

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

SCUOLA DI SCIENZE
Corso di Laurea in Informatica

Title
Automazione delle pipeline di Machine
Learning

Relatore:
Chiar.mo Prof.
Maurizio Gabbrielli

Presentata da:
Luca Genova

Correlatori:
Dott. Stefano Pio Zingaro
Dott. Saverio Giallorenzo

Sessione II
Anno Accademico 2020/2021

Indice

1	Introduzione	3
2	AI in Radiology	5
2.1	Overview	5
2.2	Workflow	6
2.2.1	Raccolta dei dati	6
2.2.2	Cura dei dati	7
2.2.3	Creazione del modello	10
2.2.4	Formazione del modello	12
2.2.5	Analisi e metriche	12
2.2.6	Distribuzione	13
2.3	Analisi e conclusioni	14
2.3.1	I dati	14
2.3.2	Il modello	15
2.3.3	Conclusioni	18
3	Demand forecasting	19
3.1	Overview	19
3.2	Workflow	20
3.2.1	Raccolta dati	20
3.2.2	Comprensione e preelaborazione dei dati	21
3.2.3	Costruzione del modello	22
3.2.4	Formazione del modello	28
3.2.5	Validazione del modelllo	28
3.2.6	Miglioramento	29
3.2.7	Distribuzione	29
3.3	Analisi e conclusioni	29
3.3.1	I dati	29
3.3.2	Il modello	31
3.3.3	Conclusioni	33

4	Frameworks	35
4.1	MetaFlow	35
4.1.1	Vantaggi	37
4.2	ZenML	37
4.2.1	Problemi risolti da ZenML	38
4.2.2	Vantaggi	39
4.3	MLRun	39
4.3.1	Vantaggi	40
5	Conclusioni	43
	Appendices	45
.1	Recurrent neural network	46
.2	Convolutional neural network	46
.3	Long-Short Term Memory	46
.4	Gated Recurrent Units (GRU)	47
.5	Natural language processing (NLP)	47
.6	Neuro-linguistic programming (PNL)	47
.7	Power Trasformation (Box-Cox)	47
.8	Docker	48
.9	Kubernetes	48
.10	Exponential Smoothing di Holt Winter	48
.11	ARIMA/SARIMA	48
.12	Root-mean-square deviation (RMSD)	49
.13	Mean absolute percentage error (MAPE)	49
.14	DICOM	50
.15	PACS	50

Capitolo 1

Introduzione

Il Machine Learning è un sottoinsieme dell'intelligenza artificiale (AI) che si occupa di creare sistemi che apprendono o migliorano le performance in base ai dati che utilizzano. Intelligenza artificiale è un termine generico e si riferisce a sistemi o macchine che imitano l'intelligenza umana.

Definire in maniera semplice le caratteristiche e le applicazioni del machine learning non è sempre possibile, visto che questo ramo è molto vasto e prevede differenti modalità, tecniche e strumenti per essere realizzato. Inoltre, le differenti tecniche di apprendimento e sviluppo degli algoritmi danno vita ad altrettante possibilità di utilizzo che allargano il campo di applicazione dell'apprendimento automatico rendendone difficile una definizione specifica. Si può tuttavia dire che quando si parla di machine learning si parla di differenti meccanismi che permettono a una macchina intelligente di migliorare le proprie capacità e prestazioni nel tempo. La macchina, quindi, sarà in grado di imparare a svolgere determinati compiti migliorando, tramite l'esperienza, le proprie capacità, le proprie risposte e funzioni.

Alla base dell'apprendimento automatico ci sono una serie di differenti algoritmi che, partendo da nozioni primitive, sapranno prendere una specifica decisione piuttosto che un'altra o effettuare azioni apprese nel tempo.

L'obiettivo di questa tesi è cercare di automatizzare delle pipeline di machine learning al fine di trovare qualcosa che possa essere integrabile con una piattaforma che gestisce risorse/progetti di Machine Learning, come AI4EU.

Non è stato possibile eseguire un lavoro molto esteso e per questo mi sono ricondotto a particolari casi di studio. Infatti è stata applicato un approccio bottom-up, cercando in letteratura vari approcci a due casi studio specifici al fine di tirare fuori i relativi workflow per eseguire l'analisi e cercare una soluzione che comprenda tutte quante le diverse proprietà e i diversi attributi dei casi specifici.

L'analisi dei casi di studio è stata eseguita per arrivare alla generalizzazione, e per fare ciò sono andato alla ricerca di quali potessero essere le invarianti tra i diversi approcci trovati in letteratura. Una volta trovate le invarianti, si è cercato di definire i/criteri/o

per cui un framework ci permetta di implemetare il workflow che è stato trovato, ovvero cercare i framework più fruibili da integrare in una piattaforma.

I due casi studio in questione sono:

- AI in radiology
- Demand forecasting

È stato eseguito tutto questo lavoro poiché è mia convinzione che creare delle pipeline di AI e/o ML, dopo tutto ciò, sia più automatico (qualche forma di automatizzazione per queste pipeline). Senza un adeguata analisi dei casi di studio, avere tantissime risorse di AI e/o ML non servirebbe a molto, dato che tutte quelle risorse sarebbero inutilizzabili se non si producessero delle automazioni per permetterne l'uso. Invece se si vogliono trovare delle astrazioni che generalizzano rispetto al caso di studio è necessario studiare la capacità di automatizzare quei processi.

Senza la pretesa di essere completi riportiamo il risultato dell'analisi che è stata fatta.

Capitolo 2

AI in Radiology

Interpretare immagini mediche e riassumerle sotto forma di referti radiologici è un compito impegnativo, noioso e complesso. Un radiologo fornisce una descrizione completa di un'immagine medica sotto forma di referto radiologico descrivendo reperti normali o anormali e fornendo un riepilogo per il processo decisionale. La ricerca mostra che la pratica della radiologia è soggetta a errori a causa del numero limitato di esperti, dell'aumento del volume dei pazienti e della natura soggettiva della percezione umana. Per ridurre il numero di errori diagnostici e per alleviare il compito dei radiologi, è necessario un sistema di generazione di referti computerizzato in grado di generare automaticamente un referto radiologico per una determinata immagine medica.

2.1 Overview

L'imaging medico è la fonte di dati più grande nel settore sanitario. I radiologi interpretano abitualmente le immagini mediche e raccontano i loro risultati sotto forma di referti radiologici. A causa della natura soggettiva della percezione umana, i radiologi possono non rilevare sottili scoperte che portano a errori diagnostici. Per alleviare il ruolo dei radiologi e ridurre l'onere della stesura dei referti, è necessario un sistema di generazione di referti di radiologia assistita da computer in grado di redigere un referto di radiologia data un'immagine medica in modo che un radiologo possa rivederlo, modificarlo se necessario eventuali modifiche. L'apprendimento automatico fornisce un modo efficace per automatizzare l'analisi e la diagnosi per le immagini mediche. Può potenzialmente ridurre l'onere per i radiologi nella pratica della radiologia.

Le applicazioni dell'apprendimento automatico in radiologia includono la segmentazione di immagini mediche (ad es. cervello, colonna vertebrale, polmone, fegato, rene, colon), registrazione di immagini mediche (ad es. registrazione di immagini di organi da diverse modalità o serie temporali), sistemi di rilevamento e diagnosi computerizzati per immagini TC o RM (ad es. mammografia, colongrafia TC e CAD nodulo polmonare TC) e

analisi del testo dei referti di radiologia utilizzando l'elaborazione del linguaggio naturale (NLP) e la comprensione del linguaggio naturale (NLU).

Deep Learning: Come si può vedere le applicazioni del machine learning in radiologia sono molte. Ma c'è una cosa in comune con tutte le applicazioni: il fulcro è l'imaging diagnostico per arrivare ad una diagnosi.

Per creare un modello di classificazione che mi permette di partire da dati in input (immagini DICOM) fino ad avere un referto medico attendibile bisogna lavorare molto sui dati e nel contesto dell'assistenza sanitaria, il deep learning mostra grandi promesse per l'analisi di dati strutturati (ad es. database, tabelle) e non strutturati (ad es. immagini, testo).

2.2 Workflow

Mi sono concentrato principalmente sul processo di assistenza alla creazione di referti medici, analizzando un framework in particolare [13], e di seguito mostro il workflow che sono riuscito a tirarne fuori.

2.2.1 Raccolta dei dati

Questo passaggio, insieme al successivo (cura dei dati), vengono eseguiti per standardizzare e migliorare qualità del set di dati per le successive deep neural network training.

La *raccolta* dati si riferisce al processo di raccolta di informazioni da una o più fonti per variabili predefinite per testare ipotesi di ricerca e valutare i risultati ed è un prerequisito per la formazione di modelli di deep learning. I dati possono essere dati clinici (biobanca), immagini e relativi metadati (*DICOM*^[14]) e/o annotazioni (referti di radiologia). Questi ultimi rappresentano annotazioni umane e caratteristiche generate dalla macchina.

Analizziamo il caso specifico in cui viene utilizzata una collezione di referti di radiografie del torace, dove ad ogni referto radiologico è associata una coppia di immagini aventi visualizzazione frontale e laterale.

Ogni referto di radiologia è composto da quattro sezioni, vale a dire, confronto, indicazione, risultati e impressione:

- La sezione confronto indica se l'attuale studio di imaging viene confrontato con uno qualsiasi dei precedenti studi di imaging del paziente.
- La sezione indicazione elenca le informazioni sul paziente come età, sesso e informazioni cliniche rilevanti, comprese eventuali malattie e sintomi esistenti.
- La sezione risultati indica se ciascuna area dell'immagine è normale, anormale o potenzialmente anormale.

- La sezione impressione riassume i risultati, l'anamnesi clinica del paziente e le indicazioni per lo studio ed è considerata la parte più indicativa e importante di un referto radiologico per il processo decisionale.

Il processo di raccolta e quello di cura dei dati sono i passaggi più dispendiosi in termini di tempo in un progetto di intelligenza artificiale, ma è fondamentale per qualsiasi addestramento del modello.

Uno dei grandi problemi in questo campo è proprio la reperibilità dei dati per l'addestramento. Il problema della disponibilità dei dati per motivi legali e quello della scarsità dei dati con annotazioni (etichette) di esperti possono creare delle barriere ai fini dell'addestramento.

Approvazione istituzionale

Se un progetto si basa sull'utilizzo di dati di imaging, l'approvazione da parte dei comitati di revisione istituzionali deve essere conforme alle normative regionali. I comitati di revisione istituzionali devono imporre il rispetto dell'autonomia del paziente (consenso libero, informato e continuo) o rinunciare alla necessità del consenso del paziente e trovare un equilibrio tra rischi (ad esempio, prevenzione di violazioni dei dati su larga scala e divulgazione involontaria) e benefici (es: migliorare la diagnosi e migliorare la selezione del trattamento).

Una soluzione all'approvazione costituzionale può essere il Transfer Learning, spiegato successivamente nella fase di cura dei dati.

2.2.2 Cura dei dati

La *cura* dei dati si riferisce al processo di esplorazione e pulizia dei dati ai fini di addestrare, convalidare e testare gli algoritmi.

Sebbene siano stati compiuti sforzi per sviluppare strumenti di cura automatica, questo passaggio richiede ancora la conoscenza e la supervisione umana per ottenere set di dati di alta qualità. Ad esempio, dopo la selezione dei casi ammissibili da una coorte basata su una biobanca, l'acquisizione dei dati richiederebbe la raccolta di tutte le immagini corrispondenti pertinenti dal sistema di comunicazione di immagini e archiviazione locale (*PACS*^[15]). Successivamente, la cura può richiedere la selezione delle sequenze appropriate, delle fasi vascolari e dei piani di imaging. Questo passaggio può anche richiedere l'esclusione di casi anomali a causa di artefatti di imaging.

Di seguito descriverò alcuni passaggi/regole applicati ai dati.

