K-means: Análise de desempenho e energia em duas implementações

Henrique Lindemann

INF01063 – 2025/2
Professor: **Luigi Carro**

UFRGS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

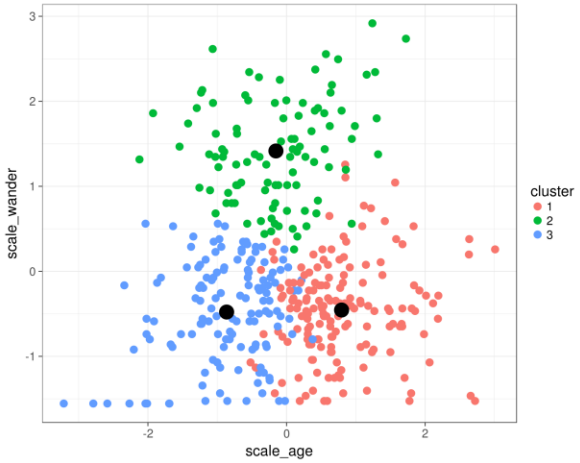
.inf
INSTITUTO DE INFORMÁTICA
UFRGS

Agenda

1. **K-means:** Visão geral do algoritmo
2. **Três implementações:** *text-book* ***x*** *SoA + SIMD* ***x*** *SoA + SIMD + Loop Unroll*
3. **Medições do desempenho:** O que é coletado e variações de K
4. ***Dataset*:** Explicação geral
5. **Resultados:** Muita coisa!
6. **Conclusões**

K-means

Retirado de *https://rpubs.com/cyobero/k-means*, **K-Means Clustering Tutorial.** Acesso em 15/11/25.



Função: Agrupamento em k clusteres;

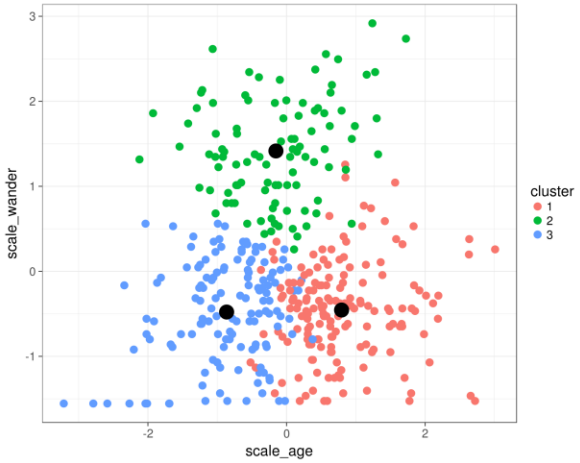
***Means*:** "médias" de todos pontos gera o centroide do cluster;

Processo:

1. **Inicialização:**
   - Escolhe K centroides aleatórios
2. **Atribuição:**
   - Calcula a distância de cada ponto a todos centroides
   - Cada ponto é atribuído ao centroide mais próximo
3. **Atualização:**
   - Recalcula novos centroides: média de todos pontos atribuídos a ele
4. **Repetição:**
   - Repete os passos 2 e 3 até convergência

K-means

Retirado de *https://rpubs.com/cyobero/k-means*, **K-Means Clustering Tutorial.** Acesso em 15/11/25.



Função: Agrupamento em k clusteres;

***Means*:** "médias" de todos pontos gera o centroide do cluster;

Processo:

1. **Inicialização:**
   - Escolhe K centroides aleatórios
2. **Atribuição:**
   - Calcula a distância de cada ponto a todos centroides
   - Cada ponto é atribuído ao centroide mais próximo
3. **Atualização:**
   - Recalcula novos centroides: média de todos pontos atribuídos a ele
4. **Repetição:**
   - Repete os passos 2 e 3 até convergência

Etapa mais custosa:
*Precisa varrer **todos** os pontos para **todos** K centroides.*
Acesso massivo à memória!

K-means: Implementação *naive*

Cada ponto é representado como uma estrutura contígua (forma Array of Structs – AoS)

```
typedef struct {
    float features[NUM_FEATURES];  // 7 features
    int cluster_id;
} DataPoint;

DataPoint points[N];  // [p0: f0,f1,...,f6][p1: f0,f1,...,f6]...
```

Ou seja, para acessar uma feature específica de todos pontos, toda a memória (com as 7 features) vai ter que ser percorrida.

Resultado: Menor localidade de dados! *Se tratando de uma feature específica.*

K-means: Implemer

Cada ponto é representado como uma estrutura

```
typedef struct {
    float features[NUM_FEATURES]; //
    int cluster_id;
} DataPoint;

DataPoint points[N]; // [p0: f0,f1,.
```

Ou seja, para acessar uma feature espe
memória (com as 7 features) vai

Resultado: Menor localidade de da

rahulbhadani / kmeans.cpp

Last active 3 years ago • Report abuse

Code Revisions 3

K-means cluster of LiDAR 3D point cloud

kmeans.cpp

```
1  #include <cstdint>
2  #include <iostream>
3  #include <limits>
4  #include <algorithm>
5  #include <vector>
6  #include <cassert>
7  #include <random>
8
9  using namespace std;
10
11
12 struct Point {
13     float x;
14     float y;
15     float z;
16 };
17
18 /* Enter your code here. */
19 class Clustering {
20     vector<Point> points;
```

K-means: Implementação *naive*

Cada ponto é representado como uma estrutura contígua (forma Array of Structs – AoS)

```c
// Calcula distância euclidiana ao quadrado entre ponto e centroid
float euclidean_distance_aos(const DataPoint *p, const Centroid *c) {
    float dist = 0.0f;
    for (int i = 0; i < NUM_FEATURES; i++) {
        float diff = p->features[i] - c->features[i];
        dist += diff * diff;
    }
    return dist;
}
```

Distância é calculada **feature a feature**, *mas ponto a ponto*!
Ou seja, já existe certa localidade de pontos

Resultado: Menor localidade de dados! *Se tratando de uma feature específica.*

K-means: Otimizações pt.1

Os dados são organizados por feature. Cada feature é um array contendo seu valor para todos os pontos (forma Struct of Arrays – SoA)

```
typedef struct {
    float *feature_arrays[NUM_FEATURES];  // 7 arrays separados
    int *cluster_ids;
    size_t size;
} DataSetSoA;

// Layout: [all_f0][all_f1]...[all_f6][cluster_ids]
```

Para processar uma feature, a CPU lê um bloco da memória e acessa os dados de determinada feature para vários pontos.

Permite processamento paralelo de vários pontos simultaneamente e é especialmente eficaz em CUDA e SIMD/AVX.

Resultado: Maior localidade de dados de cada feature e paralelização!

K-means: Otimizações pt 1

Highly optimized CUDA implementation of k-means algorithm

A novel, highly-optimized CUDA implementation of the k-means clustering algorithm. The approach is documented in a conference paper here (link to the paper text can be found here):

> Kruliš, Martin, and Miroslav Kratochvíl. "Detailed Analysis and Optimization of CUDA K-means Algorithm." *49th International Conference on Parallel Processing -- ICPP*. 2020.

This repository contains:

- k-means imeplentation and experimental code used for benchmarking
  - the actual CUDA k-means
  - a microbenchmark of bucket-wise sum of matrices in CUDA
- The measured results for several recent GPUs

Permite processamento paralelo de vários pontos simultaneamente e é especialmente eficaz em CUDA e SIMD/AVX.

Resultado: Maior localidade de dados de cada feature e paralelização!

K-me

Os dados são **ndo seu valor**

Highly optimized CUDA implementation of k-means algorithm

A novel, highly-optimized CUDA implementation of the k-means clustering algorithm. The approach is documented in a conference paper here (link to the paper text can be found here):

> Kruliš, Martin, and Miroslav Kratochvíl. "Detailed Analysis and Optimization of CUDA K-means Algorithm." *49th International Conference on Parallel Processing -- ICPP*. 2020.

This repository contains:

- k-means imeplentation and experimental code used for benchmarking
  - the actual CUDA k-means
  - a microbenchmark of bucket-wise sum of matrices in CUDA
- The measured results for several recent GPUs

cuda-kmeans / experimental / k-means / k-means / **k-means.cpp**

```
template<typename F = float, class LAYOUT = SoALayoutPolicy<32>, class LAYOUT_MEANS = SoALayoutPolicy<3
void run(bpp::ProgramArguments& args)
{
    std::size_t dim = (std::size_t)args.getArgInt("dim").getValue();
    std::size_t k = (std::size_t)args.getArgInt("k").getValue();
    std::size_t n = (std::size_t)args.getArgInt("N").getValue();

    std::cerr << "Generating input data (" << n << " x " << dim << ") ..." << std::endl;
    std::size_t seed = (args.getArg("seed").isPresent()) ? args.getArgInt("seed").getValue() : std::num
    if (args.getArg("seed").isPresent()) {
        std::cerr << "Seed is set to " << seed << std::endl;
    }

    std::vector<F> data(LAYOUT::size(n, dim));
```

cuda-kmeans / experimental / k-means / k-means / **k-means.cpp**

```
template<typename F = float, class LAYOUT = SoALayoutPolicy<32>, class LAYOUT_MEANS = SoALayoutPolicy<3
void run(bpp::ProgramArguments& args)
{
    std::size_t dim = (std::size_t)args.getArgInt("dim").getValue();
    std::size_t k = (std::size_t)args.getArgInt("k").getValue();
    std::size_t n = (std::size_t)args.getArgInt("N").getValue();

    std::cerr << "Generating input data (" << n << " x " << dim << ") ..." << std::endl;
    std::size_t seed = (args.getArg("seed").isPresent()) ? args.getArgInt("seed").getValue() : std::num
    if (args.getArg("seed").isPresent()) {
        std::cerr << "Seed is set to " << seed << std::endl;
    }

    std::vector<F> data(LAYOUT::size(n, dim));
```

pt.1

um array contendo seu valor

Arrays – SoA)

```
float *feature_arrays[NUM_FEATURES];  // 7 arrays separados
```

cuda-kmeans / experimental / k-means / k-means / headers / **layout_policies.hpp**

```
class SoALayoutPolicy
{
public:
    using precomputed_t = std::size_t;

    template<typename F>
    CUDA_CALLABLE_MEMBER static F& at(F* data, std::size_t idx, std::size_t
    {
        return data[dim * precomputed + idx];
    }
```

Para pro dados de

Per e é

Resultado: Maior localidade de dados de cada feature e paralelização!

K-means: Otimizações pt.2

Uso de registradores vetoriais (SIMD)

Só é possível por conta do SoA

```
__m256 vc0 = _mm256_set1_ps(c0);
__m256 vc1 = _mm256_set1_ps(c1);
__m256 vc2 = _mm256_set1_ps(c2);
__m256 vc3 = _mm256_set1_ps(c3);
__m256 vc4 = _mm256_set1_ps(c4);
__m256 vc5 = _mm256_set1_ps(c5);
__m256 vc6 = _mm256_set1_ps(c6);

// Carregar 8 pontos de cada feature
__m256 vf0 = _mm256_loadu_ps(&f0[start_idx]);
__m256 vf1 = _mm256_loadu_ps(&f1[start_idx]);
__m256 vf2 = _mm256_loadu_ps(&f2[start_idx]);
__m256 vf3 = _mm256_loadu_ps(&f3[start_idx]);
__m256 vf4 = _mm256_loadu_ps(&f4[start_idx]);
__m256 vf5 = _mm256_loadu_ps(&f5[start_idx]);
__m256 vf6 = _mm256_loadu_ps(&f6[start_idx]);

// Calcular diferenças
__m256 d0 = _mm256_sub_ps(vf0, vc0);
__m256 d1 = _mm256_sub_ps(vf1, vc1);
__m256 d2 = _mm256_sub_ps(vf2, vc2);
__m256 d3 = _mm256_sub_ps(vf3, vc3);
__m256 d4 = _mm256_sub_ps(vf4, vc4);
__m256 d5 = _mm256_sub_ps(vf5, vc5);
__m256 d6 = _mm256_sub_ps(vf6, vc6);

// Calcular quadrados e acumular
__m256 sum = _mm256_mul_ps(d0, d0);
sum = _mm256_fmadd_ps(d1, d1, sum);  // sum += d1²
sum = _mm256_fmadd_ps(d2, d2, sum);
sum = _mm256_fmadd_ps(d3, d3, sum);
sum = _mm256_fmadd_ps(d4, d4, sum);
sum = _mm256_fmadd_ps(d5, d5, sum);
sum = _mm256_fmadd_ps(d6, d6, sum);

// Armazenar resultados
_mm256_storeu_ps(distances, sum);
```

