



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	弱連結成分抽出によるグラフ理論的クラスター分析アルゴリズムの検討
Author(s)	大内, 東; 加地, 郁夫; 栗原, 浩一
Citation	北海道大学工学部研究報告, 138, 23-33
Issue Date	1988-01-30
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/42063
Type	departmental bulletin paper
File Information	138_23-34.pdf



弱連結成分抽出によるグラフ理論的クラスター分析 アルゴリズムの検討

大内 東*, 加地 郁夫*, 栗原 浩一**

(昭和 62 年 9 月 30 日受理)

Graph-theoretic Cluster Analysis Algorithms Based on the Concept of Weak Connected Components of a Digraph.

Azuma OHUCHI*, and Ikuo KAJI* and Khoichi KURIHARA**

(Received September 30, 1987)

Abstract

A sequence of digraphs can be associated with a given matrix by converting it into binary matrices. Any such binary square matrices can be interpreted as an adjacent matrix of a digraph in which there is a directed edge from vertex i to vertex j , iff the (i, j) entry of the binary matrix is 1. The vertices of any digraph can be partitioned into weak components. By taking the thresholds in the ascending order, and determining the weak components of each of the associated digraphs, vertices can be hierarchically clustered. Ten algorithms for the clustering are implemented and their efficiency is compared.

1. ま え が き

システムを構成している要素集合を何らかの基準によっていくつかのグループに分類して、システムの構造を知ろうとする手法に、クラスター分析がある。クラスター分析は多くの分野で利用されている¹⁾。

本論文では、システム構成要素間の一般には非対称行列である類似度（あるいは非類似度）行列を入力データとし、類似度行列をあるしきい値で 2 値化し、対応する有向グラフの弱連結成分を 1 つのクラスターと見なすグラフ理論的クラスター分析のアルゴリズムについて検討する。この方法においては、分析者がコンピュータを対話形式で利用し、次々としきい値を変えて、結果を検討しながら実行することが多いため、速やかな応答が要求される。応答時間は、各しきい値毎にそのしきい値における有向グラフの弱連結成分を抽出するアルゴリズムに依存する。また、弱連結成分の抽出を効率良く実行するための前処理も重要である。そこで、著者は 10 のアルゴリズムをインプリメントし、それらの処理時間を理論と実験の両面から比較を行ない、対話型グラフ理論的クラスター分析に適しているアルゴリズムの検討を行なった。

* 情報工学科システム工学講座
** 日本鉱業株式会社

2. 諸 定 義

以下で、 $G(V, D)$ は有向グラフを、 $G(V, E)$ は無向グラフを表わす。ここで、 V は有向（無効）グラフを構成する頂点の集合を表わし、 D は有向辺の集合、 E は無向辺の集合を表わす。

グラフの用語（例えば，“準路”，“路”，“路の長さ”等）に関する定義については標準的定義に従う⁸⁾⁹⁾。

[定義1] 類似度行列

類似度行列 F とは、データを構成する要素集合をその添字集合とし、その第 $(i-j)$ 成分を $0 \leq f_{ij} \leq 1$ として要素 i と j の間の非負類似度をもつ n 次正方行列のことをいう。 $f_{ii} = 1$, for all i , である。

[定義] 弱連結

有向グラフにおいて、すべての二頂点間に準路が存在するとき、その有向グラフは弱連結グラフであるといい、任意の有向グラフについて、その極大な弱連結部分グラフを、その有向グラフの弱連結成分という。