Anonimizzazione dei dati

Pratiche che garantiscono la riservatezza delle informazioni relative al paziente sono di fondamentale importanza per i progetti di deep learning perché le informazioni mediche sensibili possono essere reidentificate. Quindi, tre concetti devono essere tenuti a mente durante la pianificazione e l'esecuzione del progetto: identificazione, anonimizzazione e pseudonimizzazione. In questo caso il set di dati è completamente anonimizzato e non è possibile estrarre alcuna informazione specifica del paziente.

Esplorazione dei dati e controllo qualità

La fase di esplorazione dei dati consiste nel valutare le proprietà qualitative generali (ad es. tramite visualizzazione) o quantitative (ad es. tramite statistiche) del set di dati grezzi iniziale, al fine di mostrare caratteristiche specifiche, tendenze globali o valori anomali.

Etichettatura dei dati per l'addestramento

I radiologi in genere eseguono misurazioni, disegnano regioni di interesse e commentano le immagini con annotazioni. Il markup si riferisce a "simboli grafici posizionati su un'immagine per rappresentare un'annotazione", mentre l'annotazione si riferisce a informazioni esplicative o descrittive relative al significato di un'immagine generata da un osservatore umano. Dopo la selezione delle immagini appropriate, l'etichettatura dei dati può richiedere la delineazione delle lesioni, tramite riquadri di delimitazione o maschere di segmentazione accompagnate da annotazioni sul tipo di lesioni e sulla loro posizione.

Esclusione dei dati

Nei referti di radiologia, due sono le sezioni più importanti:

- Risultati → evidenziano tutte le principali anomalie presenti nell'immagine
- Impressione → riassume i risultati evidenziando se lo studio è positivo o negativo

Nel nostro caso, quindi, ci concentriamo solo sui risultati e sulle sezioni delle impressioni. Nel set di dati, potrebbero esserci anche referti radiologici in cui mancano reperti e sezioni di impressione, quindi si escludono tutti i referti di radiologia e le relative immagini mediche in cui mancano sia i risultati che le sezioni di impressione. Questo riduce il set di dati.

Poiché la sezione di impressione è la più indicativa se una scansione è positiva o negativa e non è presente un set di dati etichettato, viene applicata l'elaborazione del testo basata su regole per classificare un referto radiologico in Normale (Negativo) o Anormale (Positivo). In questo caso, viene combinato il testo dei risultati e le sezioni delle impressioni per formulare la didascalia finale per un'immagine medica.

Strategie di campionamento dei set di dati

Il campionamento dei dati si riferisce alla selezione di sottoinsiemi di dati a scopo di formazione. La capacità di un algoritmo di eseguire un compito specifico su dati non visti è chiamata generalizzazione. Per ottimizzare e misurare queste prestazioni, l'intero set di dati disponibile deve essere suddiviso in diversi set. I campioni in tutti i set dovrebbero condividere lo stesso processo di generazione dei dati, pur essendo indipendenti l'uno dall'altro e distribuiti in modo identico. La strategia di campionamento più frequente nel deep learning è dividere il set di dati in set di addestramento, convalida e test. Il rapporto ottimale di campioni distribuiti in ciascuno set varia per ogni problema. Ma come regola empirica, viene comunemente utilizzata una suddivisione dell'80% di formazione, del 10% di convalida e del 10% di divisione del test. Questa divisione consente a più corsi di formazione che utilizzano lo stesso set di formazione per cercare gli iperparametri ottimali per massimizzare le prestazioni sul set di convalida. Quando si ottengono le migliori prestazioni sul set di convalida, l'algoritmo viene infine utilizzato una volta sul set di test per misurare e confermare la prestazione finale.

Per set di dati più piccoli, la strategia di campionamento più comunemente utilizzata è la k-fold cross-validation. Il set di dati è diviso equamente in k pieghe. Per ogni addestramento, l'algoritmo viene addestrato su quasi tutte le pieghe ma testato su una singola piega di controllo dei dati. L'allenamento viene ripetuto k volte utilizzando pieghe di controllo variabili. La prestazione finale è la media delle k prestazioni misurate. Gli algoritmi di deep learning generalmente introducono due limitazioni significative per utilizzare sistematicamente la convalida incrociata k-fold. In primo luogo, l'addestramento di algoritmi di deep learning su grandi set di dati di solito implica un carico computazionale intenso che impedisce in pratica un numero elevato di iterazioni di addestramento con risorse limitate. In secondo luogo, l'addestramento delle reti neurali profonde dipende da molti più iperparametri rispetto agli algoritmi di apprendimento automatico meno profondi.

Transfer learning

Il Transfer Learning (TL)[13] è un problema di ricerca nell'apprendimento automatico (ML) che si concentra sulla memorizzazione delle conoscenze acquisite durante la risoluzione di un problema e l'applicazione a un problema diverso ma correlato. Poiché, come detto precedentemente, è difficile raccogliere dati medici annotati su larga scala a causa dell'interoperabilità, della privacy e di questioni legali, il TL svolge un ruolo fondamentale nel campo dell'imaging medico, dove è difficile accedere a set di dati di immagini etichettati. Nel TL una rete neurale viene inizializzata dai pesi del modello che è già stato addestrato su un set di dati su larga scala.

Per consentire il trasferimento di conoscenza per l'estrazione di incorporamenti di immagini, si inizializza la $CNN^{[2]}$ (Convolutional neural network), che vedremo successivamente, con pesi pre-addestrati del modello che è stato addestrato su un set di dati di classificazione delle immagini su larga scala come ImageNet. Inoltre, dal lato del testo, vengono usati i word embedding Glove [11] con un vettore di incorporamento di 300 dimensioni per ogni parola.

Poiché la natura del testo medico è diversa dal testo generale, è stata anche applicata la conoscenza del dominio inizializzando $LSTM^{[3]}$ (Long-Short Term Memory) con RadGlove (Radiology Glove)[17].

2.2.3 Creazione del modello

Il processo di assistenza alla creazione di referti medici può essere suddiviso in due parti:

- Codifica dell'immagine
- Decodifica in referto radiologico

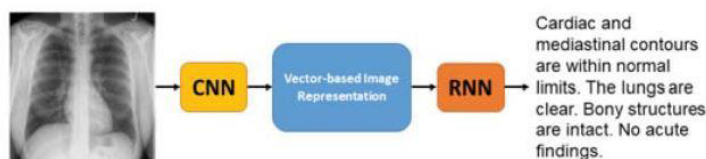


Figura 2.1: Schema a blocchi di un framework encoder-decoder

Il codificatore ha la forma di una rete neurale convoluzionale ($CNN^{[2]}$) che codifica le immagini DICOM, mentre il decodificatore è una rete neurale ricorrente a più stadi ($RNN^{[1]}$) che traduce le caratteristiche dell'immagine medica in un referto radiologico. In questo caso andiamo quindi a creare un framework codificatore-decodificatore, le caratteristiche dell'immagine globale vengono prima estratte utilizzando la CNN e quindi inserite in un $LSTM^{[3]}$ (Long short-term memory) per generare una sequenza di parole. Quando si applica la struttura del codificatore-decodificatore alla generazione di referti di radiologia, l'attività può essere considerata come la traduzione di immagini mediche in referti di radiologia.

La figura seguente mostra il diagramma del nostro approccio alla generazione di report da immagini mediche. Per generare referti radiologici da immagini mediche, ci viene fornita un'immagine di input I e il modello dovrebbe generare una sequenza di parole $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$, dove y denota la descrizione sotto forma di referto radiologico e $y_1 \dots y_N$ denotano le parole nella relazione.

Dato un set di allenamento $D = (I, y)$ che consiste in (I, y) coppie, dove I rappresenta una data immagine medica e y rappresenta un referto radiologico accompagnato per l'immagine sotto di $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$, addestriamo il modello rispetto ai suoi parametri θ al fine di massimizzare un modello probabilistico $p_\theta(y_1, y_2, \dots, y_N | I)$

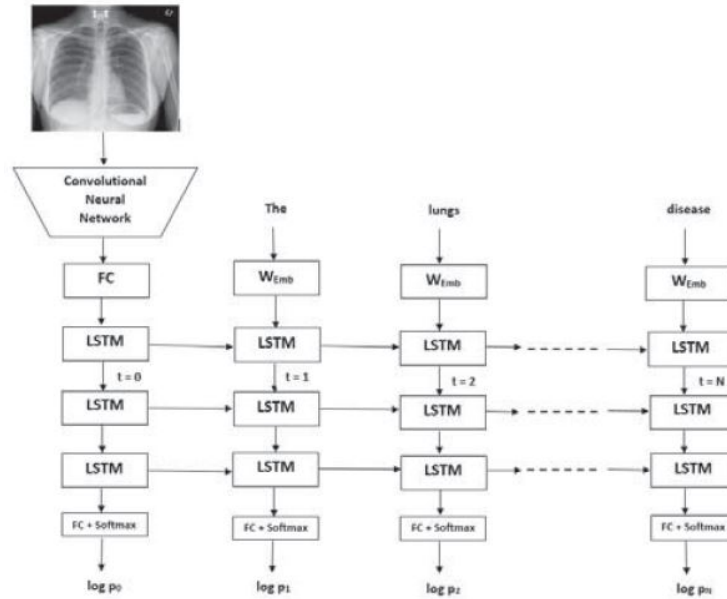


Figura 2.2: Un framework Encoder-Decoder per la generazione di referti radiologici da immagini edical. $t = 0, \dots, t = N$ rappresenta le iterazioni della ricorrenza LSTM.

Encoder

Le reti neurali convoluzionali (CNN) sono comunemente utilizzate per le rappresentazioni di immagini in quanto hanno la capacità di catturare caratteristiche a vari livelli di astrazione. Le CNN hanno mostrato prestazioni all'avanguardia nella classificazione delle immagini e nel riconoscimento degli oggetti. I livelli in una CNN includono livelli convoluzionali, livelli di pooling e livelli completamente connessi. In questo studio, viene utilizzato il modello Inception-v3 di Google come codificatore perché ha una struttura significativamente più profonda e, grazie ai blocchi di Inception, apprende una rappresentazione semanticamente ricca delle immagini

Decoder

Le reti neurali ricorrenti (RNN) sono reti neurali specializzate che eccellono nell'apprendimento e nell'elaborazione di dati sequenziali come testo e parlato. Gli RNN sono

generalmente addestrati dalla retropropagazione nel tempo, il che può portare a problemi di gradienti evanescenti ed esplosivi. Due degli RNN più popolari e importanti che superano questi problemi sono Long-Short Term Memory (LSTM) e Gated Recurrent Unit (GRU).

2.2.4 Formazione del modello

Il framework, quindi, è costituito da un codificatore che trasforma l'immagine grezza in una rappresentazione vettoriale e un decodificatore che trasforma il vettore dell'immagine codificata in una sequenza di parole.

In questo framework della rete neurale, una CNN viene solitamente impiegata come codificatore per estrarre una rappresentazione globale di immagini e il decodificatore è solitamente un RNN che modella il $p(S_t|I, S_0, S_1, \dots, S_{t-1})$, e genera le frasi corrispondenti.

L'obiettivo generale del framework del codificatore-decodificatore è trovare la sequenza di parole (frasi) più probabile che descriva una data immagine. Durante l'addestramento, vogliamo trovare il modello θ^* che soddisfa l'equazione 1:

$$\theta^* = \sum_{(I,S)} \log p(S|I; \theta) \quad (2.1)$$

dove θ sono i parametri del modello, I è l'immagine medica di input, e S è il rapporto di verità fondamentale corrispondente all'immagine. La probabilità della descrizione corretta S per una data immagine I può essere modellato come la probabilità congiunta sulle sue parole S_0, S_1, \dots, S_{t-1} come indicato nell'equazione 2:

$$\log p(S|I) = \sum_{t=0}^N \log p(S_t|I, S_0, S_1, \dots, S_{t-1}) \quad (2.2)$$

dove S_0, S_1, S_{t-1} denota le parole nell'immagine descrizione. S_0 denota uno speciale $< start >$ token e S_N denota uno speciale $< end >$ token.

