

#### **Agenda**

- Introducción a Spark MLlib
  - Paquete pyspark.mllib vs pyspark.ml
- Formas de explotar un modelo entrenado con Spark
- Estimadores, transformadores y pipelines



# Introducción a Spark MLlib



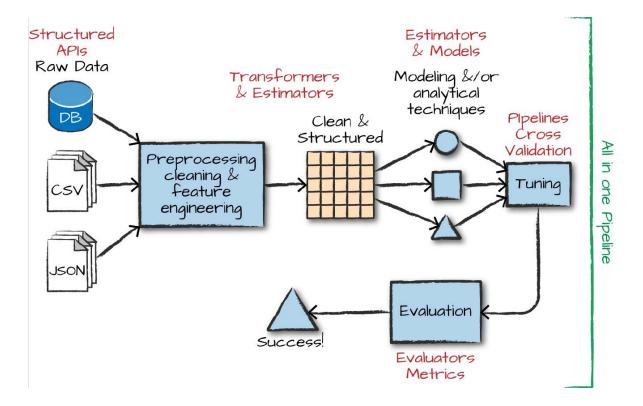
#### El módulo Spark MLlib

- Spark MLlib: módulo de Spark para ayudarnos en operaciones de
  - Limpieza de datos (aunque la mayoría se realizan con Spark SQL)
  - Ingeniería de variables (creación de variables desde datos en crudo)
  - Aprendizaje de modelos sobre datasets muy grandes (distribuidos)
  - Ajuste de híper-parámetros y evaluación de modelos
- No proporciona métodos para despliegue en producción de modelos entrenados (hoy, microservicios que usan el modelo entrenado para predecir un ejemplo, online)
- Puede ayudar en el proceso de ingeniería de variables y entrenamiento, incluso si el modelo entrenado va a ser explotado después con otro software no distribuido



#### El módulo Spark MLlib

 Fases del proceso de exploración y ajuste de un modelo, y herramientas de Spark para asistirnos en cada una de ellas



#### Despliegue de modelos con Spark

- Spark **no** fue concebido para explotación online de modelos entrenados, es decir, dar respuestas rápidas (predicciones) a un ejemplo nuevo que se recibe, por ejemplo, desde un sitio web, sino para entrenar modelos con grandes cantidades de datos
- Aun así, hay varias formas de aprovechar el modelo entrenado obtenido por Spark:
  - 1. Entrenar en batch con datos offline almacenados en HDFS (probablemente el proceso de creación de variables + entrenamiento llevará un tiempo), y usar el modelo entrenado para predecir en modo batch sobre otro conjunto de datos preparados para la predicción (esta etapa es mucho más rápida).
    - Es un enfoque **muy** frecuente en clientes. Es posible cuando los datos que hay que predecir ya se conocen en el momento de entrenar, por ejemplo series temporales para predecir una ventana a futuro.
    - Las predicciones pre-calculadas se almacenan en HDFS o en una BD, indexadas para que sea muy rápido servirlas desde un microservicio



#### Despliegue de modelos con Spark

- 2. Entrenar, guardar el modelo entrenado, y usarlo desde Spark para hacer predicciones. Poco recomendable: lanzar un job nuevo para cada ejemplo que predecir implica sobrecarga. Balanceo de carga con réplicas del modelo
- 3. Entrenar y exportar el modelo a un formato de intercambio, ej. PMML, para leerlo y explotarlo con otra herramienta no distribuida (Python en especial)
- 4. Entrenar y guardar el modelo, y usarlo desde Spark con Structured Streaming para hacer predicciones en mini-batches. Válido si vamos a recibir muchos datos de manera continua y no es muy relevante el tiempo de respuesta sino el throughput (métrica que optimiza Structured Streaming)



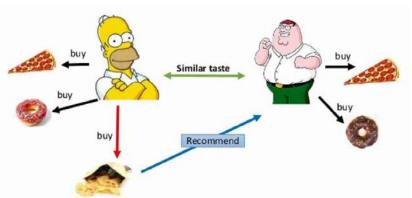
# **Spark MLlib vs Spark ML**

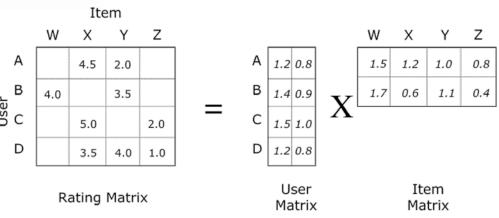
En la API de pyspark se distinguen:

- Paquete pyspark.mllib: API antigua basada en RDD de una estructura llamada LabeledPoint. Obsoleta.
- Paquete pyspark.ml: API actual, sobre DataFrames. En la medida de lo posible, se debe utilizar siempre.
- Casi todo está migrado del módulo mllib al módulo ml, excepto algunas clases en métricas de evaluación y algún algoritmo de recomendación.



#### Filtrado colaborativo





#### Ingeniería de variables y preprocesado

- La mayoría de las operaciones de manipulación, limpieza y transformación de datos en Spark se llevan a cabo con la API de **Spark SQL** (API estructurada, DataFrames)
  - Incluye la creación de nuevas variables (feature engineering)
  - Existe un transformador para poder insertar código SQL en un pipeline: SQLTransformer
- Hay ciertos tipos de pre-procesamiento para los que MLlib nos facilita herramientas:
  - Escalado / estandarización / normalización
  - Codificación One Hot
  - Tokenización (separación de textos en palabras)
  - Representación de textos mediante vectores numéricos con TF IDF
- Además, es necesario un pre-procesamiento específico para los algoritmos de MLlib: exige un formato de entrada concreto y rígido en los DataFrames de entrenamiento
  - Pre-procesamiento adicional para preparar el DF para Spark ML después del habitual de limpieza de datos y creación de variables



#### Ingeniería de variables y preprocesado

- Modelos de clasificación: la variable target que representa las clases debe ser Double, con parte decimal a 0 y empezando en 0.0
- Cualquier modelo: las variables (los predictores) deben ir en una sola columna de tipo vector
  - Excepción: recomendación por filtrado colaborativo (ALS)

Clasificación y regresión

| features               | target |
|------------------------|--------|
| [-32.2, 4.5, 1.0, 6.7] | 1.0    |

Clustering features
[-32.2, 4.5, 1.0, 6.7]

Recomendación (filtrado colaborativo)

| user | item | rating |
|------|------|--------|
| 3    | 27   | 2.8    |



## Ingeniería de variables en Spark

#### Extracting, transforming and selecting features

This section covers algorithms for working with features, roughly divided into these groups:

- Extraction: Extracting features from "raw" data
- · Transformation: Scaling, converting, or modifying features
- Selection: Selecting a subset from a larger set of features
- Locality Sensitive Hashing (LSH): This class of algorithms combines aspects of feature transformation with other algorithms.

#### Table of Contents

- Feature Extractors
  - TF-IDF
  - Word2Vec
  - CountVectorizer
  - FeatureHasher
- Feature Transformers
  - Tokenizer
  - StopWordsRemover
  - n-gram
  - Binarizer
  - PCA
  - PolynomialExpansion
  - Discrete Cosine Transform (DCT)
  - StringIndexer
  - IndexToString
  - OneHotEncoder (Deprecated since 2.3.0)
  - OneHotEncoderEstimator
  - VectorIndexer
  - Interaction
  - Normalizer

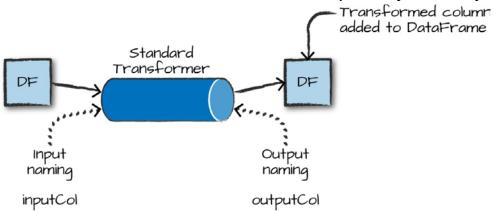
- StandardScaler
- MinMaxScaler
- MaxAbsScaler
- Bucketizer
- ElementwiseProduct
- SQLTransformer
- VectorAssembler
- VectorSizeHint
- QuantileDiscretizer
- Imputer
- Feature Selectors
  - VectorSlicer
  - RFormula
  - ChiSaSelector
- · Locality Sensitive Hashing
  - LSH Operations
    - Feature Transformation
    - Approximate Similarity Join
    - Approximate Nearest Neighbor Search
  - LSH Algorithms
    - Bucketed Random Projection for Euclidean Distance
    - MinHash for Jaccard Distance