[定義3] 隣接行列と可到達行列

$G(V, D)$ において、行列の行（列）の添字集合がグラフの頂点集合 V に等しく、 $(v_i, v_j) \in D$ のとき、かつその時に限り $a_{ij} = 1$ とし、それ以外の時には $a_{ij} = 0$ とした行列 $A = \{a_{ij}\}$ を、グラフ G の隣接行列という。また、やはり行列の行（列）の添字集合は、グラフの頂点集合 V に等しく、頂点 v_i から頂点 v_j への（長さ 0 以上の）有向路が存在する時かつその時に限り $a_{ij} = 1$ とし、それ以外の時には $a_{ij} = 0$ とした行列 $A^* = \{a_{ij}^*\}$ をグラフ G の可到達行列という。ただし、各頂点から自分自身への長さ 0 の有向路が存在するとする。 A^* は $(A+I)$ の推移的閉包として求められる。すなわち、

$$A^* = I + A^1 + A^2 + \dots + A^n,$$

ただし、 I は単位行列である。

無向グラフ $G(V, E)$ に対しても同様に定義する。無向グラフの隣接行列、可到達行列を B , B^* で表わす。 B , B^* は対称行列となる。

[定義4] 行列 F の t による二値化

$f_{ij} \geq t$ ならば $a_{ij} = 1$, そうでなければ $a_{ij} = 0$ とし、行列 F から二値行列 A_t を求める。これを、行列 F の t による二値化と呼ぶ。 A_t には A_t を隣接行列とする有向グラフが一意に対応する。

[定義5] 弱連結成分抽出によるクラスター分析

以上の定義をもちいると、類似度行列を用いた弱連結成分抽出によるクラスター分析は、コンピュータとの対話形式で以下のように実行される。

[階層的クラスター分析の過程]

1. F を入力する。
2. しきい値 t を決定する。
3. 弱連結成分を探索するための前処理を行なう。
4. しきい値 t における有向グラフの中で、同一の弱連結成分を構成する頂点集合を一つのクラスターとする。
5. クラスターの数 N が、 $N \geq 2$ ならばステップ 2 へ行く。 $N = 1$ ならば終了する。

3. 前 処 理

しきい値 t に於けるグラフを表わすデータ構造として隣接行列あるいは可到達行列である二値行列を利用する。このため、要素が実数である n 次正方行列 F から隣接行列あるいは可到達行列を生成するための前処理が必要となる。これらの前処理には以下の処理がある。

- (1) F の s による二値化により A_s を生成する。
- (2) A_s から対称行列 B_s を求める。
- (3) 二値行列 $A_s(B_s)$ の推移的閉包 $A_s^*(B_s^*)$ を計算する。
- (4) $A_s^*(B_s^*)$ の変化に伴う新たな $A_t^*(B_t^*)$ を計算する。
- (5) F から超計量不等式を満たす行列 F^* を計算する。
 - (1) は定義から容易に実行できる。
 - (2) は $B_s = A_s + (A_s)^T$ (A_s の転置行列) を実行する。有向グラフ $G_s(V, D)$ において, $(v_i, v_j) \in D$ or $(v_j, v_i) \in D$ ならば無向グラフ $G'_s(V, E)$ において $(v_i, v_j) \in E$ とすると, 準路の定義から有向グラフ G_s の弱連結成分は無向グラフ G'_s の連結成分に等しい。 B_s は G'_s の隣接行列に対応する。 B_s を使うことにより弱連結成分の探索が効率良く実行できる。
 - (3) の計算には後述する Warshall のアルゴリズムを適用する。
 - (4) の意味は, 隣接行列 $A_s(B_s)$ とその推移的閉包 $A_s^*(B_s^*)$ を持つとき, $A_s^* \leq A_t^*(B_s^* \leq B_t^*)$ なる $A_s^*(B_s^*)$ の推移的閉包 $A_s^*(B_s^*)$ を $A_s^*(B_s^*)$ を利用して計算することである。ここで, $A_s^* \leq A_t^*(B_s^* \leq B_t^*)$ の意味は, $(A_s)^*_{ij} \leq (A_t)^*_{ij} ((B_s)^*_{ij} \leq (B_t)^*_{ij}), \text{ for all } i, j$, である。 $A_s^*(B_s^*)$ で 0 から 1 へ値が変化した要素数が少ないときは Warshall のアルゴリズムを適用しなくても効率良く $A_s^*(B_s^*)$ を計算することができる。
 - (5) の F^* の計算アルゴリズムとして Boyd アルゴリズムがある³⁾。しかし, このアルゴリズムは非負実数行列に対する一般化 Warshall アルゴリズムである事が示されている⁴⁾。

