PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE MINAS GERAIS NÚCLEO DE EDUCAÇÃO A DISTÂNCIA

Pós-graduação Lato Sensu em Inteligência Artificial e Aprendizado de Máquina

Nicolas Marcos de Moraes Oliveira

MLFLOW Aplicado à Soluções de Machine Learning

Rio de Janeiro, Brasil 2022

Nicolas Marcos de Moraes Oliveira

MLFLOW Aplicado à Soluções de Machine Learning

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Especialização em Inteligência Artificial e Aprendizado de Máquina como requisito parcial à obtenção do título de especialista.

Rio de Janeiro, Brasil 2022

SUMÁRIO

1. Introdução	4
1.1. Contextualização	
1.2. O problema proposto	4
2. Coleta de Dados	6
3. Análise e Exploração dos Dados	9
4. Processamento/Tratamento de Dados	12
5. Criação de Modelos de Machine Learning	14
6. Apresentação dos Resultados	19
7. Links	22
REFERÊNCIAS	23

1. Introdução

1.1. Contextualização

Este estudo tem por objetivo apresentar o emprego da plataforma de MLFLOW em soluções corporativas de Machine Learning, provendo um ambiente escalável, compartilhado, monitorável e metrificável. O estudo foi feito utilizando a implementação da plataforma através de ambiente Databricks.

1.2. O problema proposto

Conforme afirmado por Géron (2019, p. 24), ao trabalhar com Machine Learning e partir do princípio que a principal tarefa consiste em selecionar o algoritmo de aprendizagem e o treinar baseado em dados, dois possíveis pontos de erro são algoritmos ruins e dados ruins.

Para evitar algoritmos ruins e buscar as melhores métricas aos seus respectivos problemas, profissionais da área de Machine Learning realizam testes dentre diferentes algoritmos, com diferentes hiperparâmetros e técnicas. Corroborado por Vanschoren e Blockeel (2009, p.1), experimentação é alma de Machine Learning. Durante o trabalho de exploração, preparação, treinamento e testes de modelos; diversos experimentos são feitos por profissionais da área com o intuito de achar a melhor combinação de fatores inerentes ao trabalho que permitam os melhores desempenhos.

Deste modo, percebem-se duas questões que se tornam cotidianas aos profissionais de aprendizagem de máquina: como realizar a comparação mensurada dentre diferentes experimentos; e como realizar seu *tracking* monitorando diferentes versões a ajustes, bem como recuperar o experimento cuja combinação culminou no melhor desempenho?

Ao pensar sobre soluções corporativas, há dois novos desafios que podem ser adicionados ao contexto: como permitir reprodutibilidade destes experimentos

em diferentes ambientes e como permitir o trabalho colaborativo entre integrantes da mesma equipe com o mesmo fim?

Diante de todos estes desafios, surge o MLFLOW como alternativa capaz de atender tais desafios. O MLFLOW é uma plataforma Open Source de gerenciamento do ciclo de vida de machine learning, escalável para Big Data com Apache Spark, que permite o trabalho através de diferentes linguagens como Python e R, em diferentes clouds e com trabalho colaborativo entre diferentes usuários. O MLFLOW conta com os seguintes componentes:

- MLFLOW Tracking: componente responsável por armazenar e permitir consulta de experimentos, com seus códigos, dados e resultados. É possível qual código foi executado, sob quais dados (pode-se usar diferentes algoritmos para diferentes partes dos dados) e quais resultados foram obtidos.
- MLFLOW Projects: componente que permite empacotar projetos e posteriormente os compartilhar e/ou versionar. Deste modo, uma vez que o projeto faça uso de determinadas dependências, bibliotecas e demais configurações de ambiente podem ser reproduzidas em outras plataformas.
- MLFLOW Models: componente responsável por permitir deploy de modelos de machine learning, bem como os servir para uso de predições, seja em tempo real através de API REST ou inferência batch em ambiente Apache Spark.
- MLFLOW Registry: componente que permite o registro e armazenagem de modelos, bem como recuperar e disponibilizar versões específicas, controlando transições de estados, anotações e demais. Atua como um repositório centralizado de modelos, APIs e UI.

Este estudo da plataforma MLFLOW foi desenvolvido a utilizando no ambiente Databricks, que é um ambiente de Delta Lake provendo em um mesmo ambiente a possibilidade de usar MLFLOW com Big Data.

Quanto ao projeto de Machine Learning que servirá para o estudo da plataforma, será utilizando um modelo de classificação empregando algoritmo de

random forest sobre base de dados fictícia para tentar prever a probabilidade de um funcionário deixar ou não a empresa.

