V_1$  и  $V_2$ . По индукции второе и третье слагаемые уже равны минимальным стоимостям для поддеревьев с множествами листьев  $V_1$  и соответственно  $V_2$ , начиная с выходящей из корневой развилки трубы  $d_1$  и соответственно  $d_2$ . Остается показать, что первое слагаемое равно суммарной стоимости дубликаций в корневой трубе  $d$  и потерь в корневой развилке  $r$  поддерева  $S'$ . Пусть в  $d$  суммарно по всем деревьям генов входят  $n$  ребер, а в трубу  $d_1$  – входят  $n_1$  ребер и в трубу  $d_2$  – входят  $n_2$  ребер. По Лемме 2 эти числа равны мощностям множеств  $\bigcup_i (\text{Ed}(V, G_i))$ ,  $\bigcup_i (\text{Ed}(V_1, G_i))$ ,  $\bigcup_i (\text{Ed}(V_2, G_i))$ . Число ребер в трубе  $d$  не может уменьшиться (так как потеря не может происходить в трубе), но их число может увеличиться за счет дубликаций. Все ребра из  $G_i$ , дошедшие до конца трубы  $d$ , проходят развилку  $r$  с разветвлением на два ребра из  $G_i$  (видообразование) или с сворачивая в одну из труб  $d_1$  или  $d_2$  с потерей копии на развилке (фактически копия теряется в смежной трубе). Таким образом,  $n \leq n_1 + n_2$  (см. также лемму 2b). Рассмотрим множество  $M$  тех вершины деревьев генов, которые отображаются при вложении в  $d$  или в  $r$ . Это те вершины, которые заключены между ребрами, входящими в  $d$ , и ребрами, входящими в  $d_1$  или  $d_2$ . Множество  $M$  распадается на непересекающиеся части, где каждая часть соответствует своему ребру, входящему в  $d$ , и образует дерево с листьями, соответствующими некоторым ребрам, входящим в  $d_1$  или  $d_2$ . Число внутренних вершин произвольного дерева равно уменьшенному на 1 числу листьев. Поэтому, в  $M$  ровно  $k = n_1 + n_2 - n$  вершин. Каждая из них – дубликация в трубе  $d$  или видообразование на развилке  $r$ . Поэтому сумма чисел дубликаций и видообразований равна  $k$ . Число видообразований найдем просмотром всех вершин во всех деревьях генов и подсчетом числа вершин, у которых одно сыновнее ребро входит в  $d_1$ , а другое в  $d_2$ : такие вершины – это в точности

видообразования в  $r$  согласно описанию минимального вложения в лемме 1. Вычтя из  $k$  это число, получим число дубликаций в трубе  $d$ . Наконец, число потерь в  $r$  равно  $n_1+n_2-2k$ , поскольку каждое из  $n_1+n_2$  входящих в  $d_1$  или  $d_2$  ребер составляло видообразование в паре с другим ребром или имело в  $r$  потерю. Можно также сказать, что каждое видообразование «охватывает» два ребра: одно входящее в  $d_1$ , другое – в  $d_2$ , а все «неохваченные» ребра соответствуют потерям. В соответствии с описанием алгоритма первое слагаемое в (2) действительно равно суммарной стоимости дубликаций в трубе  $d$  и потерь в корневой развилке  $r$ .