#### https://spark.apache.org/docs/latest/ml-features.html



#### **Transformadores en Spark ML**

Transformer: función que recibe como entrada un DF y uno o varios nombres de columna existentes (inputCol), y las transforma de alguna manera. Salida: el mismo DF con una nueva columna añadida, con el nombre que hayamos fijado (outputCol)



- La interfaz *Transformer* tiene un único método: *transform(df: DataFrame)* que recibe un DF y devuelve otro DF
- Los transformadores no tienen ningún parámetro que aprender de los datos. Su salida es un DataFrame

#### **Transformadores muy comunes**

VectorAssembler: recibe varias columnas y las concatena en una sola de tipo vector, de longitud igual al número de columnas que se quieran ensamblar. Necesario para calcular la columna (única) de features en los algoritmos de aprendizaje supervisado.

```
from pyspark.ml.linalg import Vectors
from pyspark.ml.feature import VectorAssembler

dataset = spark.createDataFrame(
       [(0, 18, 1.0, Vectors.dense([0.0, 10.0, 0.51]), 1.0)],
       ["id", "hour", "mobile", "userFeatures", "clicked"])

assembler = VectorAssembler(
       inputCols=["hour", "mobile", "userFeatures"],
       outputCol="features")

output = assembler.transform(dataset)
print("Assembled 'hour', 'mobile', 'userFeatures' to column 'features'")
output.select("features", "clicked").show(truncate = False)
```



#### **Transformadores muy comunes**

**Bucketizer**: transforma una columna continua en una columna con *identificadores de intervalo (bucket)*. Recibe como parámetro el vector con los límites de cada intervalo

```
from pyspark.ml.feature import Bucketizer
splits = [-float("inf"), -0.5, 0.0, 0.5, float("inf")]
data = [(-999.9,), (-0.5,), (-0.3,), (0.0,), (0.2,), (999.9,)]
dataFrame = spark.createDataFrame(data, ["features"])
bucketizer = Bucketizer(splits=splits, inputCol="features",
outputCol="bucketedFeatures")
# Transform original data into its bucket index
                                                      |features|bucketedFeatures|
bucketedData = bucketizer.transform(dataFrame)
                                                        -999.9
                                                                            0.0
print("Bucketizer output with %d buckets"
                                                          -0.5
                                                                            1.0
       % (len(bucketizer.getSplits())-1))
                                                          -0.3
                                                                            1.0
                                                                            2.0
                                                           0.0
bucketedData.show()
                                                                            2.0
                                                           0.2
                                                         999.9
```



#### **Transformadores muy usuales**

- Cualquier modelo entrenado: el resultado de entrenar un modelo sobre un DF es un objeto \*Model de la subclase específica del modelo que hayamos ajustado
- Todo modelo **entrenado** es también un *Transformer* por lo que es capaz de transformar (hacer predicciones con) un DF de ejemplos, siempre que tenga el mismo formato (mismos nombres de columnas y tipos de datos) que el DF que se utilizó para entrenar
- En general, transformar quiere decir añadir una o varias columnas nuevas al DF, en este caso con las predicciones
- Para facilitar que se mantenga el mismo formato, se suele entrenar un pipeline completo y utilizar su salida (*pipeline entrenado*) como transformador



#### Transformadores muy usuales

```
%> from pyspark.ml.regression import LinearRegression
%> training = spark.read.format("libsvm")\
               .load("sample linear regression data.txt")
%> training.show()
              label features
 -9.490009878824548 | (10, [0, 1, 2, 3, 4, 5, ...
 0.2577820163584905 (10,[0,1,2,3,4,5,...]
 1.5299675726687754 | (10, [0, 1, 2, 3, 4, 5, ...
 -0.250102447941961 | (10,[0,1,2,3,4,5,...|
%> lr = LinearRegression(maxIter=10, regParam=0.3,
     elasticNetParam=0.8, featuresCol = "features",
     labelCol = "label")
%> lrModel = lr.fit(training)
%> lrModel. class
<class 'pyspark.ml.regression.LinearRegressionModel'>
%> from pyspark.ml import Transformer
%> isinstance(lrModel, Transformer)
```