3. 1 推移的閉包

一般に Q 半環と呼ばれる代数系 $\langle Q, +, *, 0, 1 \rangle$ ⁶⁾ の元を要素とする n 次正方行列の推移的閉包は, 一般化 Warshall アルゴリズムにより $O(n^3)$ で計算できる⁵⁾。

2 値ブール代数 $\langle Q = \{0, 1\}, +, \dots, 0, 1 \rangle$ は Q 半環である。このとき, Q の元を要素とする一般には非対称な 2 値行列の推移的閉包は $O(n^3)$ で計算できる²⁾⁸⁾⁹⁾。更に, Q が 2 値対称行列の場合には, $O(n^2)$ で計算できる事が知られている。

3. 2 推移的閉包の部分修正

次に(4)の前処理について考察する。今, 可到達行列 A^* において, $a_{ij}^* = 0$ なる要素が, $a_{ij}^* = 1$ と変化したと仮定する。 A^* に対応する有向グラフ G^* で考えると, 頂点 i から頂点 j への有向辺が新たに加わったことになる。この場合, 頂点 i へ到達可能なすべての頂点から, 頂点 j から到達可能なすべての頂点への有向路が新たに存在することになる。 A^* に対しこれを実行するには次のようにする。

[手続き PB-Warshall]

{推移的閉包 A^* の修正。新たに 1 となったすべての要素 a^*_{ij} に対し以下の計算を実行する}

1. begin

2. for $p=1$ to n do
3. if $a^*_{pi}=1$ then
4. for $q=1$ to n do
5. $a^*_{pq} := a^*_{pi} + a^*_{jq}$;
6. end

このアルゴリズムは Warshall アルゴリズムを第 j 列に対してのみ適用した結果になっている。

同様に、無向グラフの可到達行列 B^* において、 $b_{ij}^*=0$ なる要素が、 $b_{ij}^*=1$ と変化したと仮定する。 B^* に対応する無向グラフ G^* で考えると、頂点 i と頂点 j の間に無向辺が新たに加わったことになる。この場合、頂点 i が属する連結部分グラフを構成するすべての頂点 ($b^*_{ip}=1$ なる p) と、頂点 j が属する連結部分グラフを構成するすべての頂点 ($b^*_{jq}=1$ なる q) の間に無向辺が新たに存在する ($b^*_{pq}=b^*_{qp}=1$) ことになる。従って、 B^* の i 行と j 行のブール和をとり、 $b^*_{ip}=1$ なる p 行と $b^*_{jq}=1$ なる q 行へコピーする。これにより、 B^* の部分修正が終了する。アルゴリズムとして表わすと次のようになる。

[手続き PSB-Warshall]

{推移的閉包 B^* の修正。新たに 1 となったすべての要素 b^*_{ij} に対し以下の計算を実行する}

1. begin
2. for $q := 1$ to n do
3. $b^*_{iq} := b^*_{iq} + b^*_{jq}$;
4. for $p := 1$ to n do
5. if $b^*_{ip}=1$ then
6. for $q := 1$ to n do $b^*_{pq} := b^*_{iq}$;
7. end

このアルゴリズムは対称 2 値行列に対する Warshall アルゴリズムを第 i 行に対してのみ適用した結果になっている。

3. 3 超計量行列

類似度行列 F の超計量行列 F^* は、 Q 半環 $\langle Q=[0, 1], \max, \min, 1, 0 \rangle$ に対する一般化 Warshall アルゴリズムにより計算できる。(5)の計算にはこのアルゴリズムを適用する。 F の推移的閉包行列 F^* はどんなしきい値について二値化しても、行列 F を同じしきい値で二値化した行列 A_i の閉包行列 A_i^* に等しくなる。

