Segundo trabalho de BDCC

João Sá

Maio de 2020

Introdução	1
Inspeccionar o dataset	2
Visualizar o dataset	6
Internamentos	6
Itens	8
Itens num internamento	12
Colunas WARNING, ERROR, RESULTSTATUS e CGID	16
Machine Learning	18
Preparação dos dados para os vários modelos de regressão	19
Vetorizar e normalizar as features para os três conjuntos de modelos	21
Treinar os modelos	22
Avaliar os modelos	26
Conclusão	30

1. Introdução

Este trabalho tem como objetivo processar, visualizar e extrair informação de um dataset de grandes dimensões com dados clínicos.

A realização de qualquer uma destas tarefas está condicionada por um detalhe importante, o tamanho do dataset. No formato csv ocupa cerca de 32.5GB em disco. A solução que surgiu mais imediata para resolver este primeiro problema foi reduzir o tamanho do dataset. A procura por um formato que permitisse comprimir o dataset convergiu em dois formatos: orc e parquet. A escolha recaiu sobre o parquet por já se ter tido experiência no seu uso durante o primeiro trabalho. Este formato faz o armazenamento dos dados por colunas, com dados do mesmo tipo a serem armazenados de forma contígua, permitindo uma compressão muito maior do que aquela que seria possível se os dados estivessem armazenados por linhas. As consultas também se tornam mais rápidas, dado que se torna possível consultar apenas um subconjunto das colunas e não o dataset inteiro.

Para além disso, o formato parquet também está bem integrado dentro da framework PySpark, que foi usada para a realização das tarefas propostas, por automatizar o processamento dos dados em paralelo. No contexto deste trabalho, o PySpark acabou por se mostrar eficaz, mesmo estando configurado no modo local (sem cluster), numa máquina modesta para a realização deste tipo de tarefas (desktop com um CPU com 4 cores e 8GB de RAM).

A primeira parte do relatório diz respeito à leitura e inspecionamento básico do dataset, a segunda à visualização mais detalhada dos seus conteúdos, e a terceira à criação de modelos de previsão do tempo de internamento de cada paciente.

Configurações

```
import pyspark
from pyspark.context import SparkContext
from pyspark.sql.session import SparkSession
from pyspark.sql import functions as F
import time
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from pyspark.sql.types import StructType
SEED=123
def debug(starttime, text=""):
    seconds = time.time()-starttime
    print("[ DEBUG %s] took %f seconds (%f minutes)" % (text,seconds,seconds/60 ))
spark = SparkSession.builder\
        .master('local[*]')\
        .appName("BDCC")\
        .getOrCreate()
```

2. Inspeccionar o dataset

```
events_df = spark.read.csv("EVENTS.csv", header=True)
print("#rows: %d #cols: %d" % (events_df.count(), len(events_df.columns)))
#rows: 330712483 #cols: 15
```

Mais de 330 milhões de entradas. Vamos guardar o dataset no formato parquet, na esperança de conseguirmos acelerar o seu processamento:

```
events_df.write.parquet("events.parquet")
events_df = spark.read.parquet("events.parquet")
```

Com a compressão no formato parquet obteve-se um ficheiro consideravelmente mais pequeno (3.7GB em disco). O dataset tem 15 colunas, vamos ver o que representam:

```
print(events_df.columns)

['ROW_ID', 'SUBJECT_ID', 'HADM_ID', 'ICUSTAY_ID', 'ITEMID', 'CHARTTIME',
'STORETIME', 'CGID', 'VALUE', 'VALUENUM', 'VALUEUOM', 'WARNING', 'ERROR',
'RESULTSTATUS', 'STOPPED']
```

Sabemos que o dataset contém informação sobre análises e medições feitas sobre pacientes que deram entrada em unidades de cuidados intensivos. Consultando o portal do MIMIC-III [1] é possível obter informação mais detalhada sobre o que cada uma destas colunas representa:

- **SUBJECT_ID, HADM_ID e ICUSTAY_ID** identificadores únicos de pacientes, admissões em hospitais e internamentos.
- CHARTTIME registo do tempo em que uma observação foi efectuada. STORETIME regista o tempo em que a observação foi introduzida manualmente ou validada por um membro do staff clínico. CGID é o identificador do membro do staff clínico que validou essa medição.
- VALUE e VALUENUM valor da medição efectuada (identificada por ITEMID). Em geral, VALUENUM contém o mesmo valor de VALUE, mas em formato numérico. Caso a informação não seja numérica, VALUENUM fica a null. VALUEUOM é a unidade de medida de VALUE.
- **WARNING e ERROR** identificam se foi retornado um warning sobre o valor e se ocorreu algum erro durante a medição.
- **RESULTSTATUS** e **STOPPED** RESULTSTATUS identifica o tipo de medição (Manual ou Automatic) e STOPPED identifica se a medição foi, ou não, parada.

Para reduzir um pouco a dimensão do dataset, optou-se por eliminar as seguintes colunas:

- **ROW_ID** Identifica a entrada na tabela original. Não ajuda a caracterizar nenhum internamento por isso deixa de fazer sentido mantê-la aqui.
- STORETIME Já temos o CHARTTIME, que nos diz quando é que as medições foram, de facto, realizadas. Esta informação pareceu-nos não tão relevante, por isso também optámos por deixá-la para trás.

```
cols = ["ROW_ID","STORETIME"]
events_df = events_df.drop(*cols)

print("Schema após a eliminação das colunas %s:\n" %(cols))
events_df.printSchema()
```

Schema após a eliminação das colunas ['ROW ID', 'STORETIME']:

```
root
```

```
|-- SUBJECT_ID: string (nullable = true)
|-- HADM_ID: string (nullable = true)
|-- ICUSTAY_ID: string (nullable = true)
|-- ITEMID: string (nullable = true)
|-- CHARTTIME: string (nullable = true)
|-- VGID: string (nullable = true)
|-- VALUE: string (nullable = true)
|-- VALUENUM: string (nullable = true)
|-- WARNING: string (nullable = true)
|-- ERROR: string (nullable = true)
|-- RESULTSTATUS: string (nullable = true)
|-- STOPPED: string (nullable = true)
```

As colunas foram todas interpretadas como Strings. Vamos fazer cast do tipo das colunas do nosso data frame para ficarem consistentes com o schema original:

```
events_df = events_df\
    .withColumn("SUBJECT_ID",events_df["SUBJECT_ID"].cast("integer"))\
    .withColumn("HADM_ID",events_df["HADM_ID"].cast("integer"))\
    .withColumn("ICUSTAY_ID",events_df["ICUSTAY_ID"].cast("integer"))\
    .withColumn("ITEMID",events_df["ITEMID"].cast("integer"))\
    .withColumn("CHARTTIME",events_df["CHARTTIME"].cast('timestamp'))\
    .withColumn("CGID",events_df["CGID"].cast('integer'))\
    .withColumn("VALUENUM",events_df["VALUENUM"].cast("integer"))\
    .withColumn("WARNING",events_df["WARNING"].cast("integer"))\
    .withColumn("ERROR",events_df["ERROR"].cast("integer"))\
```