True

#### %> pred = lrModel.transform(training) %> pred.show()

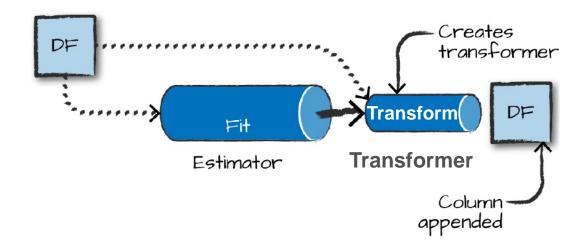
| prediction           | features          | label               |
|----------------------|-------------------|---------------------|
| 0.39922280427864854  | (10,[0,1,2,3,4,5, | -9.490009878824548  |
| -0.29559741764686487 | (10,[0,1,2,3,4,5, | 0.2577820163584905  |
| 0.7651496483023066   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -4.438869807456516  |
| 0.7839239258929726   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -19.782762789614537 |
| 1.4831466765011345   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -7.966593841555266  |
| -0.9871618140066576  | (10,[0,1,2,3,4,5, | -7.896274316726144  |
| 1.5395124755034428   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -8.464803554195287  |
| 0.05906145957465214  | (10,[0,1,2,3,4,5, | 2.1214592666251364  |
| -2.0397390816430665  | (10,[0,1,2,3,4,5, | 1.0720117616524107  |
| 2.1211666677165093   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -13.772441561702871 |
| -0.04572650153420729 | (10,[0,1,2,3,4,5, | -5.082010756207233  |
| 1.4045706595369045   | (10,[0,1,2,3,4,5, | 7.887786536531237   |
| 1.8936490662233862   | (10,[0,1,2,3,4,5, | 14.323146365332388  |
| 0.2625495742873283   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -20.057482615789212 |
| 1.1054144970959854   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -0.8995693247765151 |
| -1.3003908887799676  | (10,[0,1,2,3,4,5, | -19.16829262296376  |
| -2.0446543261749612  | (10,[0,1,2,3,4,5, | 5.601801561245534   |
| -0.960287000485595   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -3.2256352187273354 |
| 1.6330567770307318   | (10,[0,1,2,3,4,5, | 1.5299675726687754  |
| 1.1299316224433398   | (10,[0,1,2,3,4,5, | -0.250102447941961  |

Ir : Estimador

IrModel: Transformador (modelo entrenado

#### Estimadores en Spark ML

- Estimator: herramienta de Spark para poder realizar transformaciones que requieren que ciertos parámetros de la transformación se ajusten (o se *aprendan*) a partir de los datos.
- Normalmente requieren una pasada previa (o varias) sobre la columna que se desea transformar
- La interfaz Estimator tiene un único método: fit(df: DataFrame) que recibe un DF y devuelve un objeto de tipo \*Model, el modelo entrenado, que es además un Transformer
  - OJO: Spark llama modelo a cualquier cosa que requiera un fit previo, no sólo a los algoritmos de machine learning



#### **Estimadores muy comunes**

- StringIndexer: estimador para pre-procesar variables categóricas. Es el más utilizado. Convierte una columna categórica (da igual el tipo ya que los valores serán entendidos como categorías) en Double empezando en 0.0, donde las categorías se representan mediante 0.0, 1.0, 2.0...
  - Además, añade metadatos al DataFrame transformado (resultante de transform) indicando que esa columna es categórica (no es simplemente continua)
  - Los algoritmos que sí soportan variables categóricas (ej: DecisionTree, RandomForest, GradientBoostedTrees) requieren que se las pasemos indexadas
  - Los algoritmos que no soportan variables categóricas (LinearRegression, LogisticRegression) requieren el uso de *OneHotEncoder* (siguiente slide)
  - IMPORTANTE: al predecir ejemplos nuevos, hay que usar la misma codificación!