4. 弱連結成分探索のアルゴリズム

弱連結成分探索のアルゴリズムは大きく、

- (1) 隣接行列を用いるアルゴリズム
- (2) 閉包行列を用いるアルゴリズム

の二つに分けられる。

4. 1 隣接行列を用いるアルゴリズム

隣接行列を用いるアルゴリズムとは、隣接行列 A (隣接行列 B) で表わされている有向グラフ $G(V, D)$ (無向グラフ $G'(V, E)$) 中の有向辺 (無向辺) を深さ優先探索ですべてたどりながら、弱連結成分を構成する頂点を求めるものである。再帰の手続きを用いたアルゴリズムは文献 (9) に述べられている。

4. 2 隣接行列修正アルゴリズム

しきい値を常に $s < t$ となるように選ぶと、 $A_s \leq A_t$ である。今、有向グラフ G において、頂点 i から頂点 j への有向辺が新たに加わったとする。頂点 i と頂点 j が同一の弱連結成分に属している場合には、ひとつ前のしきい値で求められたクラスターについての変更を行なう必要はない。一方、頂点 i と頂点 j が異なる弱連結成分に属している場合には、頂点 i の属する弱連結成分を構成するすべての頂点と、頂点 j の属する弱連結成分を構成するすべての頂点とが、新たにひとつの弱連結成分を構成することになる。従って、頂点 i の属する弱連結成分と、頂点 j の属する弱連結成分を新たにひとつのクラスターとすれば部分的な変更だけによって新たなクラスターを求めることができる。

$A_s \leq A_t$ から $B_s \leq B_t$ であるので、上と同様にして、 B_t に対する修正アルゴリズムを構成することができる。

4. 3 可到達行列を用いるアルゴリズム

弱連結の定義からある頂点 i から可到達な頂点集合と i へ可到達な頂点集合はすべて同一の弱連結成分となる。そこで可到達行列 A^* を求めておくことにより弱連結成分の探索効率をあげることが考えられる。可到達行列 A^* から弱連結成分を構成する要素を捜し出す手続 CDA-Search は以下の様に記述できる。

[手続き CDA-Search]

{可到達行列 A^* から弱連結成分を求める手続き}

1. for $i=1$ to n do
 2. if (i はどの弱連結成分にも含まれていない)
 3. then
 4. begin
 5. for $i=1$ to n do
 6. if $a^*_{ij} = 1$
 7. then (要素 i と要素 j は新たな弱連
 8. 結成分を構成する)
 9. for $j=1$ to n do
 10. if $a^*_{ji} = 1$
 11. then (要素 i と要素 j は新たな弱連
 12. 結成分を構成する)
 13. end
-

無向グラフの可到達行列 B^* から弱連結成分を構成する要素を捜し出す手続 CDB-Search は

以下の様に記述できる。

[手続き CDB-Search]

{可到達行列 B^* から弱連結成分を求める手続き}

1. for $i=1$ to n do
2. for $j=1$ to i do
3. if $b^*_{ij} = 1$
5. then (要素 i はすでにある要素 j を含む弱連結成分に含まれる。)
6. else (要素 i は新たに弱連結部分成分を構成する)

5. アルゴリズムの構成

3. と 4. の結果を用いた 10 のクラスタリングアルゴリズムをインプリメントした。それぞれ、AD-A, AD-B, CL-A, CL-B, PAD-A, PAD-B, PCL-A, PCL-B, CL-FA (CL-FB) と呼ぶことにする。(図 1)