K-means: Otimizações pt.3

Outras otimizações:

Atualização de Centroides em *Single-Pass*

```
for (size_t i = 0; i < num_points; i++) {
    int cluster = points[i].cluster_id;
    if (cluster != -1) {
        // Acumula as features para o centroide do cluster
        for (int j = 0; j < NUM_FEATURES; j++) {
            new_centroids[cluster].features[j] += points[i].features[j];
        }
        cluster_counts[cluster]++;
    }
}
```

```
for (size_t i = 0; i < dataset->size; i++) {
    int cluster_id = cluster_ids[i];
    // Acumula todas as features em uma única passada
    sums[cluster_id][0] += feature0[i];
    sums[cluster_id][1] += feature1[i];
    sums[cluster_id][2] += feature2[i];
    sums[cluster_id][3] += feature3[i];
    sums[cluster_id][4] += feature4[i];
    sums[cluster_id][5] += feature5[i];
    sums[cluster_id][6] += feature6[i];
    counts[cluster_id]++;
}
```

K-means: Otimizações pt.4

Otimização em terceira versão:
loop *unroll para k* de 2 a 10

```
if (k == 2) {
    // Loop SIMD+Unroll para k=2
    for (size_t i = 0; i < n_simd; i += 8) {
        find_nearest_clusters_8_k2(f0, f1, f2, f3, f4, f5, f6, i, centroids, results);
        for (int j = 0; j < 8; j++) {
            const int old_cluster = cluster_ids[i + j];
            cluster_ids[i + j] = results[j];
            changes += (old_cluster != results[j]);
        }
    }
```

```
// SIMD: Calcula distâncias de 8 pontos para UM centroid simultaneamente
static inline void compute_distances_8_simd(
    const float * restrict f0, const float * restrict f1,
    const float * restrict f2, const float * restrict f3,
    const float * restrict f4, const float * restrict f5,
    const float * restrict f6, size_t start_idx,
    const float c0, const float c1, const float c2, const float c3,
    const float c4, const float c5, const float c6,
    float * restrict distances) {

    // Broadcast centroid values para vetores
    __m256 vc0 = _mm256_set1_ps(c0);
    __m256 vc1 = _mm256_set1_ps(c1);
    __m256 vc2 = _mm256_set1_ps(c2);
    __m256 vc3 = _mm256_set1_ps(c3);
    __m256 vc4 = _mm256_set1_ps(c4);
```

K-means: Os testes

1. *Versão **naive***
2. *Versão otimizada **SoA com SIMD***
3. *Versão otimizada **SoA com SIMD e loop unroll***

Framework

Disponível em: https://github.com/HenriqueLindemann/analise-k-means-com-perf



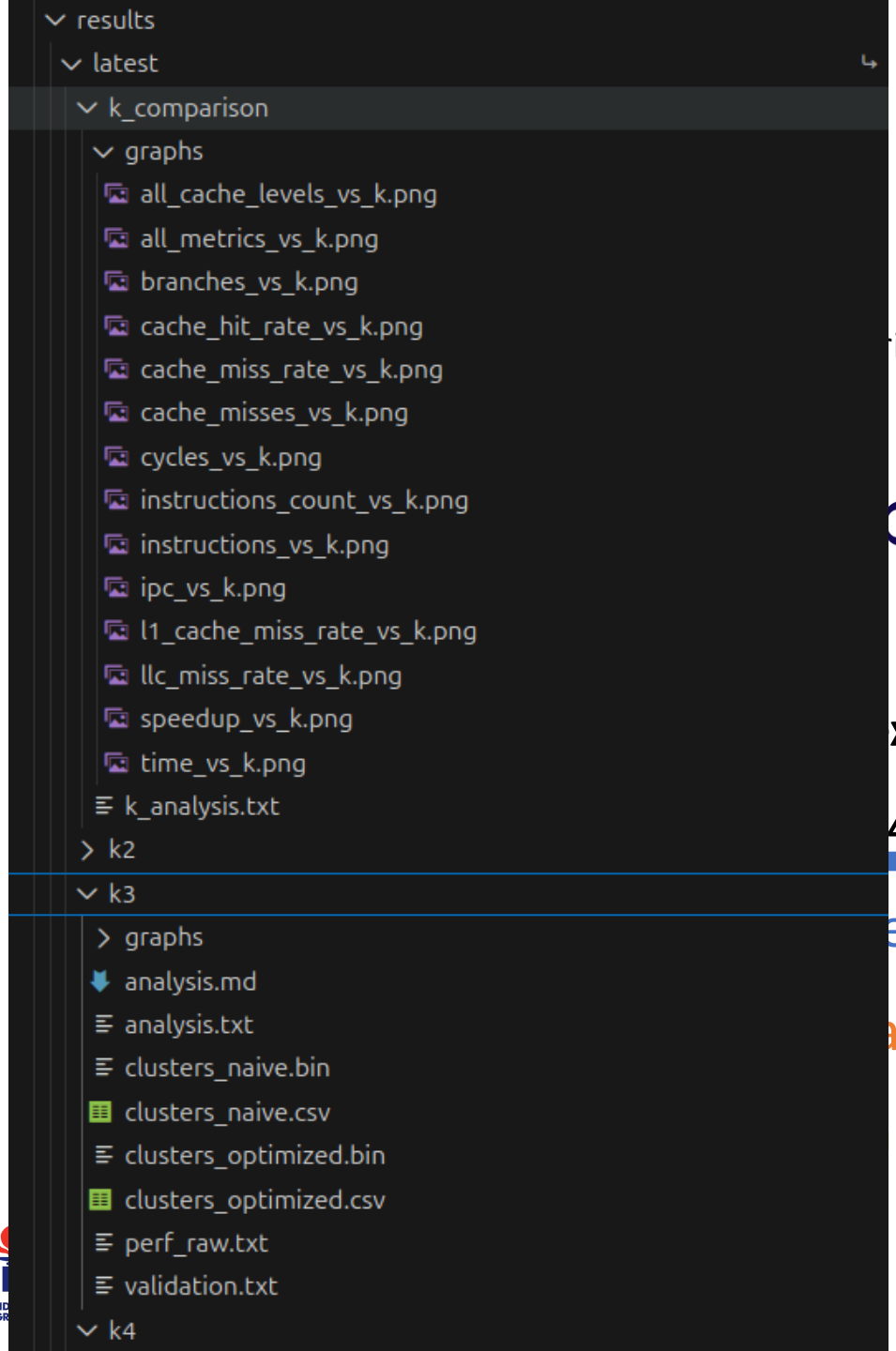

Comando usado para executar análise:

./run_full_analysis.sh "2 3 4 5 6 7 8 9 10" 100 15

Valores de K a serem testados

Número máximo de iterações do algoritmo

Número de runs para cada teste



riqueLindemann/analise-k-means-com-perf

pandas matplotlib

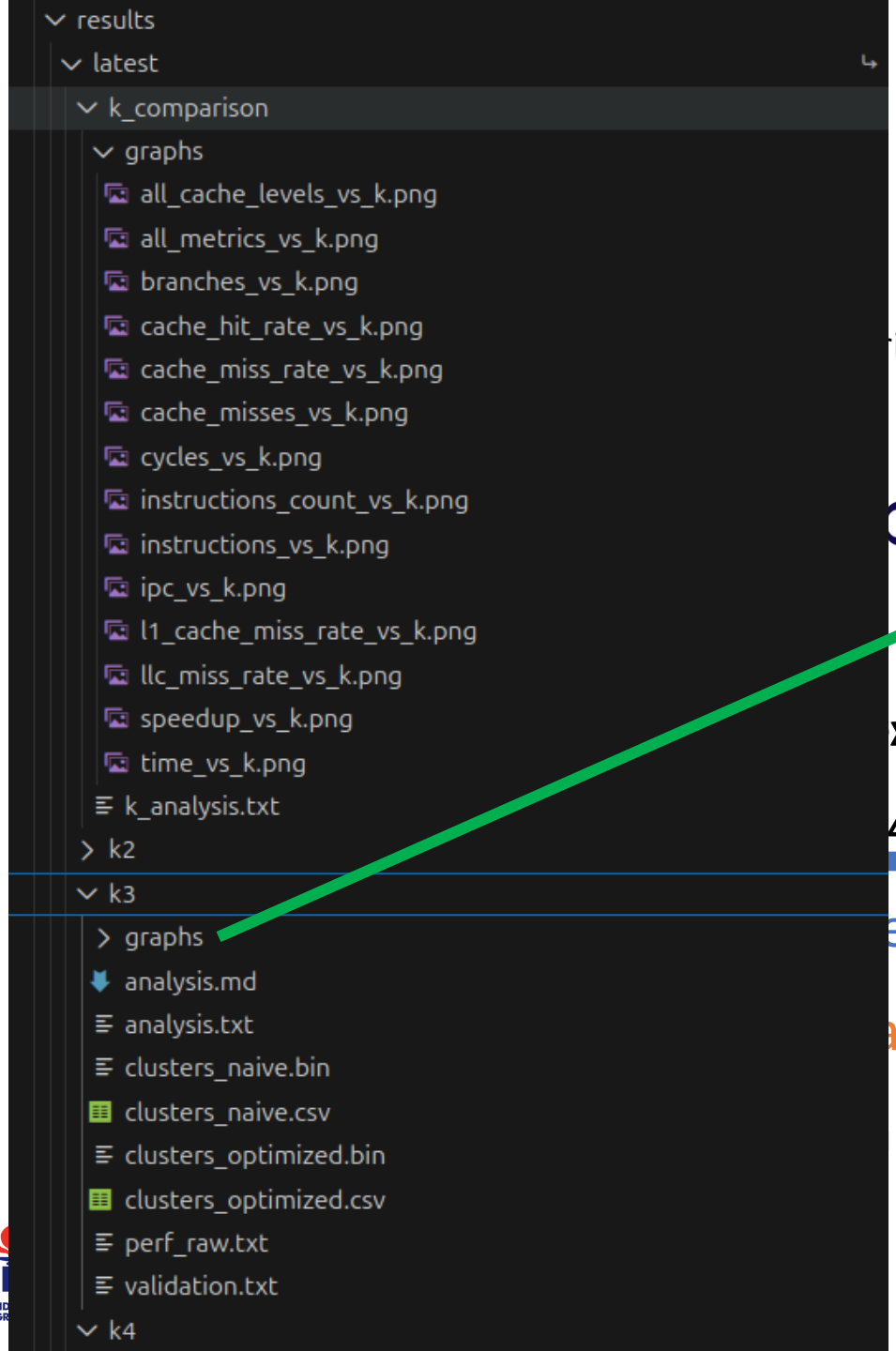
xecutar análise:

4 5 6 7 8 9 10" 100 15

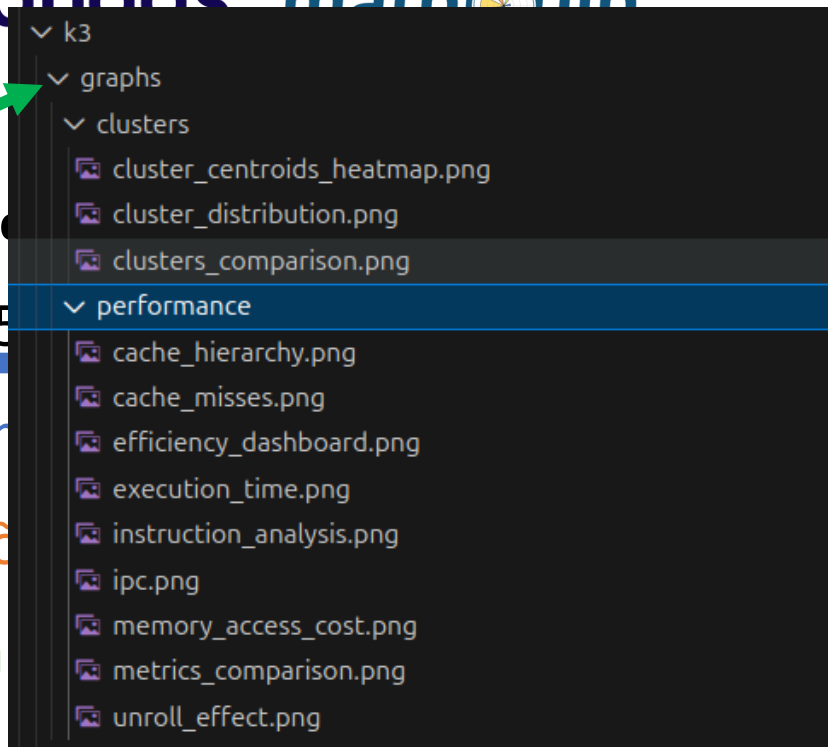
em testados

ações do algoritmo

ra cada teste



riqueLindemann/analise-k-means-com-perf



K-means: Verificação

Resultados das otimizações é verificado para cada K e implementação.