#### Estimadores muy comunes: StringIndexer

```
... # resto de código
indexedNuevo = indexerModel.transform(otroDF) # lo uso otra vez!
```



#### **Estimadores muy comunes**

- OneHotEncoderEstimator: recibe un conjunto de columnas y convierte cada una (de manera independiente) a un conjunto de variables dummy con codificación one-hot
  - Cada variable (con n categorías posibles) da lugar a n-1 columnas (en una sola columna de tipo vector) donde en cada ejemplo, sólo una de ellas tiene valor 1 y el resto son 0 indicando cuál es el valor de la categoría presente en ese ejemplo
  - Spark siempre asume que los valores provienen de una indexación previa con *StringIndexer*. obligatoriamente números reales con la parte decimal a 0
- Cualquier algoritmo de predicción (Machine Learning) es un Estimator antes de ser ajustado:
  - Todos los modelos heredan de *Estimator:* el método *fit(df)* lanza el aprendizaje.
  - Los Estimators suelen tener muchos parámetros configurables antes de fit (en algunos Transformers también hay parámetros configurables, pero suelen ser menos).



#### **Estimadores muy comunes**

```
>>> from pyspark.ml.feature import OneHotEncoderEstimator
>>> df = spark.createDataFrame([
    (0.0, 1.0, 2.0),
    (1.0, 0.0, 3.0),
    (2.0, 1.0, 2.0), # Spark asume que la tercera columna tiene 5 categorías!
    (0.0, 2.0, 1.0),
    (0.0, 1.0, 4.0),
    (2.0, 0.0, 4.0)
[ "categoryIndex1", "categoryIndex2", "categoryIndex3"])
>>> encoder = OneHotEncoderEstimator(inputCols = ["categoryIndex1", "categoryIndex2", "categoryIndex3"],
                                 outputCols = ["categoryVec1", "categoryVec2", "categoryVec3"])
>>> model = encoder.fit(df)
>>> encoded = model.transform(df)
>>> encoded.show()
     categoryIndex1 | categoryIndex2 | categoryIndex3 | categoryVec1 | categoryVec2 | categoryVec3 |
          0.0
                       1.0|
                                     [0.0, 1.0]
                        0.0
                                     3.0 \mid [0.0, 1.0] \mid [1.0, 0.0] \mid [0.0, 0.0, 0.0, 1.0]
          1.0
          2.0
                       1.0
                                          [0.0,0.0] [0.0,1.0] [0.0,0.0,1.0,0.0]
                                     2.0
          0.0
                        2.0
                                           [1.0,0.0] [0.0,0.0] [0.0,1.0,0.0,0.0]
                                     1.0
          0.01
                        1.0
                                     4.0
                                           [1.0,0.0]
                                                      [0.0,1.0] [0.0,0.0,0.0,0.0]
                                                      [1.0,0.0] [0.0,0.0,0.0,0.0]
          2.0
                        0.0
                                     4.0
                                           [0.0, 0.0]
```

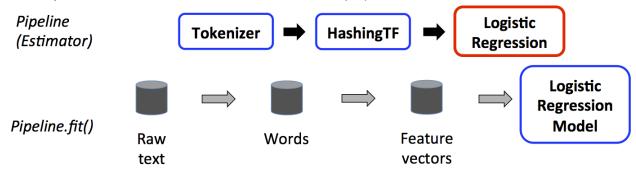
#### **Pipelines**

- Es frecuente en ML extraer características de datos raw y prepararlas antes de llamar a un algoritmo de aprendizaje.
- Puede ser difícil tener control de todos los pasos de pre-procesamiento si luego queremos replicarlos en otros conjuntos de datos o en el momento de hacer predicciones con nuevos datos. Ejemplo: para procesar un documento:
  - División en palabras
  - Procesamiento de palabras para obtener un vector de características numéricas
  - Preparación de esas características para el formato que requiere el algoritmo elegido en Spark
  - Finalmente, entrenamiento de un modelo.
- Pipeline: secuencia de etapas (*PipelineStage*, superclase de Estimator y Transformer) que se ejecutan en un cierto orden. La salida de una etapa es entrada para *alguna* de las etapas posteriores (no necesariamente la inmediatamente siguiente)
  - Es un **Estimator**. El método *fit(df)* recorre cada etapas, **Ilama a transform() si la etapa es un Transformer, y Ilama a fit(df) y luego a transform(df) si es un Estimator**, pasando siempre el DF tal como esté en ese punto (con las columnas originales más las que le hayan añadido las etapas previas).
  - Es habitual (pero no obligatorio) que la última etapa sea un algoritmo de ML, aunque podría haber varios a lo largo de un pipeline
  - IMPORTANTE: un mismo objeto no puede ser añadido a dos pipelines