2. Coleta de Dados

Os dados trabalhados neste projeto foram obtidos em 10/06/2022 através da plataforma Kaggle no link que segue: https://www.kaggle.com/datasets/pavansubhasht/ibm-hr-analytics-attrition-dataset?resource=download. Esta base contém um case dados fictícios sobre funcionários de uma empresa e tem por objetivo tentar prever a possibilidade de um funcionário deixar ou não a companhia, dadas determinadas características.

O dataset obtido foi disponibilizado no github do autor do estudo através do link https://raw.githubusercontent.com/nicolasmarcos/TCC PucMinas/main/dataset hr.cs v e conta com as seguintes colunas:

COLUNA	DESCRIÇÃO	TIPO				
Age	Idade do funcionário	Numérico discreto				
Attrition	Se o funcionário deixou ou	Categórico nominal				
	não a companhia: YES /					
	NO					
BusinessTravel	Frequência com a qual o	Categórico nominal				
	funcionário viaja					
DailyRate	Taxa diária do funcionário	Numérico discreto				
Department	Departamento do	Categórico nominal				
	funcionário					
DistanceFromHome	Distância entre a moradia	Numérico discreto				
	do funcionário e seu					
	trabalho					
Education	Nível educacional do	Numérico discreto				
	funcionário, sendo: 1	(representando categórico				
	'Below College'; 2 'College'; 3	ordinal)				
	'Bachelor'; 4 'Master'; 5					
	'Doctor'.					
EducationField	Área de estudo do	Categórico nominal				

	funcionário.	
EmployeeCount	Valor dummy para	Numérico discreto
	contagem de registros	
EmployeeNumber	Número identificador do	Numérico discreto
	funcionário	
EnvironmentSatisfaction	Nível de satisfação do	Numérico discreto
	funcionário com ambiente	(representando categórico
	de trabalho, sendo: 1	ordinal)
	'Low'; 2 'Medium'; 3 'High';	
	4 'Very High'.	
Gender	Gênero do funcionário	Categórico nominal
HourlyRate	Taxa hora do funcionário	Numérico discreto
JobInvolvement	Nível de envolvimento do	Numérico discreto
	funcionário com o	(representando categórico
	trabalho, sendo: 1 'Low', 2	ordinal)
	'Medium', 3 'High', 4 'Very	
	High'.	
JobLevel	Nível do funcionário	Numérico discreto
JobRole	Cargo do funcionário	Categórico nominal
JobSatisfaction	Nível de satisfação do	Numérico discreto
	funcionário com o	(representando categórico
	trabalho, sendo: 1 'Low', 2	ordinal)
	'Medium',3 'High', 4 'Very	
MaritalStatus	High'. Status civil do funcionário	Categórico nominal
		Numérico discreto
MonthlyIncome	Rendimento mensal do funcionário	Numerico discreto
MonthlyRate	Taxa mensal do	Numérico discreto
MonthlyNate	funcionário	Numerico discreto
NumCompaniesWorked	Quantidade de	Numérico discreto
riumcompaniesviorkeu		INDITION DISCIPIO
	·	
Over19	funcionário já trabalhou	Catagárica naminal
Over18	Se "Y" referente à "yes",	Categórico nominal

	indica que o funcionário é	
	maior de 18 anos	
OverTime	Indica se o funcionário faz	Categórico nominal
	horas extras como "Yes"	
	ou "No"	
PercentSalaryHike	Evolução salarial	Numérico discreto
	percentual	
PerformanceRating	Nível de performance do	Numérico discreto
	funcionário, sendo: 1	(representando categórico
	'Low', 2 'Good', 3	ordinal)
	'Excellent', 4 'Outstanding'	
RelationshipSatisfaction	Nível de satisfação do	Numérico discreto
	funcionário em	(representando categórico
	relacionamento, sendo: 1	ordinal)
	'Low', 2 'Medium', 3 'High', 4	
	'Very High'.	
StandardHours	Quantidade de horas	Numérico discreto
	padrões do funcionário	
StockOptionLevel	Nível de opção de	Numérico discreto
	participação em ações	
TotalWorkingYears	Total de anos trabalhados	Numérico discreto
TrainingTimesLastYear	Vezes em que o	Numérico discreto
	funcionário foi treinado no	
	último ano	
WorkLifeBalance	Nível de equilíbrio entre	Numérico discreto
	vida pessoal e trabalho,	(representando categórico
	sendo: 1 'Bad', 2 'Good', 3	ordinal)
	'Better', 4 'Best'.	
YearsAtCompany	Anos do funcionário na	Numérico discreto
	companhia	
YearsInCurrentRole	Anos do funcionário no	Numérico discreto
	cargo atual	
YearsSinceLastPromotion	Anos do funcionário desde	Numérico discreto

	sua última promoção	
YearsWithCurrManager	Anos do funcionário com	Numérico discreto
	gestor atual	

Observação: O dataset não dispunha de metadados a respeito de todas as colunas. Portanto, as descrições citadas são a respeito do entendimento do autor sobre as colunas, corroborados por pesquisas em canais e fóruns sobre estudos realizados nos mesmos dados.