**3. Пример работы основного алгоритма.** Иллюстрируем работу основного алгоритма на искусственном примере, в котором даны десять деревьев генов  $G_i$ , показанных на рис. 3. Эти деревья подобраны так, чтобы было легко найти их супердерево  $S^*$ , которое показано на том же рисунке. Здесь  $V_0 = \{a,b,c,d,e\}$ . Пусть  $P$  – стандартный набор множеств видов, т.е. набор всех клад во всех показанных деревьях генов. Пусть цена потери равна 2, а цена дубликации равна 3. По формуле (2) рекурсивно вычислим цены всех множеств, входящих в набор  $P$ . Для одноэлементных множеств все цены по определению равны 0. Вычислим цены всех десяти двухэлементных множеств  $V$ , они входят в  $P$ . Результат для множества  $V = \{x,y\}$ , вычисленный по его единственному разбиению на  $V_1 = \{x\}$  и  $V_2 = \{y\}$ , приведен в таблице 1. Поясним ход вычислений. Рассмотрим два случая: текущее дерево  $G_i$  не содержит множество  $V$  как кладу или это не так. В обоих случаях имеем  $|Ed(V_1, G_i)| = |Ed(V_2, G_i)| = 1$ , но в первом случае  $|Ed(V, G_i)| = 2$ , а во втором  $|Ed(V, G_i)| = 1$ ; это проверяется по определению множества  $Ed(V, G_i)$  или по шагам алгоритма, приведенного выше для его вычисления. В первом случае в дереве  $G_i$  нет вершин, у которых одно сыновнее ребро принадлежит  $Ed(V_1, G_i)$ , а второе –  $Ed(V_2, G_i)$ , а во втором случае одна такая вершина имеется. Поэтому  $l(V, V_1, V_2, G_i)$  и  $d(V, V_1, V_2, G_i)$  в первом случае равны 2 и 0, а во втором случае равны 0 и 0. Эти  $l(V, V_1, V_2, G_i)$  и  $d(V, V_1, V_2, G_i)$  подставляем в формулу (2). В столбце  $t$  таблицы 1 для каждого множества  $V$  указано количество деревьев генов, которые не содержат кладу  $V$ . Отсюда получаем значение  $c(V)$ , указанное в этой таблице. В результате видим, что множества  $\{a,b\}$  и  $\{c,d\}$  имеют минимальную цену, для них  $c(V) = 24$ .

**Таблица 1.** В первом и четвертом столбцах после первой строки указаны значения  $x$  и  $y$ .

$V=\{x,y\}$	$t$	$c(V)$		$V=\{x,y\}$	$t$	$c(V)$
$a,b$	6	24		$b,d$	8	32
$c,d$	6	24		$a,e$	9	36
$a,c$	8	32		$b,e$	9	36
$a,d$	8	32		$c,e$	9	36
$b,c$	8	32		$d,e$	9	36

Разбиение множества  $V$ , совпадающее с разбиением в  $S^*$ , назовем *стандартным*, а остальные разбиения – *нестандартными*. Конечно, наш алгоритм не использует дерево  $S^*$ , а перебирает все разбиения.

После двухэлементных множеств из  $P$  нужно рассмотреть все трехэлементные множества из  $P$ . Сделаем это на примере множества  $V = \{c,d,e\}$ . Для него стандартным является разбиение на  $V_1 = \{c,d\}$  и  $V_2 = \{e\}$ . Вычислим на этом разбиении значение  $c(V, V_1, V_2)$  функционала (2). Для каждого дерева генов  $G_i$  имеет место один из четырех случаев: 1)  $\{c,d\}$  клада в  $G_i$ , а  $\{c,d,e\}$  не клада в  $G_i$ , таких деревьев генов два; 2)  $\{c,d,e\}$  клада в  $G_i$ , а  $\{c,d\}$  не клада в  $G_i$ , таких деревьев также два; 3)  $\{c,d\}$  и  $\{c,d,e\}$  не клады в  $G_i$ , таких деревьев четыре; 4)  $\{c,d\}$  и  $\{c,d,e\}$  клады в  $G_i$ , таких деревьев два.

В первом и четвертом случаях имеем  $|Ed(V_1, G_i)| = |Ed(V_2, G_i)| = 1$ , а во втором и третьем –  $|Ed(V_1, G_i)| = 2$ ,  $|Ed(V_2, G_i)| = 1$ . В первом случае  $|Ed(V, G_i)| = 2$ , во втором и четвертом –  $|Ed(V, G_i)| = 1$ , в третьем  $|Ed(V, G_i)| = 3$ . В первом и третьем случаях в дереве  $G_i$  не имеется вершин, у которых одно сыновнее ребро принадлежит  $Ed(V_1, G_i)$ , а второе –  $Ed(V_2, G_i)$ , а во втором и четвертом случаях имеется одна такая вершина. Поэтому  $l(V, V_1, V_2, G_i)$  и  $d(V, V_1, V_2, G_i)$  равны в первом случае 2 и 0, во втором случае 1 и 1, в третьем случае 3 и 0, а в четвертом случае 0 и 0. По формуле (2) для стандартного разбиения получаем:  $c(V, V_1, V_2) = 8 + 10 + 24 + 0 + c(\{c,d\}) + c(\{e\}) = 42 + 24 + 0 = 66$ , так как по индукции  $c(\{c,d\}) = 24$  и  $c(\{e\}) = 0$ .