[DEBUG] took 0.049876 seconds (0.000831 minutes)

Este é o aspecto do data frame após estas transformações:

```
events_df.printSchema()
root
 |-- ROW ID: string (nullable = true)
 -- SUBJECT ID: integer (nullable = true)
 |-- HADM ID: integer (nullable = true)
 -- ICUSTAY ID: integer (nullable = true)
 |-- ITEMID: integer (nullable = true)
 |-- CHARTTIME: timestamp (nullable = true)
 |-- STORETIME: string (nullable = true)
 |-- CGID: integer (nullable = true)
 |-- VALUE: string (nullable = true)
 -- VALUENUM: integer (nullable = true)
 |-- VALUEUOM: string (nullable = true)
 -- WARNING: integer (nullable = true)
 -- ERROR: integer (nullable = true)
 -- RESULTSTATUS: string (nullable = true)
 |-- STOPPED: string (nullable = true)
```

Um dos objectivos deste trabalho consiste em criar modelos de machine learning que consigam prever a duração de um internamento (LOS). Esse valor pode pode ser inferido através das datas do primeiro e do último item. Vamos agregar a data mínima e máxima de cada internamento e colocar a diferença numa nova coluna.

```
starttime=time.time()
events_df = spark.read.parquet("events_pre_processed.parquet")
```

Após estas transformações, ficámos com um dataset com o seguinte schema:

```
events_df = spark.read.parquet("events_LOS1.parquet")
events_df.printSchema()
root
 |-- ROW ID: string (nullable = true)
 |-- SUBJECT ID: integer (nullable = true)
 |-- HADM ID: integer (nullable = true)
 -- ICUSTAY ID: integer (nullable = true)
 |-- ITEMID: integer (nullable = true)
 -- CHARTTIME: timestamp (nullable = true)
 |-- STORETIME: string (nullable = true)
 |-- CGID: integer (nullable = true)
 |-- VALUE: string (nullable = true)
 |-- VALUENUM: integer (nullable = true)
 -- VALUEUOM: string (nullable = true)
 -- WARNING: integer (nullable = true)
 |-- ERROR: integer (nullable = true)
 -- RESULTSTATUS: string (nullable = true)
 |-- STOPPED: string (nullable = true)
 |-- LOS: double (nullable = true)
```

Corresponde a uma versão do dataset original sem as colunas ROW_ID e STORETIME mas com uma nova coluna com o LOS de cada paciente. Este dataset está armazenado num ficheiro parquet em disco, a ocupar apenas 1.9GB. Ou seja, conseguiu-se comprimir mais de 18 vezes o tamanho do dataset original.

3. Visualizar o dataset

Conhecemos as dimensões e o que cada coluna representa, tudo o resto ainda nos é desconhecido. Nesta parte vamos explorar os conteúdos do dataset.

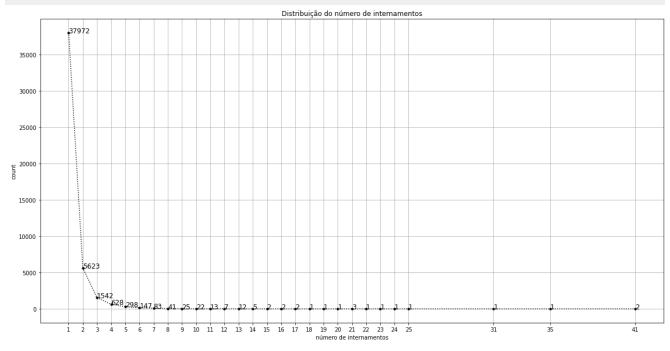
a) Internamentos

Nesta primeira secção vamos inspeccionar o dataset ao nível dos internamentos: ver a distribuição do número de internamentos, duração média dos internamentos e visualizar a distribuição do número de internamentos por paciente.

Número de internamentos e duração média dos internamentos

Distribuição do número de internamentos por paciente

```
starttime=time.time()
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, figsize=(20, 10))
ax.set title("Distribuição do número de internamentos")
ax.set_ylabel("count")
ax.set_xlabel("número de internamentos")
df = query_df.groupBy(["SUBJECT_ID"]).count()
df = df.groupBy("count").agg(F.count("count").alias("y")).orderBy("count",
ascending=True)
xx = [x[0] for x in df.select("count").collect()]
yy = [y[0] for y in df.select("y").collect()]
ax.plot(xx, yy, "r:.",color="black",markersize=7)
for i, v in enumerate(np.arange(len(xx))):
    ax.text(xx[i], yy[i], yy[i], color='black', size=12)
ax.set_xticks(xx)
plt.grid()
plt.show()
plt.close()
query_df.unpersist()
del df
debug(starttime)
```



[DEBUG] took 9.342276 seconds (0.155705 minutes)

A maioria dos pacientes que foram internados, apenas o foram por uma vez. Muito poucos foram internados múltiplas vezes.

b) Itens

Número de itens

A maior parte dos itens não tem nunca um valor numérico associado. Isto significa que se usarmos exclusivamente o valor dos itens como features para os modelos de aprendizagem, vamos estar a desperdiçar a maior parte dos itens.

Itens mais frequentes

```
items_df.show(5)

+----+
|ITEMID| count|
+----+
| 211|5174633|
| 742|3461124|
| 646|3415655|
| 618|3383891|
| 212|3300119|
+----+
only showing top 5 rows
```

O item 211 é o mais frequente. Neste momento ainda não temos nenhum tipo de informação sobre o que é que os itens representam.

A tabela D_ITEMS possui informação sobre os itens, incluindo uma coluna label com uma descrição sobre cada um deles. Para satisfazer a nossa curiosidade, vamos carregá-la e ver o que é que os itens mais frequentes representam:

```
| ITEMID | LABEL | LAB
```

```
[DEBUG] took 0.694438 seconds (0.011574 minutes)
```

A medição da freguência cardíaca é o evento mais comum.

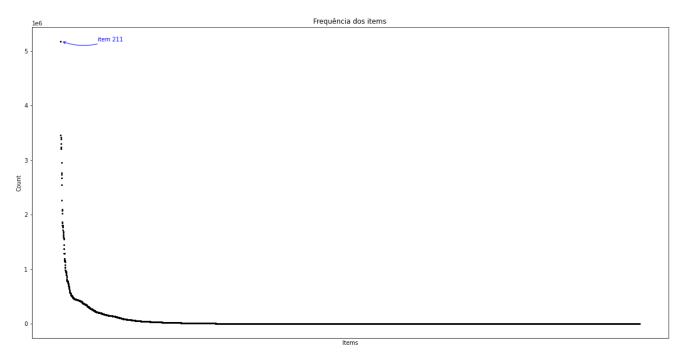
Embora já soubéssemos que os itens representavam observações ou medições efectuadas sobre os pacientes, ainda nos pareciam coisas um pouco abstractas, dado que apenas víamos os IDs e nunca o seu significado concreto. Agora já temos uma ideia mais clara sobre o que representam.