2.2.5 Analisi e metriche

Quando si addestra un algoritmo per un progetto di ricerca per la pratica clinica, è fondamentale comprendere chiaramente le metriche utilizzate per valutare le prestazioni del compito. Per ogni attività di visione artificiale vengono definite metriche specifiche, che possono differire da un obiettivo clinico. Le metriche calcolano i punteggi di somiglianza della didascalia prevista.

Il compito di classificazione è strettamente correlato al comune compito interpretativo radiologico di fornire una diagnosi dalle immagini. Di conseguenza, per questa attività,

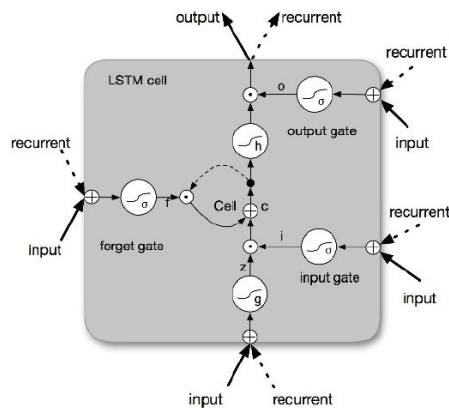


Figura 2.3: Schema schematico di una cella LSTM

le metriche di apprendimento automatico sono molto simili alle consuete metriche dei test diagnostici riportate in radiologia diagnostica.

2.2.6 Distribuzione

L'implementazione si riferisce qui all'esecuzione di un progetto di deep learning precedentemente stabilito. Nel contesto attuale, comprende la costruzione e la cura del set di dati, la scelta di un insieme di architetture di reti neurali, l'addestramento delle reti e la messa a punto degli iperparametri utilizzando metriche selezionate.

Deployment si riferisce all'implementazione di una soluzione sviluppata localmente su una scala più ampia, ad esempio a livello di istituto o all'interno di una rete sanitaria. Questo processo richiede una chiara definizione delle specifiche del modello, in termini di prestazioni o di ingegneria del software (ad esempio, configurazioni, versioni, test di unità o requisiti istituzionali specifici).

A seconda dell'evoluzione delle metriche delle prestazioni e della valutazione visiva nel tempo, un modello può essere riaddestrato utilizzando dati aggiuntivi per aggiornare dinamicamente le sue prestazioni. Inoltre, viene consigliato di memorizzare i pesi ottenuti dopo l'allenamento separatamente dall'architettura di rete ai normali checkpoint. Ciò consente aggiornamenti e versioni più semplici, purché l'architettura di rete rimanga identica.

Da un punto di vista pratico, l'integrazione dei modelli nelle procedure di routine può essere impegnativa in termini di portabilità, accessibilità dei dati e pre-elaborazione. È quindi necessario definire se la soluzione sviluppata è destinata ad essere integrata in un'infrastruttura esistente o utilizzata come applicazione standalone. Durante la prima fase di implementazione, è possibile adottare un approccio containerizzato come quello proposto da *Docker*^[.8] o *Kubernetes*^[.9] e applicazioni web-based (REST-API) per l'im-

plementazione successiva.

Per soddisfare al meglio queste sfide di integrazione, stanno rapidamente emergendo i mercati delle applicazioni di intelligenza artificiale che offrono un'ampia varietà di strumenti con un'interfaccia utente unificata per i radiologi e un'interfaccia di programmazione delle applicazioni (API) generica per gli sviluppatori. Questo livello commerciale tra i fornitori PACS e le applicazioni di intelligenza artificiale può potenzialmente consentire un'implementazione clinica, una convalida e un'usabilità più rapide.[10]

2.3 Analisi e conclusioni

In questa fase di analisi ho cercato di confrontare alcuni casi che ho trovato in letteratura, sono andato alla ricerca di quali potessero essere le invarianti e le versatilità tra loro in modo da centrare il nostro obiettivo.

2.3.1 I dati

La cosa principale che è comune a tutti è la struttura dati: set di dati formato sempre da immagine DICOM e/o annotazione.

Ovviamente alcuni input devono essere scartati perché non presentano le caratteristiche di cui abbiamo bisogno.

Per superare i problemi di privacy sulla violazione dei dati, una potenziale soluzione potrebbe essere quella di eseguire la formazione locale di più modelli e condividere i pesi, una strategia nota come apprendimento federato o distribuito.

La creazione di grandi set di dati medici di alta qualità è impegnativa e costosa, a causa delle risorse necessarie per la raccolta dei dati e del tempo necessario per l'annotazione. Per affrontare queste limitazioni, sono state proposte alcune strategie di formazione specifiche o architetture di modelli, come l'etichettatura debole o l'apprendimento a pochi colpi.

In generale, lo sviluppo di algoritmi di intelligenza artificiale generalizzabili nell'imaging medico richiede set di dati statisticamente alimentati nell'ordine di centinaia di migliaia o milioni, il che è problematico, data la scarsa disponibilità dei dati.

In alcuni modelli, proprio per questa limitazione, viene eseguito un aumento dei dati di addestramento.

Una soluzione parziale per questo problema può essere l'apprendimento semisupervisionato. Sono necessari set di dati completamente annotati per l'apprendimento supervisionato, mentre l'apprendimento semisupervisionato utilizza una combinazione di immagini annotate e non annotate per addestrare un algoritmo. L'apprendimento semisupervisionato può consentire un numero limitato di casi annotati; tuttavia, sono ancora

necessari grandi set di dati di immagini non annotate.

Un'altra potenziale soluzione futura per aumentare la dimensione del campione di dati potrebbe essere la generazione di dati sintetici attraverso reti generative avversarie. Le reti generative avversarie hanno il potenziale per sintetizzare un numero illimitato di immagini realistiche di alta qualità che possono essere aggiunte ai set di dati di addestramento per lo sviluppo di algoritmi di rilevamento e classificazione. Tuttavia, sono disponibili prove limitate, specialmente quando sono presenti anomalie nelle immagini. L'aumento dell'immagine sarebbe preferibile per aumentare il livello di robustezza del modello. Ovviamente, l'aumento delle immagini si traduce in un aumento del numero di set di dati per la formazione e potrebbe esserci il rischio del problema di sovradattamento.

Anche se viene esaminato lo stesso paziente, le immagini non sarebbero identiche tra gli esami a causa di lievi differenze di posizionamento. Pertanto, l'uso di immagini ruotate o spostate parallelamente renderebbe il modello robusto per lievi differenze nelle posizioni del paziente. A volte vengono utilizzate anche immagini speculari. L'uso di immagini con rumore aggiunto sarebbe utile per rendere il modello robusto per diversi gradi di rumore dell'immagine.

Come già detto precedentemente, un modello potrebbe differire da un altro anche per le strategie di campionamento del set di dati:

- Addestramento, convalida e test
- Convalida incrociata k-fold

Anche se il primo (Figura 2.4) è quello più utilizzato, poiché il processo di formazione richiede un'enorme quantità di calcoli.

2.3.2 Il modello

Per estrarre le caratteristiche dall'immagine viene sempre utilizzata un CNN per le sue elevate prestazioni nel riconoscimento delle immagini. La capacità delle CNN di apprendere complesse relazioni spaziali e imparare modelli basati su pixel sottili e intricati li rendono perfetti strumento per apprendere dalle immagini radiologiche.

Per quanto riguarda l'estrazione del testo, invece, le tecniche di elaborazione del linguaggio naturale (*NLP*^[5]) possono essere una chiave per analizzare con successo i referti radiologici per estrarre risultati e raccomandazioni clinicamente importanti. La programmazione neuro-linguistica (*PNL*^[6]) ha già mostrato il potenziale per automatizzare il compito di classificare i report di imaging in un modo che potrebbe informare le decisioni relative all'utilizzo e all'adeguatezza dell'imaging medico [2].

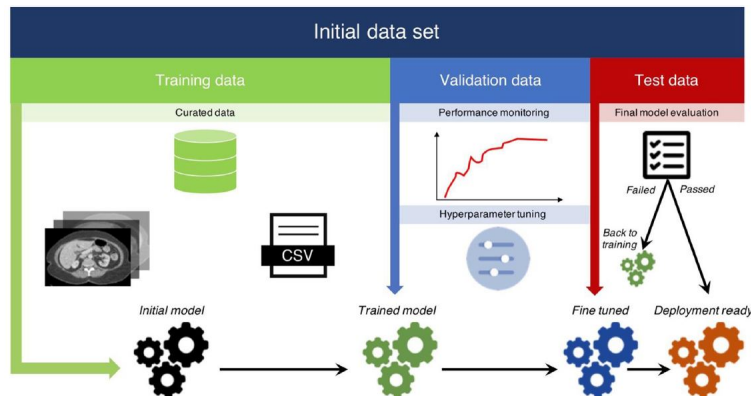


Figura 2.4: Divisione del set di dati in set di dati di addestramento, convalida e test. Si consiglia di eseguire la suddivisione all'inizio del flusso di lavoro, mantenendo i dati di test nascosti al modello fino alla valutazione finale delle prestazioni

Una classe di architetture di reti neurali, le reti neurali ricorrenti (RNN), ha recentemente attirato molta attenzione da parte dei ricercatori per la modellazione di sequenze e ha dimostrato di funzionare bene nella risoluzione di vari compiti di PNL grazie alla loro capacità di gestire input di lunghezza variabile e uscita.

Sebbene RNN sia teoricamente un modello potente per codificare informazioni sequenziali, in pratica spesso soffre dei problemi di sfumatura/esplosione del gradiente mentre apprende le dipendenze a lungo raggio. Le reti LSTM e *GRU*^[4] sono note per essere rimedi efficaci a questi problemi.

Le estensioni più popolari di RNN sono, appunto, Long Short-Term Memory (LSTM) e la Gated Recurrent Unit (GRU). La memoria a lungo termine utilizza blocchi di memoria per salvare lo stato temporale della rete e porte per monitorare il flusso di informazioni. D'altra parte, GRU è una forma più leggera di RNN rispetto a LSTM in termini di topologia, spese di calcolo e complessità. Al momento, i ricercatori devono scegliere tra il modello più veloce offerto da GRU che necessita di meno parametri o il modello più performante fornito da LSTM che contiene dati sufficienti e potenza di calcolo.

Tipi di apprendimento

La Figura 2.5 illustra i tipi di apprendimento: apprendimento supervisionato, semi-supervisionato e non supervisionato.

Per l'apprendimento supervisionato, deve essere disponibile uno standard di riferimento per tutti i casi.

Per l'apprendimento semi-supervisionato, è disponibile uno standard di riferimento so-

lo per un sottoinsieme di materie. L'apprendimento semi-supervisionato che si basa su una combinazione di dati etichettati e non etichettati generalmente ottiene risultati migliori rispetto all'apprendimento supervisionato che si basa solo sul sottoinsieme di dati etichettati. Questo processo di apprendimento combina tecniche non supervisionate e supervisionate.

Per l'apprendimento non supervisionato, non è disponibile uno standard di riferimento. In questo contesto, gli algoritmi non supervisionati hanno lo scopo di stabilire una rappresentazione efficiente del set di dati iniziale (ad esempio, clustering attraverso proprietà statistiche, densità o distanze del set di dati). Tale nuova rappresentazione può costituire un primo passo prima della formazione del modello supervisionato, consentendo prestazioni migliori.