Garante resultados equivalentes para todas versões usando a mesma seed (que gera posições iniciais de centroides)

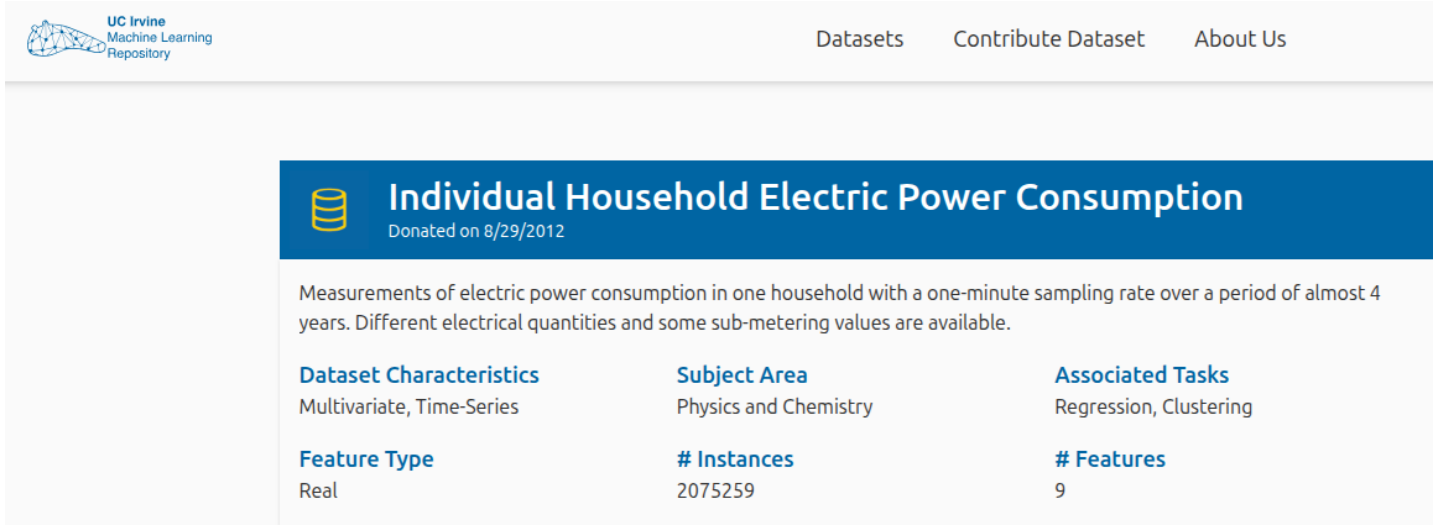
```
=== Comparing Centroids ===
  Naive cluster 0 <-> Optimized cluster 0: distance = 0.000000 ✓
  Naive cluster 1 <-> Optimized cluster 1: distance = 0.000015 ✓
  Naive cluster 2 <-> Optimized cluster 2: distance = 0.000034 ✓
  Naive cluster 3 <-> Optimized cluster 3: distance = 0.000046 ✓
  Naive cluster 4 <-> Optimized cluster 4: distance = 0.000000 ✓

Matches: 5/5

=== Comparing Cluster Distribution ===
Cluster | Naive Count | Optimized Count | Difference
--------|-------------|-----------------|------------
   0    |       46441 |           46441 | 0 (0.000%)
   1    |      647190 |          647190 | 0 (0.000%)
   2    |      148295 |          148294 | 1 (0.000%)
   3    |     1151987 |         1151988 | 1 (0.000%)
   4    |       55367 |           55367 | 0 (0.000%)

=== Comparing Inertia ===
  Naive inertia:     57948052.00
  Optimized inertia: 57948136.00
  Difference:        84.00 (0.000%)
```

K-means: Dataset

Individual Household Electric Power Consumption

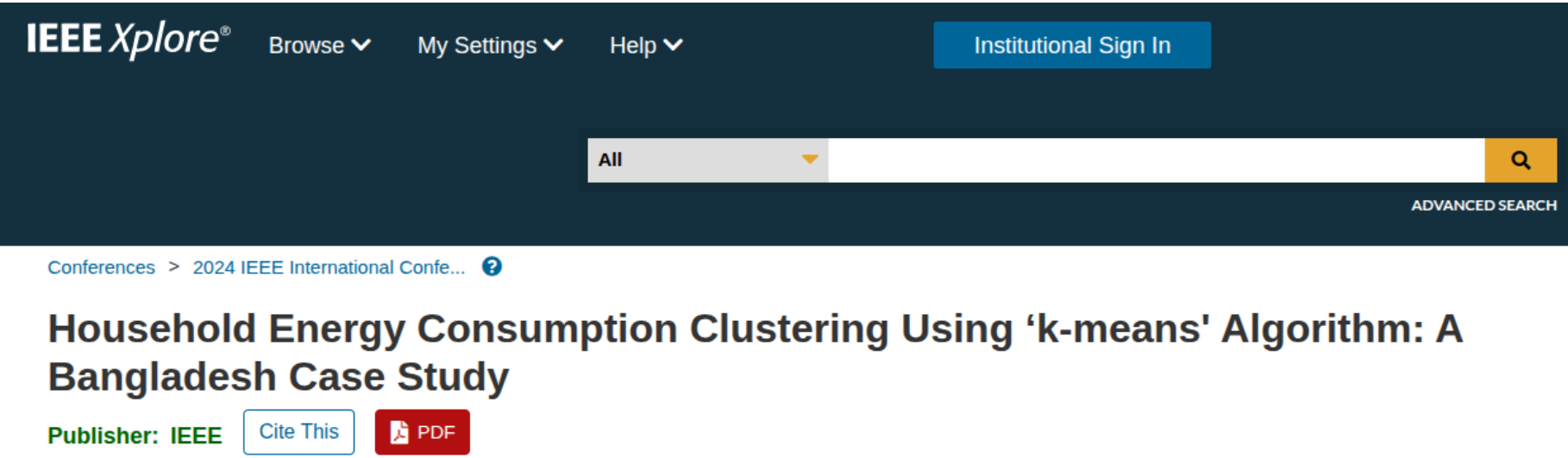
+ de 2 milhões de amostras, 7 features numéricas

Convertido para um arquivo binário para I/O rápido, isolando a medição apenas no algoritmo.

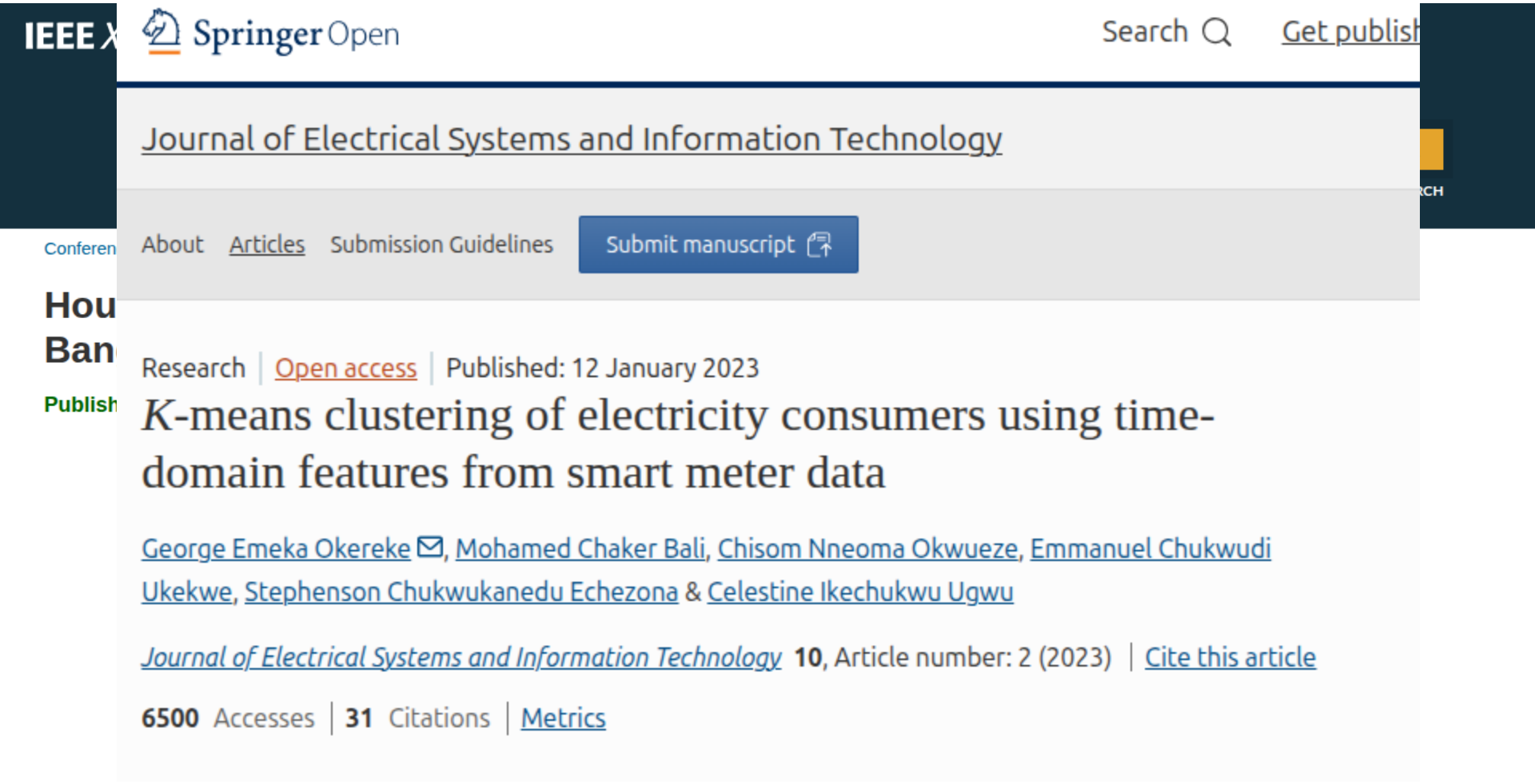


https://archive.ics.uci.edu/dataset/235/individual+household+electric+power+consumption

K-means: Dataset



K-means: Dataset



Springer Open

Search

Get publish

Journal of Electrical Systems and Information Technology

About Articles Submission Guidelines Submit manuscript

Research | Open access | Published: 12 January 2023

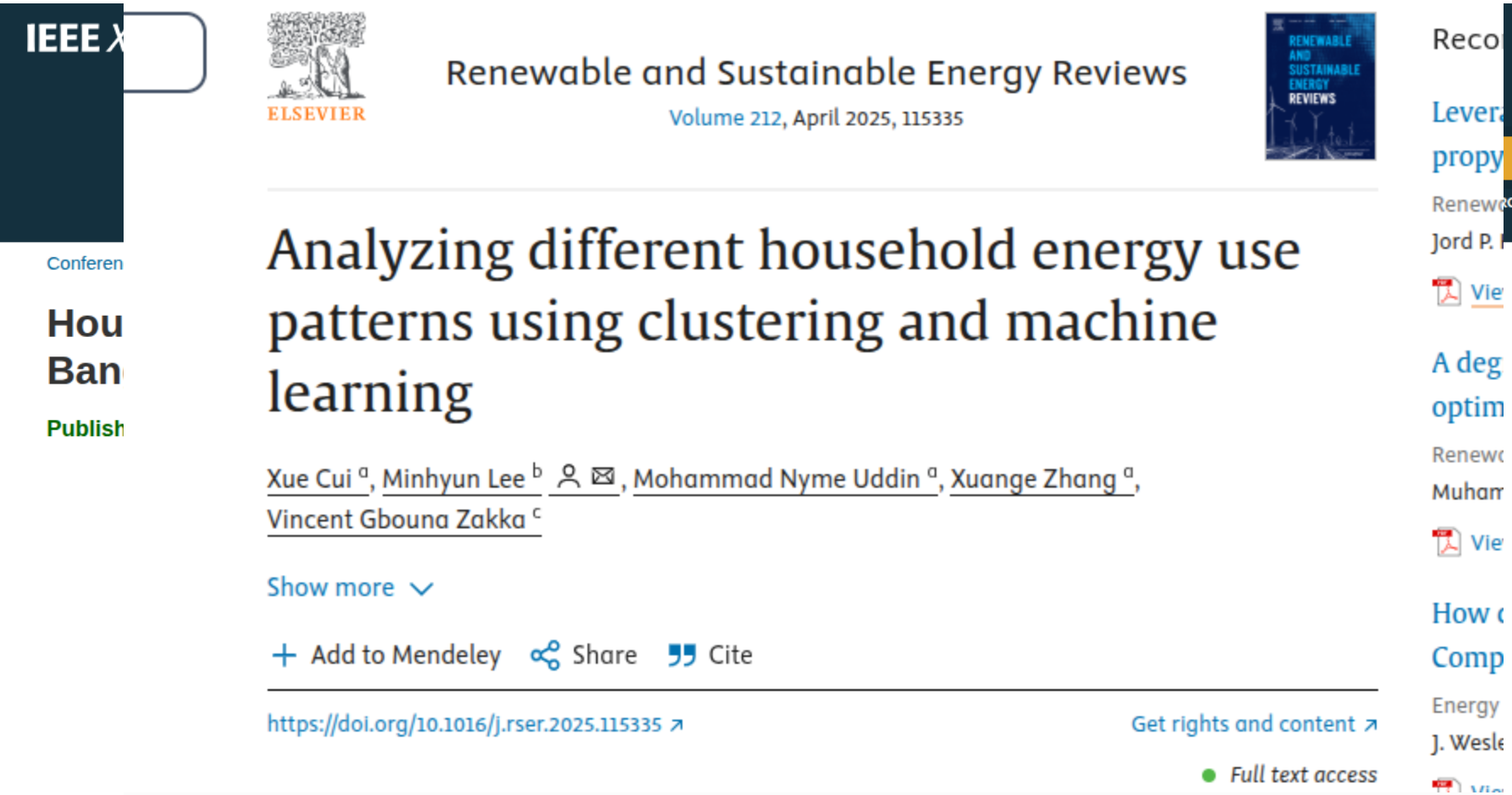
K-means clustering of electricity consumers using time-domain features from smart meter data