Vamos ver qual o aspecto da distribuição dos itens:

Distribuição dos itens

```
%matplotlib inline
starttime=time.time()
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, figsize=(20, 10))

yy = [y[1] for y in items_df.collect()]
xx = [x[0] for x in items_df.collect()]
xx_= list(range(len(xx)))
```



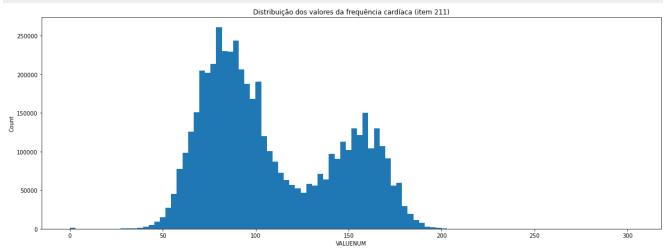
[DEBUG] took 1.193473 seconds (0.019891 minutes)

Mais uma vez estamos perante uma power law. Poucos itens ocorrem muito frequentemente enquanto a maioria ocorre muito pouca frequência.

Distribuição dos valores para o item mais frequente

Já vimos que alguns itens têm uma medição ou observação associada, indicada em VALUE ou VALUENUM. Vamos agora ver qual a distribuição desses valores para o item mais frequente (medição da frequência cardíaca).

```
starttime=time.time()
item_211 = events_LOS_df\
            .filter(events LOS df["ITEMID"]==211)\
            .filter(events_LOS_df["VALUENUM"].isNotNull())\
            .select("VALUENUM")
values = item_211.collect()
values = [x[0] \text{ for } x \text{ in values}]
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, figsize=(20, 7))
plt.hist(values,bins=100)
plt.xlabel("VALUENUM")
plt.ylabel("Count")
plt.title("Distribuição dos valores da frequência cardíaca (item 211)")
plt.show()
plt.close()
del item_211, values
debug(starttime)
```



[DEBUG] took 29.670448 seconds (0.494507 minutes)

A distribuição é interessante, tem dois máximos locais. O primeiro pico parece representar os valores normais da frequência cardíaca que, em repouso, oscila entre os 60 e os 100 batimentos por minuto [2].

c) Itens num internamento

Nesta parte vamos criar gráficos para a visualização dos itens de um paciente ao longo do tempo. Para efeitos demonstrativos, optou-se por seleccionar o primeiro internamento que nos surge no data frame:

```
row = events_LOS_df.rdd.take(1)[0]
data = dict(zip(row.__fields__, [row[field] for field in row.__fields__]))
for k in data:
   print ("%s: %s"%(k,data[k]))
del row
SUBJECT ID: 11464
HADM ID: 171574
ICUSTAY ID: 295297
ITEMID: 161
CHARTTIME: 2132-10-31 15:05:00
CGID: 17590
VALUE: PVC's
VALUENUM: None
VALUEUOM: None
WARNING: None
ERROR: None
RESULTSTATUS: None
STOPPED: NotStopd
LOS: 2.35972222222222
```

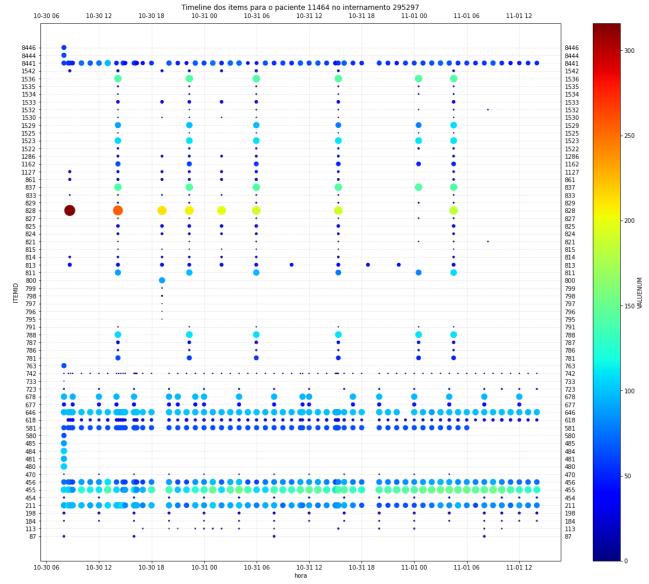
Agora, vamos obter os itens associados a este internamento, e visualizar a ocorrência de cada um deles durante o período total de internamento.

```
def plot items(xx,yy,zz,title=""):
    sizes = [x+1 \text{ for } x \text{ in } zz]
   fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, figsize=(20, 17))
    plt.title(title)
    plt.ylabel("ITEMID")
    plt.xlabel("hora")
    p = ax.scatter(xx,yy,c=zz,s=sizes,cmap=plt.cm.jet)
   plt.grid(linestyle=':', linewidth=.5)
    plt.tick_params(axis='y', which='both', labelright=True)
    plt.tick_params(axis='x', which='both', labeltop=True)
    plt.colorbar(p, label='VALUENUM')
    plt.show()
    plt.close()
df_full_timeline = events_LOS_df\
            .filter(events_LOS_df["ICUSTAY_ID"]==data["ICUSTAY_ID"])\
.select(["ICUSTAY ID","ITEMID","CHARTTIME","VALUE","VALUENUM","VALUEUOM","LOS"])\
            .orderBy(["CHARTTIME","ITEMID"])
df_full_timeline.cache()
df_items_full = df_full_timeline\
            .select(["CHARTTIME","ITEMID","VALUENUM"])\
```

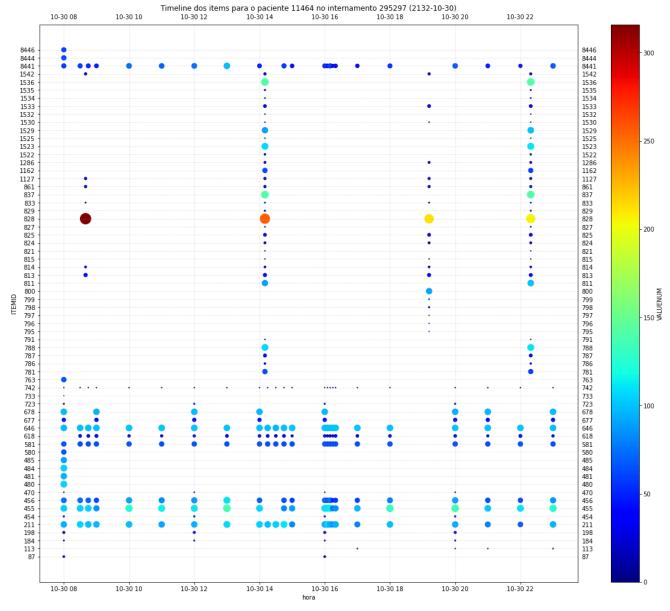
```
.orderBy(["ITEMID","CHARTTIME","VALUE"], ascending=[True,True,True])
df_items_full = df_items_full.dropna()
df_items_full.cache()

xx = [x["CHARTTIME"] for x in df_items_full.select("CHARTTIME").collect()]
yy = [str(x["ITEMID"]) for x in df_items_full.select("ITEMID").collect()]
zz = [x["VALUENUM"] for x in df_items_full.select("VALUENUM").collect()]
title = "Timeline dos items para o paciente %s no internamento %s" %
(data["SUBJECT_ID"],data["ICUSTAY_ID"])

plot_items(xx, yy, zz, title)
```