3. Análise e Exploração dos Dados

Uma vez de posse dos dados, foram feitas análises com o objetivo de identificar suas naturezas. Através dos comandos que seguem, foi possível inferir que:



Figura 1 - O dataset dispõe de 1470 linhas e 35 colunas

	Teremo		mosta dos dado	os do iní	cio											Pythor	
Ag	e Attrit	ition	BusinessTravel	DailyRate	Department	DistanceFromHome	Education	EducationField	EmployeeCount	EmployeeNumber	Environment Satisfaction	Gender	HourlyRate	Jobinvolvement	JobLevel	JobRole	JobSatisfaction Ma
0 4	1 '	Yes	Travel_Rarely	1102	Sales	1	2	Life Sciences	1	1	2	Female	94	3	2	Sales Executive	4
1 4	9	No 1	Travel_Frequently	279	Research & Development	8	1	Life Sciences	1	2	3	Male	61	2	2	Research Scientist	2
2 3	7	Yes	Travel_Rarely	1373	Research & Development	2	2	Other	1	4	4	Male	92	2	1	Laboratory Technician	3
3 3	3	No 1	Travel_Frequently	1392	Research & Development	3	4	Life Sciences	1	5	4	Female	56	3	1	Research Scientist	3
4 2	7	No	Travel_Rarely	591	Research & Development	2	1	Medical	1	7	1	Male	40	3	1	Laboratory Technician	2
4																	?

Figura 2 - É possível ter uma ideia inicial dos dados

	Informações .describe()		t												
	Age	DailyRate	DistanceFromHome	Education	EmployeeCount	EmployeeNumber	Environment Satisfaction	HourlyRate	Jobinvolvement	JobLevel	JobSatisfaction	Monthlyincome	MonthlyRate	NumCompaniesWorked	Per
count	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.0	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1470.000000	1
mean	36.923810	802.485714	9.192517	2.912925	1.0	1024.865306	2.721769	65.891156	2.729932	2.063946	2.728571	6502.931293	14313.103401	2.693197	
std	9.135373	403.509100	8.106864	1.024165	0.0	602.024335	1.093082	20.329428	0.711561	1.106940	1.102846	4707.956783	7117.786044	2.498009	
min	18.000000	102.000000	1.000000	1.000000	1.0	1.000000	1.000000	30.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1009.000000	2094.000000	0.000000	1
25%	30.000000	465.000000	2.000000	2.000000	1.0	491.250000	2.000000	48.000000	2.000000	1.000000	2.000000	2911.000000	8047.000000	1.000000	,
50%	36.000000	802.000000	7.000000	3.000000	1.0	1020.500000	3.000000	66.000000	3.000000	2.000000	3.000000	4919.000000	14235.500000	2.000000	i
75%	43.000000	1157.000000	14.000000	4.000000	1.0	1555.750000	4.000000	83.750000	3.000000	3.000000	4.000000	8379.000000	20461.500000	4.000000	1
max	60.000000	1499.000000	29.000000	5.000000	1.0	2068.000000	4.000000	100.000000	4.000000	5.000000	4.000000	19999.000000	26999.000000	9.000000	1
4															-

Figura 3 - Não há valores nulos e é possível analisar sua distribuição

```
df["Attrition"].value_counts()
 Out[11]: No
                  1233
 Yes
         237
 Name: Attrition, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@g
Cmd 17
 1
     df["BusinessTravel"].value_counts()
 Out[12]: Travel_Rarely
                                 1043
 Travel_Frequently
                        277
 Non-Travel
                        150
 Name: BusinessTravel, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@g
Cmd 18
 1
     df["Department"].value_counts()
 Out[13]: Research & Development
                                      961
 Sales
                             446
 Human Resources
                              63
 Name: Department, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@g
Cmd 19
     df["EducationField"].value_counts()
 1
 Out[14]: Life Sciences
                                606
 Medical
                      464
 Marketing
                      159
 Technical Degree
                      132
 0ther
                       82
 Human Resources
                       27
 Name: EducationField, dtype: int64
```