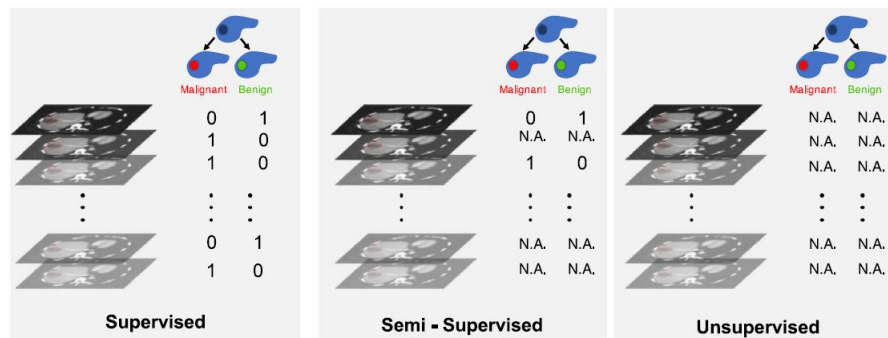


Figura 2.5: Tipi di apprendimento. Con l'apprendimento supervisionato, il numero di input (immagini TC in questo esempio) è uguale al numero di obiettivi (stato di malignità di una lesione qui). Con semi-supervisionato, il numero di input è maggiore del numero di obiettivi (il set di dati include campioni non etichettati). Con l'apprendimento non supervisionato, nessuno degli input viene etichettato (ad esempio, clustering, apprendimento multiplo, macchine di Boltzmann limitate). N.A. indica informazioni non disponibili

Inoltre è possibile trovare alcuni modelli (ex: nel framework r.AID.ologist [1]) concepiti come modello di ragionamento basato sui casi (Case-Based Reasoning - CBR), alimentato da diversi modelli di deep learning che sono stati inclusi per migliorarne le prestazioni, oltre a fornire funzionalità aggiuntive. Sebbene CBR sia integrato come un ciclo continuo, le sue sottoparti sono progettate per essere completamente modulari, quindi possono essere facilmente sostituite per adattarsi a nuovi dati.

Il ragionamento basato su casi (CBR) è il processo di risoluzione di nuovi problemi basandosi sulle soluzioni di problemi anteriori ed è stato formalizzato, per il ragionamento automatico, come un processo suddiviso in quattro fasi:

1. Recupero: Dato un problema, recuperare in memoria dei casi rilevanti (ricordi) per risolverlo. Un caso è composto da un problema, la soluzione e tipicamente alcune annotazioni su come si è arrivati alla soluzione.
2. Riutilizzo: Mappare la soluzione del caso precedente al problema attuale. Ciò può comportare alcune modifiche al caso precedente per adattarlo al caso attuale.
3. Revisione: Avendo mappato la soluzione precedente al caso attuale, bisogna provare la nuova soluzione (nel mondo reale o con una simulazione) e, se necessario rivedere la nuova soluzione.
4. Conservazione: Dopo che la soluzione è stata adattata al problema attuale, memorizzare l'esperienza come nuovo caso.

2.3.3 Conclusioni

L'apprendimento profondo mostra grandi promesse in radiologia, come dimostrato dalla diversità delle applicazioni e dalle prestazioni riportate in una varietà di compiti di visione artificiale [10].

Poiché le applicazioni mediche sono numerose e le soluzioni tecniche sono facilmente accessibili, la parte che richiede più tempo è la creazione di set di dati (raccolta e cura di dati strutturati o non strutturati di dati Montagnon et al. Insights into Imaging (2020) 11:22 Pagina 12 di 15), seguito dalla messa a punto del modello attraverso l'ottimizzazione degli iperparametri.

Su scala multi-istituzionale, la grande quantità di dati condivisi disponibili costituisce una grande opportunità per la formazione di modelli complessi. I limiti principali sono la disponibilità di annotazioni esperte, il raggruppamento di dati su più siti e la necessità di una cura dei dati per ottenere un set di dati di alta qualità.

Capitolo 3

Demand forecasting

La previsione della domanda è uno dei problemi principali delle catene di approvvigionamento. Mira ad ottimizzare le scorte, ridurre i costi e aumentare le vendite, i profitti e la fedeltà dei clienti. A tal fine, i dati storici possono essere analizzati per migliorare la previsione della domanda utilizzando vari metodi come tecniche di apprendimento automatico, analisi di serie temporali e modelli di deep learning.

In questo studio viene analizzato il workflow della previsione della domanda con i relativi modelli.

3.1 Overview

Poiché la concorrenza aumenta di giorno in giorno tra i rivenditori sul mercato, le aziende stanno concentrando più tecniche di analisi predittiva per ridurre i costi e aumentare la produttività e il profitto.

Esistono diversi tipi di previsione della domanda: [12]

- A breve termine (viene effettuato per un periodo più breve da 3 mesi a 12 mesi).
- Da medio a lungo termine (in genere viene effettuato da più di 12 mesi a 24 mesi in anticipo (36-48 mesi in alcune attività)).
- Livello aziendale interno (questo tipo di previsione si occupa delle operazioni interne dell'azienda come categoria di prodotto, divisione vendite, divisione finanziaria e gruppo di produzione. Ciò include previsioni di vendita annuali, stima di COGS, margine di profitto netto, flusso di cassa, ecc.)
- Passivo (Si effettua per imprese stabili con piani di crescita molto conservativi. Semplici estrapolazioni di dati storici vengono effettuate con ipotesi minime.)

- Attivo (viene eseguito per ridimensionare e diversificare le aziende con piani di crescita aggressivi in termini di attività di marketing, espansione del portafoglio di prodotti e considerazione delle attività della concorrenza e dell'ambiente economico esterno).

I rivenditori in diversi settori sono alla ricerca di soluzioni automatizzate di previsione della domanda e rifornimento che utilizzino big data e tecnologie di analisi predittiva.

I metodi di previsione tradizionali si basano su approcci di previsione basati su serie temporali. Questi approcci di previsione prevedono la domanda futura in base a dati di serie temporali storiche, ovvero una sequenza di punti dati misurati a intervalli successivi nel tempo. Questi metodi utilizzano un numero limitato di dati storici di serie temporali relativi alla domanda. Negli ultimi due decenni, I modelli di data mining e machine learning hanno attirato maggiore attenzione e sono stati applicati con successo alla previsione delle serie temporali.[cite]

I metodi di previsione dell'apprendimento automatico possono utilizzare una grande quantità di dati e funzionalità correlate alla domanda e prevedere la domanda e i modelli futuri utilizzando diversi algoritmi di apprendimento. Tra molti metodi di apprendimento automatico, i metodi di deep learning (DL) sono diventati molto popolari e sono stati recentemente applicati a molti campi come il riconoscimento di immagini e parole, l'elaborazione del linguaggio naturale e la traduzione automatica. I metodi DL hanno prodotto previsioni e risultati migliori, rispetto ai tradizionali algoritmi di apprendimento automatico in molte ricerche.

3.2 Workflow

In questo caso ho utilizzato un approccio differente dal precedente. Qui non ho analizzato un caso specifico, ma sono riuscito a catturare le possibili generalità del caso. Siccome sono stati trovati più dettagli nella parte di modello utilizzato, la parte dei modelli verrà descritta con maggiore dettaglio.

3.2.1 Raccolta dati

Questo primo processo include i seguenti passaggi: [9]

1. Raccogliere i dati disponibili
2. Esaminare brevemente la struttura dei dati, l'accuratezza e la coerenza
3. Eseguire alcuni test e progetti pilota sui dati
4. Guardare attraverso un riepilogo statistico

In questo caso studio il tipo di dato può essere molto differente in base all'obiettivo aziendale. Distinguiamo i dati in: [9]

- Strutturati
- Non strutturati

Nei dati strutturati possiamo trovare dati interni come i dati di vendita e-commerce, le transazioni di vendita, gli ordini d'acquisto, le proprie informazioni POS e dati esterni come tempo meteorologico, spedizioni/ricevute del negozio del cliente, le informazioni POS cliente e dati sindacati di terze parti.

Nei dati non strutturati possiamo trovare dati interni come siti web, recensioni, campagne di marketing, app, dispositivi in negozio e dati esterni come social media, stream di click, IoT, dispositivi di geolocalizzazione, video, linguaggio naturale.

La selezione delle giuste caratteristiche di input per la fase di formazione è fondamentale. In questo contesto, ogni caratteristica rappresenta una variabile di input che influenza l'esito della previsione.

3.2.2 Comprensione e preelaborazione dei dati

Indipendentemente da ciò che vorremmo prevedere, la qualità dei dati è una componente fondamentale di una previsione accurata della domanda.

Parametri di qualità dei dati

Quando si costruisce un modello di previsione, i dati vengono valutati in base ai seguenti parametri:

- Consistenza
- Precisione
- Validità
- Rilevanza
- Accessibilità
- Completezza
- Detalizzazione

Preelaborazione dei dati

In realtà, i dati raccolti dalle aziende spesso non sono ideali. Questi dati di solito devono essere puliti, analizzati per lacune e anomalie, verificati per pertinenza e ripristinati. La preelaborazione può essere applicata in tre forme: adeguamenti stagionali, log o trasformazioni di potenza e rimozione della tendenza [6].

- Dati originali: non viene applicata alcuna preelaborazione.
- Trasformazione dei dati: Ai dati originali viene applicato il log o la trasformazione di potenza *Box – Cox*^[7] per ottenere la stazionarietà nella varianza.
- Destagionalizzazione dei dati: i dati sono considerati stagionali se esiste un coefficiente di autocorrelazione significativo al lag 12. In tal caso i dati vengono destagionalizzati utilizzando il classico approccio di decomposizione moltiplicativa. L'addestramento dei pesi ML, o l'ottimizzazione dei metodi statistici, viene successivamente effettuato sui dati destagionalizzati. I pronostici ottenuti vengono poi ristagionali per determinare i pronostici finali. Ciò non avviene nel caso dei metodi *ETS*^[10] e *ARIMA*^[11] poiché includono modelli stagionali, selezionati utilizzando test relativi e criteri informativi che si occupano direttamente della stagionalità e della complessità del modello.
- Detrending dei dati: viene eseguito un test di Cox-Stuart [3] per stabilire se sia necessario utilizzare un trend lineare deterministico, o in alternativa un primo differenziamento, per eliminare il trend dai dati e ottenere la stazionarietà nella media.
- Combinazione dei tre precedenti: i vantaggi delle singole tecniche di pre-elaborazione vengono applicati simultaneamente per regolare i dati originali.

Una volta che i dati sono stati puliti, generati e verificati per pertinenza, vengono strutturati in un modulo completo.

La comprensione dei dati è il compito successivo una volta completate la preparazione e la strutturazione. Non è ancora un modello, ma è un modo eccellente per comprendere i dati tramite la visualizzazione. Prima di iniziare a creare modelli, bisogna dividere il set di dati per l'addestramento, la convalida e il test, come si può vedere nella Figura 3.1.

3.2.3 Costruzione del modello

Non esistono algoritmi di previsione "taglia unica". Spesso, le funzionalità di previsione della domanda consistono in diversi approcci di apprendimento automatico. La scelta dei modelli di apprendimento automatico dipende da diversi fattori, come l'obiettivo aziendale, il tipo di dati, la quantità e la qualità dei dati, il periodo di previsione, ecc.



Figura 3.1: Esempio di suddivisione dei dati

Mostreremo i diversi metodi che utilizzano il ML, in particolare sull'approccio per serie temporali, che è quello più utilizzato.

Nei modelli di previsione delle serie temporali, l'approccio classico consiste nel raccogliere dati storici, analizzare questi dati sottostanti e utilizzare il modello per prevedere il futuro. Questi algoritmi sono algoritmi di previsione comunemente usati nel dominio di previsione della domanda di serie temporali.