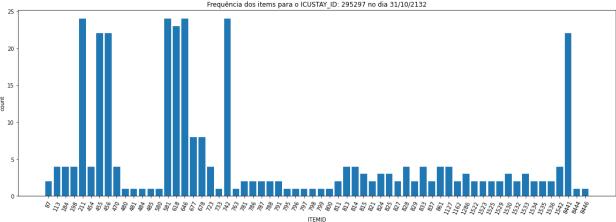


Os intervalos entre as linhas de referência verticais representam intervalos de tempo de 6 horas. É possível ver que, em geral, as medições/observações a que os itens correspondem foram feitas em conjunto, separados por intervalos de tempo mais ou menos regulares. Os valores, representados pela cor/tamanho, também não diferem muito para os mesmos itens. Este gráfico abrange o tempo total de internamento deste paciente. Engloba muitos itens e alguns acabam por ficar sobrepostos. Se traçarmos o mesmo gráfico mas apenas para um dia, conseguimos ter uma visão um pouco mais nítida, com menos sobreposições:



Também podemos obter uma representação das frequências dos itens deste internamento. Vamos representá-las através de dois gráficos de barras. Um para o tempo total do internamento e outro para o primeiro dia:

```
items_full = [item[0] for item in df_items_full.select("ITEMID").collect()]
items_day = [item[0] for item in df_items.select("ITEMID").collect()]
count_full, count_day = {}, {}
for i in items full:
    count_full[i] = count_full.get(i, 0) + 1
for i in items day:
    count_day[i] = count_day.get(i, 0) + 1
fig, ax = plt.subplots(nrows=2, ncols=1, figsize=(20, 14))
ax[0].set_title("Frequência dos items para o ICUSTAY_ID: %d durante todo o internamento" %
(data["ICUSTAY_ID"]))
ax[0].set_xlabel("ITEMID"), ax[1].set_ylabel("count")
ax[0].bar(np.arange(len(count_full.keys())) , list(count_full.values()))
ax[0].set_xticklabels(list(count_full.keys()), rotation=65)
ax[0].set_xticks(np.arange(len(count_full.keys())))
ax[1].set_title("Frequência dos items para o ICUSTAY_ID: %d no dia %d/%d/%d" %
              (data["ICUSTAY_ID"], data["CHARTTIME"].day, data["CHARTTIME"].month,
                                                           data["CHARTTIME"].year))
ax[1].bar(np.arange(len(count_day.keys())) ,list(count_day.values()))
ax[1].set_xlabel("ITEMID"), ax[1].set_ylabel("count")
ax[1].set_xticklabels(list(count_day.keys()), rotation=65)
ax[1].set_xticks(np.arange(len(count_day.keys())))
plt.show()
                             Frequência dos items para o ICUSTAY_ID: 295297 durante todo o internamento
    30
    20
    10
         ITEMID
                               Frequência dos items para o ICUSTAY_ID: 295297 no dia 31/10/2132
    25
```



d) Colunas WARNING, ERROR, RESULTSTATUS e CGID

O dataset tem também informação sobre o CGID que fez a medição, se a medição soltou um aviso (WARNING), e o status da medição (automática ou manual). Vamos contrastar estes valores com o LOS médio:

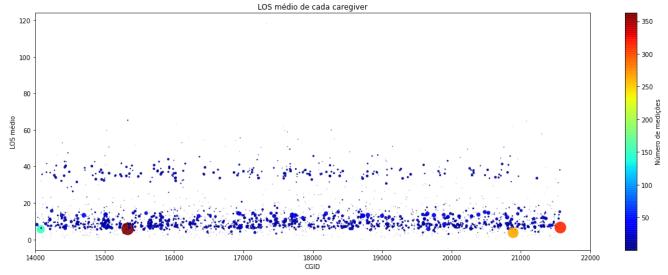
```
starttime=time.time()
events_LOS_df.groupBy("WARNING").agg(F.count("WARNING"),F.avg("LOS")).dropna().show()
events_LOS_df.groupBy("ERROR").agg(F.count("ERROR"),F.avg("LOS")).dropna().show()
events_LOS_df.groupBy("RESULTSTATUS").agg(F.count("RESULTSTATUS"),F.avg("LOS")).dropna().show()
debug(starttime)
```

[DEBUG] took 83.976559 seconds (1.399609 minutes)

A maior parte das medições não soltaram nem um warning nem um erro. Em MIMIC-III [1] é-nos dito que RESULTSTATUS indica se uma medição foi automática ou manual, por isso deduzimos que "Final" represente as medições automáticas, e que estas são as mais frequentes. De qualquer das formas, parece-nos não haver grande causalidade entre a diferença destes valores e o respectivo LOS médio.

CGID identifica o membro do staff clínico que realizou ou validou a medição. Vamos visualizar a relação entre os diferentes CGIDs e o LOS médio:

```
df_CGID = events_LOS_df.select("SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","CGID","LOS").distinct()
df_CGID = df_CGID.groupBy("CGID").agg(F.count('LOS'), F.mean('LOS'))\
            .orderBy("CGID", ascending=True)
df CGID.cache()
xx = [x["CGID"] for x in df_CGID.select("CGID").collect()]
yy = [x["avg(LOS)"]  for x in df_CGID.select("avg(LOS)").collect()]
zz = np.array([x["count(LOS)"] for x in df_CGID.select("count(LOS)").collect()])
xx_,yy_,zz_=[],[],[]
for i in range(0,len(xx)):
    if(xx[i]!=None):
        xx_.append(xx[i])
        yy_.append(yy[i])
        zz .append(zz[i])
xx_,yy_,zz_=np.array(xx_),np.array(yy_),np.array(zz_)
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=1, figsize=(20, 7))
plt.title("LOS médio de cada caregiver")
plt.ylabel("LOS médio")
plt.xlabel("CGID")
p = ax.scatter(xx_,yy_,s=zz_/100,c=zz_/100,cmap=plt.cm.jet,alpha=.9)
plt.xlim([14000, 22000])
plt.colorbar(p, label='Número de medições')
plt.show()
plt.close()
df_CGID.unpersist()
```



A média do LOS dos pacientes com que cada caregiver esteve em contacto não parece variar muito. Há quatro caregivers que estiveram envolvidos num grande número de internamentos, e o LOS médio desses internamentos não varia muito entre eles. Alguns caregivers têm LOS médios mais elevados, mas estiveram envolvidos em poucos internamentos. A ideia aqui era tentar ver se havia um conjunto de caregivers que estivesse dedicado ao tratamento de pacientes em internamentos mais prolongados, o que parece não ser o caso.

