Prototype based hierarchical clustering

제안할 알고리즘 동작 시 관측되는 중간 결과 정리 및 알고리즘 설명

Key point: soft clustering, bottom-up clustering, KL-Divergence, merging strategy

Considerations

1. 계층 구조가 만들어지는 tau와 min sample을 결정
   1. Tau 값만의 변화는 prototype의 수의 감소에 영향을 미치지 않는다.
      1. 최소 샘플 수는 변화가 없기 때문에 tau 값의 증가는 HR의 크기만 증가하고 프로토타입의 수는 변화가 없다.
   2. Tau 값을 고정하고 min sample 값을 증가시킬 때 프로토타입의 수는 감소
      1. Tau 값을 고정 후 최소 샘플 수의 증가에 따라 프로토타입의 수는 감소하며 병합되는 효과를 가지지만 검증이 필요
         1. 2차원 데이터로 검증해본다면 이해에 도움을 줄 가능성이 있다.
            1. Consideration 4를 참고
   3. Tau 값의 범위 제한이 필요
      1. 실험에 사용되는 데이터셋 내 임의의 데이터 의 범위는 을 가지므로 tau 값은 으로 제한하여 iteration을 진행하여야 할 것으로 예상
2. Sub cluster 간의 병합이 이루어질 때 생성되야 할 새로운 프로토타입에 대한 정의
   1. 실험에 사용되는 데이터셋 내 임의의 데이터 만 프로토타입으로 선정해야만 하는 것으로 알고 있었음
      1. 교수님께 문의하여 프로토타입에 대한 재정의를 병합되는 sub cluster들의 min값과 max 값을 이용하여 tau값을 계산하고 새로운 프로토타입 을 정의한다.
3. Initial data point 선정 방식의 영향
   1. 프로토타입 결정과 클러스터링 결과에 대한 영향
      1. 반복을 데이터 읽는 순서에 따라서 진행하고 만약 앞쪽의 데이터가 새로운 HR cluster로 선정된다면 뒤쪽의 데이터들은 중복을 제거하는 규칙에 의해 새로운 클러스터로 고려가 안됨
4. 클러스터의 구성 결과에 대한 검증할 지표가 필요
   1. 지도학습 방식과 유사하게 정답 라벨과 클러스터링 결과 간의 비교 방식
      1. 분류 문제로 클러스터링 결과를 비교
      2. 클러스터링의 클러스터 인덱스는 무작위로 선정되기 때문에 다른 방식을 고려해야 할 것 같다.
5. 상향식 클러스터링은 일종의 트리의 형태로 구성되어 계층 정보를 가지고 있어야한다.

Experiment design

1. Prototype based hierarchical clustering with HR distance
   1. tau값과 최소 샘플 수를 변화시키면서 적절한 tau와 최소 샘플 수 선정 방법에 대한 이해를 한다.
      1. 초기 최소 샘플 수 변화에 따른 실험
         1. 초기 최소 샘플 수는 3으로 설정하며 점차 증가
      2. Tau 값 변화에 따른 실험
         1. Tau 값 변화가 미치는 영향을 실험하기 위해 최소 샘플 수를 고정
      3. Tau값과 최소 샘플 수의 변화에 따른 실험
         1. 두 파라미터 모두 변화, 변화 방식은 추후에 A와 B가 끝나면 결정
2. Prototype based hierarchical clustering with KL-Divergence
   1. HR 클러스터들 간의 유사도 또는 거리를 측정하기 위한 KL-Divergence 계산은 두 가지 방식으로 진행한다.
      1. 각 HR 클러스터가 포함하는 데이터들을 각 축에 대해 1변량 정규분포로 확률밀도함수를 생성하여 계산하는 방식
      2. 모든 축을 포함하는 다변량 정규분포로 확률밀도함수를 생성하여 계산하는 방식
   2. KLD 값에 따른 순위 비교를 통해 사용자가 정한 k개의 sub cluster를 병합하는 방식을 선정한다.
      1. K의 수에 따른 클러스터 구성 결과 비교

가제: Prototype based hierarchical clustering with HR distance

1. Assumption
   1. 최소 샘플 수는 프로토타입의 수만큼 반복을 진행
   2. 초기 모델의 프로토타입의 수는 데이터의 수와 동일
   3. 다음 단계의 프로토타입의 수는 이전 단계의 프로토타입의 수의 절반으로 설정
2. Algorithm
   1. 데이터의 수만큼 프로토타입을 생성하기 위한 초기 tau값과 최소 샘플 수를 반복을 통해 설정한다.
   2. 데이터의 수만큼 프로토타입을 생성
   3. Tau값을 고정하고

가제: Prototype based hierarchical clustering with KL-Divergence

1. Assumption
   1. 두 sub cluster간의 분포 유사도 측정을 위해 KL-Divergence를 계산하고 함수에 대입하여 0과 1의 값 범위를 가지는 sub cluster 유사도 지표 M을 생성한다.
   2. HR 클러스터 생성 알고리즘을 통해 생성된 HR 클러스터들 중 어떤 하나의 HR 클러스터 HR1은 지표 M을 이용하여 1~k번 째로 높은 유사도를 보이는 HR 클러스터들과 병합한다. K는 사용자가 정하는 파라미터이다.
   3. 병합을 진행하면서 HR 클러스터가 주어진 모든 데이터를 포함할 때 병합은 종료된다.
2. Algorithm
   1. 데이터의 수만큼 프로토타입을 생성하기 위한 초기 tau값과 최소 샘플 수를 반복을 통해 설정한다.
   2. 데이터의 수만큼 프로토타입을 생성
   3. Tau값을 고정하고