George Emeka Okereke, Mohamed Chaker Bali, Chisom Nneoma Okwueze, Emmanuel Chukwudi Ukekwe, Stephenson Chukwukanedu Echezona & Celestine Ikechukwu Ugwu

Journal of Electrical Systems and Information Technology **10**, Article number: 2 (2023) | Cite this article

6500 Accesses | **31** Citations | Metrics

K-means: Dataset



IEEE X

Conferen

Hou
Ban

Publish

ELSEVIER

Renewable and Sustainable Energy Reviews

Volume 212, April 2025, 115335

Analyzing different household energy use patterns using clustering and machine learning

Xue Cui [a], Minhyun Lee [b], Mohammad Nyme Uddin [a], Xuange Zhang [a], Vincent Gbouna Zakka [c]

Show more

+ Add to Mendeley Share Cite

https://doi.org/10.1016/j.rser.2025.115335

Get rights and content

Full text access

Reco

Lever
propy

Renew

Jord P.

Vie

A deg
optim

Renew

Muham

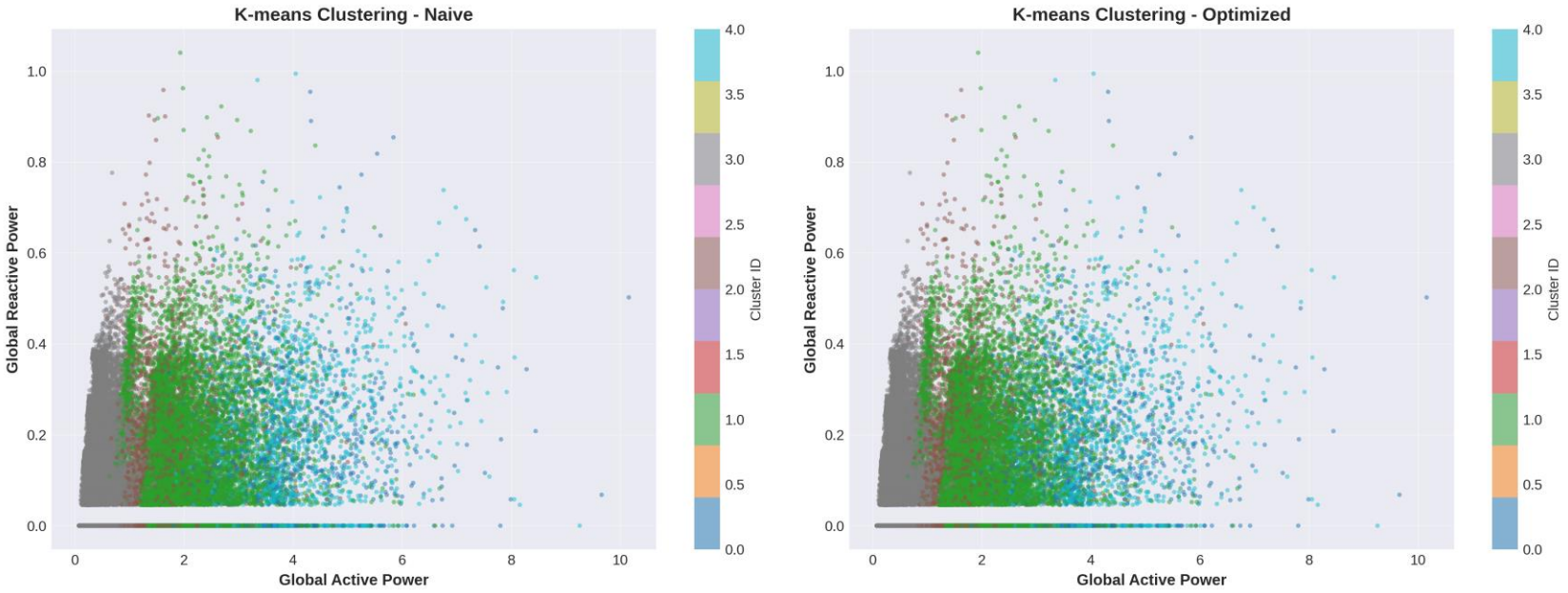
Vie

How
Comp

Energy

J. Wesle

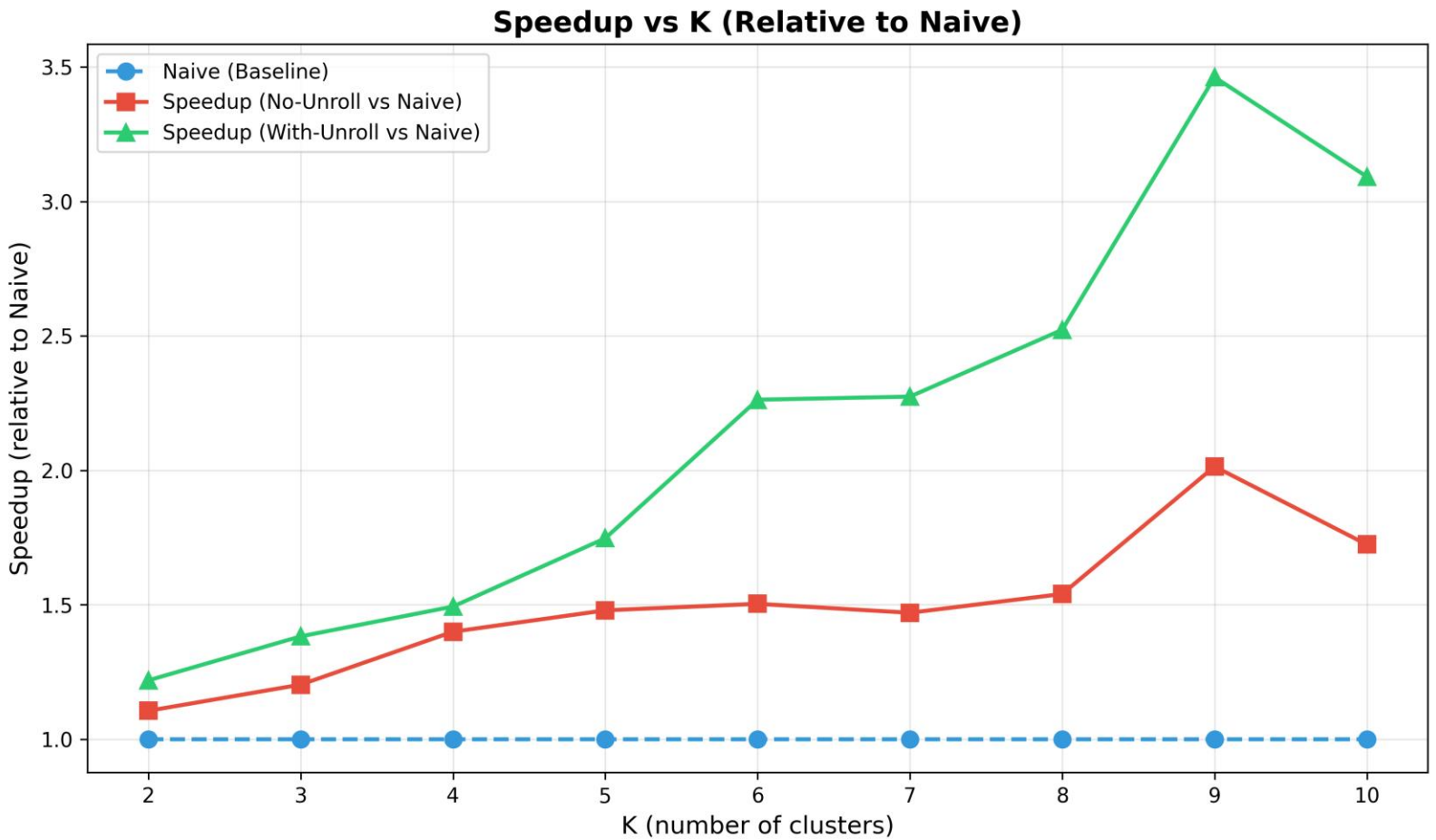
Resultados: O que está sendo feito?



Exemplo de clusterização com k=5.

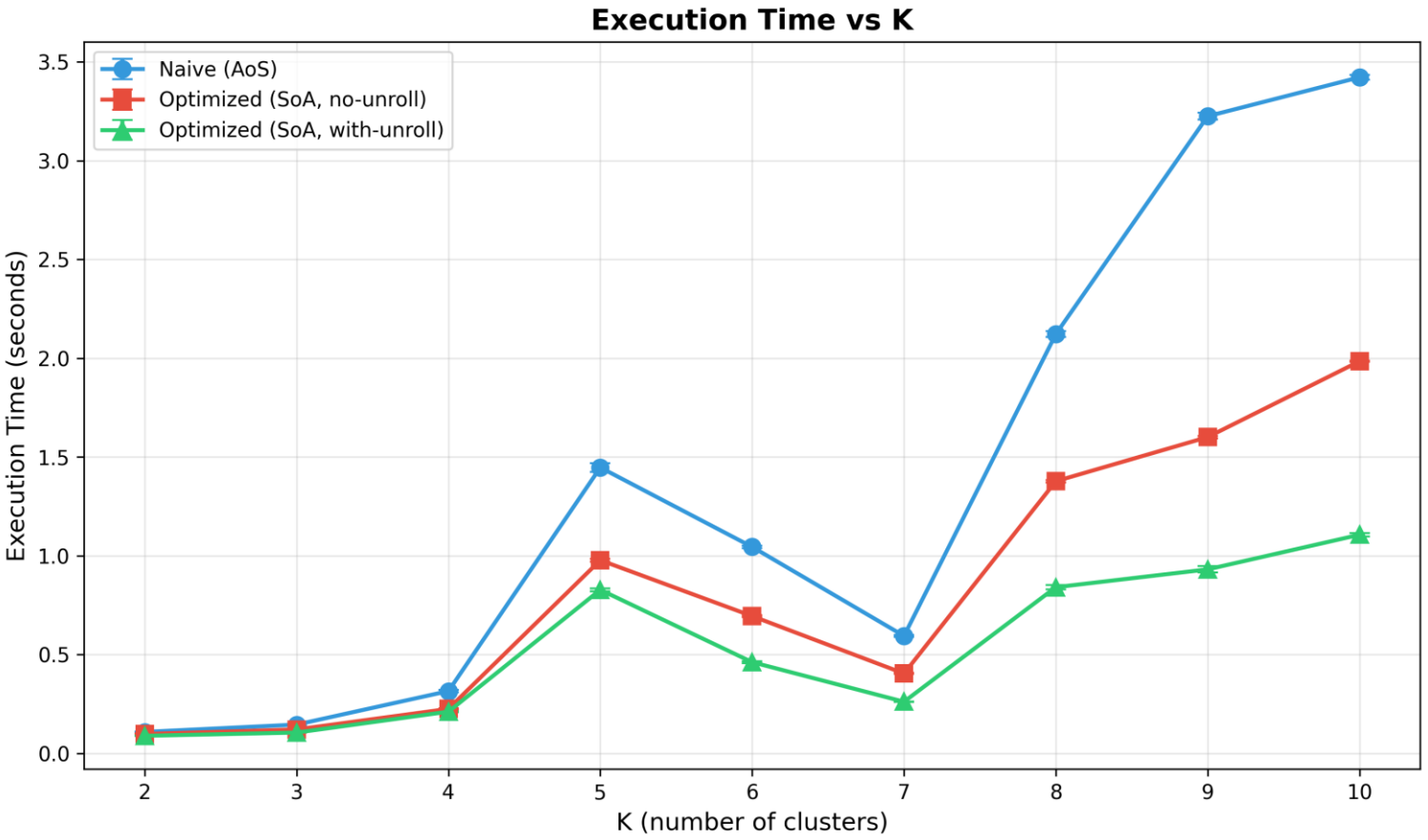
Resultados: visão geral

Muitos ganhos!



