

# Τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής

Πανεπιστήμιο Πατρών 23 Νοεμβρίου 2020

# Παράλληλος Προγραμματισμός 1<sup>ο</sup>Εργαστήριο

Ανδρέας Καρατζάς



# Περιεχόμενα

```
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1
  Ο αλγόριθμος K-Means
1.1
      Εισαγωγή
      Ρυθμίζοντας το Visual Studio 2019
1.2
      Η δομή της εργασίας
1.3
      Ο φάκελος data
1.3.1
      Common.h
1.3.2
1.3.3
      Vec.h KOI Vec.cpp
1.3.4
     Center.h KOI Center.cpp
      Class.h KOI Class.cpp
1.3.5
1.3.6
     Optimize.h KON Optimize.cpp
1.3.7
     Distance.h KON Distance.cpp
1.3.8
     Interface.h KOU Interface.cpp
1.3.9
      Benchmark.h KOU Benchmark.cpp 10
1.3.10 Validation.h KOU Validation.cpp 10
1.3.11 kmeans.h KOU kmeans.cpp
1.4
      Aπό το testing, στο scaling
      Τα αποτελέσματα του Intel VTUNE Profiler
1.5
  ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2
  Το πρόγραμμα επικύρωσης σε Python
      Περιγραφή 15
2.1
  ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3
  Ο κώδικας C++
      Σχολιασμός
3.1
      Τα αρχεία 17
3.2
```

# Ο αλγόριθμος K-Means

## 1.1 Εισαγωγή

Για την 1<sup>η</sup> εργαστηριακή άσκηση, υλοποιήθηκε ο αλγόριθμος K-Means. Ο K-Means είναι ένας αλγόριθμος που χρησιμοποιείται για συσταδοποίηση στο χώρο του Big Data. ο λόγος είναι ότι έχει πολύ καλή απόδοση. Η πολυπλοκότητά του είναι  $O(iterations \cdot dataset \cdot K \cdot dimentions)$ . Ο ψευδοκώδικας που θα μπορούσε να περιγράψει τον K-Means είναι ο Αλγόριθμος 1.1.

#### **Αλγόριθμος 1.1** K-Means

```
input: Vec[N][Nv], Center[Nc][Nv], Classes[N], double threshold output: Center begin

while \sum_{i=0}^{N} \sum_{j=0}^{Nc} euclidean \ distance(Vec[i], Center[j]) > threshold: Classes <math>\leftarrow j \mid \Rightarrow \operatorname{argmineuclidean \ distance}(Vec[i], Center[j]) \ \forall i \in N \ \& j \in Nc

foreach Center[i]:

Center[i] \leftarrow Vec[j] \ \forall j \mid \Rightarrow Vec[j] \in Classes[i]

return Center[i]
end
```

Στα πλαίσια της εργασίας έγιναν αρκετές βελτιστοποιήσεις. Ωστόσο, ο αλγόριθμος σχεδιάστηκε σε ένα γενικό πλαίσιο και χωρίς τοπικότητα, δηλαδή δεν έγιναν παραδοχές. Για τον έλεγχο του αλγορίθμου οπτικά, φτιάχτηκε και ένα πρόγραμμα σε γλώσσα Python, το οποίο θα αναλυθεί σε επόμενο κεφάλαιο. Στα επόμενα κεφάλαια, θα αναλυθεί η δομή της εργασίας και θα απαντηθούν τα ζητούμενα που τίθενται στην εκφώνηση. Η εργασία υλοποιήθηκε σε C++ 17 με σκοπό την δημοσίευση του κώδικα στην πλατφόρμα του Github χρησιμοποιώντας τον IDE του Visual Studio 2019 και το μεταγλωττιστή Intel 19.1. Το σύστημα στο οποίο υλοποιήθηκε ο αλγόριθμος έχει λειτουργικό Windows 10, επεξεργαστή Intel Core 17 9<sup>ης</sup> γενιάς και μνήμη RAM των 16 GB. Για την εκτέλεση του κώδικα σε λειτουργικό Unix, συντάχθηκε ένα αρχείο makefile το οποίο βρίσκεται στο ίδιο directory με τα αρχεία κώδικα.

### 1.2 Ρυθμίζοντας το Visual Studio 2019

Αρχικά, σε περίπτωση που το μηχάνημα στο οποίο θα ελεγχθεί η εργασία διαθέτει επεξεργαστή Intel, προτείνεται η εγκατάσταση του Compiler της Intel, καθώς παρέχει επιπλέον βελτιστοποίηση κώδικα για επεξεργαστές της αρχιτεκτονικής τους.

Έπειτα, θα πρέπει να γίνει cloning του repository από το GitHub. Εναλλακτικά, μπορούν να προστεθούν χειροκίνητα τα αρχεία που βρίσκονται στο συμπιεσμένο. Στο συμπιεσμένο υπάρχει και ένα αρχείο makefile που μπορεί να αξιοποιηθεί ιδιαιτέρως σε περιβάλλον Unix. Στο περιβάλλον Visual Studio 2019, θα πρέπει να γίνουν αλλαγές στις ρυθμίσεις του Project επιλέγοντας Project > Properties και ακολουθώντας τα παρακάτω βήματα:

- \* Configuration Properties > General > Platform Toolset  $\rightarrow$  Intel C++ Compiler 19.1
- Configuration Properties > General > C++ Language Standard  $\rightarrow$  ISO C++ 17 Standard (std::c++17)
- · Configuration Properties > C++ > Optimization > Optimization  $\rightarrow$  Highest Optimizations (/03)
- Configuration Properties > C++ > Optimization > Inline Function Expansion  $\rightarrow$  Any Suitable (/Ob2)
- Configuration Properties > C++ > Optimization > Enable Intrinsic Functions  $\rightarrow$  Yes (/Oi)
- \* Configuration Properties > C++ > Optimization > Favor Size Or Speed  $\rightarrow$  Favor fast code (/Ot)
- \* Configuration Properties > C++ > Optimization > Enable Fiber-Safe Optimizations  $\rightarrow$  Yes (/GT)
- \* Configuration Properties > C++ > Optimization [Intel C++] > Optimize For Windows Application  $\rightarrow$  Yes (/GA)
- \* Configuration Properties > C++ > Code Generation > Enable String Pooling  $\rightarrow$  Yes (/GF)
- \* Configuration Properties > C++ > Code Generation > Enable C++ Exceptions  $\rightarrow$  Yes (/EHsc)
- Configuration Properties > C++ > Code Generation > Floating Point Model  $\rightarrow$  Fast=2 (/fp:fast=2)
- \* Configuration Properties > C++ > Code Generation > Enable Floating Point Exceptions  $\rightarrow$  No
- Configuration Properties > C++ > Code Generation[Intel C++] > Floating Point Expression Evaluation → Double (/fp:double)
- · Configuration Properties > C++ > Code Generation[Intel C++] > Intel Processor-Specific Optimization  $\rightarrow$  Same as the host processor performing the compilation (/QxHost)

- · Configuration Properties > C++ > Language > C++ Language Standard  $\rightarrow$  ISO C++ 17 Standard (/std:c++17)
- · Configuration Properties > C++ > Language[Intel C++] > C/C++ Language Support  $\rightarrow$  C++ 17 Support (/Qstd=c++17)

#### Η δομή της εργασίας 1.3

Ο κώδικας χωρίστηκε σε header files. Στα διάφορα header files δηλώθηκαν συναρτήσεις και μεταβλητές, που ορίζονται στα αντίστοιχα CPP αρχεία κώδικα. Το repository του αλγορίθμου βρίσκεται σε αυτό το link. Στο repository υπάρχει ο φάκελος k-means στον οποίο υπάρχουν όλα τα αρχεία που γράφηκαν στα πλαίσια της εργασίας, μαζί με τα αρχεία k-means.vcxproj και k-means.vcxproj.filters,τα οποία είναι αρχεία του Visual Studio.