Figura 4 - Pode-se analisar ocorrências distintas para atributos categóricos.

```
df["Gender"].value_counts()
 Out[15]: Male
                    882
 Female
          588
 Name: Gender, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@gmail.com at 10/09/2022 11:43:07 on default
Cmd 21
 1 df["JobRole"].value_counts()
 Out[16]: Sales Executive
                                        326
 Research Scientist
                             292
 Laboratory Technician
                             259
 Manufacturing Director
                             145
 Healthcare Representative 131
                             102
 Manager
 Sales Representative
                               83
 Research Director
                                80
 Human Resources
                                52
 Name: JobRole, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@gmail.com at 10/09/2022 11:43:07 on default
Cmd 22
 1 df["MaritalStatus"].value_counts()
 Out[17]: Married
                       673
            470
 Single
           327
 Divorced
 Name: MaritalStatus, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@gmail.com at 10/09/2022 11:43:07 on default
Cmd 23
 1
    # Este atributo indica se a pessoa tem mais de 18 anos. Como todos possuem, não o utilizaremos
 2 df["Over18"].value_counts()
 Out[18]: Y
             1470
 Name: Over18, dtype: int64
 Command took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@gmail.com at 10/09/2022 11:43:09 on default
Cmd 24
 1 # Este atributo indica se a pessoa trabalha horas extras
 2 df["OverTime"].value_counts()
 Out[19]: No
                 1054
        416
 Yes
 Name: OverTime, dtype: int64
```

Figura 5 - Pode-se analisar ocorrências distintas para demais atributos categóricos.

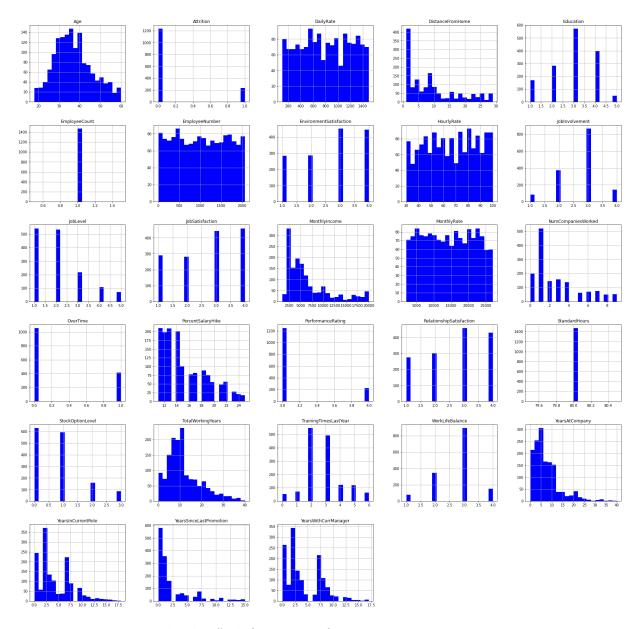


Figura 6 - Pode-se analisar distribuição de features numéricas

4. Processamento/Tratamento de Dados

Após as análises realizadas na etapa de exploração de dados, identificou-se que:

 Todos os funcionários possuem mais de 18 anos. Portanto, a coluna "Over18" não se faz necessária para o treinamento do modelo e foi retirada do dataset. O mesmo raciocínio foi empregue para as colunas "StandardHours" e "EmployeeCount", visto que todos os registros tinham o mesmo valor.

- A coluna "EmployeeNumber" foi retirada por ser apenas um ID do funcionário, sem agregar significado ao modelo.
- Uma vez que a classe "Attrition" a ser prevista pelo modelo é binária, seus valores foram alterados para 1 quando "Yes" e 0 quando "No". O mesmo foi empregue para a feature "OverTime".
- Não foram encontrados outliers ou dados faltantes que requeressem tratamentos.

Realizados os ajustes, é necessário preparar o dataset para o processo de Machine Learning. Dado que o algoritmo a ser utilizado será um algoritmo de Random Forest, não se faz necessário etapa de normalização dos dados. Todavia, será necessário encoding de dados para tratar os dados categóricos. O processo será realizado com o uso de OneHotEncoder().

Uma vez que o objetivo deste estudo consiste em explorar o potencial do MLFLOW para soluções corporativas e reprodutíveis, todas as etapas de préprocessamento dos dados foram atribuídas à um pipeline de processamento, de modo que mediante entrada de novos dados seja possível reproduzir as etapas com o mínimo de esforço. Para tal, foi convertido o dataframe pandas que estava sendo utilizado até então para análises, feita a divisão em treinamento e teste nos percentuais de 80% e 20% do dataset, respectivamente. Posteriormente, o dataset de treino será submetido às etapas do pipeline.



Figura 7 - Separação dos dados de treino e teste

A primeira etapa do pipeline será a utilização do StringIndexer() que será responsável por indexar a lista de colunas categóricas antes de submetê-las ao OneHotEncoder(), que é executado na sequência e gera uma lista de colunas encodadas.