Теперь рассмотрим в качестве примера нестандартное разбиение того же множества  $V=\{c,d,e\}$  на  $V_1 = \{c,e\}$  и  $V_2 = \{d\}$ , одно из двух симметричных разбиений. Вычислим значение  $c(V, V_1, V_2)$ . Снова для каждого дерева генов  $G_i$  имеет место один из четырех случаев: 1)  $\{c,d\}$  клада в  $G_i$ , а  $\{c,d,e\}$  не клада в  $G_i$ , таких деревьев два; 2)  $\{c,d,e\}$  клада в  $G_i$ , а  $\{c,e\}$  не клада в  $G_i$ , таких деревьев три; 3) никакое из трех множеств  $\{c,d\}$ ,  $\{c,e\}$ ,  $\{d,e\}$  не клада в  $G_i$ , таких деревьев четыре; 4)  $\{c,e\}$  и  $\{c,d,e\}$  клады в  $G_i$ , таких деревьев одно.

В первом, втором и третьем случаях имеем  $|Ed(V_1, G_i)| = 2$ ,  $|Ed(V_2, G_i)| = 1$ , а в четвертом  $|Ed(V_1, G_i)| = |Ed(V_2, G_i)| = 1$ . В первом случае  $|Ed(V, G_i)| = 2$ , во втором и четвертом  $|Ed(V, G_i)| = 1$ , в третьем  $|Ed(V, G_i)| = 3$ . В первом, втором и четвертом случаях в дереве  $G_i$  имеется одна вершина, у которой одно сыновнее ребро принадлежит  $Ed(V_1, G_i)$ , а второе –  $Ed(V_2, G_i)$ , а в третьем случае таких вершин нет. Поэтому  $l(V, V_1, V_2, G_i)$  и  $d(V, V_1, V_2, G_i)$  равны в первом случае 1 и 0, во втором случае 1 и 1, в третьем случае 3 и 0 и в четвертом случае 0 и 0.

По формуле (2) для этого нестандартного разбиения получаем:  $c(V, V_1, V_2) = 4 + 15 + 24 + 0 + c(\{c, e\}) + c(\{d\}) = 43 + 36 + 0 = 79$ , так как по индукции имели  $c(\{c, e\}) = 36$  и  $c(\{d\}) = 0$ . Второе нестандартное разбиение имеет ту же цену, поэтому заключаем, что разобраны все случаи разбиения  $V$  на две части из  $P$  и выбираем разбиение с наименьшим значением (равным 66) функционала (2), в данном случае это – стандартное разбиение. Поэтому дерево  $S(\{c, d, e\})$  совпадает с поддеревом в  $S^*$ .

Аналогично, вычисляется значение  $c(V_0, V_1, V_2)$  для множества  $V_0 = \{a, b, c, d, e\}$  всех видов и его стандартного разбиения на  $V_1 = \{a, b\}$  и  $V_2 = \{c, d, e\}$  (оно равно 128) и для его нестандартных разбиений (среди них наименьшее значение равно 143). В итоге алгоритм выдает дерево  $S(V_0)$  с ценой 128, которое совпадет с деревом  $S^*$ .

**4. Вспомогательный алгоритм.** Для задачи А2 наш алгоритм предлагает лишь эвристическое решение. А именно, в качестве супердерева он выдает *результат  $S'$  применения к набору  $\{S(V): V - \text{базисное множество}\}$  описанного чуть ниже вспомогательного алгоритма.* Его роль – согласовать набор  $S(V)$  в единое дерево  $S'$ . Неверно, что в  $S'$  все клады принадлежат  $P$ , поэтому  $S'$  не обязательно является решением задачи Б, также мы не можем доказать, что  $S'$  является решением задачи А2. Компьютерный анализ показал, что возможны оба случая  $S' = S(V_0)$  и  $S' \neq S(V_0)$ , во втором случае биологически предпочтительным представляется дерево  $S'$ .

Вспомогательный алгоритм: склейка базисных деревьев  $S(V)$  в единое дерево  $S'$ . Известны разные эвристические алгоритмы, основанные на идее склейки заданного набора деревьев в единое дерево, например, алгоритм из [12] (там же приведены дальнейшие ссылки). В [12] отсутствуют какие-либо оценки сложности алгоритма, но не вызывает сомнения, что он работает экспоненциально долго. Для эффективности алгоритмов склейки важно, чтобы склеиваемые деревья были согласованы между собой, например, в смысле указанном в Теореме 1b, что имеет место для набора базисных деревьев. Итак, вспомогательный алгоритм состоит в

следующем. Определим цену произвольного дерева видов  $S$  с множеством  $V$  листьев относительно произвольного дерева генов  $G$  как цену вложения в  $S$  дерева генов  $G'$ , полученного из  $G$  обрезанием всех листьев, соответствующих видам, не принадлежащим  $V$ ; точнее, обрезаются поддеревья, все листья которых не принадлежат  $V$ . Цену произвольного дерева видов  $S$  определим как сумму цен дерева  $S$  относительно всех деревьев из  $\{S(V): V - \text{базисное множество}\}$ .