#### Ο φάκελος data 1.3.1

Στον φάκελο data αποθηκεύονται τα δεδομένα όπως αυτά υπολογίστηκαν από τον αλγόριθμο K-Means. Τα δεδομένα αυτά αποτυπώνουν το τυχαίο dataset, αλλά και τις αλλαγές που υπάρχουν στις μεταβλητές Classes και Centers. Ο χρήστης θα πρέπει να μετακινεί ό,τι αρχεία βρίσκονται μέσα στο συγκεκριμένο φάκελο. Αν και έγινε προσπάθεια σύνταξης κώδικα για να επιλυθεί το παραπάνω πρόβλημα χρησιμοποιώντας τη βιβλιοθήκη filesystem, ο compiler δεν κατάφερε να παράξει εκτελέσιμο.

#### 1.3.2 Common.h

Στην κεφαλίδα Common.h δηλώνονται οι απαραίτητες βιβλιοθήκες για την εκτέλεση του προγράμματος, αλλά και σταθερές που καθορίζουν τη λειτουργία του αλγορίθμου. Αναλύοντας:

- VERBOSITY: Η σταθερά χρησιμεύει κατά την κλήση της συνάρτησης kmeans progress που είναι δηλωμένη στην κεφαλίδα Interface. Η σταθερά αυτή μπορεί να πάρει τιμή 0, 1, 2 ή 3. Όσο πιο μεγάλη τιμή έχει, τόσο μεγαλύτερη θα είναι και η συχνότητα εκτύπωσης των αποτελεσμάτων του kmeans κατά τη διαδικασία της βελτιστοποίησης των συστάδων
- TEST\_MODE: Η σταθερά αυτή χρησιμεύει κατά τη διαδικασία του testing του προγράμματος. Όταν αρχικοποιείται με 1, το πρόγραμμα χρησιμοποιεί σύνολο δεδομένο με πληθάριθμο 30 αντί για 100,000 που ορίζεται μέσα στην εκφώνηση. Επίσης, οι διαστάσεις είναι 2 και τα clusters 3. Όταν είναι αρχικοποιημένη με ο, τότε το πρόγραμμα λειτουργεί με τα δεδομένα της εκφώνησης

• MAX\_LIMIT: Η σταθερά αυτή καθορίζει το μέγιστο που μπορεί να πάρει οποιοδήποτε από τα στοιχεία του συνόλου δεδομένων μας (μεταβλητή Vec) έτσι ώστε να λυθεί το πρόβλημα της υπερχείλισης δεδομένων τύπου float. Σε περίπτωση που γίνεται testing, η σταθερά παίρνει χαμηλότερη τιμή έτσι ώστε να διευκολύνει τον προγραμματιστή

#### **1.3.3** Vec.h **και** Vec.cpp

Στο αρχείο Vec.h γίνεται η δήλωση της συνάρτησης vec\_init η οποία καλείται στην αρχή του προγράμματός μας για να γεμίσει τη μεταβλητή Vec που αποτελεί το dataset του αλγορίθμου. Στο αρχείο Vec.cpp, η παραπάνω συνάρτηση εμπλουτίζεται με τον απαραίτητο κώδικα.

#### 1.3.4 Center.h Kal Center.cpp

Στο αρχείο Center.h γίνεται η δήλωση της συνάρτησης init\_centers η οποία καλείται στην αρχή του προγράμματός μας για να αρχικοποιηθούν τα clusters (μεταβλητή Center<sup>1</sup>). Στο αρχείο Center.cpp, η παραπάνω συνάρτηση εμπλουτίζεται με τον απαραίτητο κώδικα.

#### 1.3.5 Class.h KQI Class.cpp

Στο αρχείο Class.h γίνεται η δήλωση της συνάρτησης compute\_classes η οποία καλείται κάθε φορά που πρέπει να αντιστοιχιστούν τα δεδομένα του αλγορίθμου (dataset) με το σωστό cluster (μεταβλητή old\_Center). Στο αρχείο Class.cpp, η παραπάνω συνάρτηση εμπλουτίζεται με τον απαραίτητο κώδικα.

#### 1.3.6 Optimize.h Kal Optimize.cpp

Στο αρχείο Optimize.h γίνεται η δήλωση της συνάρτησης optimize\_center η οποία καλείται σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου και επιστρέψει τα καινούργια διανύσματα - συστάδες (μεταβλητή new\_Center). Η συνάρτηση αυτή καλείται μετά την αντιστοίχιση δεδομένων με συστάδες, για να βελτιστοποιηθούν τα διανύσματα των συστάδων. Στο αρχείο Optimize.cpp, η παραπάνω συνάρτηση εμπλουτίζεται με τον απαραίτητο κώδικα.

#### 1.3.7 Distance.h και Distance.cpp

Στο αρχείο Distance.h γίνεται η δήλωση των παρακάτω συναρτήσεων:

• eucl\_diff: Η συνάρτηση αυτή δέχεται στην είσοδό της 2 διανύσματα διαστάσεων  $N_v$  και επιστρέφει την Ευκλείδεια απόστασή τους

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Στο πρόγραμμα αναφέρεται ως old\_Center

- · convergence: Η συνάρτηση αυτή δέχεται στην είσοδό της τις συστάδες από δύο διαδοχικές επαναλήψεις και επιστρέψει την αθροιστική Ευκλείδεια απόστασή τους. Η συνάρτηση καλείται για να αποφανθεί ο αλγόριθμος σύγκλισης
- · normalize\_convergence: Η συνάρτηση αυτή δέχεται την προηγουμένως υπολογισμένη αθροιστική Ευκλείδεια απόσταση δύο διαδοχικών συστάδων και την κανονικοποιεί σύμφωνα με το μαθηματικό τύπο:

$$\frac{|A - B|}{\max A.B}$$

Ωστόσο, αν ο αλγόριθμος είναι ακόμα στις πρώτες επαναλήψεις, όπου η Ευκλείδεια απόσταση αλλάζει ραγδαία, τότε η κανονικοποιημένη τιμή θεωρείται ίση με 1 (μέγιστη κανονικοποιημένη τιμή). Τέλος, για να λυθεί το πρόβλημα του υπολογιστικού σφάλματος λόγω έλλειψης επαρκούς ακρίβειας σε αριθμούς κινητής υποδιαστολής, εισάγεται ένας επιπλέον κανόνας: Αν η μη κανονικοποιημένη αθροιστική Ευκλείδεια απόσταση δύο διαδοχικών συνόλων συστάδων είναι μικρότερη του 100, τότε θεωρείται ότι η επιτάχυνση των κέντρων είναι σχεδόν μηδενική<sup>2</sup> και άρα ο αλγόριθμος έχει συγκλίνει

Στο αρχείο Distance.cpp, οι συναρτήσεις αυτές εμπλουτίζονται με τον αντίστοιχο κώδικα.