A terceira etapa do processo ocorre com o VectorAssembler() que recebe as colunas categóricas encodadas e as une com as colunas numéricas, gerando como saída uma coluna de features que serão usadas pelo modelo de aprendizado.

A etapa seguinte do pipeline é o modelo de RandomForestClassifier. Nesta etapa há a instanciação do modelo e MulticlassClassificationEvaluator que será a estratégia utilizada para análise do sucesso do modelo. Todavia, nesta etapa não são passados hiperparâmetros ao modelo. Isto ocorrerá na hiperotimização que será feita através do MLFLOW, usando uma função objetiva de otimização de resultado.

```
# Define pipeline e métrica de avaliação
# Esta função gera uma lambda que capta o nome dos campos onde o tipo do dado for string
categoricalCols = [field for (field,dataType) in trainDF.dtypes if ((dataType == "string"))]
# Gera um array com o nome das colunas com sufixo Index
indexOutputCols = [x + "Index" for x in categoricalCols]
# Instancia o stringIndexer e caso hajam valores inválidos, pulará
stringIndexer = StringIndexer(inputCols=categoricalCols, outputCols=indexOutputCols, handleInvalid="skip")
# Gera um array com o nome das colunas com sufixo OHE
oheOutputCols = [x + "OHE" for x in categoricalCols]
# Instância o OHE
oheEncoder = OneHotEncoder(inputCols=indexOutputCols, outputCols=oheOutputCols)
# Pegará as colunas numéricas que não são a classe para dps combinarmos os inputs do assembler
numericCols = [field for (field, dataType) in trainDF.dtypes if ((dataType != "string") & (field != "Attrition"))]
# Unifica colunas categóricas e numéricas
assemblerInputs = oheOutputCols + numericCols
# Gera coluna de features para o algoritmo
vecAssembler = VectorAssembler(inputCols=assemblerInputs, outputCol="features")
# Instancia o modelo informando a classe
rf = RandomForestClassifier(labelCol="Attrition", seed=42)
stages = [stringIndexer, oheEncoder, vecAssembler, rf]
pipeline = Pipeline(stages=stages)
evaluator = \texttt{MulticlassClassificationEvaluator(labelCol="Attrition", predictionCol="prediction", metricName="accuracy")}
```

Figura 8 - Definição do Pipeline

5. Criação de Modelos de Machine Learning

Uma vez definido o pipeline, a próxima etapa consiste em definir a objective function, que será a função utilizada dentro do MLFLOW na busca dos melhores hiperparâmetros do modelo. Nesta etapa ocorrem os seguintes passos:

Definem-se os parâmetros a serem otimizados no modelo;

- Instancia-se o grid com a classe ParamGridBuilder() que será usada na otimização do modelo;
- Instancia-se o CrossValidator() que usará como estimador (ou seja, dataset de entrada) o resultado do pipeline gerado nos passos anteriores, com o grid de parâmetros a serem otimizados, a quantidade desejada de folds e objeto evaluator que será usado no treinamento.
- Geração do modelo após treinamento usando dataset de treino;
- Registro da acurácia. Perceba que a acurácia é negativada, pois será usado algoritmo fmin() para a otimização e este algoritmo busca otimizar o menor valor de perda encontrado. Ou seja, negativando a acurácia, será buscado o menor valor encontrado que por sua vez corresponderá a melhor acurácia para o modelo.

```
def objective_function(params):
1
2
3
      # Instancia como array os parâmetros a serem tunados e coloca em variável de mesmo nome
     max_depth = params["max_depth"]
     num trees = params["num trees"]
5
     max_bins = params["max_bins"]
      # Instancia o grid com os parâmetros e valores
8
    grid = (ParamGridBuilder()
      .addGrid(rf.maxDepth, [max_depth])
10
1.1
       .addGrid(rf.numTrees, [num_trees])
12
       .addGrid(rf.maxBins, [max_bins])
        .build())
13
15
     # Instancia o Cross Validator COM O PIPELINE, mas o cross validator está recebendo o grid instanciado acima
     # E o grid instanciado acima está recebendo uma lista de valores
16
17
     cv = CrossValidator(estimator=pipeline, estimatorParamMaps=grid, parallelism=4, evaluator=evaluator, numFolds=3)
     cvModel = cv.fit(trainDF)
18
20
     accuracy = cvModel.avgMetrics[0]
21
22
     return {"loss": -accuracy, "status": STATUS_OK}
23
```