4. Machine Learning

Esta parte tem como objectivo a criação de modelos de machine learning que consigam prever o valor do LOS. Optou-se por criar três conjuntos de modelos, o primeiro usando como features a média dos valores das observações (VALUENUM) durante o internamento completo, o segundo usando a frequência média das observações diárias de cada item (ITEMIDs) em relação ao internamento completo, e um terceiro usando as features dos dois conjuntos anteriores. Cada conjunto é composto por quatro modelos utilizando algoritmos de aprendizagem diferentes: regressão linear, árvores de decisão, random forest e gradient-boosting trees. Os 12 modelos foram treinados usando o mesmo conjunto de treinos, com 75% dos internamentos. Os 25% restantes foram usados para avaliar a performance dos modelos através das métricas RMSE, MAE, SME e R2.

a) Preparação dos dados para os vários modelos de regressão

Conjunto de modelos 1 - Média dos valores dos itens de cada internamento (VALUENUM) como features

```
starttime=time.time()
events_LOS_df = spark.read.parquet("events_LOS1.parquet")
""" Agregar a média dos valores dos ITEMID para cada internamento """
events LOS agg df = events LOS df\
                    .groupBy(["SUBJECT_ID","ICUSTAY ID","ITEMID","LOS"])\
                    .agg(F.avg("VALUENUM").alias("avg"))
events_LOS_agg_df.write.parquet("events_valuenum_avg1.parquet", mode="overwrite")
""" Eliminar NAs e transpôr os items para colunas """
events_valuenum_avg = spark.read.parquet("events_valuenum_avg1.parquet")
items = list(dict.fromkeys([x[0] for x in
events_valuenum_avg.select("ITEMID").collect()]))
events_LOS_agg_items_df = events_valuenum_avg.groupBy(["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"])\
                    .pivot("ITEMID", items)\
                    .agg(F.first("avg"))
""" Preencher nulls com zero """
events LOS agg items df = events LOS agg items df.na.fill(0)
events_LOS_agg_items_df.write.parquet("events_valuenum_avg_cols1.parquet",
mode="overwrite")
events_valuenum_avg_cols = spark.read.parquet("events_valuenum_avg_cols1.parquet")
print("#rows: %d #cols: %d" % (events valuenum avg cols.count(),
len(events_valuenum_avg_cols.columns)))
debug(starttime)
```

[DEBUG] took 1695.598353 seconds (28.259973 minutes)

Conjunto de modelos 2 - Média do número de cada item para cada internamento como features

```
events_LOS_df = spark.read.parquet("events_LOS1.parquet")
#Agregar a média das frequências dos ITEMID para cada internamento
events_LOS_agg_df = events_LOS_df\
                .groupBy(["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","ITEMID","LOS",
                          F.date_format('CHARTTIME','yyyy-MM-dd').alias("day")])\
                .agg(F.count("ITEMID").alias("count"))
events LOS agg df.write.parquet("temp.parquet", mode="overwrite")
df = spark.read.parquet("temp.parquet")
df = df.groupBy(["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","ITEMID","LOS"]
).agg(F.sum("count").alias("sum"))
df.printSchema()
df = df.withColumn('avg count', df["sum"] /df["LOS"])\
        .select(["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","ITEMID","avg_count","LOS"])
df.printSchema()
df.write.parquet("temp2.parquet", mode="overwrite")
df = spark.read.parquet("temp2.parquet")
items = list(dict.fromkeys([x[0] for x in df.select("ITEMID").collect()]))
df = df.groupBy(["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"])\
                    .pivot("ITEMID", items)\
                    .agg(F.first("avg count"))
df = df.na.fill(0)
df.write.parquet("events_count_avg_cols.parquet", mode="overwrite")
df = spark.read.parquet("events count avg cols.parquet")
```

Conjunto de modelos 3 - Média dos valores e do número de itens como features

```
df_avg_value = spark.read.parquet("events_valuenum_avg_cols1.parquet")
df_avg_count = spark.read.parquet("events_count_avg_cols.parquet")

df_avg_count = df_avg_count.select(
    [F.col(c).alias("_"+c) if c not in ["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"] else F.col(c)
    for c in df_avg_count.columns]
)

df_full = df_avg_value.join(df_avg_count,
    on=["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"],how="inner")

df_full = df_full.na.fill(0)
df_full.write.parquet("counts_and_values.parquet", mode="overwrite")
```

Temos como objectivo criar três conjuntos de modelos usando features diferentes.

Para o conjunto de modelos 1, criou-se um data frame agregando a média dos valores dos diferentes itens para cada internamento. Para o segundo conjunto, agregou-se a frequência média dos itens para cada internamento (número de vezes que um item ocorreu sobre o LOS do internamento).

Feita a agregação, transpôs-se os itens para colunas. Obteve-se dois datasets com muitas colunas, tantas quanto o número de itens, que são as nossas features, mais a coluna com o LOS, que é a variável target, e as colunas SUBJECT_ID e ICUSTAY_ID que identificam o internamento.

O terceiro conjunto de modelos usa como features a combinação das features dos dois modelos anteriores, e foi obtido fazendo join dos dois datasets.

Estas são as dimensões dos três conjuntos de features:

```
starttime=time.time()

df = spark.read.parquet("events_count_avg_cols.parquet")
print("Conjunto de modelos 1: #rows: %d #cols: %d" % (df.count(), len(df.columns)))

df = spark.read.parquet("events_valuenum_avg_cols1.parquet")
print("Conjunto de modelos 2: #rows: %d #cols: %d" % (df.count(), len(df.columns)))

df = spark.read.parquet("counts_and_values.parquet")
print("Conjunto de modelos 3: #rows: %d #cols: %d" % (df.count(), len(df.columns)))

del df
debug(starttime)
```

```
Conjunto de modelos 1: #rows: 60993 #cols: 6460
Conjunto de modelos 2: #rows: 60993 #cols: 6460
Conjunto de modelos 3: #rows: 60993 #cols: 12917
[ DEBUG ] took 21.178452 seconds (0.352974 minutes)
```