#### 1.3.8 Interface.h Kal Interface.cpp

Στο αρχείο Interface.h γίνεται η δήλωση των παρακάτω συναρτήσεων:

- multidimentional float vector interface: συνάρτηση Η εκτυπώνει σε περιβάλλον CLI περιεχόμενα οποιασδήποτε μεταβλητής std::vector<std::array<float, Nv>>. Στο πρόγραμμα, χρησιμοποιείται για την εκτύπωση των περιεχομένων των μεταβλητών:
  - Vec.
  - old Center KOI
  - new Center
- · multidimentional\_int\_array\_interface: Η συνάρτηση αυτή εκτυπώνει σε περιβάλλον CLI περιεχόμενα οποιασδήποτε μεταβλητής τύπου std::array<std::vector<int>, Nc>. Στο πρόγραμμα, χρησιμοποιείται για την εκτύπωση των περιεχομένων της μεταβλητής Classes
- · progress\_interface Και kmeans\_progress: Η συνάρτηση progress\_interface καλείται από τη συνάρτηση kmeans progress, η οποία πληροφορεί το χρήστη για τη σχετική πρόοδο του αλγορίθμου

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Η επιτάχυνση των κέντρων είναι πολύ μικρή σε αυτήν την περίπτωση καθώς η μέση μετατόπιση σημείου μεταξύ των επαναλήψεων αυτών είναι μικρότερη του  $\frac{100}{100\cdot 1.000}=0.001$ .

· kmeans termination: Η συνάρτηση αυτή καλείται στο τέλος του αλγορίθμου και εκτυπώνει τους χρόνους (benchmark) του αλγορίθμου και επιβεβαιώνει τη σύγκλισή του

Στο αρχείο Interface.cpp, οι συναρτήσεις αυτές εμπλουτίζονται με τον αντίστοιχο κώδικα.

#### 1.3.9 Benchmark.h Kal Benchmark.cpp

Στο αρχείο Benchmark.h δηλώνονται οι συναρτήσεις:

- · init benchmark: Η συνάρτηση αυτή επιστρέψει ένα σημείο στο χρόνο (checkpoint), οπουδήποτε το χρειάζεται ο προγραμματιστής, για να μετρήσει χρόνο (benchmarking)
- · bench convergence: Η συνάρτηση αυτή θα μπορούσε να διαγραφεί, καθώς έχει ίδιο σώμα με τη συνάρτηση init\_benchmark. Ωστόσο, λόγω της διαφοράς στο όνομα, βοηθάει τον προγραμματιστή να ξεχωρίζει το σκοπό της καθεμίας και συνεπώς το που πρέπει να κληθεί η καθεμία
- · bench\_loop: Η συνάρτηση αυτή μετράει το συνολικό χρόνο που βρίσκεται «εγκλωβισμένος» ο αλγόριθμος μέσα στην επανάληψη βελτιστοποίησης
- · terminate\_bench: Η συνάρτηση αυτή θα μπορούσε να διαγραφεί, καθώς έχει ίδιο σώμα με τη συνάρτηση init\_benchmark και τη bench\_convergence. Ωστόσο, λόγω της διαφοράς στο όνομα, βοηθάει τον προγραμματιστή να ξεχωρίζει το σκοπό της καθεμίας και συνεπώς το που πρέπει να κληθεί η καθεμία
- · benchmark results: Η συνάρτηση αυτή χρησιμοποιείται στο τέλος του προγράμματος κι επιτελεί συνολικό benchmarking του αλγορίθμου

Στο αρχείο Benchmark.cpp, οι συναρτήσεις αυτές εμπλουτίζονται με τον αντίστοιχο κώδικα.

#### Validation.h KQI Validation.cpp

Στο αρχείο Validation.h δηλώνονται οι συναρτήσεις:

- · export\_multidimentional\_float\_vector: Η συνάρτηση αυτή αποθηκεύει σε αρχείο CSV τα περιεχόμενα οποιασδήποτε μεταβλητής τύπου std::vector<std::array<float, Nv>>. Στο πρόγραμμα, χρησιμοποιείται για την εκτύπωση των περιεχομένων των μεταβλητών:
  - Vec.
  - old Center KOI
  - new\_Center

- export multidimentional integer array: συνάρτηση Η αυτή αποθηκεύει σε αρχείο CSV τα περιεχόμενα οποιασδήποτε μεταβλητής τύπου std::array<std::vector<int>, Nc>. Στο πρόγραμμα, χρησιμοποιείται για την εκτύπωση των περιεχομένων της μεταβλητής Classes
- track\_kmeans\_progress και export\_kmeans\_progress: Η συνάρτηση track\_kmeans\_progress ενημερώνει τη μεταβλητή kmeans\_progress την οποία αποθηκεύει σε αρχείο TXT η συνάρτηση export kmeans progress. Τα δεδομένα που εξάγονται αφορούν τη πρόοδο που κάνει ο αλγόριθμος K-Means από επανάληψη σε επανάληψη

Ο σκοπός αυτών των συναρτήσεων είναι εμφανής κατά το testing του προγράμματος. Τα δεδομένα που εξήχθησαν στο φάκελο data μετά από την εκτέλεση του αλγορίθμου, τα επεξεργάζεται το πρόγραμμα σε Python, το οποίο επιστρέφει τη γεωμετρική εικόνα της πορείας του αλγορίθμου. Στο αρχείο Validation.cpp, οι συναρτήσεις αυτές εμπλουτίζονται με τον αντίστοιχο κώδικα.

#### 1.3.11 kmeans.h Kal kmeans.cpp

Στο αρχείο kmeans.cpp δηλώνονται όλες οι επιπλέον (custom) κεφαλίδες του προγράμματος. Στο αρχείο kmeans.cpp είναι γραμμένος ο driver του προγράμματος (συνάρτηση main).

## 1.4 Από το testing, στο scaling

Το πρόγραμμα όπως έχει ανέβει στο GitHub είναι αρχικοποιημένο για testing. Για να μπορέσει ο εκάστοτε χρήστης να δει την καθαρή απόδοση του προγράμματος<sup>3</sup>, θα πρέπει να γίνει η ακόλουθη επεξεργασία:

- Common.h > line 27 > TEST\_MODE  $\leftarrow$  O
- kmeans.cpp > lines [18, 19]  $\leftarrow$  Comment
- kmeans.cpp > lines [23, 24]  $\leftarrow$  Comment
- · kmeans.cpp > line 36 ← Comment
- kmeans.cpp > lines [38, 39]  $\leftarrow$  Comment
- kmeans.cpp > lines [41, 42]  $\leftarrow$  Comment
- kmeans.cpp > line  $47 \leftarrow Comment$
- kmeans.cpp > lines  $[52, 53] \leftarrow Comment$

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Το πρόγραμμα φαίνεται αν είναι αποδοτικό ή όχι, αν οι μεταβλητές Ν, Νν και Νc αρχικοποιηθούν όπως περιγράφεται στο τέταρτο κομμάτι της εργασίας.

Σε περίπτωση που ο tester επιθυμεί να κάνει profiling ή να χρησιμοποιήσει την time λειτουργικού Unix, τότε θα πρέπει να κάνει επιπλέον των παραπάνω και τις παρακάτω αλλαγές:

- kmeans.cpp > lines [12, 14]  $\leftarrow$  Comment
- kmeans.cpp > line  $30 \leftarrow Comment$
- kmeans.cpp > lines [33, 35]  $\leftarrow$  Comment
- kmeans.cpp > lines [49, 51]  $\leftarrow$  Comment

#### Τα αποτελέσματα του Intel VTUNE Profiler 1.5

Το αποτέλεσμα του Intel VTUNE Profiler φαίνεται στο Σχήμα 1.1.