Perceptron multistrato (MLP)

Il perceptron multistrato (spesso chiamato semplicemente rete neurale) è forse l'architettura di rete più popolare oggi in uso sia per la classificazione che per la regressione (Bishop, 1995). Il MLP è dato come segue:

$$\hat{y} = v_0 + \sum_{j=1}^{NH} v_j g(w_j^T x'), \quad (3.1)$$

dove x' è il vettore di input x , aumentato di 1, cioè $x' = (1, x^T)^T$, w_j è il vettore dei pesi per j-esimo nodo nascosto, v_0, v_1, \dots, v_{NH} sono i pesi per l'output nodo e \hat{y} è l'output di rete. La funzione g rappresenta l'output del nodo nascosto, ed è data in termini di una funzione di schiacciamento, ad esempio la funzione logistica: $g(u) = 1/(1 + \exp(-u))$. Un modello correlato nella letteratura econometrica è il modello di autoregressione a transizione graduale che si basa anche sulla costruzione di funzioni lineari e transizioni di funzioni logistiche (Medeiros e Veiga, 2000; van Dijk et al., 2002). L'MLP è un modello fortemente parametrizzato e selezionando il numero di nodi nascosti NH possiamo controllare la complessità del modello. La svolta che ha dato credito alla capacità delle reti neurali è la proprietà di approssimazione universale (Cybenko, 1989; Funahashi, 1989; Hornik et al., 1989; Leshno et al., 1993). In determinate condizioni blande sulle

funzioni del nodo nascosto g , ogni data funzione continua su un insieme compatto può essere approssimata il più vicino possibile a quella data arbitrariamente utilizzando una rete con un numero finito di nodi nascosti. Sebbene questo sia un risultato rassicurante, è fondamentale evitare un'eccessiva parametrizzazione, specialmente nelle applicazioni di previsione che in genere hanno una quantità limitata di dati altamente rumorosi. La selezione del modello (attraverso la selezione del numero di nodi nascosti) ha quindi suscitato molto interesse nella letteratura sulle reti neurali (vedi Anders e Korn, 1999; Medeiros et al., 2006 per esempio). Viene usata una procedura di convalida K-fold per selezionare il numero di nodi nascosti. Per ottenere i pesi, viene definito l'errore quadratico medio e i pesi vengono ottimizzati utilizzando tecniche di gradiente. Il metodo più noto, basato sul concetto di discesa più ripida, è l'algoritmo di backpropagation. Un metodo di ottimizzazione del secondo ordine chiamato Levenberg Marquardt è generalmente noto per essere più efficiente dell'algoritmo di retropropagazione di base.

Rete neurale bayesiana (BNN)

Una rete neurale bayesiana (BNN) è una rete neurale progettata sulla base di una formulazione probabilistica bayesiana (MacKay, 1992a,b). In quanto tali, i BNN sono correlati al concetto di statistica classica della stima dei parametri bayesiani e sono anche correlati al concetto di regolarizzazione come nella regressione della cresta. Le BNN hanno goduto di un'ampia applicabilità in molte aree come l'economia/finanza (Gencay e Qi, 2001) e l'ingegneria (Bishop, 1995). L'idea di BNN è di trattare i parametri o i pesi di rete come variabili casuali, obbedendo a una distribuzione a priori. Questa distribuzione è progettata in modo da favorire modelli a bassa complessità, cioè modelli che producono accoppiamenti lisci. Una volta osservati i dati, viene valutata la distribuzione a posteriori dei pesi e può essere calcolata la previsione della rete. Le previsioni rifletteranno quindi sia l'aspetto di levigatezza imposto dal precedente sia l'aspetto di accuratezza del fitness imposto dai dati osservati.

Un concetto strettamente correlato è l'aspetto della regolarizzazione, per cui la seguente funzione obiettivo è costruita e minimizzata

$$J = \alpha E_D + (1 - \alpha) E_W \quad (3.2)$$

dove E_D è la somma dei quadrati degli errori nelle uscite di rete, E_W è la somma dei quadrati dei parametri di rete (cioè i pesi) ed è il parametro di regolarizzazione. Per l'approccio bayesiano, la scelta tipica del priore (credenze iniziali su un evento in termini di distribuzione di probabilità) è la seguente densità normale che dà più peso ai valori dei parametri di rete più piccoli

$$p(w) = \left(\frac{1 - \alpha}{\pi} \right)^{\frac{L}{2}} e^{-(1-\alpha)E_W} \quad (3.3)$$

dove L indica il numero di parametri (pesi). Il posteriore è quindi dato da

$$p(w|D, \alpha) = \frac{p(D|w, \alpha)p(w, \alpha)}{p(D, \alpha)} \quad (3.4)$$

dove D rappresenta i dati osservati. Assumendo errori normalmente distribuiti, la densità di probabilità dei dati dati i parametri può essere valutata come

$$p(D|w, \alpha) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{M}{2}} e^{-(1-\alpha)E_D} \quad (3.5)$$

dove M è il numero di punti dati di addestramento. Sostituendo le espressioni per le densità in (3) e (5) in (4), otteniamo

$$p(w|D, \alpha) = c \exp(-J) \quad (3.6)$$

dove c è una costante di normalizzazione. La costante di regolarizzazione α è anche determinata utilizzando concetti bayesiani, da

$$p(\alpha|D) = \frac{p(D|\alpha)p(\alpha)}{p(D)} \quad (3.7)$$

Entrambe le espressioni (6) e (7) dovrebbero essere massimizzate per ottenere rispettivamente i pesi ottimali e il parametro α . Il termine $p(D|\alpha)$ in (7) è ottenuto da un'approssimazione quadratica di J in termini di pesi e quindi integrando i pesi.

Reti neurali di regressione generalizzata (GRNN)

Nadaraya e Watson hanno sviluppato questo modello (Nadaraya, 1964; Watson, 1964). È comunemente chiamato stimatore Nadaraya-Watson o stimatore di regressione del kernel. Nella comunità del machine learning, viene in genere utilizzato il termine rete neurale di regressione generalizzata (o GRNN). Useremo quest'ultimo termine. Il modello GRNN è un modello non parametrico in cui la previsione per un dato punto dati x è data dalla media degli output target dei punti dati di addestramento nelle vicinanze del dato punto x (Hardle, 1990). La media locale è costruita pesando i punti in base alla loro distanza da x , usando alcune funzioni del kernel. La stima è solo la somma ponderata delle risposte osservate (o output target) data da

$$\hat{y} = \sum_{m=1}^M w_m y_m, \quad (3.8)$$

dove i pesi w_m sono dati da

$$w_m = \frac{K\left(\frac{\|x-x_m\|}{h}\right)}{\sum_{m'=1}^M K\left(\frac{\|x-x_{m'}\|}{h}\right)}, \quad (3.9)$$

dove y_m è l'output di destinazione per il punto dati di training x_m e K è la funzione del kernel. Abbiamo usato il tipico kernel gaussiano *formula*. Il parametro h , chiamato larghezza di banda, è un parametro importante in quanto determina la levigatezza dell'adattamento, poiché aumentandolo o diminuendolo controllerà la dimensione della regione di levigatura.

Regressione K-Nearest Neighbor (KNN)

KNN è un metodo non parametrico che basa la sua previsione sugli output di destinazione dei K vicini più vicini del dato punto di interrogazione (vedi Hastie et al., 2001). Nello specifico, dato un punto dati, calcoliamo la distanza euclidea tra quel punto e tutti i punti del training set. Quindi selezioniamo i punti dati di allenamento K più vicini e impostiamo la previsione come media dei valori di output target per questi K punti. Quantitativamente parlando, sia $I(x)$ l'insieme di K vicini più prossimi del punto x . Allora la previsione è data da

$$\hat{y} = \frac{1}{K} \sum_{m \in I(x)} y_m \quad (3.10)$$

dove di nuovo y_m è l'output di destinazione per il punto dati di training x_m . Naturalmente K è un parametro chiave in questo metodo e deve essere selezionato con cura. Un K grande porterà a un adattamento più fluido, e quindi a una varianza inferiore, ovviamente a scapito di un bias maggiore, e viceversa per un K piccolo.

Regressione del vettore di supporto (SVR)

La regressione del vettore di supporto (Scholkopf e Smola, 2001; Smola e Scholkopf, 2003) è un metodo di successo basato sull'utilizzo di uno spazio di caratteristiche ad alta dimensione (formato trasformando le variabili originali) e penalizzando la conseguente complessità utilizzando un termine di penalità aggiunto alla funzione di errore. Consideriamo prima per l'illustrazione un modello lineare. Quindi, la previsione è data da

$$f(x) = w^T x + b \quad (3.11)$$

dove w è il vettore del peso, b è il bias e x è il vettore di input. Sia x_m e y_m denotano, rispettivamente, l' m -esimo vettore di input di addestramento e output di destinazione, $m = 1, \dots, M$. La funzione di errore è data da

$$J = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{m=1}^M |y_m - f(x_m)|_\epsilon \quad (3.12)$$

Il primo termine nella funzione di errore è un termine che penalizza la complessità del modello. Il secondo termine è la funzione di perdita $\epsilon - insensitive$, definita come

$$|y_m - f(x_m)|_\epsilon = \max\{0, |y_m - f(x_m)| - \epsilon\} \quad (3.13)$$

Non penalizza gli errori sottostanti, consentendo un po' di spazio di manovra per lo spostamento dei parametri per ridurre la complessità del modello. Si può dimostrare che la soluzione che minimizza la funzione di errore è data da

$$f(x) = \sum_{m=1}^M (\alpha_m^* - \alpha_m) x_m^T x + b, \quad (3.14)$$

dove α_m e α_m^* sono moltiplicatori di Lagrange. I vettori di addestramento che forniscono moltiplicatori di Lagrange diversi da zero sono chiamati vettori di supporto e questo è un concetto chiave nella teoria SVR. I vettori non di supporto non contribuiscono direttamente alla soluzione e il numero di vettori di supporto è una misura della complessità del modello (vedi Chalimourda et al., 2004; Cherkassky e Ma, 2004). Questo modello viene esteso al caso non lineare attraverso il concetto di kernel K , dando una soluzione

$$f(x) = \sum_{m=1}^M (\alpha_m^* - \alpha_m) L(x_m^T x) + b. \quad (3.15)$$

Un kernel comune è il kernel gaussiano. Assumiamo che la sua larghezza sia σK (la deviazione standard della funzione gaussiana).

Rete Neurale Ricorrente (RNN)

L'RNN semplice, noto anche come rete di Elman, ha una struttura simile all'MLP, ma contiene connessioni di feedback per tenere conto degli stati precedenti insieme all'input corrente prima di produrre l'output o gli output finali. Questo viene fatto salvando una copia dei valori precedenti del livello contenente i nodi ricorrenti e utilizzandoli come input aggiuntivo per il passaggio successivo. A questo proposito, la rete può esibire un comportamento temporale dinamico per una sequenza temporale. In questo studio il modello utilizzato per implementare la RNN è quello sequenziale. È composto da due livelli, uno nascosto contenente nodi ricorrenti e uno di output contenente uno o più nodi lineari. A causa degli elevati requisiti computazionali, non è stata utilizzata la convalida k-fold per scegliere l'architettura di rete ottimale per serie, ma piuttosto tre nodi di input e sei unità ricorrenti, che formano lo strato nascosto, per tutte le serie temporali del set di dati.

Rete neurale di memoria a lungo termine (LSTM)

La rete LSTM è simile alla RNN discussa sopra ed è stata proposta per evitare il problema della dipendenza a lungo termine. Il vantaggio delle unità LSTM rispetto alle normali unità RNN è la loro capacità di conservare le informazioni per periodi di tempo più lunghi grazie alla loro architettura complessa che consiste in diverse porte con il potere di rimuovere o aggiungere informazioni allo stato dell'unità. Simile a RNN, il modello utilizzato per implementare la rete LSTM è quello sequenziale composto da uno strato nascosto e uno di output. Allo stesso modo, a causa dell'elevato tempo di calcolo, l'architettura del modello è costituita da tre nodi di input, sei unità LSTM che formano lo strato nascosto e un singolo nodo lineare nello strato di output. La funzione di attivazione lineare viene utilizzata prima dell'uscita di tutte le unità e quella del sigmoide rigido per il passo ricorrente.