Figura 9 - Geração Objective Function

Após a geração da Objective Function, define-se o espaço de buscas que o algoritmo de otimização usará para cada um dos hiperparâmetros. Buscando evitar overfitting de dados, foi considerada poda (max_depth) de até 10 níveis. A quantidade de árvores no modelo foi testada de 10 a 300 árvores. Para o parâmetro max_bins que corresponde a quantidade de subdivisões e compartimentos do modelo, segundo a documentação oficial da biblioteca:

```
"(...) Número máximo de compartimentos para discretizar recursos contínuos.

Deve ser >= 2 e >= número de categorias para qualquer recurso categórico. (...)".

Traduzido de

https://spark.apache.org/docs/3.1.3/api/python/reference/api/pyspark.ml.classifi

ca-

tion.RandomForestClassifier.html#pyspark.ml.classification.RandomForestClassifie

r.maxBins. Acessado em: 24 de set. de 2022.
```

Diante deste fato, gerou-se mecanismo capaz de identificar a quantidade de registros distintos dentre os atributos categóricos. Para testes e otimização do parâmetro, utilizou-se espaço de busca de hiperparâmetros entre este limiar mínimo e até 3 vezes a quantidade de valores categóricos.

```
valoresDistintosCategoricos = 0

for col in categoricalCols:
   valoresDistintosCategoricos += df[col].value_counts().shape[0]

valoresDistintosCategoricos
```

Out[72]: 26

Figura 10 - Valores distintos de features categóricas

```
# Gera-se números aleatórios baseado em um intervalo para cada parâmetro.
search_space = {
   "max_depth": hp.randint("max_depth", 2, 10),
   "num_trees": hp.randint("num_trees", 10, 300),
   "max_bins": hp.randint("max_bins", valoresDistintosCategoricos, valoresDistintosCategoricos*3)
}
```

Figura 11 - Espaço de busca dos hiperparâmetros

A partir deste momento será instanciado o experimento MLFLOW. Uma instancia sem um nome especificado no ambiente Databricks criará por padrão um experimento com o nome do notebook que o executa.

Na instância, define a quantidade de tentativas e o objeto Trials() que serão usados pela função fmin() para encontrar o melhor hiperparâmetro do modelo. Por sua vez, a função fmin() recebe o espaço de busca definido anteriormente; o algoritmo de busca TPE para otimização dos parâmetros e o parâmetro rstate para permitir reprodutibilidade do código. Esta função será responsável por encontrar os melhores hiperparâmetros do modelo.

Na sequência são alimentadas variáveis com estes hiperparâmetros. Em seguida estes melhores parâmetros encontrados são definidos na instância do modelo de Random Forest e ocorre o treinamento do pipeline com os dados de treinamento, usando os melhores parâmetros encontrados.

Por fim, valida-se o modelo o aplicando aos dados que foram separados para teste e há verificação da acurácia. Ocorre então o registro no MLFLOW dos parâmetros, métricas e o modelo.

```
# Instancia Execução do MLFLOW
    with mlflow.start_run():
      num_evals = 50 # Indica o número de vezes que ele tentará sozinho achar o melhor hiperparâmetro nos intervalos especificados
      trials = Trials() # Instancia objetos Trials()
      best_hyperparam = fmin(fn=objective_function, # fmin com a função objetiva que criamos
                             space=search\_space, # no space passamos o space de amostragem de cada parâmetro
                             algo=tpe.suggest, # No algo passamo o algoritmo da estratégia de TPE para otimização dos parâmetros
                             max_evals=num_evals, # No max_eval a quantidade de avaliações que serão realizadas
                             trials=trials, # No trials o objeto Trials das tentativas
10
                             rstate=np.random.default rng(42)
11
12
13
      # Recebe a lista dos hiperparâmetros
      best_max_depth = best_hyperparam["max_depth"]
14
      best_num_trees = best_hyperparam["num_trees"]
15
      best_max_bins = best_hyperparam["max_bins"]
17
18
      # Encontrará o melhor hiperparâmetro e o setará para o rf
19
      rf.setMaxDepth(best_max_depth)
20
      rf.setNumTrees(best_num_trees)
21
      rf.setMaxBins(best_max_bins)
22
23
      # Treina o pipeline com todo o conjunto de dados de treinamento, já utilizando os melhores hiperparâmetros encontrados.
24
      pipelineModel = pipeline.fit(trainDF)
25
26
27
      # Testará os dados e fará evaluate
28
      predDF = pipelineModel.transform(testDF)
      acc = evaluator.evaluate(predDF)
      # Loga os parâmetros encontrados, métrica e modelo
      mlflow.log_param("max_depth", best_max_depth)
      mlflow.log_param("numTrees", best_num_trees)
      mlflow.log_param("max_bins", best_max_bins)
      mlflow.log_metric("accuracy", acc)
      {\tt mlflow.spark.log\_model(pipelineModel, "model")}
```

Figura 12 - Execução MLFLOW

A partir deste momento, o modelo já está foi registrado e é possível o importar em outros projetos, bem como acompanhar o tracking de seus experimentos. Por fim, é possível também salvar o modelo em um diretório e o importar para realização de predições.