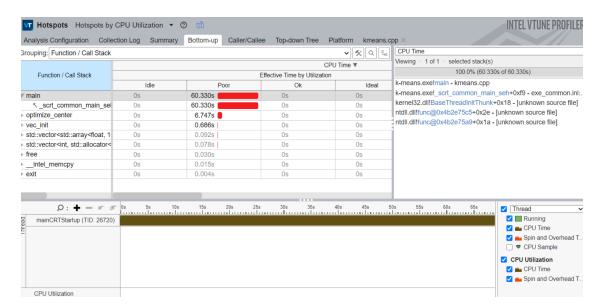
Το πρώτο στοιχείο που φαίνεται είναι ο χρόνος που χρειάστηκε το πρόγραμμα για την εκτέλεσή του. Ο χρόνος είναι μέσα στα επιθυμητά πλαίσια όπως αυτά ορίζονται στην εκφώνηση. Η κόκκινη ένδειξη δείχνει το πόση παραλληλοποίηση έγινε στον αλγόριθμο. Επειδή η άσκηση δε ζητούσε παραλληλοποίηση, το πρόγραμμα είναι 1 - threaded. Θετικά είναι τα ποσοστά Memory Bound που δείχνει την αποδοτικότητα των I/Os που έγιναν κατά την εκτέλεση του προγράμματος, και το Vectorization, το οποίο επιτρέπει block επεξεργασία.

Μια λεπτομερέστερη εικόνα του προγράμματος δίνεται στα σχήματα 1.2 και 1.3, όπου φαίνεται ανά συνάρτηση η κατανάλωση χρόνου. Βλέπουμε ότι ο Profiler δίνει την main που είναι λογικό, καθώς αποτελεί το driver του προγράμματος. Ωστόσο, στο Σχήμα 1.3 ξεκαθαρίζει λίγο παραπάνω η κατανομή και πλέον δίνεται η συνάρτηση compute classes, η οποία καταναλώνει σχεδόν το μισό χρόνο του προγράμματος. Αυτό είναι απολύτως λογικό, καθώς καλείται σε κάθε επανάληψη του K-Means και έχει περισσότερες πράξεις από κάθε άλλη συνάρτηση εντός της επανάληψης.

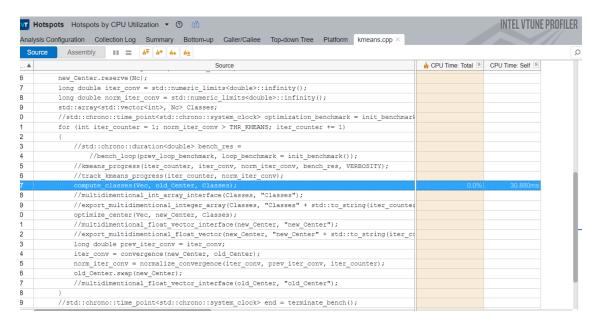
IPC®: 1.903 SP GFLOPS®: 0.091 DP GFLOPS®: 15.663 x87 GFLOPS®: 0.004 Average CPU Frequency®: 4.0 GHz

- Effective Logical Core Utilization :: 14.4% (1.722 out of 12) ▶
- Microarchitecture Usage : 55.6% of Pipeline Slots
- Memory Bound : 7.1% of Pipeline Slots
- Vectorization : 97.5% of Packed FP Operations

Σχήμα 1.1: Η ανάλυση του Intel VTUNE Profiler



Σχήμα 1.2: Η ανάλυση της main



Σχήμα 1.3: Το «hotspot» του προγράμματος

# Το πρόγραμμα επικύρωσης σε Python

## 2.1 Περιγραφή

Για τον ευκολότερο έλεγχο του προγράμματος συντάχθηκε και ένα πρόγραμμα σε Python με περιβάλλον *PyCharm*. Το πρόγραμμα υπάρχει στο φάκελο kmeans-visualize. Το πρόγραμμα χρειάζεται τις βιβλιοθήκες:

- NumPy
- Pandas
- Matplotlib

Προαιρετικά, ο προγραμματιστής μπορεί να εγκαταστήσει και το πακέτο SciPy. Έπειτα, ο προγραμματιστής μετακινεί τα αρχεία επικύρωσης που δημιουργήθηκαν στο φάκελο data από τον αλγόριθμο K-Means στο φάκελο που υπάρχει και το Python Script. Τέλος, ο προγραμματιστής εκτελεί το Python Script.

Στο GitHub υπάρχουν και οδηγίες για το πως μπορεί ο προγραμματιστής να μετατρέψει αυτό το «stream» αρχείων PNG που δημιουργούνται μετά από την εκτέλεση του Script σε αρχείο GIF (βλέπε αρχείο «instructions»).

# Ο κώδικας C++

## 3.1 Σχολιασμός

Στην αρχή η ιδέα ήταν να χρησιμοποιηθούν αποκλειστικά πίνακες για την αποθήκευση όλων των δεδομένων. Ωστόσο, αυτό αποδείχθηκε εξαιρετικά απαιτητικό ως προς το stack του προγράμματος. Έτσι, έγινε η αλλαγή σε δυναμικούς πίνακες που αποτελούνται από (στατικούς) πίνακες. Το αποτέλεσμα ήταν ότι κάθε φορά ήταν επαρκές να υπάρχει στη μνήμη ένα διάνυσμα 1000 στοιχείων, που θα αποτελούσε το διάνυσμα προς επεξεργασία από τη μεταβλητή Vec, ένα διάνυσμα επίσης 1000 στοιχείων που θα αποτελούσε κάποιο από τα κέντρα της μεταβλητής old\_Center ή new\_Center (ανάλογα με το σημείο εκτέλεσης) και οι δείκτες προς όλους τους πίνακες οι οποίοι όμως είναι αποθηκευμένοι στο heap. Στο φάκελο buggy υπάρχουν ενδεικτικά κάποιες ενδιάμεσες εκδόσεις που ικανοποιούν το ζητούμενο της εργασίας 4. Ωστόσο, δεν υπάρχουν σχόλια στις εκδόσεις αυτές, καθώς είναι κάποιες ειδικά έχουν αρκετά λανθασμένη αρχιτεκτονική.