3.2.4 Formazione del modello

Una volta sviluppati i modelli di previsione, è il momento di iniziare il processo di formazione. Quando si addestrano i modelli di previsione, i data scientist di solito utilizzano dati storici. Elaborando questi dati, gli algoritmi forniscono modelli addestrati pronti per l'uso.

3.2.5 Validazione del modello

Questo passaggio richiede l'ottimizzazione dei parametri del modello di previsione per ottenere prestazioni elevate. Utilizzando un metodo di ottimizzazione della convalida incrociata in cui il set di dati di training è suddiviso in dieci parti uguali. I data scientist addestrano modelli di previsione con diversi set di iperparametri. L'obiettivo di questo metodo è capire quale modello ha la previsione più accurata. Anche se l'obiettivo principale degli algoritmi di apprendimento automatico è simile in questo lavoro - imitare un sistema reale - ci sono più criteri di prestazione. Mentre alcuni metodi sono migliori per trovare lo schema generale, ignorando i picchi occasionali, altri possono fornire una migliore comprensione degli eventi sporadici. Quando si misurano le prestazioni di un esperimento statistico come una previsione della domanda, ci sono due dimensioni principali:

1. Come descrive la tendenza generale del fenomeno
2. Come si comporta quando incontra possibili valori anomali casuali e rumore

Nell'apprendimento automatico, la definizione del modello e dei suoi parametri/pesi dipende dai criteri di prestazione scelti per la fase di formazione. Criteri diversi determinano pesi del modello diversi. Le prestazioni dei modelli sono, di solito, valutate utilizzando

le metriche statistiche standard $RMSE^{[12]}$ e $MAPE^{[13]}$. Tuttavia, altre metriche possono essere utili. L'errore medio (ME), chiamato anche bias medio, può dare un'idea se le previsioni sono al di sopra o al di sotto dell'obiettivo. Il coefficiente di determinazione R^2 è una misura di come la differenza tra le osservazioni e le previsioni si rapporta alla differenza tra le osservazioni e la loro media. Può essere interpretato come la probabilità che nuovi valori vengano previsti correttamente.

3.2.6 Miglioramento

Quando si ricercano le migliori soluzioni aziendali, gli scienziati dei dati di solito sviluppano diversi modelli di apprendimento automatico. Poiché i modelli mostrano diversi livelli di accuratezza, gli scienziati scelgono quelli che soddisfano meglio le loro esigenze aziendali. La fase di miglioramento prevede l'ottimizzazione dei risultati analitici. Ad esempio, utilizzando tecniche di insieme di modelli, è possibile ottenere una previsione più accurata. In tal caso, l'accuratezza viene calcolata combinando i risultati di più modelli di previsione.

3.2.7 Distribuzione

Questa fase presuppone l'integrazione dei modelli di previsione nell'uso della produzione. Si consiglia inoltre di impostare una pipeline per aggregare nuovi dati da utilizzare per le prossime funzionalità di intelligenza artificiale. Ciò può far risparmiare molto lavoro di preparazione dei dati in progetti futuri. In questo modo aumenta anche la precisione e la varietà di ciò che potresti essere in grado di prevedere.

3.3 Analisi e conclusioni

In questa fase di analisi ho cercato di confrontare alcuni casi che ho trovato in letteratura, sono andato a ricercare quali potessero essere le invarianti e le versatilità tra loro. Le svariate applicazioni della previsione della domanda portano anche a svariati modelli utilizzabili e svariati modi di pretrattare i dati.

3.3.1 I dati

I diversi modi di pretrattare i dati dipendono dal tipo di modello utilizzato, se si prende in considerazione la stagionalità verrà utilizzato un determinato modello con un set di dati con una determinata struttura, se viene utilizzato un modello per serie temporali abbiamo bisogno che i dati abbiano un timestamp, e così via..

Allo stesso tempo nei problemi di classificazione, le prestazioni degli algoritmi di apprendimento dipendono principalmente dalla natura della rappresentazione dei dati.

Come visto in precedenza le modalità di pretrattamento dei dati sono molteplici:

- Trasformazione dei dati (log o la trasformazione di potenza Box-Cox).
- Destagionalizzazione dei dati.
- Detrending dei dati.
- Combinazione dei tre precedenti

Si è evidenziata inoltre la necessità non solo di considerare l'uso attento dei metodi di preparazione dei dati, ma di testare attivamente più combinazioni diverse di schemi di preparazione dei dati per un dato problema al fine di scoprire cosa funziona meglio, anche nel caso dei metodi classici.

Estrazione delle caratteristiche: [cite] Potrebbero esserci alcuni problemi a causa dell'enorme quantità di dati. Quando si prova ad utilizzare tutte le funzionalità di tutti i dati (es: i prodotti in ogni negozio con 155 funzionalità e 875 milioni di record), l'algoritmo di deep learning può impiegare persino giorni per completare il suo lavoro a causa della potenza di calcolo limitata. [4]

Quindi per ogni algoritmo è necessario ridurre il numero di caratteristiche e il tempo di calcolo. Per superare questo problema e accelerare le fasi di clustering e modellazione, potrebbe essere utilizzato PCA (Principal Component Analysis) come algoritmo di estrazione delle caratteristiche.

PCA è un algoritmo di riduzione delle dimensioni comunemente utilizzato che presenta le caratteristiche più significative. PCA trasforma ogni istanza del dato insieme di dati dallo spazio d dimensionale a un sottospazio dimensionale k in cui il nuovo insieme generato di k dimensioni è chiamato Componenti Principali (PC). Ciascuna componente principale è indirizzata a una varianza massima esclusa la varianza, contabilizzata in tutte le sue componenti precedenti. Di conseguenza, il primo componente copre la massima varianza e così via.

In breve, i Componenti Principali sono rappresentati come

$$PC_i = a_1X_1 + a_2X_2 + \dots \quad (3.16)$$

dove PC_i è l' i -esimo componente principale, X_j è la j -esima caratteristica originale e a_j è il coefficiente numerico per la caratteristica X_j .

Le caratteristiche per la previsione della domanda dipendono fortemente dall'obiettivo aziendale, per esempio la comunità scientifica ha effettuato diversi studi riguardanti le caratteristiche più adeguate per la previsione della domanda idrica e si può genericamente concludere che, oltre ai dati storici, il clima e la stagionalità hanno l'impatto più forte sui risultati e possono essere presi in considerazione anche gli sporadici eventi stagionali, come Natale, Pasqua o anche un grande evento sportivo [6]. Quando si parla di stagionalità, essa può essere implementata nell'algoritmo in due modi diversi:

1. La periodicità dei dati influenza direttamente il numero di macchine (modelli predittivi) utilizzate nella previsione e, di conseguenza, la quantità di dati utilizzati nell'addestramento di ciascuna macchina. Ad esempio, considerando una periodicità di 24 ore significa che l'algoritmo addestrerà 24 macchine e farà previsioni per un intervallo di 24 ore. Le diverse periodicità da considerare hanno applicazioni diverse e possono avere implicazioni per l'accuratezza delle previsioni.
2. Identificare e separare diversi modelli nei dati e utilizzare ciascuno di essi come set di dati indipendenti. Questo è noto come clustering e può essere ottenuto utilizzando algoritmi di apprendimento automatico.

Clustering dei dati: [cite] Nell'apprendimento non supervisionato, un problema comune è identificare e classificare correttamente un certo numero di classi identiche (cluster) presenti nei dati (Bishop 2006). All'inizio, il numero di cluster, k , è solitamente sconosciuto. Trovarlo può essere ottenuto eseguendo l'algoritmo di clustering per diversi valori di k e valutando i risultati per ciascun valore.

Il numero ottimale di cluster è quello che ottimizza un determinato criterio, come la varianza tra osservazioni nello stesso cluster. Complessivamente, il numero di cluster e il modo in cui vengono trovati, la formulazione della distanza e l'implementazione dell'algoritmo di clustering stesso sono reciprocamente influenzati e diverse combinazioni di essi produrranno risultati diversi.

Qui, l'analisi di clustering può essere utilizzata per verificare la stagionalità e altre relazioni tra i dati di input.

3.3.2 Il modello

Come visto in precedenza i modelli da poter utilizzare sono molteplici:

- Perceptor multistrato (MLP)
- Rete neurale bayesiana (BNN)
- Reti neurali di regressione generalizzata (GRNN)

- Regressione K-Nearest Neighbor (KNN)
- Regressione del vettore di supporto (SVR)
- Rete Neurale Ricorrente (RNN)
- Rete neurale di memoria a lungo termine (LSTM)

Come mostrato in letteratura, tecniche diverse sono più adatte a sistemi diversi. Per questo motivo, non ci si aspetta di trovare una soluzione che si adatti perfettamente a tutti i set di dati o di trovare la soluzione perfetta per ciascuna metodologia. Tuttavia, si prevede di scoprire quali configurazioni del modello testate presentano i migliori risultati. Inoltre i vantaggi di ciascuna tecnica possono essere combinati attraverso una strategia ibrida di metodi paralleli, diluendo gli svantaggi.

Ensemble Learning: Oltre a questi modelli discussi in precedenza c'è anche l'Ensemble Learning (EL), che è un'altra metodologia per aumentare le prestazioni del sistema. Un sistema di insieme è composto da due parti: [12]

- generazione di insieme
- integrazione di insieme.

Nella parte di generazione dell'ensemble, viene generato un insieme diversificato di modelli di previsione di base utilizzando metodi o campioni diversi. Nella parte di integrazione, le previsioni di tutti i modelli vengono combinate utilizzando una strategia di integrazione.

Descrivo in breve un algoritmo in particolare che si approccia molto a questo caso, e si tratta dell'algoritmo Stacking:

Stacking o Stacked Generalization è un algoritmo di apprendimento automatico di insieme. Utilizza un algoritmo di meta-apprendimento per apprendere come combinare al meglio le previsioni di due o più algoritmi di apprendimento automatico di base. Potremmo usare Stacking per combinare vari modelli e fare nuove previsioni. L'architettura di un modello di impilamento (stacking model) coinvolge due o più modelli di base, spesso indicati come modelli di livello 0 e un meta-modello che combina le previsioni dei modelli di base indicati come modello di livello 1:

- Modelli di livello 0 (modelli base): i modelli si adattano ai dati di addestramento e le cui previsioni vengono compilate.
- Modello di Livello 1 (Meta-Modello): modello che apprende come combinare al meglio le previsioni dei modelli base.

Il meta-modello è addestrato sulle previsioni fatte dai modelli di base su dati fuori campione. In altre parole, i dati non utilizzati per addestrare i modelli di base vengono inviati ai modelli di base, vengono effettuate previsioni e queste previsioni, insieme agli output previsti, forniscono le coppie di input e output del set di dati di addestramento utilizzato per adattarsi al meta-modello. Gli output dei modelli di base utilizzati come input per il meta-modello possono essere valori reali in caso di regressione e valori di probabilità, valori simili alla probabilità o etichette di classe in caso di classificazione. La regressione a stack è una tecnica di apprendimento di insieme per combinare più modelli di regressione tramite un meta-regressore. I singoli modelli di regressione vengono addestrati in base al training set completo; quindi, il meta-regressore viene adattato in base agli output - meta-caratteristiche - dei singoli modelli di regressione nell'insieme.

3.3.3 Conclusioni

Dopo aver esaminato molti articoli in letteratura, gli studi fatti precedentemente forniscono importanti prove a sostegno del fatto che i metodi classici possono dominare la previsione di serie temporali, almeno sui tipi di problemi di previsione valutati.[cite]

La domanda più interessante e la sfida più grande è trovare le ragioni delle loro scarse prestazioni con l'obiettivo di migliorarne la precisione e sfruttarne l'enorme potenziale. Gli algoritmi di apprendimento dell'intelligenza artificiale hanno rivoluzionato un'ampia gamma di applicazioni in diversi campi e non c'è motivo per cui lo stesso non possa essere ottenuto con i metodi ML nella previsione. Quindi, si dovrebbe trovare come essere applicati per migliorare la loro capacità di prevedere in modo più accurato. Gli autori di alcuni articoli fanno commenti su LSTM e RNN, che sono generalmente ritenuti l'approccio di deep learning per problemi di previsione di sequenza in generale, e in questo caso le loro prestazioni chiaramente scarse nella pratica.