b) Vetorizar e normalizar as features para os três conjuntos de modelos

```
from pyspark.ml.feature import VectorAssembler
from pyspark.ml.feature import MaxAbsScaler

def vectorize(model_set, df, outputCol):

    """ Agrupar as features num vetor """
    features = [x for x in df.columns if x not in ['SUBJECT_ID','ICUSTAY_ID','LOS']]
    assembler = VectorAssembler(
        inputCols=features,
        outputCol='features')
```

```
df =assembler.transform(df)
    df=df.select(['SUBJECT ID','ICUSTAY ID','features','LOS'])
    """ Normalizar as features """
    maxAbsScaler = MaxAbsScaler(inputCol="features", outputCol=outputCol)
    scaler = maxAbsScaler.fit(df)
    df = scaler.transform(df).select(['SUBJECT ID','ICUSTAY ID',outputCol,'LOS'])
    return df
model set="avg value"
file name="scaled %s df.parquet" % (model set)
df1 = spark.read.parquet("events_valuenum_avg_cols1.parquet")
df1 = vectorize(model_set, df1, "features_avg_valuenum")
df1.write.parquet(file_name, mode="overwrite")
model set="avg count"
file_name="scaled_%s_df.parquet" % (model_set)
df2 = spark.read.parquet("events count avg cols.parquet")
df2 = vectorize(model_set, df2, "features_avg_count")
df2.write.parquet(file_name, mode="overwrite")
model set="full"
file_name="scaled_%s_df.parquet" % (model_set)
df3 = spark.read.parquet("counts and values.parquet")
df3 = vectorize(model_set, df3, "features_full")
df3.write.parquet(file name, mode="overwrite")
""" fazer join de scale_avg_value com scale_avg_count """
df1 = spark.read.parquet("scaled_avg_value_df.parquet")
df2 = spark.read.parquet("scaled_avg_count_df.parquet")
df3 = spark.read.parquet("scaled_full_df.parquet")
df = df1.join(df2, ["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"], "inner")\
        .join(df3,["SUBJECT_ID","ICUSTAY_ID","LOS"], "inner")
df.write.parquet("all features.parquet")
```

Vetorizaram-se e normalizaram-se as features dos três conjuntos de modelos. Ou seja, passou-se a ter uma única coluna com os valores das features normalizados e contidos num vector. Optou-se por juntar os três vetores de features (dos três conjuntos de modelos) no mesmo data frame para facilitar a divisão nos casos de treino e nos casos de teste, por forma a poder-se treinar e avaliar todos os modelos usando os mesmos casos de treino e de teste.

c) Treinar os modelos

Divisão dos internamentos em casos de treino e de teste

```
starttime=time.time()

model_sets__features = {
    "avg_value": "features_avg_valuenum",
    "avg_count": "features_avg_count",
    "full": "features_full"
}

models = {}

df = spark.read.parquet("all_features.parquet")

train, test = df.randomSplit([.75,.25], seed=SEED)
    print("#Internamentos para treino: %d" % (train.count()))
    print("#Internamentos para teste: %d" % (test.count()))

debug(starttime)

#Internamentos para treino: 45783

#Internamentos para treino: 45783
```

```
#Internamentos para treino: 45783
#Internamentos para teste: 15210
[DEBUG] took 7.789834 seconds (0.129831 minutes)
```

Treinar vários modelos de regressão

```
from pyspark.ml.regression import LinearRegression
from pyspark.ml.regression import DecisionTreeRegressor
from pyspark.ml.regression import RandomForestRegressionModel
from pyspark.ml.regression import RandomForestRegressor
from pyspark.ml.regression import GBTRegressionModel
from pyspark.ml.regression import GBTRegressor
from pyspark.ml.evaluation import RegressionEvaluator
starttime=time.time()
def training(train_set, test_set, model_set, features, target="LOS"):
    global models
   models[model_set]= {}
    def regressionModel(regressor, train_data, test_data, target):
        model = regressor.fit(train data)
        predictions = model.transform(test data)
        return model, predictions
    regressors = [
        ("linear regression", LinearRegression(featuresCol=features, labelCol=target,
maxIter=50,regParam=0.3, elasticNetParam=0.8)),
```

```
("decision trees",
                             DecisionTreeRegressor(featuresCol=features,
labelCol=target)),
        ("random forest",
                             RandomForestRegressor(featuresCol=features,
labelCol=target)),
        ("gradient boosted", GBTRegressor(featuresCol =features,labelCol=target,
maxIter=50))
    1
    for name, regressor in regressors:
        starttime1=time.time()
        model, predictions = regressionModel(regressor, train, test,target="LOS")
        models[model_set][name]={}
        models[model_set][name]["model"]=model
        path_name="%s__%s"%(model_set,algorithm)
        model.save(path name)
        models[model set][name]["predictions"]=predictions
        models[model_set][name]["evaluation"]={}
        debug(starttime1,text="training %s, %s" % (model_set, name))
    return models
def testing(model set):
    starttime1=time.time()
    metrics = ["rmse", "mae", "mse", "r2"]
    global models
    for model in models[model set].keys():
        mod = models[model set][model]
        mod["evaluation"]={}
        for metric in metrics:
            evaluator=RegressionEvaluator(labelCol="LOS", predictionCol="prediction",
metricName=metric)
            result = evaluator.evaluate(mod["predictions"])
            mod["evaluation"][metric]=result
    debug(starttime1,text="evaluating %s\n" % (model_set))
debug(starttime)
```

[DEBUG] took 0.000480 seconds (0.000008 minutes)

Criou-se uma função para treinar os modelos usando a implementação do PySpark dos algoritmos de regressão linear, árvores de decisão, random forest e gradient-boosted trees [3]. Criou-se também uma função para avaliar os modelos usando as métricas RMSE, MAE, R2 e MSE.

Estas duas funções vão ser usadas para treinar e avaliar os três conjuntos de modelos de forma sequencial:

```
starttime=time.time()
 ''' treinar e avaliar '''
for model set in model sets features:
    training(train, test, model set=model set, features=model sets features[model set])
    testing(model_set)
 ''' guardar os modelos em disco'''
for model set in models:
    for algorithm in models[model set]:
       path_name="%s__%s"%(model_set,algorithm)
       models[model_set][algorithm]["model"][0].save(path_name)
debug(starttime)
[DEBUG training avg value, linear regression] took 21 seconds (0 minutes)
[DEBUG training avg_value, decision trees] took 19 seconds (0 minutes)
[DEBUG training avg_value, random forest] took 109 seconds (2 minutes)
[DEBUG training avg value, gradient boosted] took 490 seconds (8 minutes)
[DEBUG evaluating avg value] took 51.917545 seconds (0.865292 minutes)
[DEBUG training avg count, linear regression] took 18 seconds (0 minutes)
[DEBUG training avg count, decision trees] took 27 seconds (0 minutes)
[DEBUG training avg_count, random forest] took 171 seconds (3 minutes)
[DEBUG training avg count, gradient boosted] took 953 seconds (16 minutes)
[DEBUG evaluating avg count] took 60.629286 seconds (1.010488 minutes)
[DEBUG training full, linear regression] took 22 seconds (0 minutes)
[DEBUG training full, decision trees] took 62 seconds (1 minutes)
[DEBUG training full, random forest] took 330 seconds (5 minutes)
[DEBUG training full, gradient boosted] took 1855 seconds (31 minutes)
[DEBUG evaluating full] took 510.849039 seconds (0.847484 minutes)
```

Demorou algum tempo, o algoritmo gradient-boosted trees foi especialmente moroso, principalmente quando aplicado sobre o terceiro conjunto de features, que é o mais extenso. Isto deve-se ao facto de ser um algoritmo de boosting, consistindo num ensemble de múltiplas árvores de decisão, construídas de forma iterativa, sempre com o objectivo de tentarem melhorar a performance da árvore anterior. Neste caso, foi definido um número máximo de 50 iterações.