#### 3.2 Τα αρχεία

```
Κώδικας 3.2.1: Η κεφαλίδα Common.h
```

```
* Common.h
   * In this header file, we define the constants
   * used throughout the K-means algorithm. We also
   * include all the header files necessary to make
   * the implementation work.
   #pragma once
                                                      ///< std::cout
  #include <iostream>
13 #include <vector>
                                                      ///< std::vector
  #include <iomanip>
                                                      ///< std::setw
15 #include limits>
                                                      ///< std::numeric_limits
  #include <chrono>
                                                      ///< std::chrono
                                                      ///< std::array
  #include <array>
18 #include <algorithm>
                                                      ///< std::find
                                                      ///< std::pair
19 #include <utility>
                                                      ///< std::string
20 #include <string>
  #include <cstdlib>
                                                      ///< std::abs
  #include <random>
                                                      ///< std::random_device
  #include <fstream>
                                                      ///< std::ofstream
  #include <numeric>
                                                      ///< std::iota
   constexpr int VERBOSITY = 3;
                                                      ///< Sets K-means' iterface verbosity level
  constexpr int TEST_MODE = 1;
                                                      ///< Set it equal to 1 to enter test mode, otherwise set it to 0
   constexpr int MAX_LIMIT = TEST_MODE == 1 ? 31 : 63; ///< Upper bound used in the randomly generated dataset of reals</pre>
   constexpr int N = TEST_MODE == 1 ? 20 : 100000;
                                                     ///< Elements in our dataset
  constexpr int Nv = TEST_MODE == 1 ? 2 : 1000;
                                                      ///< Dimentions of each element
constexpr int Nc = TEST_MODE == 1 ? 3 : 100;
                                                      ///< Number of clusters, also known as `K`
constexpr double THR_KMEANS = 0.000001;
                                                      ///< Threshold used to indicate K-means convergence
                      Κώδικας 3.2.2: Η κεφαλίδα Vec.h
1 /**
   * Vec.h
   * In this header file, we define a function that
   * executes only in the beginning of the algorithm.
   * This function is used to generate a random dataset
   * for the K-means algorithm.
   #pragma once
  #include "Common.h"
void vec_init(std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec);
                      Κώδικας 3.2.3: Το αρχείο Vec.cpp
1 | #include "Vec.h"
   * Initializes `Vec` variable.
   * @param[in, out] Vec the random dataset generated for clustering using the K-means algorithm.
   * @see Common.h
   * @remark [<random> Engines and Distributions] (https://docs.microsoft.com/en-us/cpp/standard-library/random?view=msvc-160#engdist)
   void vec_init(std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec)
          std::random_device rd_Vec;
                                                                                   ///< Initializes a random generator
          std::mt19937 mt Vec(rd Vec());
                                                                                       ///< Uses the mt19937 engine
          std::uniform_real_distribution<float> dist_Vec(0.0, MAX_LIMIT + 0.0);
                                                                                      ///< Generates a uniform distribution bounded by the `MAX_LIMIT` set in `Common.h` to prevent number overflow
          for (int i = 0; i < N; i += 1)</pre>
                  std::array<float, Nv> Elements;
                                                                                        ///< Declares a vector `Elements` that temporarily holds the vector that is to be inserted to `Vwc`
                  for (int j = 0; j < Nv; j += 1)
                          Elements[j] = dist_Vec(mt_Vec);
                                                                                        ///< Updates contents of `Elements`
                  Vec.emplace_back(Elements);
                                                                                    ///< Moves `Elements` to `Vec`
                     Κώδικας 3.2.4: Η κεφαλίδα Center.h
 1 /**
   * Center.h
   * In this header file, we define a function that helps
   * in the random initialization of the variable `Center`.
   * This function is only used in the beginning of the
   * K-means algorithm.
   #pragma once
  #include "Common.h"
  #include "Distance.h"
void init_centers(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec, std::vector<std::array<float, Nv>>& old_Center);
                     Κώδικας 3.2.5: Το αρχείο Center.cpp
1 #include "Center.h"
   /**
   * Initializes `Center` variable.
   * Oparam[in] Vec the dataset generated.
   * @param[in, out] old\_Center the random centroids generated in the beginning of the K-means algorithm.
   * @remark [<random> Engines and Distributions] (https://docs.microsoft.com/en-us/cpp/standard-library/random?view=msvc-160#engdist)
   void init_centers(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec, std::vector<std::array<float, Nv>>& old_Center)
                                                                                                                                                    ///< Declares our random `Vec` generator vector
          std::vector<int> Random(N);
                                                                                                                                                    ///< Initializes vector with all possible indeces of `Vec`
          std::iota(Random.begin(), Random.end(), 0);
          std::shuffle(Random.begin(), Random.end(), std::mt19937{ std::random_device{}() });
                                                                                                                                                   ///< Shuffles `Random` vector
          for (int i = 0; i < Nc; i += 1)
                  std::array<float, Nv> Element;
                                                                                                                                                       ///< Declares a vector `Elements` that temporarily holds the vector chosen from `Vec`
                  Element = Vec.at(Random.at(i));
                                                                                                                                                       ///< Copies contents of the random `Vec` element
                  old Center.emplace back(Element);
                                                                                                                                                  ///< Moves `Element` variable to the `old_Center` variable
```

```
Κώδικας 3.2.6: Η κεφαλίδα Class.h
   * Class.h
    * In this header file, we a function that assigns
    * the vectors found in the variable `Vec` to a
    * corresponding `Class` or more commonly known as cluster.
   #pragma once
  #include "Common.h"
  #include "Distance.h"
void compute_classes(const std::vector<std::array<float, Nv>>& vec, const std::vector<std::array<float, Nv>>& old_Center, std::array<std::vector<int>, Nc>& Classes);
                      Κώδικας 3.2.7: Το αρχείο Class.cpp
1 #include "Class.h"
   /**
    * Computes `Class` variable.
    * @param[in] Vec the dataset generated.
    * @param[in] old_Center the current centroids.
    * @param[in, out] Classes the classes corresponding to the dataset.
    * Onote This function calls `eucl_diff` from Distance.h
    * @see [K-means \ clustering \ Algorithm] (https://medium.com/@jaredchilders_38839/k-means-clustering-algorithm-4334db89bdf3)
    */
  void compute_classes(const std::vector<std::array<float, Nv>>& vec, const std::vector<std::array<float, Nv>>& old_Center, std::array<std::vector<int>, Nc>& Classes)
          for (int i = 0; i < Nc; i += 1)
                                                                                                         ///< Clears contents of `Classes` variable
                  Classes[i].clear();
                                                                                                     ///< Prevents garbage processing
                  Classes[i].reserve((int) N/Nc);
                                                                                                         ///< Optimizes array with high probability
          int argmin_idx = -1;
                                                                                                      ///< Initializes \argmin index
          long double argmin_val = std::numeric_limits<long int>::max() + 0.0;
                                                                                                      ///< Initializes \argmin value
          for (int i = 0; i < N; i += 1)
                                                                                                        ///< Loop through `Vec`
                                                                                                         ///< Loop through `old_Center`
                  for (int j = 0; j < Nc; j += 1)
                          long double temp_eucl_dist = eucl_diff(Vec.at(i), old_Center.at(j));
                                                                                                      ///< Compute Euclidean distance between parsed `Vec` element and parsed `old_Center` element
                                                                                                  ///< Checks if this Euclidean distance is so far the smallest
                          if (argmin_val > temp_eucl_dist)
                                                                                                      ///< Updates \argmin value
                                  argmin_val = temp_eucl_dist;
                                  argmin_idx = j;
                                                                                                         ///< Updates \argmin index
                  Classes[argmin_idx].emplace_back(i);
                                                                                                      ///< Assigns `Vec` element to a cluster
                   argmin_idx = -1;
                                                                                                   ///< Sets \argmin index for the next loop
                  argmin_val = std::numeric_limits<unsigned long int>::max();
                                                                                                     ///< Sets \argmin value for the next loop
                    Κώδικας 3.2.8: Η κεφαλίδα Optimize.h
   * Optimize.h
    * In this header file, we define a function which
    * computes the error of the `Center` variable with
    * respect to the `Vec` variable.
   #pragma once
   #include "Common.h"
void optimize_center(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec, std::vector<std::array<float, Nv>>& new_Center, const std::array<std::vector<int>, Nc>& Classes);
                    Κώδικας 3.2.9: Το αρχείο Optimize.cpp
1 #include "Optimize.h"
   /**
    * Computes `Center` variable after `Classes` correction.
    * @param[in] Vec the dataset.
    * @param[in] Classes the classes corresponding to the dataset.
    * {\it Oparam[in, out] new\_Center the new clusters of the K-means algorithm.}
   void optimize_center(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Vec, std::vector<std::array<float, Nv>>& new_Center, const std::array<std::vector<int>, Nc>& Classes)
          new_Center.clear();
                                                                                                                     ///< Clears previously computed data
          for (int i = 0; i < Nc; i += 1)
                                                                                                                         ///< Loops through all clusters
                  std::array<float, Nv> Element = { 0 };
                                                                                                                        ///< Initializes `Element` array which holds a cluster vector
                  for (int j = 0; j < Classes[i].size(); j += 1)</pre>
                                                                                                                        ///< Loops through `Vec` vectors