以下でアルゴリズム AD-A~CL-FB について述べる。

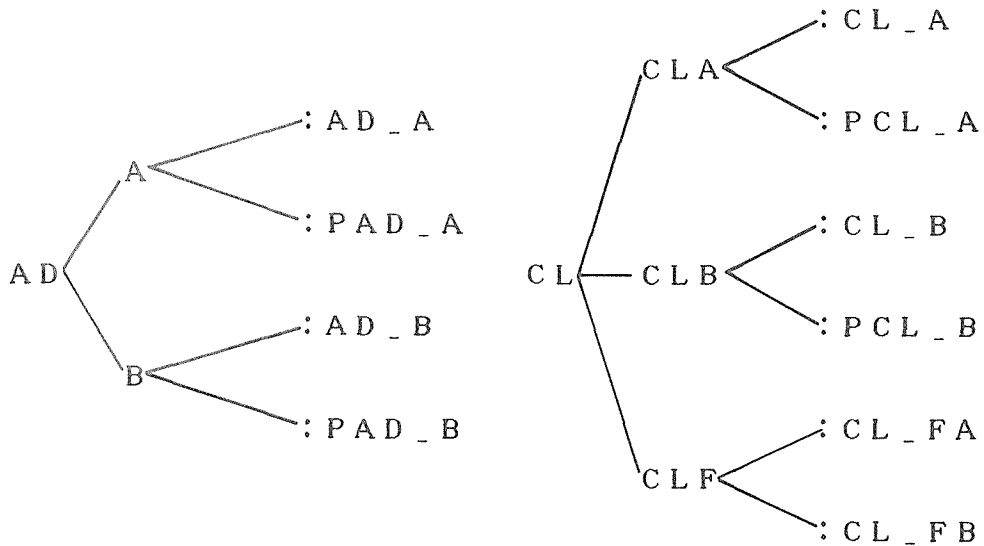


図1 アルゴリズムの分類

5. 1 アルゴリズム

(1) アルゴリズム AD-A と AD-B

アルゴリズム AD-A (AD-B) は弱連結成分の探索に隣接行列A (B) を利用する。

{アルゴリズム AD-A}

1. begin
2. repeat

3. しきい値 t を決定する
4. 行列 F を t により二値化し A_t を求める。
5. A_t を用い、再帰的手続きによって、弱連結成分を探索し、しきい値 t におけるクラスターを求める。
6. until すべてのしきい値が終了するまで
7. end

アルゴリズム AD-B は AD-A のステップ 5 を次のステップで置き換える。

- 5.1 $B_t = A_t + (A_t)^T$
- 5.2 B_t を用い、再帰的手続きによって、弱連結成分を探索し、しきい値 t におけるクラスターを求める。

(2) アルゴリズム CL-A と CL-B

CL-A (CL-B) は、 $A(B)$ の推移的閉包を用いて弱連結成分を探索する。

{アルゴリズム CL-A}

1. begin
2. repeat
3. しきい値 t を決定する
4. 行列 F を t により二値化し A_t を求める。
5. 手続き B-Warshall により、行列 A_t の可到達行列 A_t^* を求める。
6. A_t^* を用い、手続き CD-Search によって、弱連結成分を探索し、しきい値 t におけるクラスターを求める。
7. until すべてのしきい値が終了するまで
8. end

アルゴリズム CL-B は CL-A のステップ 5 と 6 を次のステップで置き換える。

- 5.1 $B_t = A_t + (A_t)^T$
- 5.2 手続き SB-Warshall により、行列 B_t の可到達行列 B_t^* を求める。
6. B_t^* を用い、手続き CD-Search によって、弱連結成分を探索し、しきい値 t におけるクラスターを求める。

以下のアルゴリズム PAD-A~PCL-B はしきい値を常に $s < t$ となるように選ぶ。

(3) アルゴリズム PAD-A と PAD-B

アルゴリズム PAD-A (PAD-B) は隣接行列 $A(B)$ を用いて弱連結成分を探索する。一番最初のしきい値については、AD-A (AD-B) を適用する。

{アルゴリズム PAD-A}

1. begin

2. しきい値 s を決定し、アルゴリズム AD-A を適用し、しきい値 s におけるクラスターを求める。
3. repeat
4. $s < t$ となるように、しきい値 t を選ぶ。
5. t により行列 F を二値化し、二値行列 A_t を得る。
6. A_t において新たに 0 から 1 となったすべての成分 a_{ij} のうち、要素 i と要素 j が異なるクラスターに属しているものについて、それぞれの属しているクラスターをまとめて一つのクラスターとする。
7. $s = t$ とセットする。
8. until すべてのしきい値が終了するまで
9. end