[DEBUG] took 4240.290351 seconds (70.671506 minutes)

A título de curiosidade, vamos ver quais quais foram os itens que o algoritmo gradient boosted trees atribuiu maiores pesos:

```
item_=[]
for model set in model sets:
    importances, lst = models[model_set]['gradient
boosted']['model'].featureImportances, []
   for e, i in enumerate(importances.indices):
        lst.append((i,importances.values[e]))
    x = sorted(lst, key=lambda y: y[1], reverse=True)[0:1]
    print("item\t importance (%s)" % (model_set))
    for item in x:
        if (item[0]>6460):
            it=item[0]-6460
        else:
            it=item[0]
        print("%s \t %s" % (item[0],item[1]))
        item_.append(str(it))
    print("")
df = spark.read.csv("D ITEMS.csv",header=True)
df.filter((df["ITEMID"]==item_[0]) | (df["ITEMID"]==item_[1]) |
(df["ITEMID"]==item_[2]))\
        .select(["ITEMID","LABEL"]).show()
```

```
item
      importance (avg value)
117
      0.0400209669282465
item
      importance (avg count)
      0.0715207699843912
300
      importance (full)
item
      0.05835231004102307
7271
+----+
ITEMID
                 LABEL
+----+
   117 | Catheter Insert Date
   300| IV #3 [Site]|
  811 Glucose (70-105)
+----+
```

Para os dois primeiros conjuntos de features (avg_value e avg_count), foi atribuído um maior peso aos itens 117 (Catheter Insert Date) e 300 (IV #3 [Site]), respectivamente.

Para o terceiro conjunto, à feature 7271. Este terceiro conjunto agrega as features dos dois anteriores, sendo que a feature 7271 corresponde a um item do segundo conjunto (existem 6460 itens distintos). Ou seja, corresponde ao item 7271-6460=811 (Glucose (70-105)).

Vamos ver como os modelos se saíram:

d) Avaliar os modelos

```
from pyspark.sql.types import StructType
from pyspark.sql.types import StructField
from pyspark.sql.types import StringType
from pyspark.sql.types import FloatType
def get_results_df(model_set):
    schema = StructType([
         StructField("Model set", StringType())
        ,StructField("Algoritmo", StringType())
       ,StructField("RMSE", FloatType())
,StructField("MAE", FloatType())
,StructField("MSE", FloatType())
,StructField("R2", FloatType())])
    1sts=[]
    for m in model_set:
         for k in models[m]:
              1st=[]
              lst.append(m)
              lst.append(k)
              for metric in models[m][k]['evaluation']:
                  lst.append(models[m][k]['evaluation'][metric])
              lsts.append(lst)
    return spark.createDataFrame(lsts,schema=schema)
```

MAE e RMSE são métricas que medem a diferença média entre os valores previstos e os valores reais. RMSE é mais sensível a outliers no sentido em que penaliza erros com maior magnitude. Quanto menor for o valor destas duas métricas, menor é o erro. Idealmente, procuramos um valor tanto quanto possível próximo de 0.

```
get_results_df(["avg_value", "avg_count","full"])\
   .select(["Model set", "Algoritmo", "RMSE", "MAE", "R2"])\
   .orderBy("RMSE", ascending=True).show()
|Model set|
                Algoritmo
                              RMSE
                                         MAE
+----+---+----+----+----+
     full| gradient boosted|2.8139894|1.0504305| 0.9096892|
|avg count| gradient boosted|2.8777533|1.0411332|
                                               0.90555
avg value| gradient boosted| 3.909892|1.6920418| 0.8256491|
             random forest 3.9145749 2.0976198 0.8252312
     full
avg count
             random forest 4.0476584 2.1422503 0.813146
     full
            decision trees 4.3686314 2.1483366 0.78233653
     full|linear regression|4.5157275|2.0003426|0.76743186|
             random forest 4.5237775 2.2975626 0.7666019
avg value
avg value|linear regression|4.5306287|2.0678236| 0.7658944|
            decision trees 4.6459956 2.426938 0.75382024
avg count
avg value
            decision trees | 5.031438 | 2.5476518 | 0.7112786 |
avg count|linear regression|5.9806137|2.5307992| 0.5920694|
+----+
```

O algoritmo gradient-boosted trees foi o que obteve melhores performances, quer usando como features o VALUENUM médio (avg_value), a frequência média (avg_count) ou a combinação dos dois anteriores (full).

Em termos de RMSE, para o mesmo algoritmo, o conjunto full obteve sempre uma performance superior comparativamente com os outros dois conjuntos.

```
get_results_df(["avg_value", "avg_count","full"])\
  .select(["Model set", "Algoritmo", "MAE", "RMSE", "R2"])\
  .orderBy("MAE", ascending=True).show()
           Algoritmo| MAE|
+----+
full| gradient boosted|1.0504305|2.8139894| 0.9096892|
avg value | gradient boosted | 1.6920418 | 3.909892 | 0.8256491 |
     full|linear regression|2.0003426|4.5157275|0.76743186|
avg value|linear regression|2.0678236|4.5306287| 0.7658944|
     full
            random forest 2.0976198 3.9145749 0.8252312
            random forest | 2.1422503 | 4.0476584 | 0.813146 |
avg count
     full | decision trees | 2.1483366 | 4.3686314 | 0.78233653 |
            random forest 2.2975626 4.5237775 0.7666019
avg value
|avg_count|
           decision trees 2.426938 4.6459956 0.75382024
|avg count|linear regression|2.5307992|5.9806137| 0.5920694|
|avg value| decision trees|2.5476518| 5.031438| 0.7112786|
+----+
```

Curiosamente, em termos de MAE, gradient-boosted trees com avg_count obteve uma performance superior do que com full. A diferença é pouco significativa, mas parece indicar que o algoritmo gradient-boosted trees com avg_count obteve um erro médio menor mas teve alguns casos em que se desviou mais do LOS real no conjunto de testes e, por isso, acabou penalizado pelo RMSE.

Para os restantes algoritmos, full obteve sempre uma melhor performance.