                          for (int k = 0; k < Nv; k += 1)
                                                                                                                         ///< Loops through vector elements
                                  Element[k] += (float)(Vec.at(Classes[i].at(j))[k] / Classes[i].size());
                                                                                                                         ///< Computes vector element
                  new_Center.emplace_back(Element);
                                                                                                                   ///< Updates `new_Center` variable
                    Κώδικας 3.2.10: Η κεφαλίδα Distance.h
    * Distance.h
    * In this header file, we define some functions which
    * help with the computations needed to define whether
    * K-means has converged or not.
   #pragma once
  #include "Common.h"
long double eucl_diff(const std::array<float, Nv>& src, const std::array<float, Nv>& dst);
long double convergence(const std::vector<std::array<float, Nv>>& curr_Center, const std::vector<std::array<float, Nv>>& prev_Center);
long double normalize_convergence(const long double curr_iter_conv, const long double prev_iter_conv, const int iter_counter);
```

```
Κώδικας 3.2.11: Το αρχείο Distacne.cpp
1 | #include "Distance.h"
   /**
    * Computes Euclidean distance between 2 arrays of size `Nv`.
    * @param[in] A the first array.
    * @param[in] B the second array.
    * @return Euclidean distance.
   long double eucl_diff(const std::array<float, Nv>& A, const std::array<float, Nv>& B)
           long double eucl_diff = 0;
          for (int i = 0; i < Nv; i += 1)
                                                                                                                                                  ///< Loops through all `Nv` elements of the given arrays
                  long double point_diff = A[i] - B[i];
                                                                                                                                                ///< Computes element-wise difference
                  if (point_diff > std::numeric_limits<float>::max())
                                                                                                                                               ///< Checks for data overflow
                          point_diff = std::numeric_limits<float>::max();
                                                                                                                                                   ///< Prevents data overflow
                                                                                                                                            ///< Squares difference
                  long double point_diff_squared = point_diff * point_diff;
                  eucl_diff += point_diff_squared;
                                                                                                                                           ///< Adds difference to `eucl_diff`
          return eucl_diff;
    * Checks if K-means has converged.
    * @param[in] curr_Center the current `Center` variable .
    * @param[in] prev_Center the old `Center` variable.
    * Oreturn Euclidean distance between the 2 vectors.
    * Onote if the Euclidean distance between 2 points is not greater than 1.0, then it is normalized to 0.
                     This is to optimize speed, prevent overfitting, and solve the precision error carried throughout the Nc \times Nv = 1,000,000 additions.
   long double convergence(const std::vector<std::array<float, Nv>>& curr_Center, const std::vector<std::array<float, Nv>>& prev_Center)
          long double convergence_sum = 0;
                                                                                                                                            ///< Initializes `convergence_sum` variable used to store the total additive difference between `curr_Center` and `prev_Center`
          for (int i = 0; i < Nc; i += 1)
                                                                                                                                                   ///< Loops through all centers
                  long double tmp_eucl_d = eucl_diff(curr_Center.at(i), prev_Center.at(i));
                                                                                                                                             ///< Computes element-wise Euclidean distance
                  convergence sum += tmp eucl d > 1.0 ? tmp eucl d : 0.0;
                                                                                                                                                   ///< Optimizes Convergence if error is close to defined threshold
                   if (convergence_sum > std::numeric_limits<double>::max())
                                                                                                                                            ///< Checks for number overflow
                           convergence_sum = std::numeric_limits<double>::max();
                                                                                                                                                 ///< Prevents number overflow
                                                                                                                                                 ///< Breaks loop because `convergence_sum` is maxed
                          break;
          return convergence_sum;
    * Normalizes the error between current `Center` variable and old `Center` variable.
    * @param[in] curr_iter_conv the current `Center` error.
    * @param[in] prev_iter_conv the old `Center` error.
    * @param[in] iter_counter the loop number.
    * @return normalized Euclidean distance between centers.
    * Onote The computation of the normalization formula is explained below:
                     if the current loop error is less or equal to the number of clusters, then normalized = 0.0
                     if the current iteration of the optimization loop is less or equal to 2, then normalized = 1.0
                     else, normalized = \frac{|curr_i ter_c onv - prev_i ter_c onv|}{\arg\max curr_i ter_c onv, prev_i ter_c onv}
   long double normalize_convergence(const long double curr_iter_conv, const long double prev_iter_conv, const int iter_counter)
           return curr_iter_conv > Nc && iter_counter > 2 ? std::abs(curr_iter_conv - prev_iter_conv) / std::max(curr_iter_conv, prev_iter_conv) :
                  iter_counter <= 2 ? 1.0 : 0.0;
                    Κώδικας 3.2.12: Η κεφαλίδα Interface.h
    * interface.h
    * In this header file, we define some functions which
    * implement a basic User Interface (UI) throughout the
    * execution of the K-means algorithm.
   #pragma once
   #include "Common.h"
void multidimentional_float_vector_interface(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Obj, std::string Obj_name);
void multidimentional_int_array_interface(const std::array<std::vector<int>, Nc>& Obj, std::string Obj_name);
void progress_interface(const int iter_counter, const long double iter_conv, const long double norm_iter_conv, const std::chrono::duration<double> loop_benchmark);
void kmeans_progress(const int iter_counter, const long double iter_conv, const long double norm_iter_conv, const std::chrono::duration<double> loop_benchmark, const int verbose);
void kmeans_termination(const std::pair<std::chrono::duration<double>, std::chrono::duration<double>>> bench_results, const long double iter_conv);
```

```
Κώδικας 3.2.13: Το αρχείο Interface.cpp
 1 #include "Interface.h"
     * Prints the contents of a vector of arrays.
     * Oparam[in] Obj the vector of arrays.
     * @param[in] obj_name the name of the variable.
     * Onote This function helps in printing the contents of the variables `Vec`, `old_Centers` and `new_Centers`.
    void multidimentional_float_vector_interface(const std::vector<std::array<float, Nv>>& Obj, std::string Obj_name)
            for (int i = 0; i < Obj.size(); i += 1)
                    for (int j = 0; j < Obj.at(i).size(); j += 1)
                           std::cout << std::setw(11) << Obj_name << "[" << i << "][" << j << "]:\t" << std::setw(18) << Obj.at(i)[j] << " ";
                    std::cout << std::endl;</pre>
            std::cout << std::endl << std::endl;</pre>
     * Prints the contents of an array of vectors.
     * {\it Cparam[in]} Obj the array of vectors.
     * {\it Cparam[in]} obj_name the name of the variable.
     * Onote This function helps in printing the contents of the variable `Classes`.
    void multidimentional_int_array_interface(const std::array<std::vector<int>, Nc>& Obj, std::string Obj_name)
            for (int i = 0; i < Obj.size(); i += 1)
                    for (int j = 0; j < Obj[i].size(); j += 1)
                            std::cout << Obj_name << "[" << i << "][" << j << "]: " << std::setw(4) << Obj[i].at(j) << " ";
                            if (j % 6 == 0 && j != 0)
                                    std::cout << std::endl;</pre>
                    std::cout << std::endl << std::endl;</pre>
            std::cout << std::endl << std::endl;</pre>
     st Prints the progress of the K-means algorithm.
     * @param[in] iter_counter the current loop number.
    * @param[in] iter_conv the current loop error.
    * @param[in] norm_iter_conv the current normalized loop error.
     * @param[in] loop_benchmark the current loop benchmark
    void progress_interface(const int iter_counter, const long double iter_conv, const long double norm_iter_conv, const std::chrono::duration<double> loop_benchmark)
            std::cout << "Iteration: " << std::setw(2) << iter_counter</pre>
                    << "\tError: " << std::setw(std::numeric_limits<float>::max_digits10) << iter_conv</pre>
                    << "\tNormalized error: " << std::setw(std::numeric_limits<float>::max_digits10) << norm_iter_conv</pre>
                    << "\tLoop benchmark: " << std::setw(std::numeric_limits<double>::max_digits10) << loop_benchmark.count();</pre>
            TEST_MODE == 1 ? (std::cout << std::endl << std::endl) : std::cout << std::endl;</pre>
     * Calls `progress_interface` function to print K-means progress.
     * @param[in] iter_counter the current loop number.
     * @param[in] norm_iter_conv the current normalized loop error.
     * @param[in] iter_conv the current loop error.
     * @param[in] loop_benchmark the current loop benchmark
     * @param[in] verbose the frequency used for activating the interface
                      if equal to 0, then `progress_interface` is called every 4 loops
                      if equal to 1, then `progress_interface` is called every 3 loops
                      if equal to 2, then `progress_interface` is called every 2 loops
                      if equal to 3, then `progress_interface` is called in every loop
     * @see `progress_interface`
    void kmeans_progress(const int iter_counter, const long double iter_conv, const long double norm_iter_conv, const std::chrono::duration<double> loop_benchmark, const int verbose)
            switch (verbose)
            case 0: if (iter_counter % 4 == 0) { progress_interface(iter_counter, iter_conv, norm_iter_conv, loop_benchmark); }
            case 1: if (iter_counter % 3 == 0) { progress_interface(iter_counter, iter_conv, norm_iter_conv, loop_benchmark); }
            case 2: if (iter_counter % 2 == 0) { progress_interface(iter_counter, iter_conv, norm_iter_conv, loop_benchmark); }
            case 3: if (iter_counter % 1 == 0) { progress_interface(iter_counter, iter_conv, norm_iter_conv, loop_benchmark); }
           default:
                    break;
     * Prints the resuts of the K-means algorithm.
     * @param[in] bench_results the benchmarking results.
     * @param[in] iter_conv the final normalized K-means error.
103
     * @see `Benchmark.h`
   void kmeans_termination(const std::pair<std::chrono::duration<double>, std::chrono::duration<double>>> bench_results, const long double iter_conv)
           std::cout << std::endl
                   << std::setw(18) << "[TOTAL TIME] " << std::setw(15) << bench_results.first.count()</pre>
                    << " {IN SECONDS}" << std::endl</pre>
110
                   << std::setw(18) << "[K-MEANS BENCH] " << std::setw(15) << bench_results.second.count()</pre>
111
                    << " {IN SECONDS}" << std::endl</pre>
                    << std::setw(18) << "[CONVERGENCE] " << std::setw(15) << iter_conv << std::endl;</pre>
114 }
```