Como uma das principais funcionalidades do MLFLOW é permitir a comparação de modelos, ajustaremos o espaço de pesquisa dos hiperparâmetros e executaremos novamente o modelo a fim de checar se foram encontrados novos hiperparâmetros melhores. Estes resultados poderão ser acompanhados na UI do MLFLOW. Perceba que foi obtida uma melhor acurácia.

```
# Gera-se números aleatórios baseado em um intervalo para cada parâmetro.
 search space = {
   "max_depth": hp.randint("max_depth", 2, 20),
   "num_trees": hp.randint("num_trees", 10, 1000),
   "max_bins": hp.randint("max_bins", valoresDistintosCategoricos, valoresDistintosCategoricos*5)
mand took 0.09 seconds -- by nicolasmarcos.ti@gmail.com at 25/09/2022 21:32:14 on default
 # Instancia Execução do MLFLOW
 with mlflow.start_run():
   num evals = 10 # Indica o número de vezes que ele tentará sozinho achar o melhor hiperparâmetro nos intervalos especificados
   trials = Trials() # Instancia objetos Trials()
   best_hyperparam = fmin(fn=objective_function, # fmin com a função objetiva que criamos
                           {\bf space\hbox{-}search\_space,}\ \hbox{\it\# no space passamos o space de amostragem de cada parâmetro}
                           algo=tpe.suggest, # No algo passamo o algoritmo da estratégia de TPE para otimização dos parâmetros
                           max_evals=num_evals, # No max_eval a quantidade de avaliações que serão realizadas
                           trials=trials, # No trials o objeto Trials das tentativas
                          rstate=np.random.default_rng(42)
   # Recebe a lista dos hiperparâmetros
   best_max_depth = best_hyperparam("max_depth")
best_num_trees = best_hyperparam("num_trees")
   best_max_bins = best_hyperparam["max_bins"]
   # Encontrará o melhor hiperparâmetro e o setará para o rf
   rf.setMaxDepth(best max depth)
   rf.setNumTrees(best_num_trees)
   rf.setMaxBins(best max bins)
   # Treina o pipeline com todo o conjunto de dados de treinamento, já utilizando os melhores hiperparâmetros encontrados.
   pipelineModel = pipeline.fit(trainDF)
   # Testará os dados e fará evaluate
   predDF = pipelineModel.transform(testDF)
   acc = evaluator.evaluate(predDF)
   # Loga os parâmetros encontrados, métrica e modelo
   mlflow.log_param("max_depth", best_max_depth)
   mlflow.log_param("numTrees", best_num_trees)
   mlflow.log_param("max_bins", best_max_bins)
   mlflow.log_metric("accuracy", acc)
   mlflow.spark.log_model(pipelineModel, "model")
```

Figura 13 - Segunda tentativa de hiperotimização

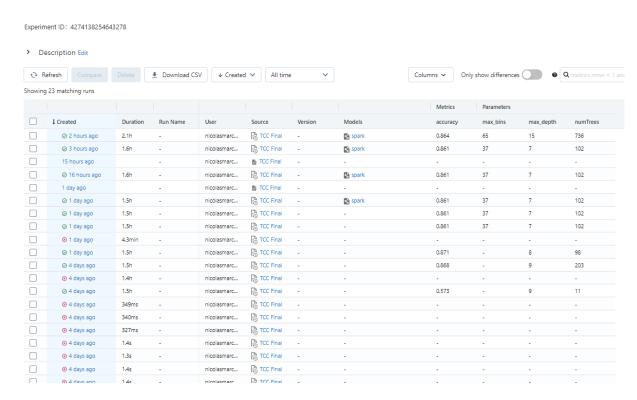


Figura 14 - Lista de Execução Após 2º tentativa de hiperotimização

6. Apresentação dos Resultados

Uma vez dispondo dos modelos registrados no MLFLOW, é possível acompanharmos todo o tracking dos experimentos, suas versões, seus parâmetros e demais.