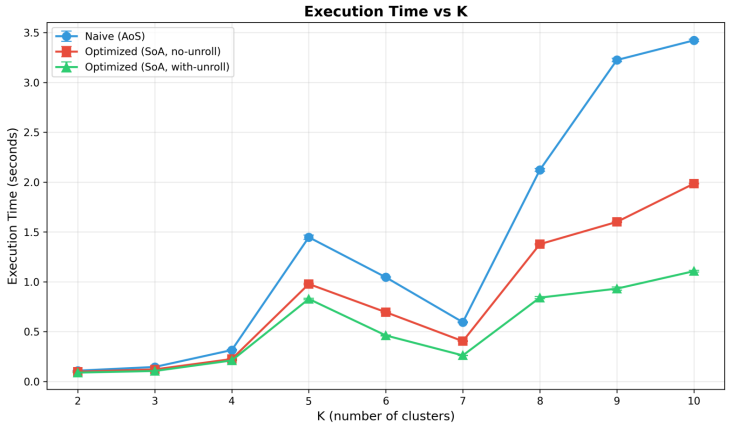
Resultados: visão geral

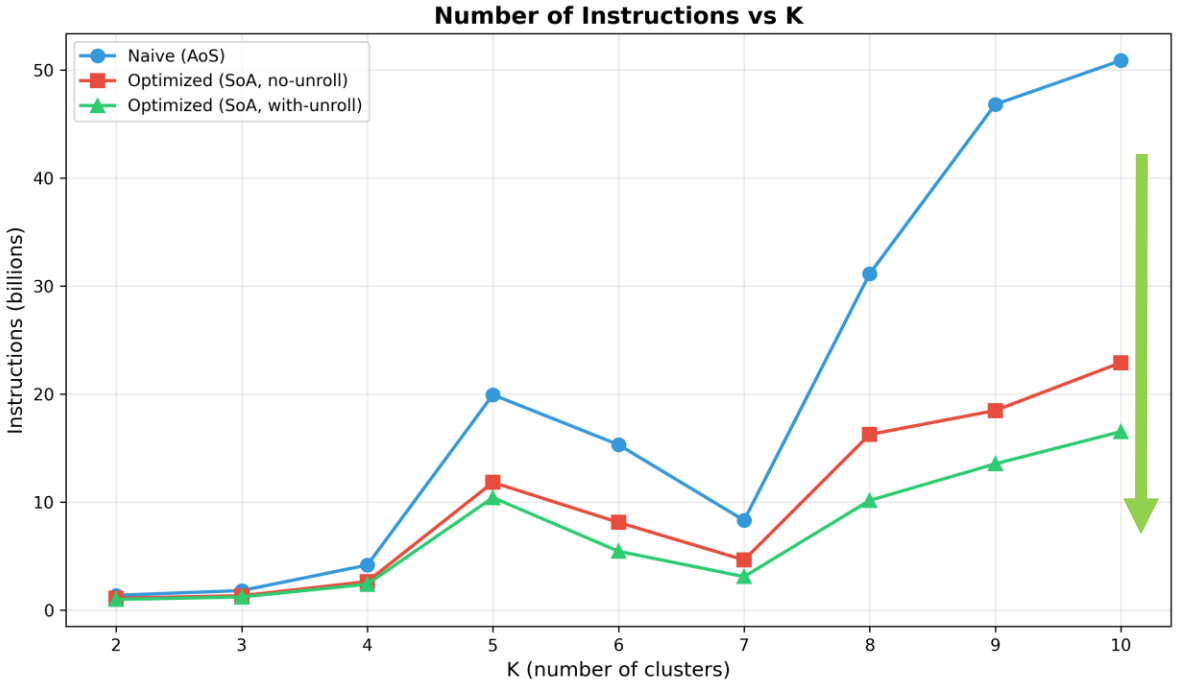
O que explica a queda de tempo de execução?



Resultados: visão geral

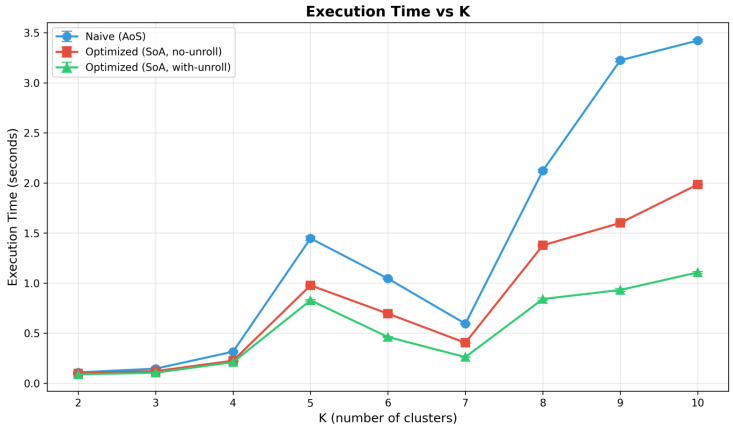
O que explica a queda de tempo de execução?

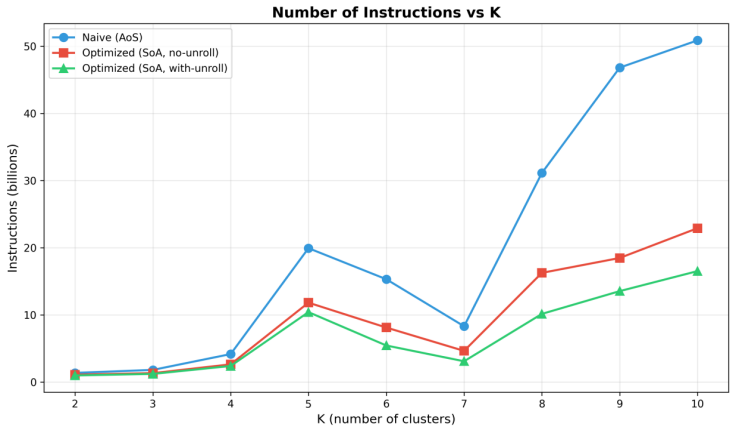


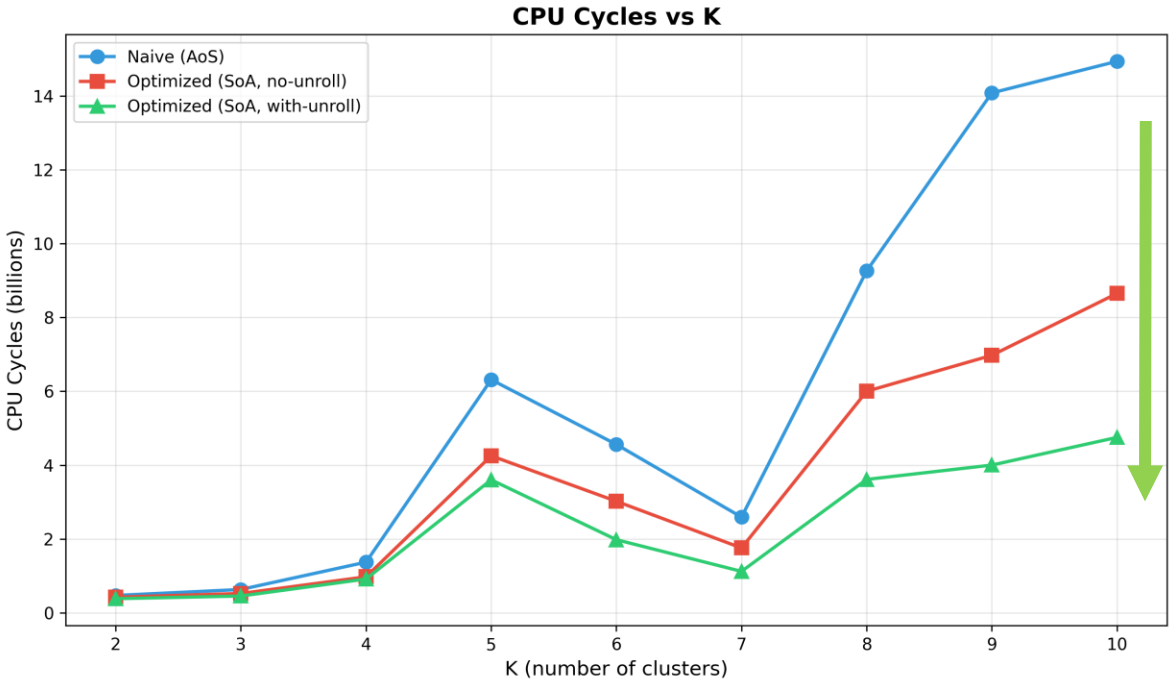


Resultados: visão geral

O que explica a queda de tempo de execução?

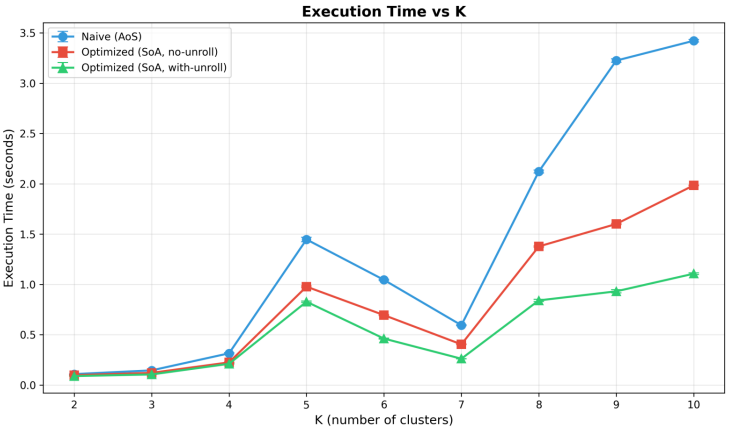


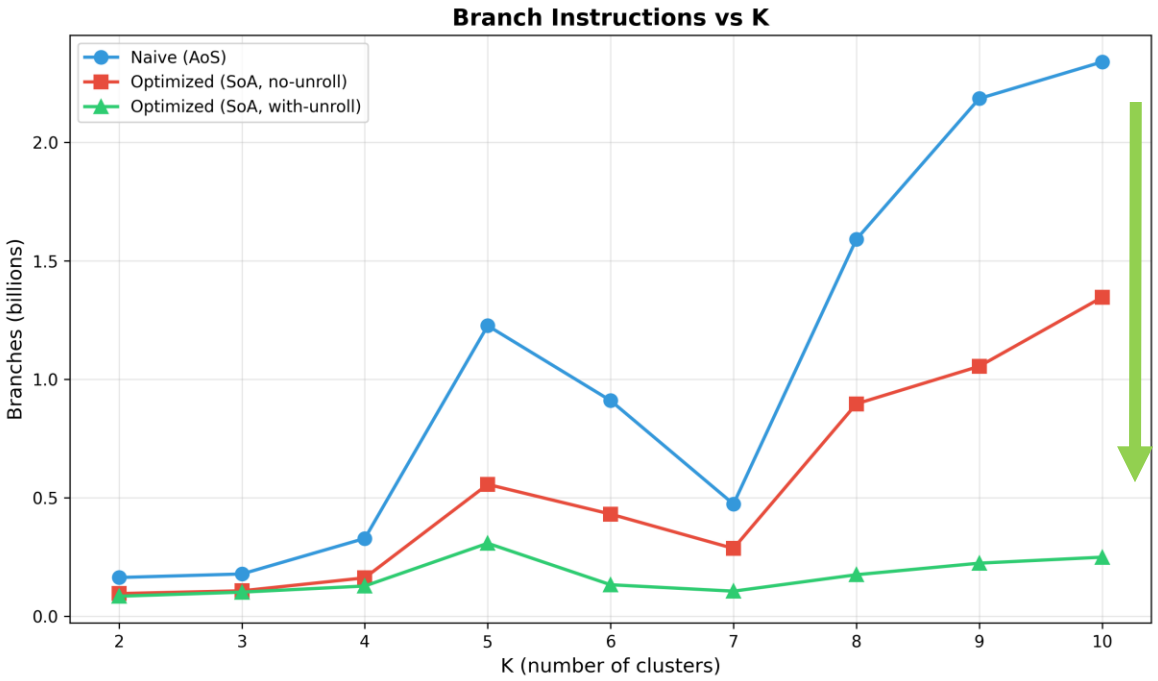




Resultados: visão geral

O que explica a queda de tempo de execução?