const std::chrono::time\_point<std::chrono::system\_clock> loop\_benchmark,

std::chrono::duration<double> k\_means\_benchmark = end - loop\_benchmark;

std::pair<std::chrono::duration<double>>, std::chrono::duration<double>> bench\_res;

const std::chrono::time\_point<std::chrono::system\_clock> end)

std::chrono::duration<double> elapsed\_seconds = end - start;

bench\_res.first = elapsed\_seconds;
bench\_res.second = k\_means\_benchmark;

return bench\_res;

```
Κώδικας 3.2.14: Η κεφαλίδα Benchmark.h
   * Benchmark.h
    * In this header file, we define some functions that help us
    * benchmark some crucial parts of the K-means algorithm. Using
    * these functions, we can benchmark the K-means runtime, as well as
    * how long did it take for our implementation to converge.
   #pragma once
  #include "Common.h"
  std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> init_benchmark(void);
std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> bench_convergence(void);
std::chrono::duration<double> bench_loop(std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock>, std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock>);
std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> terminate_bench(void);
std::pair<std::chrono::duration<double>, std::chrono::duration<double>> benchmark_results(std::chrono::system_clock> start, std::chrono::system_clock> loop_benchmark, std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> end);
                  Κώδικας 3.2.15: Το αρχείο Benchmark.cpp
1 #include "Benchmark.h"
   /**
    * Launches benchmark.
    * \mathit{@return} the starting timepoint of the K-means algorithm.
  std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> init_benchmark(void)
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> start = std::chrono::system_clock::now();
          return start;
   * Launches K-means optimization loop benchmark.
    st @return the starting timepoint of the K-means optimization loop.
   * @see kmeans.cpp
  std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> bench_convergence(void)
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> loop_benchmark = std::chrono::system_clock::now();
          return loop_benchmark;
    * Computes per-loop benchmark.
    * @param[in] startpoint loop starting time point
   * @param[in] endpoint loop ending time point
    * @return optimization loop benchmark.
   * @see kmeans.cpp
  std::chrono::duration<double> bench_loop(std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> startpoint, std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> endpoint)
          return endpoint - startpoint;
   * Stops K-means benchmark.
    * @return the ending timepoint of the K-means algorithm.
  std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> terminate_bench(void)
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> end = std::chrono::system_clock::now();
          return end;
    * Computes K-means benchmarking results.
    * @param[in] start the starting timepoint of the K-means algorithm.
    * @param[in] loop_benchmark the starting timepoint of the K-means optimization loop.
    * @param[in] end the ending timepoint of the K-means algorithm.
    * @return a pair with the total execution time of the K-means algorithm in seconds
                    and the total time in seconds that the algorithm needed to converge.
  std::pair<std::chrono::duration<double>, std::chrono::duration<double>> benchmark_results(
          const std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> start,
```

```
Κώδικας 3.2.16: Η κεφαλίδα Validation.h
   * Validation.h
   * In this header file, we define some functions which
   * help the developer validate the data computed.
   * This is done by exporting the data to CSV files.
  #pragma once
  #include "Common.h"
void export_multidimentional_float_vector(const std::vector<std::array<float, Nv>> Obj, std::string filename);
void export_multidimentional_integer_array(const std::array<std::vector<int>, Nc> Obj, std::string filename);
void track_kmeans_progress(int iter_counter, long double norm_iter_conv);
void export_kmeans_progress(std::string filename);
                   Κώδικας 3.2.17: Το αρχείο Validation.cpp
1 #include "Validation.h"
  static std::vector<std::pair<int, long double>> kmeans_progress;
                                                                                                                          ///< Variable used to store K-means progress
   * Exports the contents of a vector of arrays to a CSV file.
   * @param[in] Obj the vector of arrays.
   * @param[in] filename the name of file.
   * Onote This function helps in exporting the contents of the variables `Vec`, `old_Centers` and `new_Centers`.
  void export_multidimentional_float_vector(const std::vector<std::array<float, Nv>> Obj, std::string filename)
          std::ofstream export_stream;
                                                                                                                              ///< Defines an output file stream
          export_stream.open("./data/" + filename + ".csv");
                                                                                                                            ///< Associates `export_stream` with a CSV file named after the `filename` variable
          for (int i = 0; i < Obj.size(); i += 1)</pre>
                                                                                                                                 ///< Loops through `Obj`
                  for (int j = 0; j < Obj.at(i).size(); j += 1)
                                                                                                                               ///< Loops through the elements of the array inside `Obj` that is being parsed
                          export_stream << Obj.at(i)[j] << (j < Obj.at(i).size() - 1 ? "," : "");
                                                                                                                                ///< Exports element of that array to the `export_stream` file stream
                  export_stream << std::endl;</pre>
          export_stream.close();
                                                                                                                                ///< Closes file stream
   * Exports the contents of an array of vectors into a CSV file.
   * @param[in] Obj the array of vectors.
   * Oparam[in] filename the name of file.
   * Onote This function helps in printing the contents of the variable `Classes`.
  void export_multidimentional_integer_array(const std::array<std::vector<int>, Nc> Obj, std::string filename)
          std::ofstream export_stream;
                                                                                                                              ///< Defines an output file stream
          export_stream.open("./data/" + filename + ".csv");
                                                                                                                            ///< Associates `export_stream` with a CSV file named after the `filename` variable
          for (int i = 0; i < Obj.size(); i += 1)</pre>
                                                                                                                                 ///< Loops through `Obj`
                                                                                                                            ///< Loops through the elements of the vector inside `Obj` that is being parsed
                  for (int j = 0; j < Obj[i].size(); j += 1)
                          export_stream << Obj[i].at(j) << (j < Obj.at(i).size() - 1 ? "," : "");
                                                                                                                                 ///< Exports element of that vector to the `export_stream` file stream
                  export_stream << std::endl;</pre>
          export_stream.close();
                                                                                                                                ///< Closes file stream
   * Updates `kmeans_progress` variable, which will be used to export data about K-means progress.
   * @param[in] iter_counter the current loop number.
   * @param[in] norm_iter_conv the current normalized loop error.
  void track_kmeans_progress(int iter_counter, long double norm_iter_conv)
          kmeans_progress.push_back(std::make_pair(iter_counter, norm_iter_conv));
   * Exports the contents of the `kmeans_progress` variable into a CSV file.
   * Oparam[in] filename the name of file.
  void export_kmeans_progress(std::string filename)
                                                                                                                             ///< Defines an output file stream
          std::ofstream export_stream;
                                                                                                                            ///< Associates `export_stream` with a CSV file named after the `filename` variable
          export_stream.open("./data/" + filename + ".txt");
          for (int i = 0; i < kmeans_progress.size(); i += 1)</pre>
                                                                                                                             ///< Loops through `kmeans_progress`
                  export_stream <<
                          "Iteration: " << kmeans_progress.at(i).first <<
                          "Convergence: " << kmeans_progress.at(i).second << std::endl;</pre>
                                                                                                                               ///< Exports an element of `kmeans_progress` vector to the `export_stream` file stream
                                                                                                                               ///< Closes file stream
          export_stream.close();
```