[...] one would expect RNN and LSTM, which are more advanced types of NNs, to be far more accurate than the ARIMA and the rest of the statistical methods utilized. [6]

Dicendo anche che gli LSTM sembrano essere più adatti a adattare o sovradimensionare il set di dati di allenamento piuttosto che a prevederlo.

Another interesting example could be the case of LSTM that compared to simpler NNs like RNN and MLP, report better model fitting but worse forecasting accuracy. [6]

Come già detto precedentemente, la letteratura analizzata si concentra molto di più sulla parte di analisi dei modelli, ed è per questo che vengono forniti più dettagli al riguardo rispetto al pretrattamento dei dati, che come si è visto può anche essere assente.

Quindi evidentemente, in questi casi di studio, le persone che praticano sono molto più interessate alla parte di modellazione che a quella di preprocessing.

Capitolo 4

Frameworks

Gli strumenti di orchestrazione del machine learning vengono utilizzati per automatizzare e gestire i workflows e l'infrastruttura della pipeline, con un'interfaccia semplice e collaborativa. Insieme alla gestione e alla creazione di workflows personalizzati e delle relative pipeline, questi strumenti ci aiutano anche a tracciare e monitorare i modelli per ulteriori analisi. Gli strumenti di orchestrazione rendono il processo di machine learning più semplice, più efficiente e aiutano i data scientist e i team di machine learning a concentrarsi su ciò che è necessario, piuttosto che sprecare risorse cercando di identificare i problemi prioritari.

Come abbiamo detto precedentemente, il nostro scopo è quello di cercare quei framework che meglio si integrano con una piattaforma esistente di gestione di risorse di AI/ML, come AI4EU. La selezione dei framework è data principalmente da questo fattore, ovvero se un framework dovesse essere messo in un ambiente di produzione, come quello di AI4EU, quelli selezionati sono i candidati più sensati, scartando invece quelli utilizzati in ambito di ricerca/accademico.

Senza la pretesa di essere completi riportiamo il risultato dell'analisi che abbiamo fatto. È stata eseguita un'analisi astratta, ovvero non sono stati selezionati determinati framework implementandoli, ma solo vedendo quali sono le loro capacità e verificare che siano compatibili con le nostre necessità.

La lista di tool che si occupano di framework è molto vasta. Quelli che hanno un utilizzo ampio da parte dei practitioners e quelli che meglio si adattano ai nostri casi studio sono illustrati di seguito.

4.1 MetaFlow

Metaflow è una libreria Python di facile utilizzo che aiuta scienziati e ingegneri a creare e gestire progetti di data science reali. Metaflow è stato originariamente sviluppato da Netflix per aumentare la produttività dei data scientist che lavorano su un'ampia varietà

di progetti, dalle statistiche classiche al deep learning all'avanguardia. [7] Metaflow fornisce un'API unificata allo stack dell'infrastruttura necessario per eseguire progetti di data science, dal prototipo alla produzione, ma non presenta un'interfaccia grafica per visualizzare e gestire i flussi di lavoro. Purtroppo però MetaFlow non offre una UI per visualizzare e gestire il workflow.

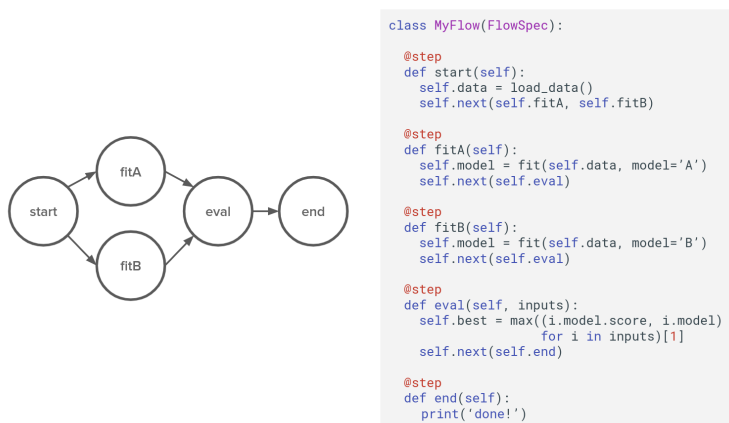


Figura 4.1: Esempio di addestramento di due versioni di un modello in parallelo e scelta di quella con il punteggio più alto

Con questo framework, i data scientists possono strutturare il proprio flusso di lavoro come un grafico aciclico diretto di passaggi, come illustrato sopra. I passaggi possono essere codice Python arbitrario. In questo esempio ipotetico, il flusso addestra due versioni di un modello in parallelo e sceglie quella con il punteggio più alto. Anche per questo motivo si appresta al nostro caso.

Per fare una predizione accurata della domanda, come già detto precedentemente, è conveniente addestrare varie versioni di un modello per scoprire quali configurazioni del modello testate presentano i migliori risultati, o addirittura addestrare in parallelo vari tipi di modello.

In superficie, questo non sembra molto. Esistono molti framework esistenti, come Apache Airflow o Luigi, che consentono l'esecuzione di DAG costituiti da codice Python arbitrario. Il "problema" è nei molti dettagli accuratamente progettati di Metaflow: ad esempio, nota come nell'esempio sopra i dati e i modelli sono memorizzati come normali variabili di istanza Python. Funzionano anche se il codice viene eseguito su una piattaforma di calcolo distribuita, supportata da Metaflow per impostazione predefinita, grazie all'archivio di artefatti indirizzato al contenuto integrato di Metaflow. In molti altri framework, il caricamento e l'archiviazione degli artefatti è lasciato come esercizio per l'utente, che lo costringe a decidere cosa dovrebbe e non dovrebbe essere mantenuto.

Metaflow rimuove questo sovraccarico cognitivo. Metaflow è ricco di dettagli incentrati sull'uomo come questo, che mirano tutti ad aumentare la produttività dei data scientist.

4.1.1 Vantaggi

Metaflow segue il dataflow paradigm che modella un programma come un grafo diretto di operazioni. Questo è un paradigma naturale per esprimere le pipeline di elaborazione dei dati, in particolare l'apprendimento automatico.

I vantaggi principali di questo framework sono: [7]

- Fornisce un'API altamente utilizzabile per strutturare il codice come flusso di lavoro, ovvero come grafico diretto dei passaggi (usabilità).
- Mantiene un'istanza immutabile di dati, codice e dipendenze esterne necessarie per eseguire ogni passaggio (riproducibilità).
- Facilita l'esecuzione delle fasi in vari ambienti, dallo sviluppo alla produzione (scalabilità, prontezza alla produzione).
- Registra i metadati sulle precedenti esecuzioni e rendili facilmente accessibili (usabilità, riproducibilità).

E come si può vedere la prontezza della produzione è uno degli aspetti che ci interessa.

4.2 ZenML

ZenML è un framework MLOps estensibile e open source per l'utilizzo di pipeline di Machine Learning pronte per la produzione, in modo semplice. Al suo interno, ZenML organizzerà le pipeline dei tuoi esperimenti dall'acquisizione dei dati alla suddivisione, pre-elaborazione, formazione, fino alla valutazione dei risultati e persino alla pubblicazione, tutto grazie anche ad una UI che permette la visualizzazione e la gestione del workflow. [16] Sebbene esistano altre soluzioni di pipeline per gli esperimenti di Machine Learning, ZenML si concentra su quanto segue:

- Semplicità.
- Riproducibilità.
- Integrazioni.

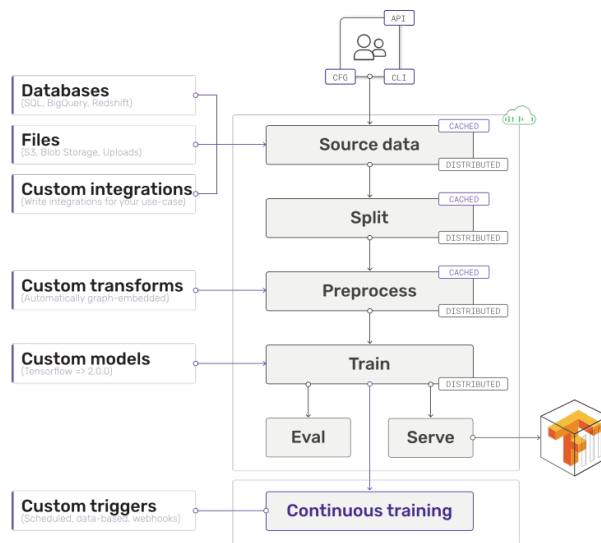


Figura 4.2: Pipeline con ZenML

4.2.1 Problemi risolti da ZenML

ZenML risolve il problema di portare in produzione l'apprendimento automatico nei modelli. È conveniente usare ZenML se si lotta con: [16]

- Riproduzione dei risultati della formazione in produzione.
- Gestione dei metadati ML, inclusi dati, codice e versionamento del modello.
- Ottenere (e mantenere) i modelli ML in produzione.
- Riutilizzare codici/dati e ridurre gli sprechi.
- Mantenimento della comparabilità tra i modelli ML.
- Ridimensionamento dell'addestramento/inferenza ML a set di dati di grandi dimensioni.
- Mantenimento della qualità del codice insieme alla velocità di sviluppo.
- Tenere il passo con il panorama degli strumenti ML in modo coerente.

Molto importante per noi è il ridimensionamento del set di dati e, appunto, la facilità del portare i modelli in produzione.

Nel caso del demand forecasting, come già detto in precedenza, potrebbe esserci la possibilità di ridurre il set di dati al fine di ridurre anche il tempo di addestramento.

Nel caso dell'AI in radiology, il riutilizzo del codice è fondamentale. Come abbiamo visto precedentemente per estrarre le caratteristiche da un'immagine viene sempre utilizzata una CNN, a questo punto quel modulo potrà essere quasi sempre riutilizzato in tutti i casi di estrazione delle caratteristiche da un'immagine.

4.2.2 Vantaggi

Elenco di seguito i vantaggi, di ZenML, a cui siamo interessati:

- Riproducibilità garantita degli esperimenti di addestramento tramite:
 - Dati versione, codice e modelli
 - Esperimenti monitorati automaticamente
 - Configurazioni dichiarative della pipeline
- Possibilità di passare rapidamente dall'ambiente locale a quello cloud (ad es. orchestrazione di pipeline su kubernetes)
- Astrazioni integrate ed estensibili per:
 - Pre-elaborazione distribuita su grandi set di dati
 - Lavori di formazione basati su cloud
 - Servizio modello

Nel caso dell'AI in radiology, come già detto, è necessario definire se la soluzione sviluppata è destinata ad essere integrata in un'infrastruttura esistente o utilizzata come applicazione standalone. Durante la prima fase di implementazione, è possibile adottare un approccio containerizzato come quello proposto da *Docker*^[8] o *Kubernetes*^[9] e applicazioni web-based (REST-API) per l'implementazione successiva.

Quindi la possibilità che da ZenML di passare rapidamente da un ambiente locale a quello cloud come kubernetes gioca a suo vantaggio.