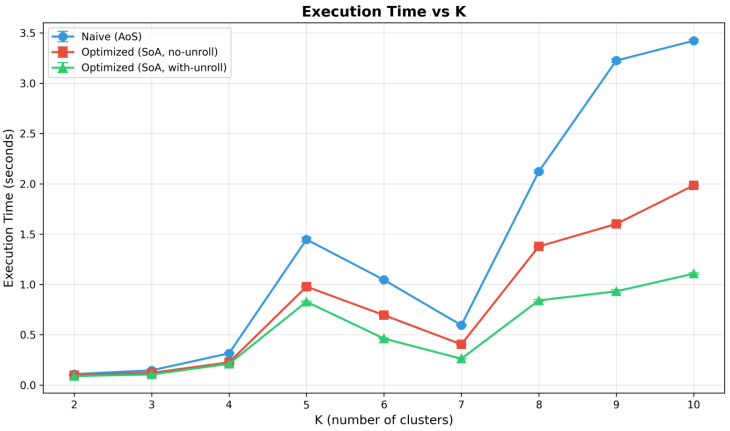


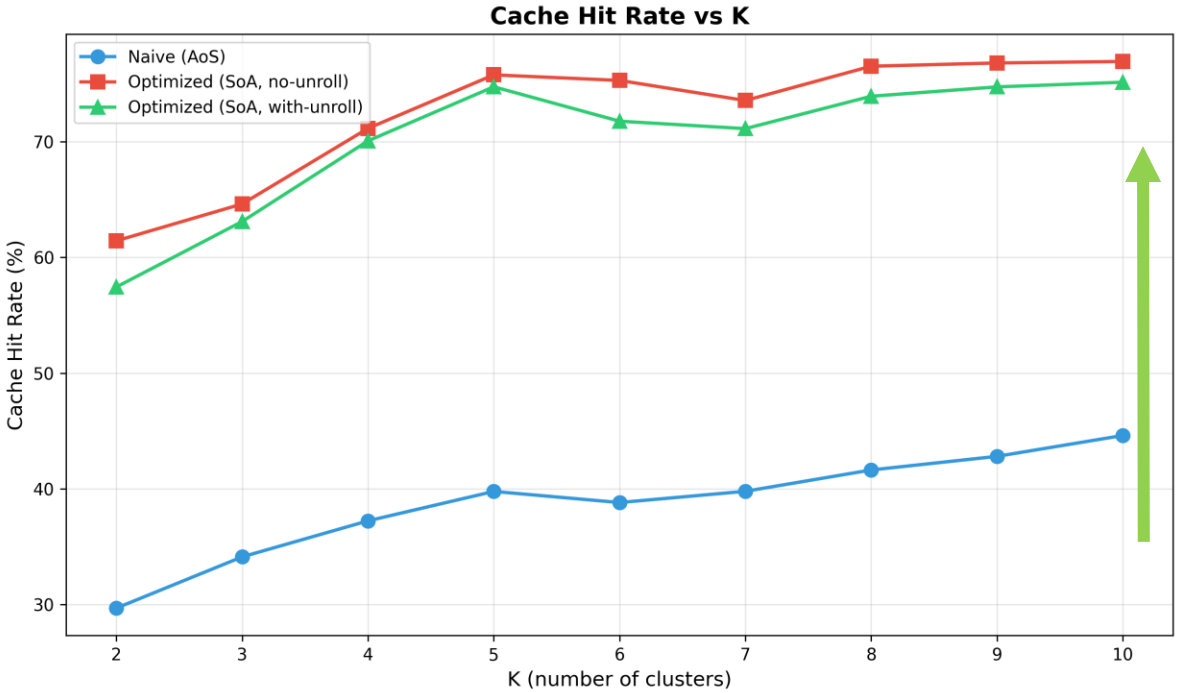
Unroll reduziu muito o número de branches

(como esperado)

Resultados: visão geral

O que explica a queda de tempo de execução?

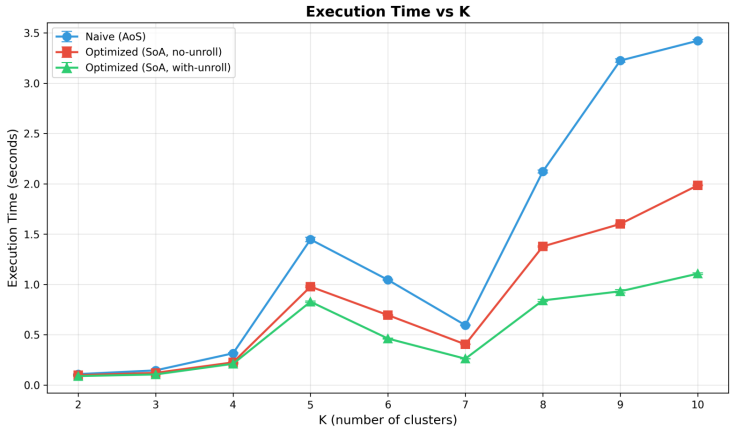


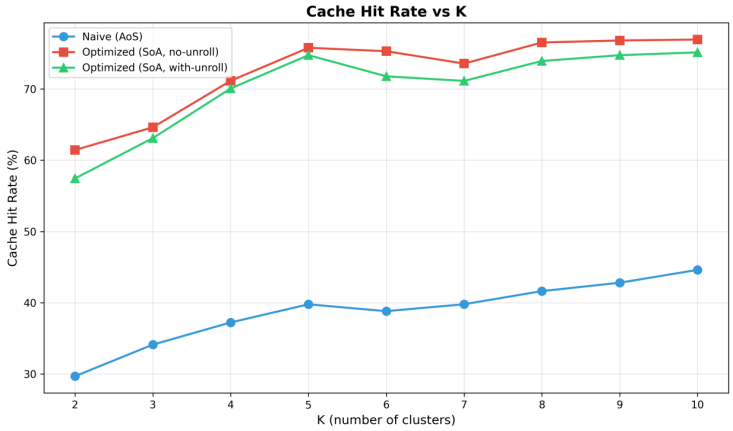


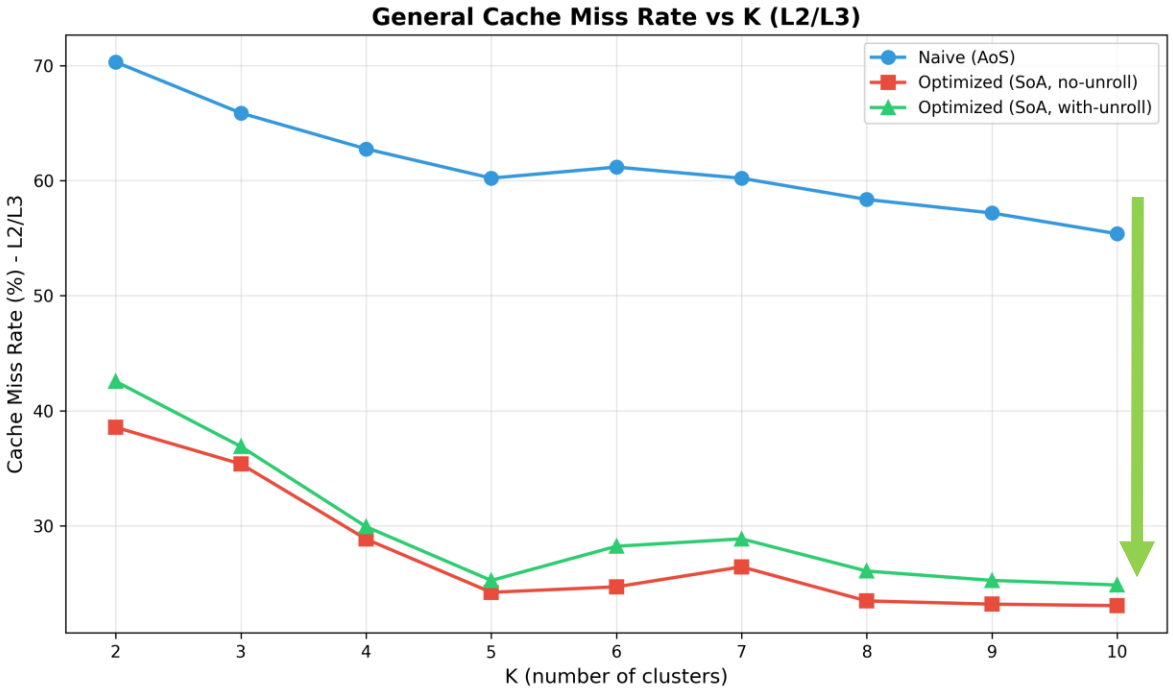
Maior hit rate da cache! SoA em ação

Resultados: visão geral

O que explica a queda de tempo de execução?



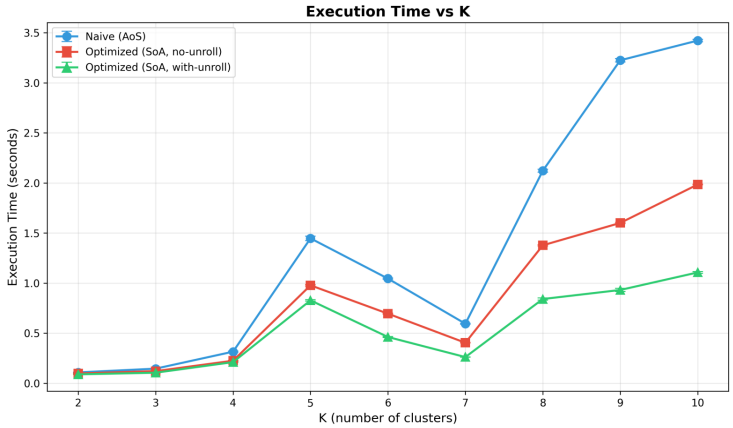


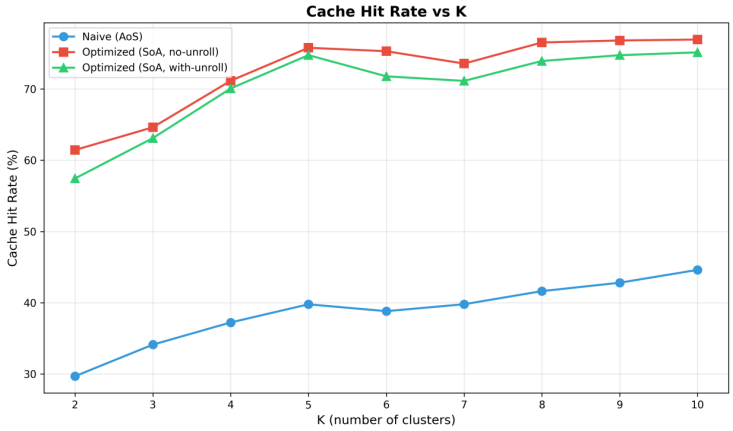


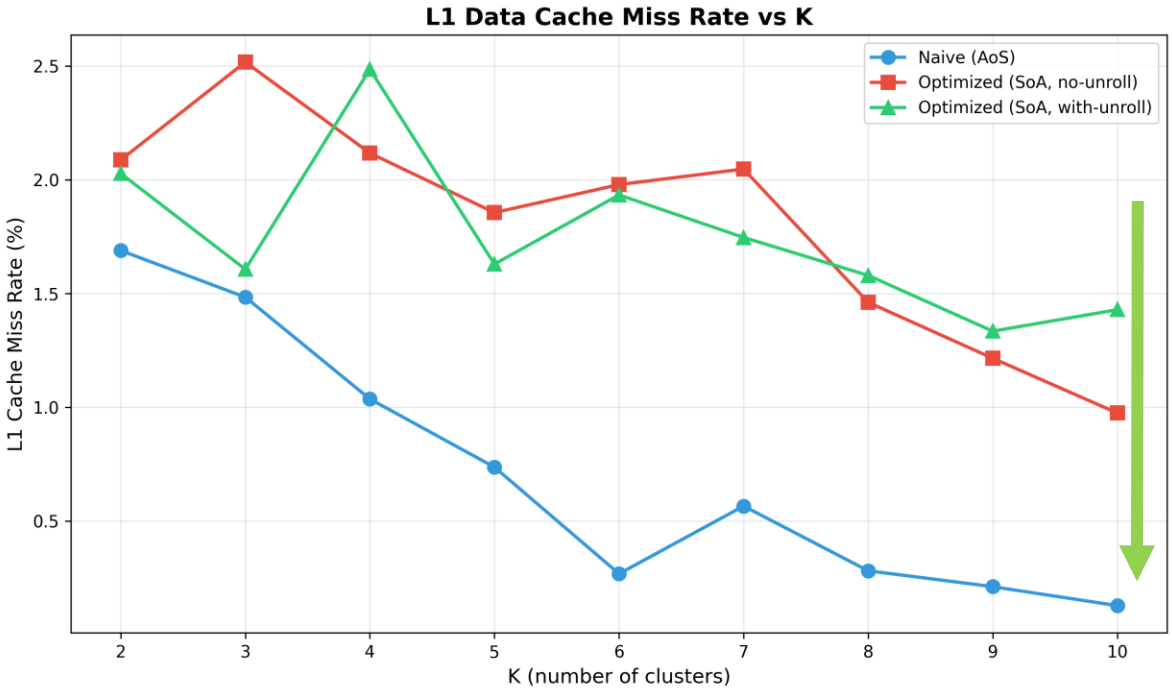
L2/L3 mais eficientes

Resultados: visão geral

O que explica a queda de tempo de execução?