Κώδικας 3.2.18: Η κεφαλίδα kmeans.h

```
* kmeans.h
   * In this header file, we include all the
   * custom made header files used in the
   * K-means algorithm.
  #pragma once
  #include "Vec.h"
  #include "Center.h"
13 #include "Class.h"
#include "Optimize.h"
#include "Distance.h"
16 #include "Interface.h"
#include "Benchmark.h"
18 #include "Validation.h"
                   Κώδικας 3.2.19: Το αρχείο kmeans.cpp
1 #include "kmeans.h"
  /**
   * Implements K-means clustering algorithm.
   * Oreturn O, if the executable was terminated normally.
  int main(void)
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> loop_benchmark, prev_loop_benchmark, start;
                                                                                                                     ///< Initializes loop-wise benchmark variables
                                                                                                                     ///< Sets output precision for long doubles
          std::cout.precision(std::numeric_limits<float>::max_digits10);
          prev_loop_benchmark = start = init_benchmark();
                                                                                                                      ///< Starts custom benchmark
          std::vector<std::array<float, Nv>> Vec;
                                                                                                                      ///< Initializes the `Vec` variable
          Vec.reserve(N);
                                                                                                                                                                                                    ///< Reserves `N` blocks of memory to increase speed
          vec_init(Vec);
                                                                                                                                                                                                   ///< Fills `Vec` with random real numbers
          multidimentional_float_vector_interface(Vec, "Vec");
                                                                                                                   ///< Outputs `Vec` contents
          export_multidimentional_float_vector(Vec, "Vec");
                                                                                                                ///< Exports `Vec` contents to CSV file
          std::vector<std::array<float, Nv>> old_Center;
                                                                                                                     ///< Initializes `old_Center` variable, which holds centroids
          old_Center.reserve(Nc);
                                                                                                                                                                                             ///< Reserves `Nc` blocks of memory to increase speed
                                                                                                                     ///< Fills `old_Center` with random vectors from `Vec`
          init_centers(Vec, old_Center);
          multidimentional_float_vector_interface(old_Center, "old_Center");
                                                                                                                  ///< Outputs `old_Center` contents
          export_multidimentional_float_vector(old_Center, "old_Center");
                                                                                                                      ///< Exports `old_Center` contents to CSV file
          std::vector<std::array<float, Nv>> new_Center;
                                                                                                                     ///< Initializes the `new_Center` variable, which holds optimized centroids
          new_Center.reserve(Nc);
                                                                                                                                                                                             ///< Reserves `Nc` blocks of memory to increase speed
          long double iter_conv = std::numeric_limits<double>::infinity();
                                                                                                                ///< Initializes `iter_conv` variable, which holds the sum of distances betweens `Vec` and `new_Center`
                                                                                                                     ///< Initializes `norm_iter_conv` variable, which holds the normalized value of `iter_conv`
          long double norm_iter_conv = std::numeric_limits<double>::infinity();
                                                                                                                 ///< Initializes `Classes` variable, which holds all cluster pointers
          std::array<std::vector<int>, Nc> Classes;
                                                                                                                    ///< K-means optimization loop benchmark
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> optimization_benchmark = init_benchmark();
          for (int iter_counter = 1; norm_iter_conv > THR_KMEANS; iter_counter += 1)
                                                                                                                  ///< K-means optimazation loop
                  std::chrono::duration<double> bench_res =
                         bench_loop(prev_loop_benchmark, loop_benchmark = init_benchmark());
                                                                                                                   ///< Benchmarks loop
                  kmeans_progress(iter_counter, iter_conv, norm_iter_conv, bench_res, VERBOSITY);
                                                                                                                      ///< Outputs K-means progress
                  track_kmeans_progress(iter_counter, norm_iter_conv);
                                                                                                                   ///< Stores K-means progress
                  compute classes(Vec, old Center, Classes);
                                                                                                                  ///< Re-computes `Classes` contents
                                                                                                                 ///< Outputs `Classes` contents
                  multidimentional_int_array_interface(Classes, "Classes");
                 export_multidimentional_integer_array(Classes, "Classes" + std::to_string(iter_counter));
                                                                                                                 ///< Exports `Classes` contents to CSV file
                  optimize_center(Vec, new_Center, Classes);
                                                                                                                 ///< Computes error of current clusters and stores it to the variable `new_Center`
                  multidimentional_float_vector_interface(new_Center, "new_Center");
                                                                                                                 ///< Outputs `new_Center` contents
                  export_multidimentional_float_vector(new_Center, "new_Center" + std::to_string(iter_counter));
                                                                                                                     ///< Exports `new_Center` contents to CSV file
                                                                                                                      ///< Stores previous `iter_conv` to use it to normalize convergence
                  long double prev_iter_conv = iter_conv;
                                                                                                               ///< Computes convergence of current K-means loop
                  iter_conv = convergence(new_Center, old_Center);
                  norm_iter_conv = normalize_convergence(iter_conv, prev_iter_conv, iter_counter);
                                                                                                                ///< Normalizes `iter_conv` to avoid overfitting
                  old_Center.swap(new_Center);
                                                                                                                   ///< Swaps `old_Center` with `new_Center` to start the next loop
                  multidimentional_float_vector_interface(old_Center, "old_Center");
                                                                                                                  ///< Outputs `old_Center` contents
          std::chrono::time_point<std::chrono::system_clock> end = terminate_bench();
                                                                                                                  ///< Initializes the endpoint of K-means benchmark
          std::pair<std::chrono::duration<double>> bench_res =
                  benchmark_results(start, optimization_benchmark, end);
                                                                                                                     ///< Stores benchmark results
          kmeans_termination(bench_res, norm_iter_conv);
                                                                                                                     ///< Outputs benchmark results
          export_kmeans_progress("kmeans_results");
                                                                                                                ///< Exports K-means progress into a CSV file
          return 0;
```