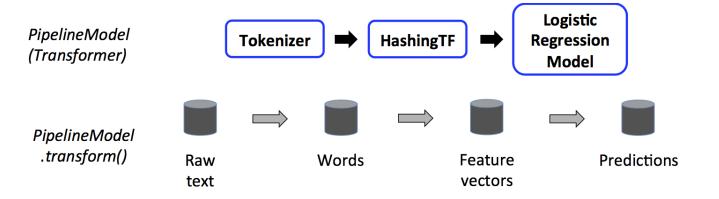


#### **Pipelines**

Pipeline antes de llamar al método fit(df):



PipelineModel (ajustado) devuelto por la llamada a fit(df): todo son Transformers



#### **Pipelines**

```
from pyspark.ml.feature import StringIndexer, VectorAssembler, Binarizer, VectorSlicer, StandardScaler
from pyspark.ml import Pipeline from pyspark.ml.classification import LogisticRegression
trainTest = spark.read.parquet("flights.parquet").randomSplit([0.8, 0.2], 12345)
trainingData = trainTest[0]
testingData = trainTest[1]
monthIndexer = StringIndexer().setInputCol("Month").setOutputCol("MonthCat")
dayofMonthIndexer = StringIndexer().setInputCol("DayofMonth").setOutputCol("DayofMonthCat")
dayOfWeekIndexer = StringIndexer().setInputCol("DayOfWeek").setOutputCol("DayOfWeekCat")
uniqueCarrierIndexer = StringIndexer().setInputCol("UniqueCarrier").setOutputCol("UniqueCarrierCat")
originIndexer = StringIndexer().setInputCol("Origin").setOutputCol("OriginCat")
assembler = VectorAssembler().setInputCols(["MonthCat", "DayofMonthCat", "DayOfWeekCat", "UniqueCarrierCat",
       "OriginCat", "DepTime", "CRSDepTime", "ArrTime", "CRSArrTime", "ActualElapsedTime", "CRSElapsedTime",
                                                                                                                 "AirTime", "DepDelay",
"Distance"]).setOutputCol("rawFeatures")
slicer = VectorSlicer().setInputCol("rawFeatures").setOutputCol("slicedfeatures").setNames(["MonthCat",
       "DayofMonthCat", "DayOfWeekCat", "UniqueCarrierCat", "DepTime", "ArrTime", "ActualElapsedTime",
                                                                                                         "AirTime", "DepDelay", "Distance"])
scaler = StandardScaler().setInputCol("slicedfeatures").setOutputCol("features")\
                               .setWithStd(True).setWithMean(True)
binarizerClassifier = Binarizer().setInputCol("ArrDelay").setOutputCol("binaryLabel").setThreshold(15.0)
lr = LogisticRegression().setMaxIter(10).setRegParam(0.3).setElasticNetParam(0.8)
                               .setLabelCol("binaryLabel").setFeaturesCol("features")
lrPipeline = Pipeline().setStages([monthIndexer, dayofMonthIndexer, dayOfWeekIndexer, uniqueCarrierIndexer,
       originIndexer, assembler, slicer, scaler, binarizerClassifier, lr])
pipelineModel = lrPipeline.fit(trainingData)
lrPredictions = pipelineModel.transform(testingData)
lrPredictions.select("prediction", "binaryLabel", "features").show(20)
```