Начальный шаг в алгоритме склейки базисных деревьев. Перебором найдем дерево с тремя видами, у которого цена минимальная. Это дерево возьмем в качестве исходного  $S$ .

Индуктивный шаг в алгоритме склейки базисных деревьев. Перебираем всевозможные пары  $\langle s, e \rangle$ , где  $s$  – вид, не присутствующий в уже построенном дереве  $S$ , а  $e$  – ребро в  $S$ , включая корневое. Для каждой пары  $\langle s, e \rangle$  присоединяем к  $S$  новое ребро, соединяющее середину ребра  $e$  с видом  $s$  в качестве листа. Вычисляем цену полученного дерева  $S(\langle s, e \rangle)$  и выбираем пару  $\langle s', e' \rangle$ , для которой она минимальная. После этого расширяем дерево  $S$  до дерева  $S(\langle s', e' \rangle)$ , т.е. новое  $S$  становится равным  $S(\langle s', e' \rangle)$ . И так далее до исчерпания всех видов, в результате получаем дерево  $S'$ . Легко видеть, что сложность этого алгоритма кубическая, а, как показало тестирование, в большинстве случаев даже квадратичная. Конец вспомогательного алгоритма склейки базисных деревьев.

Заметим, что могут быть несколько минимальных разбиений. Их число тривиально оценивается сверху величиной  $|P|$ . Основной алгоритм, описанный выше, выдает результат на каком-то одном минимальном разбиении для каждого множества  $V$  из  $P$ , поэтому он выдает, вообще говоря, не все базисные деревья  $S(V)$ . Чтобы получить множество всех базисных деревьев  $S(V)$  нужно рассмотреть вариант этого алгоритма, который на каждом шаге индукции перебирает все минимальные разбиения и для каждого из них образует  $S(V)$ . Такой вариант алгоритма может быть экспоненциальным, так как его тривиальная оценка сложности сверху включает  $|P|^{|V_0|}$ . Однако в нашем тестировании встречалось одно или редко до трех минимальных разбиений, и этот вариант алгоритма работал столько же времени, как и основной алгоритм.

Чтобы охарактеризовать деревья из набора  $\{S(V): V - \text{базисное множество}\}$ , т.е. в сущности дать аксиоматическое определение базисного дерева, нужно расширить задачу Б, заменив в ней функционал (1\*) на его обобщение, в котором суммирование по  $i$  дополнено суммированием по всем их поддеревьям  $G'$ , у которых корневыми являются ребра из  $Ed(V, G_i)$ , а  $V_0$  заменено на  $V$ . Получаем функционал

$$C(V, S) = \sum_i \sum_{G'} [c_l \cdot l(f_{G'}, G', S) + c_d \cdot d(f_{G'}, G', S)], \quad (3)$$



где  $V$  одно из базисных множеств в  $P$ .

Это расширение задачи Б назовем задачей В. Если  $V = V_0$ , то все  $G'$  из  $G_i$  совпадают с самим  $G_i$  и, тем самым, функционал (3) совпадает с функционалом (1), а задача В – с задачей Б. Для любых данных  $G'$  и  $S$  вместо переменной  $f_{G'}$  можно подставить в формулу (3) единственный (по Лемме 1) сценарий  $h(G',S)$  для этих  $G'$  и  $S$ .

**Теорема 1А.** Пусть  $P$  – набор клад.

Для любого базисного множества  $V$  из  $P$  найденное алгоритмом базисное дерево  $S(V)$  – решение задачи В. И наоборот, любое решение задачи В имеет вид  $S(V)$ , где  $V$  – базисное множество из  $P$ , при соответствующем выборе последовательности минимальных разбиений.

Доказательство теоремы 1А приведено в работе [6].

## **5. Компьютерная программа построения супердерева.**

Содержится на сайте <http://lab6.iitp.ru/ru/super3gl/>.

## **6. Примеры построения супердерева на биологических данных.**

Содержится на сайте <http://lab6.iitp.ru/ru/super3gl/>.