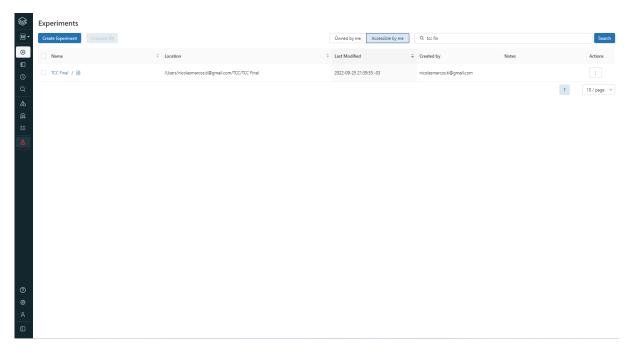


Figura 15 - Mlflow UI no Databricks

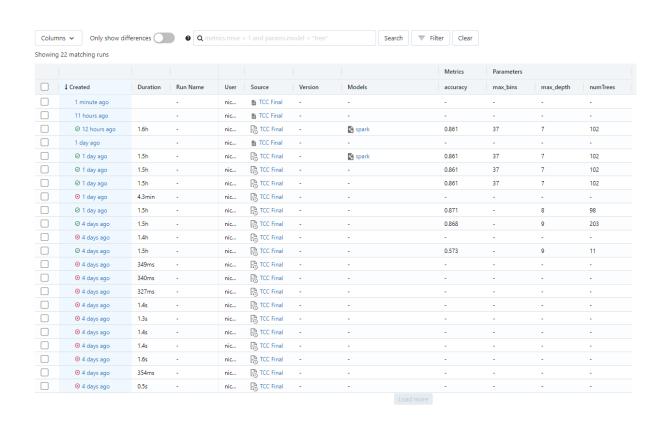


Figura 16 - Lista de Experimentos MLFLOW

Run 481cda3c7ba24da3b7f23b50f5c755f3 Provide Feedback Run ID: 481cda3c7ba24da3b7f23b50f5c755f3 Source: 🗟 TCC Final Date: 2022-09-25 09:01:52 Status: FINISHED User: nicolasmarcos.ti@gmail.com Duration: 1.6h Lifecycle Stage: active > Description Edit → Parameters (3) max_bins 37 max_depth 102 numTrees Metrics (1) Name 0.861 > Tags Artifacts

Figura 17 - Métricas e Parâmetros de Run Específica



Figura 18 - Artefatos do Modelo em Run Específica

Através da API provida pelo MlflowClient() é possível interagir com o MLFLOW. Os comandos abaixo permitem listar os experimentos (os mesmos acima listados via UI) e obtermos informações sobre estes.

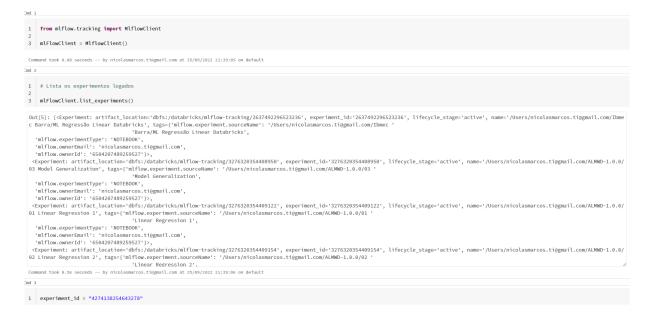


Figura 19 - Interação MlflowClient

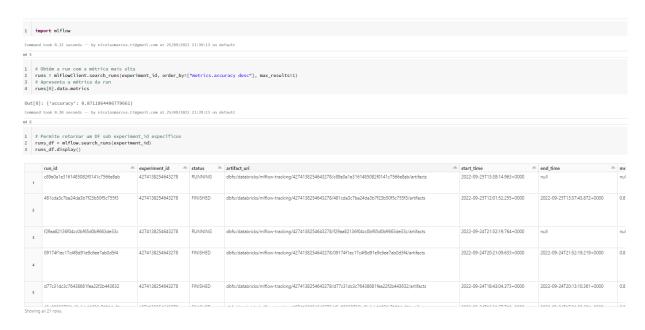


Figura 20 - Interação API Mlflow

7. Links

Repositório do projeto: https://github.com/nicolasmarcos/TCC_PucMinas

Fonte original dos dados:

https://www.kaggle.com/datasets/pavansubhasht/ibm-hr-analytics-attrition-dataset?resource=download

REFERÊNCIAS

GÉRON, Aurélien. Hands-on Machine Learning with Scikit-learning, Keras & Tensorflow. Estados Unidos da América, O'REILLY, 2019.

VANSCHOREN, JOAQUIN; BLOCKEEL, HENDRIK. **A Community-Based Platform for Machine Learning Experimentation.** Leuven, Leuven, Bélgica: Computer Science Dept., K.U, 2009.

Apache Spark, Acessado em: 24 de set. de 2022. Link: https://spark.apache.org/docs/3.1.3/api/python/reference/api/pyspark.ml.classification. RandomForestClassifier.html#pyspark.ml.classification.RandomForestClassifier.max Bins