アルゴリズム PAD-B は PAD-A のステップ 2 と 6 を次のステップで置き換える。

2. しきい値 s を決定し、アルゴリズム AD-B を適用し、しきい値 s におけるクラスターを求める。
6. 1 $B_t = A_t + (A_t)^T$
6. 2 B_t において新たに 0 から 1 となったすべての成分 b_{ij} のうち、要素 i と要素 j が異なるクラスターに属しているものについて、それぞれの属しているクラスターをまとめて一つのクラスターとする。

(4) アルゴリズム PCL-A と PCL-B

アルゴリズム PCL-A (PCL-B) はしきい値 s における可到達行列 $A_s^*(B_s^*)$ に対して手続き PA(PSB)-Warshall により、しきい値 t における可到達行列 $A_t^*(B_s^*)$ を求め、 $A_t^*(B_s^*)$ を使ってクラスターを生成する。一番最初のしきい値については CL-A (CL-B) によりクラスターを求める。

{アルゴリズム PCL-A}

1. begin
2. しきい値 s を決定し、CL-A を適用して、しきい値 s におけるクラスターを求める。
3. repeat
4. $t > s$ となるように、しきい値 t を選ぶ。
5. t により行列 F を二値化し A_t を求める。
6. $A_t = A_s^* + A_t$
7. A_t の推移的閉包 A_t^* を手続き PA-Warshall により計算する。
8. A_t^* を用い、手続き CD-Warshall によって、弱連結成分を探索し、しきい値 t におけるクラスターを求める。
9. $s = t$ とセットする。
10. until すべてのしきい値が終了するまで
11. end

アルゴリズム PCL-B は PCL-A のステップ 2 と 6, 7, 8 を以下のステップで置き換える。

2. しきい値 s を決定し, CL-B を適用して, しきい値 s におけるクラスターを求める。
6. $B_t = (B_s^*) + A_t + (A_t)^T$
7. B_t の推移的閉包 B_t^* を手続き PSB-Warshall により計算する。
8. B_t^* を用い, 手続き CD-Warshall によって, 弱連結成分を探索し, しきい値 t におけるクラスターを求める。

(5) アルゴリズム CL-FA と CL-FB

CL-FA (CL-FB) では最初に類似度行列 F に対して, その閉包行列 F^* を求め, 次に F^* をしきい t 値で二値化する。

{アルゴリズム CL-FA}

1. begin
2. repeat
3. 一般化 Warshall アルゴリズムにより相互連関行列 F の閉包行列 F^* を求める
4. しきい値 t を決定する
5. 行列 F^* を t により二値化し A_t^* を求める。
6. A_t^* を用い, 手続き CDA-Search によって, 弱連結成分を探索し, しきい値 t におけるラスターを求める。
7. until すべてのしきい値が終了するまで
8. end

アルゴリズム CL-FB は CL-FA のステップ 6 を以下のステップで置き換える。

- 6.1 $B_t^* = A_t^* + (A_t^*)^T$
- 6.2 B_t^* を用い, 手続き CDB-Search によって, 弱連結成分を探索し, しきい値 t におけるクラスターを求める。

上のステップ 6.1 で, $B_t^* = A_t^* + (A_t^*)^T$ において良いことは次の様にして示すことができる。

$X = A_t^* + (A_t^*)^T$ とおく。可到達行列の条件, $X + 1 = X$, $X^2 = X$ を示す。 $X + 1 = 1$ は F の定義から明らか。また, x_{ij} , x_{ji} は 2 値変数である