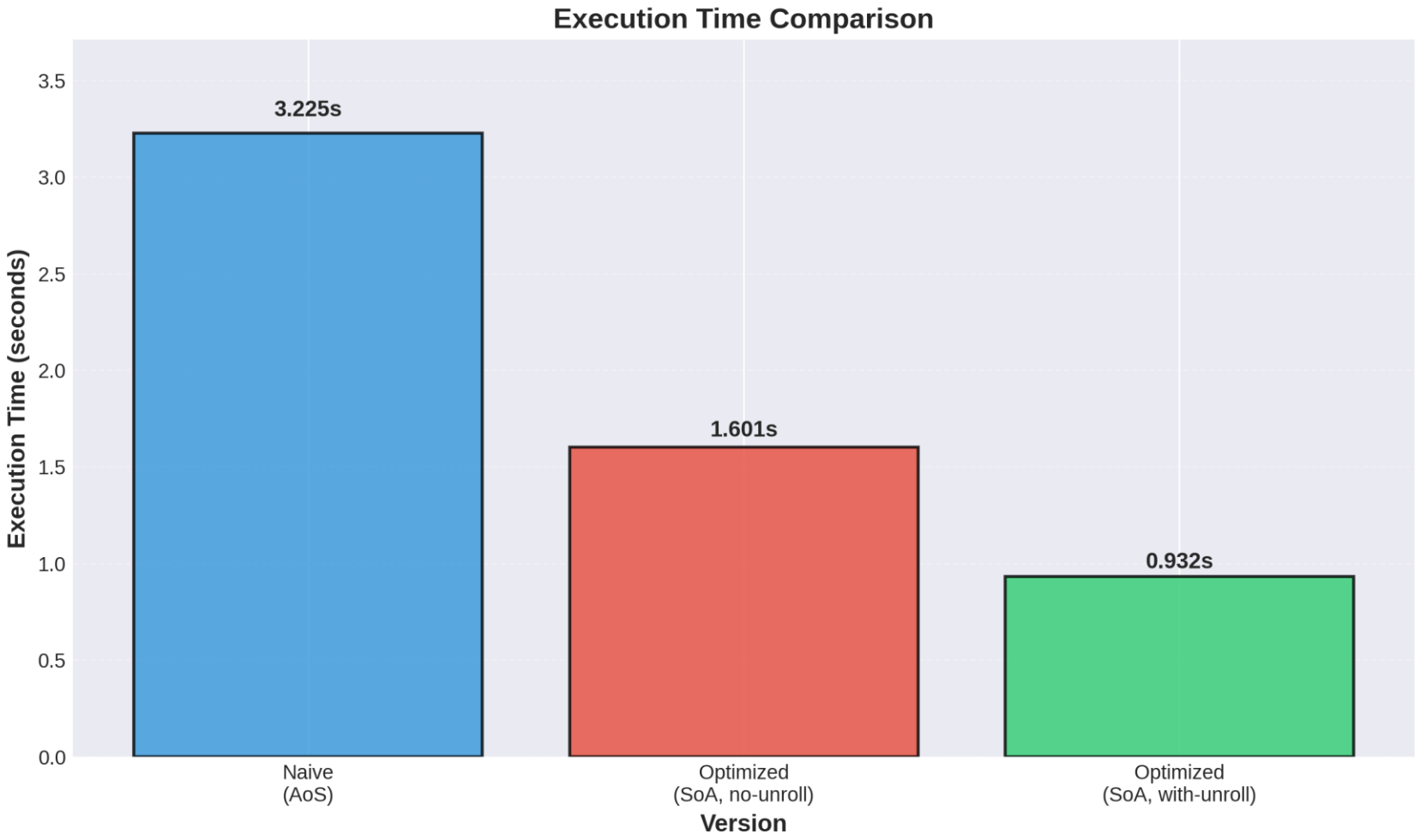




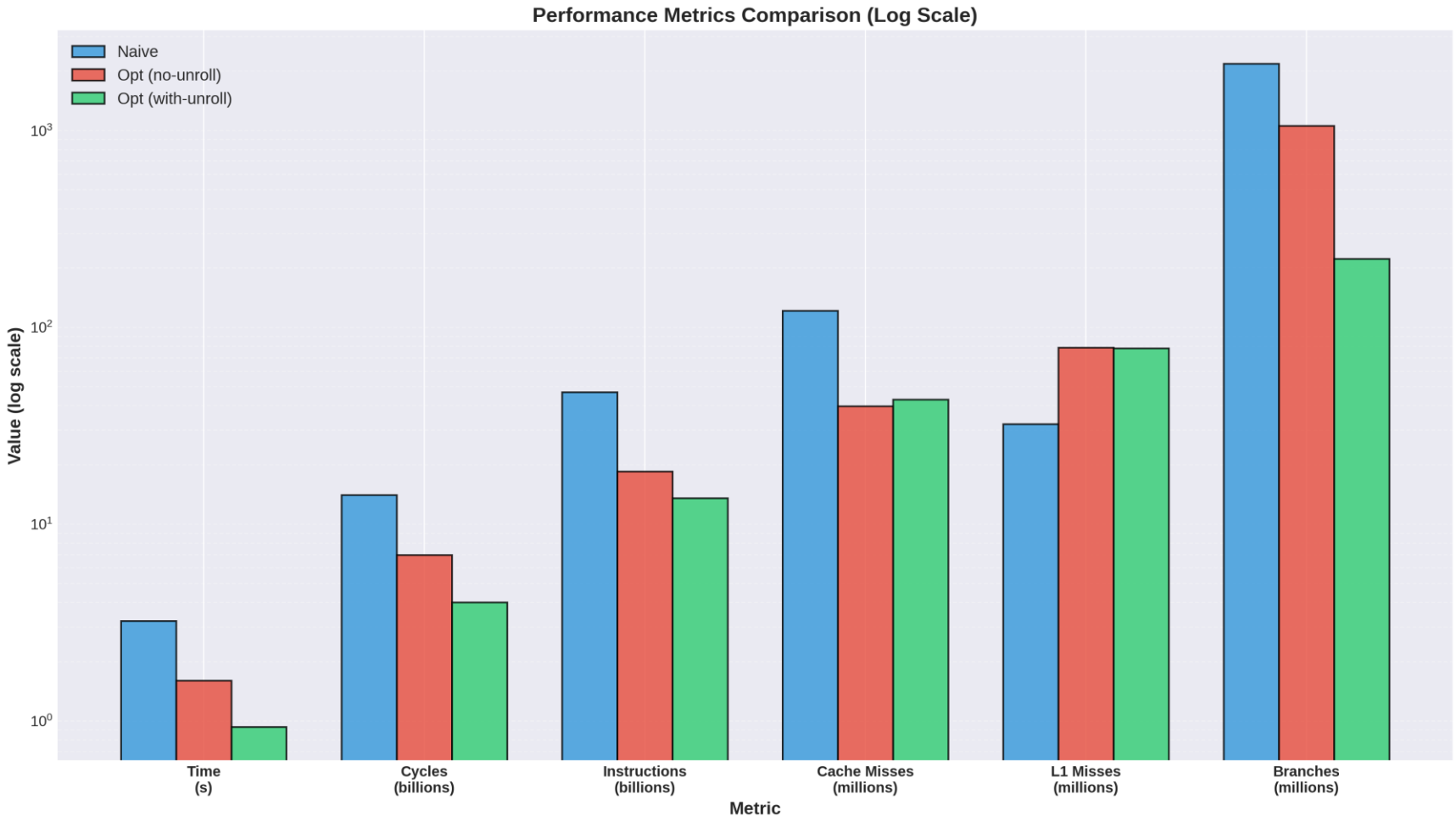


Porém menos hit-rate na L1

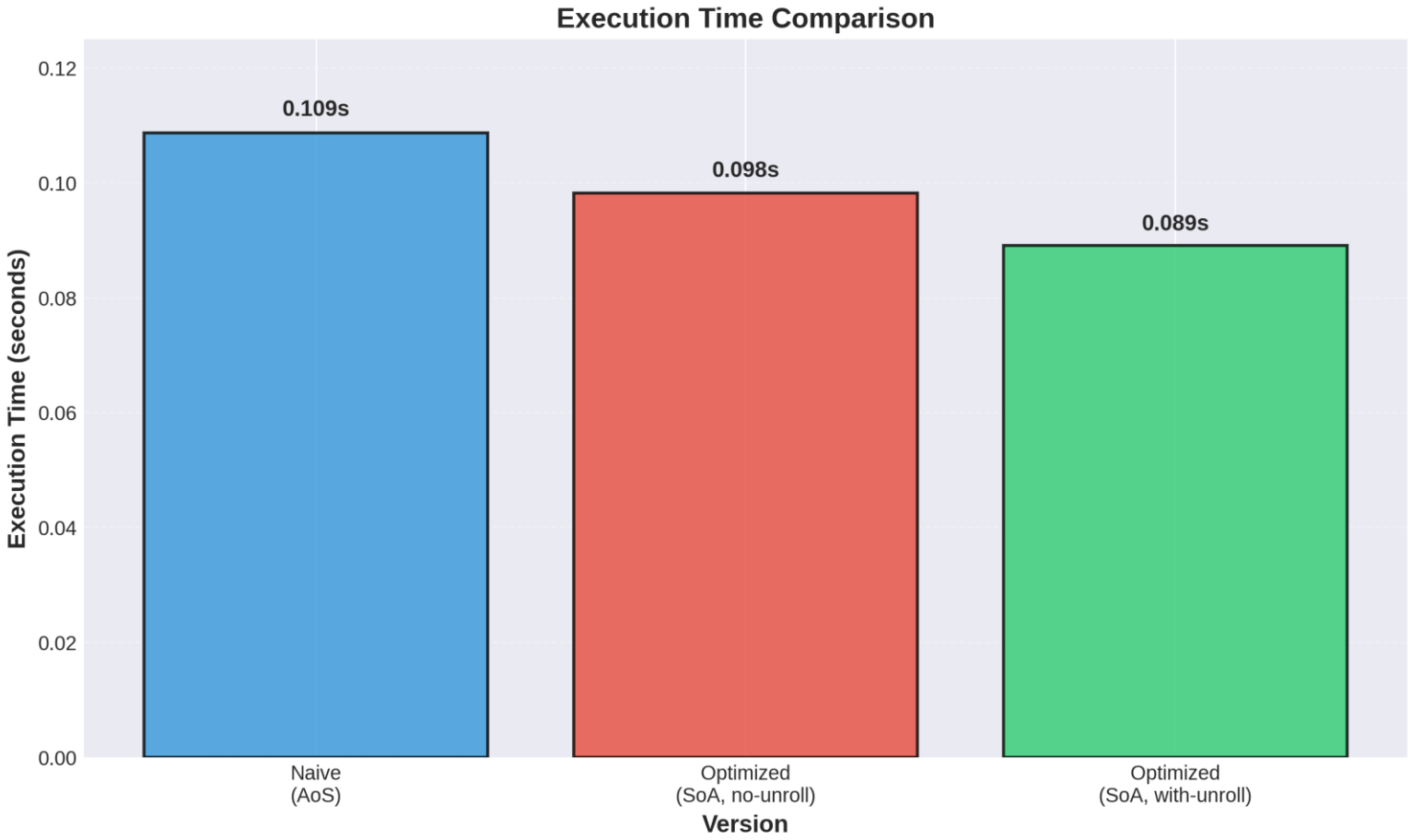
Resultados: melhor caso (k=9)