Visualizar os resultados

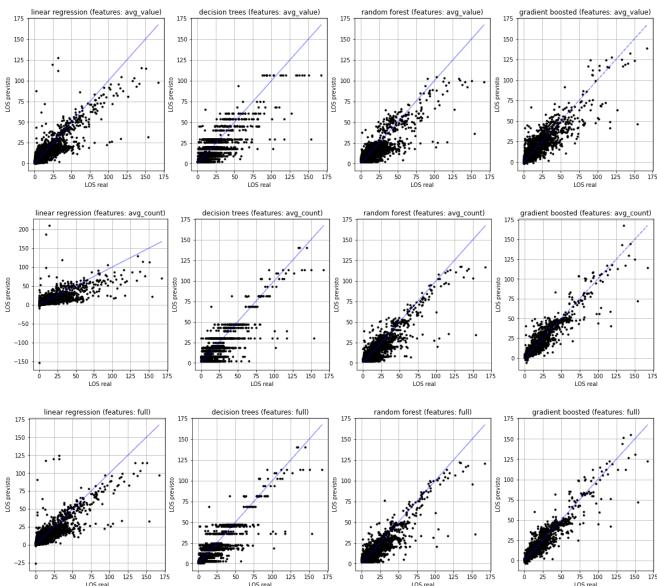
```
def plot_models(m):
    fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=4, figsize=(20, 5))
    for i in range(0,4):
        rows = models[m][list(models[m].keys())[i]]["predictions"]
        rows = rows.select(["LOS","prediction"]).collect()
        xx = [c[0] for c in rows]
        yy = [c[1] for c in rows]
        ax[i].plot(xx, yy, '.', color='black')
        ax[i].plot(xx, xx, '--', color='blue',alpha=.4)
        ax[i].set_xlabel("LOS real")
        ax[i].set_ylabel("LOS previsto")
```

```
ax[i].set_title("%s (features: %s)" %(list(models[m].keys())[i], m))
ax[i].grid()
evaluation = models[m][list(models[m].keys())[i]]["evaluation"]
plt.show()
plt.close()
plot_models("avg_value")
plot_models("avg_count")
plot_models("full")

decision trees (features: avg_value)

decision trees (features: avg_value)

gradient boosted (features: avg_value)
```



Observando os gráficos, é perceptível que o algorítmo gradient-boosted trees foi aquele que obteve previsões mais aproximadas. É interessante ver que o modelo de regressão linear usando avg_count previu alguns valores de LOS muito desfasados dos valores reais, o que explica o porquê de ser aquele que obteve o pior resultado em termos de RMSE, embora não o tenha sido em termos de MAE.

```
def plot_models2(model_set):
     fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=4, figsize=(20, 3))
     for r in range(0,4):
          df = rows =
models[model_set][list(models[model_set].keys())[r]]["predictions"].orderBy("ICUSTAY_ID",
ascending=True)
          yy1 = [y[0]  for y  in df.select("LOS").take(25)]
          yy2 = [y[0] for y in df.select("prediction").take(25)]
          xx = list(range(len(yy1)))
          ax[r].plot(xx,yy1,marker='o',c='blue',markersize=3, label="real")
          ax[r].plot(xx,yy2,marker='o',c='red', markersize=3, label="predicted")
          ax[r].fill_between(xx,yy1,yy2,color="red",alpha=.5)
          ax[r].grid()
          ax[r].set ylabel("LOS")
          ax[r].set_title("%s (features: %s)" %(list(models[model_set].keys())[r],
model set))
          ax[r].legend(loc="upper right")
          ax[r].set_xlabel("ICUSTAY_ID")
     plt.show()
     plt.close()
plot_models2("avg_value")
plot_models2("avg_count")
plot_models2("full")
     linear regression (features: avg_value)
                                   decision trees (features: avg_value)
                                                                 random forest (features: avg_value)
                                                                                              gradient boosted (features: avg_value)
                                                                                            25
  20
                                20
                                                              20
                                                                                            20
                                                            SO 15
                                                                                          SO 15
                              S 15
SO 15
  10
                                10
                                                                                            10
              ICUSTAY ID
                                            ICUSTAY ID
                                                                         ICUSTAY ID
                                                                                                       ICUSTAY ID
    linear regression (features: avg_count)
                                   decision trees (features: avg_count)
                                                                 random forest (features: avg_count)
                                                                                              gradient boosted (features: avg_count)
                                                                                            30
                                30
  30
                                                              25
                                                                                            25
                                25
  25
                                                              20
                                                                                            20
                                20
  20
                                                            SO] 15
                                                                                          S 15
                              S 15
§ 15
  10
              ICUSTAY ID
                                            ICUSTAY ID
       linear regression (features: full)
                                      decision trees (features: full)
                                                                   random forest (features: full)
                                                                                            30
  25
                                25
                                                              25
                                                                                            25
  20
                                20
                                                              20
                                                                                            20
                                                            SOJ 15
                              SO 15
S 15
                                                                                          S 15
  10
                                                              10
                                                                                            10
```

Estes gráficos servem apenas para ilustrar as diferenças entre os valores reais e os previstos, numa pequena amostra com 25 internamentos, ordenados por ordem crescente de ICUSTAY_ID. Mais uma vez, nesta pequena amostra, é visível que o algoritmo gradient boosted trees foi o que se saiu melhor.

5. Conclusão

Quando se deu início a este trabalho, ainda não era possível ter uma ideia muito concreta sobre o que se tinha em mãos. Era sabido que estávamos perante um dataset de grandes dimensões com dados clínicos, e pouco mais. A grande prioridade inicial era arranjar uma forma de conseguir ler esses dados. Aproveitando a experiência obtida na realização do primeiro trabalho, decidiu-se seguir a seguinte abordagem: utilizar o PySpark para fazer o processamento dos dados, sendo que os dados seriam sempre lidos a partir de um ficheiro parquet. Começou-se por converter o csv com o dataset original no formato parquet e, após cada transformação, escrever o resultado num novo ficheiro parquet. Desta forma, foi possível ir guardando o estado do trabalho e tornar o processamento dos dados muito mais rápido. Resumindo, tentou-se maximizar as potencialidades de hardware localmente, recorrendo a um formato de ficheiros mais apropriado e às capacidades de processamento em paralelo proporcionadas pelo Spark. Em último recurso, caso esta solução não se mostrasse eficaz, recorrer-se-ia ao BigQuery.

A ideia com que se ficou com a realização deste trabalho é que, seguindo um plano bem estruturado, recorrendo a formatos de armazenamento eficientes e fazendo um bom aproveitamento das capacidades de processamento em paralelo que a generalidade dos computadores atuais possuem, é possível fazer o processamento de grandes quantidades de dados em tempo útil. Há sempre um limite naquilo que os recursos de hardware que temos ao nosso dispor conseguem processar, mas esse limite só é alcançado maximizando-se a eficiência na utilização desses mesmos recursos. Neste trabalho procurou-se atingir esse limite, que se mostrou à altura de suportar o desafio proposto.

Referências

- [1] https://mimic.physionet.org/mimictables/chartevents/
- [2] https://medlineplus.gov/ency/article/003399.htm
- [3] https://spark.apache.org/docs/2.4.5/ml-classification-regression.html#regression
- API do PySpark: https://spark.apache.org/docs/latest/api/python/pyspark.sql.html
- API do matplotlib: https://matplotlib.org/3.2.1/api/index.html