から $(x_{ij} + x_{ji})^2 = x_{ij} + x_{ji}$ 。

表 1 各アルゴリズムの計算量

アルゴリズム	全体	弱連結探索	閉包
AD_A, AD_B	$O(n^2)$	$O(n^2)$	—
PAD_A, PAD_B	$O(n^2)$	$O(n^2)$	—
CL_A	$O(n^3)$	$O(n^2)$	$O(n^3)$
CL_B	$O(n^2)$	$O(n^2)$	$O(n^2)$
PCL_A	$O(n^3)$	$O(n^2)$	$O(n^3)$
PCL_B	$O(n^2)$	$O(n^2)$	$O(n^2)$
CL_F_A	$O(n^3)$	$O(n^2)$	$O(n^3)$
CL_F_B	$O(n^3)$	$O(n^2)$	$O(n^3)$

5. 2 理論的計算量

アルゴリズム AD-A~CL-FB について, アルゴリズム全体の計算量, 閉包をとる計算量, 弱連結成分探索の計算量についてまとめると, 表 1 のようになる。閉包を計算してから弱連結成分の探索を行なうアルゴリズムでは, 閉包を

求める部分の計算量が、アルゴリズム全体の計算量を決定していることがわかる。ただし、部分修正のアルゴリズムである PCL-A, PCL-B は、最初に $O(n^3)$ の計算が必要であるが、その後は $O(n^2)$ で済む。

6. アルゴリズムの比較実験

4. で述べた 5 種類のアルゴリズムについてその処理時間を比較した。

6. 1 実験方法

次の示すような手順で、クラスタリングを行うときに必要とされる処理時間を測定した。実験環境は、ハードウェアとしては SORD 社の M 685, OS は UNOS, アルゴリズム記述言語は C である。

[実験方法]

1. 次の要領で生成した n 次正方行列 F を類似度行列とする。
 - a) 行 i , 列 j の値 f_{ij} を $1 \sim n$ の乱数を発生させて決定する。
 - b) $0 \sim 1000$ の非負の整数を乱数で発生させて、 f_{ij} の値とする。ただし、ここでの i, j の値は、a) で決定されているものである。
 - c) F の全要素数 (n^2) に対して、正の要素数の割合がある値に達したならば、 F の生成を終了させる。この実験では、正の要素数が全要素数の 40% を超えたところで終了とすることにした。
2. クラスタリングは次の要領で実行する。
 - a) 20 の異なるしきい値 t について実行する。
 - b) $0 \leq f_{ij} \leq 1000$ ($i, j = 1, \dots, n$) であり、あまり小さい値をしきい値に選んでも無意味なので、しきい値 t は、 $420 \leq t \leq 900$ の範囲で 20 きざみで選ぶことにする。
3. ステップ 1, 2 を数回繰り返し、その総計の時間を計測する。繰り返しの回数は、原則として 10 回としたが、一部のアルゴリズムにおいてはかなり長い処理時間を必要とするため、それらについては、繰り返しの回数を 5 回とすることにした。
4. ステップ 1 ~ 3 を F の次数 n を 20 ~ 200 まで 20 おきに順次変化させて、それぞれの n について実験をおこなった。
5. ステップ 3 で求めた処理時間から、ステップ 1 で必要とされる処理時間を差し引き、真にクラスタリングにかかった時間を求めて、それからクラスタリング一回当たり (20 個のしきい値に対する) 平均処理時間を求める。

6. 2 実験結果の考察

実験の結果を、横軸に要素数を取り、縦軸に処理時間をとったグラフに表わしたのが図 2 である。

図 2 から、処理時間としては、AD-B を用いたアルゴリズムが最も速く、次いで PAD-B, PAD-A, PCL-B が速い。但し、AD-B と PAD-B はほとんど差がない。AD-B が PAD-B より速いのは次の理由によると考えられる。AD-B では新しいしきい値 t に対して、2 値化と対称化を行い B_t を生成し、その後、弱連結成分の探索を行う。これに対して PAD-B では、 B_t を生成する他に、前のしきい値 s での対称 2 値行列 B_s との比較を行い、新たに 1 がたった要素を見つけなければならない。この演算は行列の要素数に等しく $O(n^2)$ である。結局、AD-B が極めて速いため $n \leq$