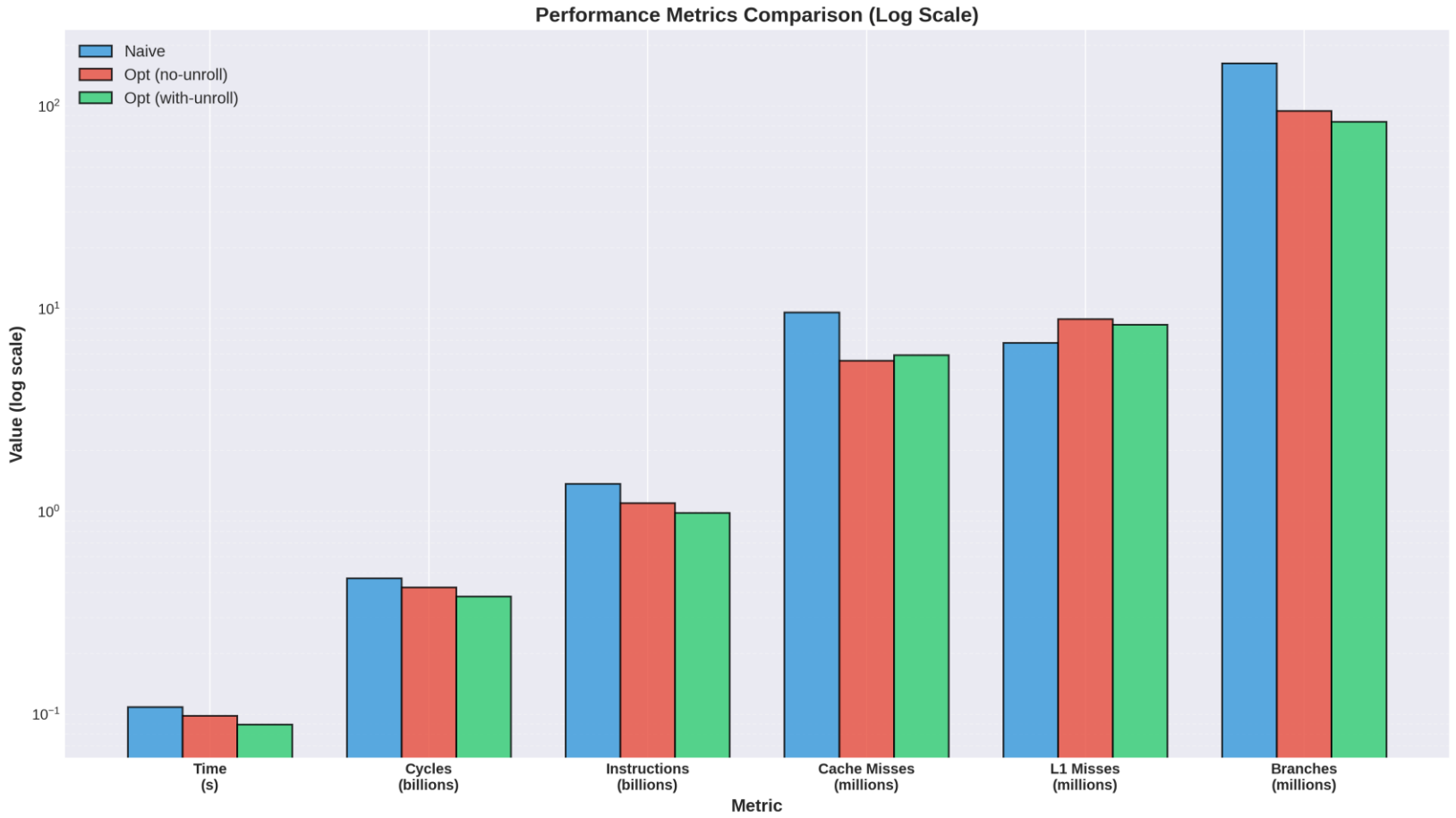
Resultados: melhor caso (k=9)



Resultados: pior caso (k=2)



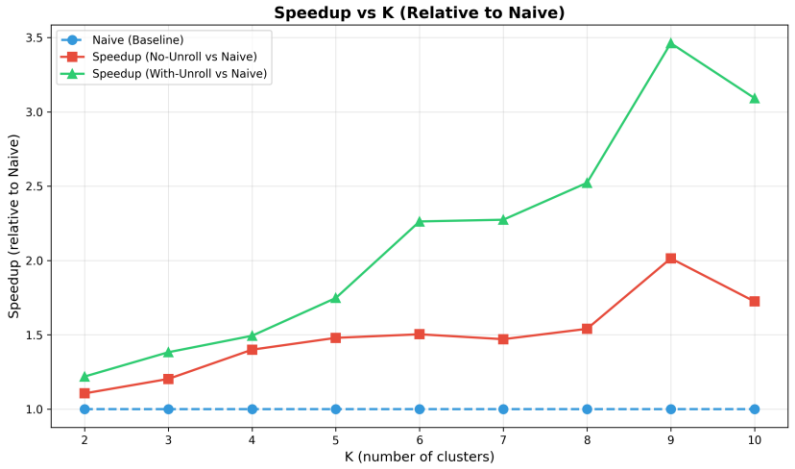
Resultados: pior caso (k=2)



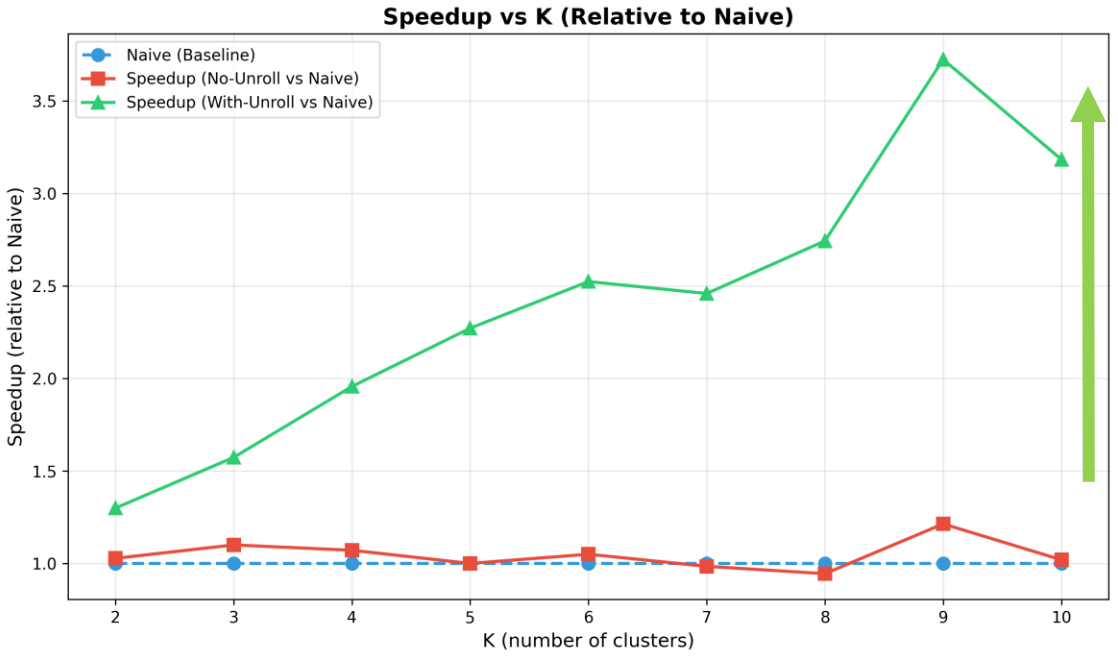
Para um desenvolvimento futuro:

Testar combinações de otimizações (assistentes de LLM facilitam muito!)

Nessa apresentação:



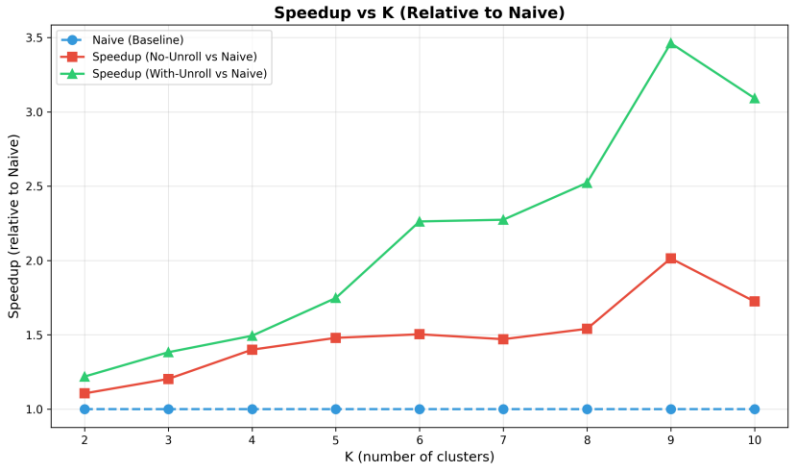
Versão antiga (sem SIMD):



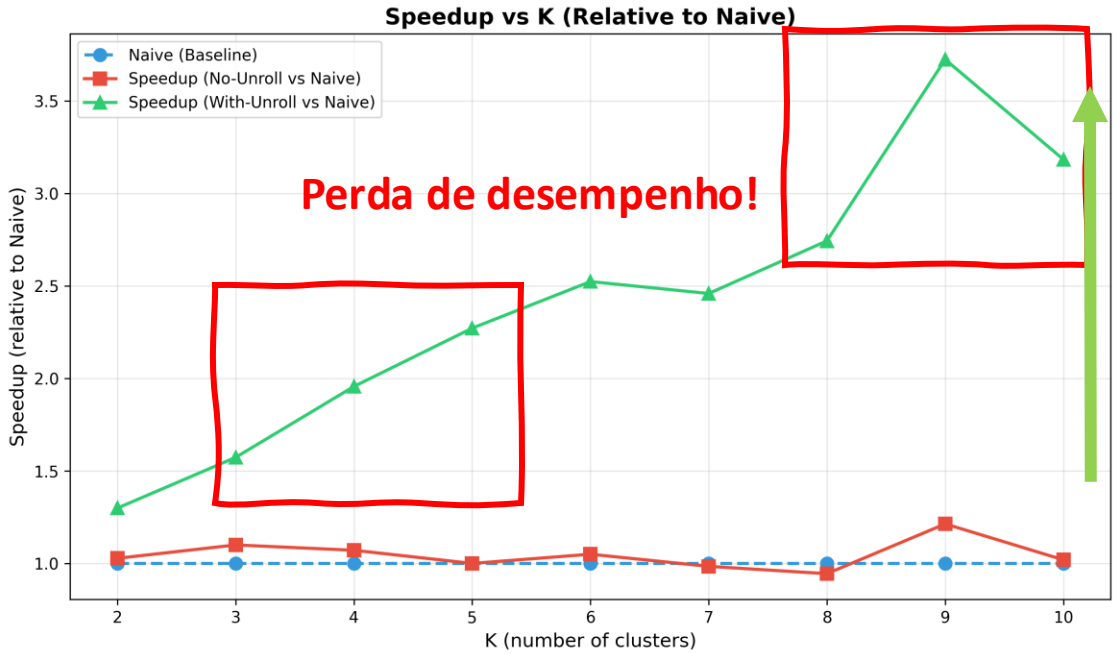
Para um desenvolvimento futuro:

Testar combinações de otimizações (assistentes de LLM facilitam muito!)

Nessa apresentação:



Versão antiga (sem SIMD):



Desempenho de unroll é algo a ser explorado sem SIMD.

Versão sem unroll tem muitos ganhos!

Obrigado pela atenção!

Alguma pergunta?

Apresentação por:
Henrique Lindemann

INF01063 – 2025/2
Professor: **Luigi Carro**

UFRGS
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO RIO GRANDE DO SUL

.inf
INSTITUTO
DE INFORMÁTICA
UFRGS