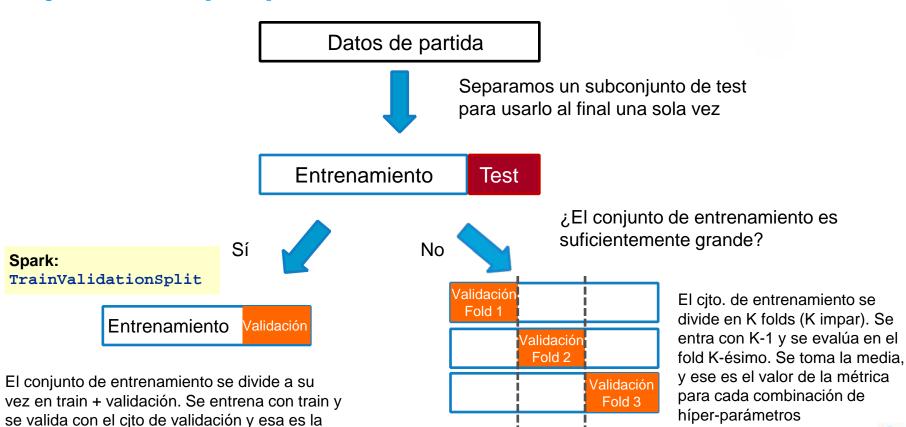
# Ajuste de híper-parámetros

- Casi todos los algoritmos tienen híper-parámetros cuyos valores debe fijar el usuario antes de iniciar el algoritmo. La búsqueda del valor óptimo se hace por ensayo-error de entre un conjunto de valores habituales factibles
- Spark proporciona herramientas para buscar la mejor combinación de valores de los híperparámetros, indicándole el conjunto de posibles valores que debe probar con cada uno.
  - Se fija una combinación, se entrena el modelo con un subconjunto de los datos (datos de entrenamiento: el mismo para todas las combinaciones que se irán probando) y se evalúa con otro subconjunto (datos de validación, también los mismos para todas las combinaciones)
  - Si hay suficientes datos, basta con un solo conjunto de entrenamiento y otro de validación. Si no, se lleva a cabo Cross Validation.
  - Con cualquiera de las dos herramientas, Spark devuelve el modelo entrenado con la mejor combinación de parámetros, usando para ello todo el dataset
- Antes de empezar todo el proceso, se separa un subconjunto de **test** que no participa en el proceso, y será utilizado solamente una vez al final, para saber cómo se comportará el mejor modelo con datos nunca vistos, y obtener así una métrica que se entregará junto con el modelo entrenado.



# Ajuste de híper-parámetros

métrica



Spark: CrossValidator

# Ajuste de híper-parámetros: TrainValidationSplit

#### Train-Validation Split

Train Validation Test

In addition to Crossvalidator Spark also offers TrainvalidationSplit for hyper-parameter tuning. TrainvalidationSplit only evaluates each combination of parameters once, as opposed to k times in the case of Crossvalidator. It is therefore less expensive, but will not produce as reliable results when the training dataset is not sufficiently large.

Unlike Crossvalidator, Trainvalidationsplit creates a single training, test) dataset pair. It splits the dataset into these two parts using the trainRatio parameter. For example with trainRatio = 0.75, TrainvalidationSplit will generate a training and test dataset pair where 75% of the data is used for training and 25% for validation.

Like CrossValidator, TrainValidationSplit finally fits the Estimator using the best ParamMap and the entire dataset.



# Ajuste de híper-parámetros: TrainValidationSplit

#### Cross-Validation

CrossValidator begins by splitting the dataset into a set of *folds* which are used as separate training and test datasets. E.g., with k=3 folds, CrossValidator will generate 3 (training, test) dataset pairs, each of which uses 2/3 of the data for training and 1/3 for testing. To evaluate a particular ParamMap, CrossValidator computes the average evaluation metric for the 3 Models produced by fitting the Estimator on the 3 different (training, test) dataset pairs.

After identifying the best ParamMap, CrossValidator finally re-fits the Estimator using the best ParamMap and the entire dataset.

#### Examples: model selection via cross-validation

The following example demonstrates using CrossValidator to select from a grid of parameters.

Note that cross-validation over a grid of parameters is expensive. E.g., in the example below, the parameter grid has 3 values for hashing TF. numFeatures and 2 values for 1r. regParam, and CrossValidator uses 2 folds. This multiplies out to  $(3\times2)\times2=12$  different models being trained. In realistic settings, it can be common to try many more parameters and use more folds (k=3 and k=10 are common). In other words, using CrossValidator can be very expensive. However, it is also a well-established method for choosing parameters which is more statistically sound than heuristic hand-tuning.