200 では PAD-B のオーバーヘッドが大きくて AD-B の方が速い結果となったと考えられる。

要素数が 100 のときと要素数が 200 のときの処理時間に注目すると、要素数が 2 倍になったのに対して、処理時間は、CL-A (B), CL-F-A (B), では約 8 倍, PCL-A (B), AD-A (B) では約 4 倍, PAD-A (B) では約 2 倍となっている。このことは、実際に行なわれる計算量が、表 1 で示される理論的な計算量と、ほぼ等しいものであることを示している。全体として、

(1) 閉包行列を利用するアルゴリズムは前処理に占める時間の割合が大きく、全体の計算時間が長くなる。しかし、プログラムは再帰呼び出しの機能がない言語でもきわめて容易である、
(2) 隣接行列を利用するアルゴリズムは前処理の必要がなく計算時間は速い。しかし、再帰呼び出しの機能がない言語ではプログラムが複雑になる。再帰呼び出しの機能がある言語が利用できるときはこの機能を利用することによりプログラムも簡潔に記述できる、と言える。

以上をまとめると、再帰呼び出しの機能がある言語を使用するときは AD-B が適当と思われる。また、再帰呼び出しの機能がない言語を利用するときは PCL-B が適当である。

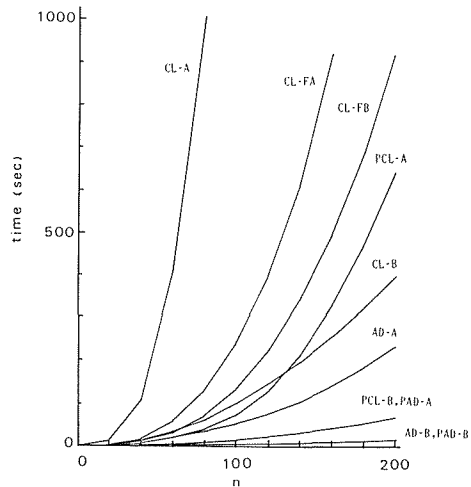


図 2. アルゴリズムの処理時間

7. む す び

弱連結成分抽出によるグラフ理論的クラスター分析のアルゴリズムについて検討した。理論解析および実験結果から、しきい値を単調に減少させながら隣接行列を利用しクラスター分析を行なうアルゴリズム AD-B,あるいは可到達行列を利用するアルゴリズム PCL-Bなどが適していると思われる。これらのアルゴリズムはインプリメントも容易であり、16ビットパソコンでも実用規模の問題を解くことができ、応用ソフトのアルゴリズムとして利用価値が高いと思われる。

参 考 文 献

- 1) J. A. Hartigan : "Clustering Algorithms", John Wiley & Sons, Inc. (1975).
- 2) tsNKy : "ちょっとめずらしい算法の話", ビット, 13, pp. 83-86, (1981).
- 3) J. P. Boyd : "Asymmetric Clusters of Internal Migration Regions of France", IEEE Trans. Syst. Man, Cybern., SMC-10, 2, pp. 101-105(1980).
- 4) 大内, 加地 : "超計量行列に対する一考察", 信学論 70-A, 5号 (昭 62)
- 5) S. Warshall : "A theorem on Boolean matrices", J. of ACM, 9, pp. 11-12(1962).
- 6) M. Yoeli : "A note on a generalization of Boolean matrix theory", Amer. Math. Monthly, 68, pp. 552-557, (1961).
- 7) P. Robert and J. Ferland : "Generalisation de l'algorithme de Warshall", R. I. R. O., 2, pp. 71-85, (1968).
- 8) A. T. Bertiss : "Data Structures, Theory and Practice", second edition, pp. 270, Academic Press (1975)
- 9) A. V. Aho, J. E. Hopcroft & J. D. Ullman : "The design and Analysis of Computer Algorithms", Addison Wesley (1974).