4.3 MLRun

MLRun è un framework MLOps open source che offre un approccio integrativo alla gestione delle pipeline di machine learning dallo sviluppo iniziale allo sviluppo del modello fino alla distribuzione completa della pipeline in produzione. MLRun offre un comodo livello di astrazione per un'ampia varietà di stack tecnologici, consentendo ai data engineer e ai data scientist di definire la funzionalità e i modelli.^[8]

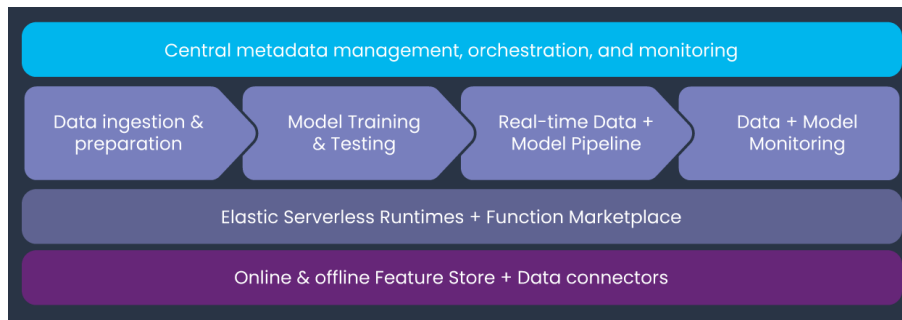


Figura 4.3: architettura di MLRun

4.3.1 Vantaggi

MLRun offre i seguenti vantaggi chiave:

- Implementazione rapida del codice nelle pipeline di produzione
- Ridimensionamento elastico di carichi di lavoro batch e in tempo reale
- Gestione delle funzionalità: acquisizione, preparazione e monitoraggio
- Funziona ovunque: il tuo IDE locale, multi-cloud o on-premise

Per garantire efficienza e scalabilità, è necessario implementare il parallelismo quando possibile. MLRun supporta questo utilizzando due meccanismi: [8]

1. Clustering: eseguire il codice su un motore di elaborazione distribuito (come Dask, Spark o Horovod).
2. Bilanciamento del carico/partizionamento: dividere (partizionare) il lavoro tra più lavoratori.

Le funzioni e le attività MLRun possono accettare iperparametri o elenchi di parametri, distribuire molti worker paralleli e suddividere il lavoro tra i worker distribuiti. L'implementazione del parallelismo è lasciata al runtime. Ogni runtime può avere il proprio metodo di esecuzione delle attività simultanee.

MLRun, quindi, supporta il parallelismo. Ad esempio, il codice seguente mostra come utilizzare gli iperparametri per eseguire l'attività di addestramento del modello XGBoost con diverse combinazioni di parametri:

```
1 parameters = {
2     "eta": [0.05, 0.10, 0.20, 0.30],
3     "max_depth": [3, 4, 5, 6, 8, 10],
4     "gamma": [0.0, 0.1, 0.2, 0.3],
5 }
6
7 task = NewTask(handler=xgb_train,
8     out_path='/User/mlrun/data').with_hyper_params(parameters, 'max.accuracy')
9 run = run_local(task)
```

Listing 4.1: Esempio di codice

Questo codice (4.1) mostra come indicare a MLRun di eseguire la stessa attività mentre si scelgono i parametri da più elenchi (ricerca a griglia). MLRun quindi registra tutte le esecuzioni, ma contrassegna solo l'esecuzione con perdita minima come risultato selezionato [8].

Oltre alla implementazione rapida del codice nelle pipeline di produzione, è anche per il parallelismo che MLRun è un ottimo candidato per il nostro scopo. Per quanto riguarda il demand forecasting, data la mole di dati, il parallelismo rappresenta un'ottima soluzione al problema di allenare una rete con tantissimi dati.

MLRun ha anche un'interfaccia utente grafica (MLRun Dashbord) per lavorare e visualizzare i dati

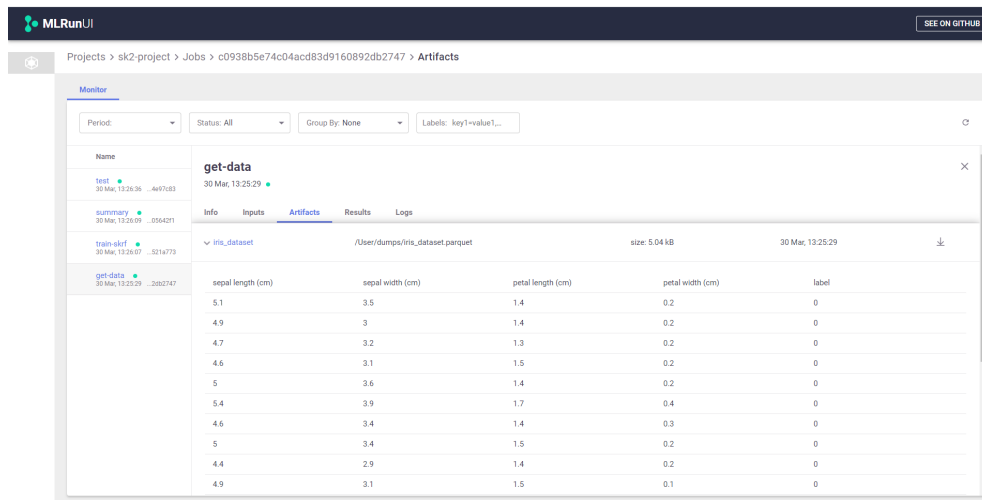


Figura 4.4: MLRun Dashbord

Capitolo 5

Conclusioni

In questo lavoro di tesi abbiamo cercato di capire se fosse possibile l'automazione di pipeline di Machine Learning al fine di trovare qualcosa che possa essere integrabile con una piattaforma che gestisce risorse/progetti di Machine Learning, come AI4EU.

Abbiamo utilizzato un approccio bottom-up, analizzando due casi studio a piacimento. Dopo aver visionato differenti articoli ed estrapolato un workflow per ogni caso, siamo andati ad analizzare le versatilità tra i vari approcci proposti in letteratura.

Abbiamo notato come il focus dei diversi approcci trovati può essere differente. Alcuni si focalizzano sui dati, ovvero raccolta e pretrattamento, altri invece si focalizzano sulla parte del modello, ovvero costruzione, addestramento e testing.

Nel primo caso (AI in radiology) i dati hanno sempre la stessa struttura e c'è anche la possibilità che venga eseguito un aumento del set di dati per la poca disponibilità, ma c'è un grande lavoro di pretrattamento da fare, dato che la qualità delle immagini è fondamentale in questo campo. Il modello è poco versatile, abbiamo sempre trovato una CNN per l'estrazione delle caratteristiche da un'immagine e quasi sempre l'utilizzo di un RNN (preferibilmente una LSTM) per l'estrazione delle parole dalle caratteristiche.

Nel secondo caso (Demand forecasting) i dati sono principalmente dati storici e possono avere strutture totalmente differenti, soprattutto in base all'obiettivo della predizione e al tipo di modello utilizzato, con pochissimo pretrattamento dei dati se non riduzione del set di dati. Il modello è molto versatile, come abbiamo già visto ci sono svariati modelli che possono essere utilizzati e nell'ultimo periodo le reti neurali stanno prendendo sempre più piede.

Anche facendo una piccola analisi da un punto di vista cronologico, in generale, il focus si sta spostando sempre di più sull'analisi dei modelli (sul confronto dei modelli) che si utilizzano e sempre meno sul preprocessamento dei dati, ed è proprio per questo che si stanno utilizzando sempre di più le reti neurali, per la loro capacità di integrare informazioni che ho nel data set all'interno del modello.

Siamo andati poi alla ricerca di qualche framework per capire se era possibile implementare la nostra pipeline e quindi cercare una soluzione che comprenda tutte quante le

diverse proprietà e i diversi attributi dei casi specifici.

Abbiamo selezionato tre framework molto simili tra loro ma con qualche piccola differenza:

- MetaFlow
- ZenML
- MLRun

Sono stati selezionati questi invece che altri soprattutto per la facilità della messa in produzione e perché rispecchiavano di più quelli che erano i punti chiave delle pipeline. In conclusione, tutte le risorse di AI/ML devono essere automatizzate per permetterne l'uso altrimenti sarebbero inutilizzabili e grazie a framework come quelli sopra citati, la loro integrazione con una piattaforma già esistente (es: AI4EU) che gestisce risorse/progetti di Machine Learning è possibile.

Appendices

.1 Recurrent neural network

Una rete neurale ricorrente (recurrent neural network, RNN) è una classe di rete neurale artificiale che include neuroni collegati tra loro in un loop. [1] Tipicamente i valori di uscita di uno strato di un livello superiore sono utilizzati in ingresso di uno strato di livello inferiore[2]. Quest'interconnessione tra strati permette l'utilizzo di uno degli strati come memoria di stato, e consente, fornendo in ingresso una sequenza temporale di valori, di modellarne un comportamento dinamico temporale dipendente dalle informazioni ricevute agli istanti di tempo precedenti[3]. In altri casi lo strato è costituito da un insieme di neuroni dotato di loop di connessioni molto sparse che innescano una dinamica caotica, impiegata per l'addestramento di una parte successiva della rete, come avviene per le echo state network. Ciò le rende applicabili a compiti di analisi predittiva su sequenze di dati, quali possono essere ad esempio il riconoscimento della grafia[4] o il riconoscimento vocale[5].

.2 Convolutional neural network

Nell'apprendimento automatico, una rete neurale convoluzionale (CNN o ConvNet dall'inglese convolutional neural network) è un tipo di rete neurale artificiale feed-forward in cui il pattern di connettività tra i neuroni è ispirato dall'organizzazione della corteccia visiva animale, i cui neuroni individuali sono disposti in maniera tale da rispondere alle regioni di sovrapposizione che tassellano il campo visivo[1]. Le reti convoluzionali sono ispirate da processi biologici[2] e sono variazioni di perceptron multistrato progettate per usare al minimo la pre-elaborazione. Hanno diverse applicazioni nel riconoscimento di immagini e video, nei sistemi di raccomandazione[3], nell'elaborazione del linguaggio naturale[4] e, recentemente, in bioinformatica.

.3 Long-Short Term Memory

La memoria a lungo termine (LSTM) è un'architettura di rete neurale ricorrente artificiale (RNN)[1] utilizzata nel campo dell'apprendimento profondo. A differenza delle reti neurali feedforward standard, LSTM ha connessioni di feedback. Può elaborare non solo singoli punti dati (come immagini), ma anche intere sequenze di dati (come voce o video). Ad esempio, LSTM è applicabile ad attività come il riconoscimento della scrittura non segmentata e connessa,[2] il riconoscimento vocale[3][4] e il rilevamento di anomalie nel traffico di rete o IDS (sistemi di rilevamento delle intrusioni).

.4 Gated Recurrent Units (GRU)

Le Gated Recurrent Units (GRU) sono un meccanismo di gating nelle reti neurali ricorrenti, introdotto nel 2014 da Kyunghyun Cho et al. Il GRU è come una memoria a lungo termine (LSTM) con un cancello di dimenticanza, ma ha meno parametri di LSTM, poiché manca un cancello di uscita. Le prestazioni del GRU su alcuni compiti di modellazione della musica polifonica, della modellazione del segnale vocale e dell'elaborazione del linguaggio naturale sono risultate simili a quelle di LSTM.

.5 Natural language processing (NLP)

L'elaborazione del linguaggio naturale (in inglese: natural language processing, in acronimo: NLP) è il processo di trattamento automatico mediante un calcolatore elettronico delle informazioni scritte o parlate in una lingua.

.6 Neuro-linguistic programming (PNL)

La programmazione neurolinguistica (PNL; in inglese neuro-linguistic programming, NLP) è un metodo di comunicazione e un sistema di "life coaching", "self-help" e "counseling", definito da alcuni suoi promotori come «un approccio alla comunicazione, allo sviluppo personale e alla psicoterapia.

.7 Power Trasformation (Box-Cox)

In statistica, una trasformazione di potenza è una famiglia di funzioni applicate per creare una trasformazione monotona di dati utilizzando le funzioni di potenza. È una tecnica di trasformazione dei dati utilizzata per stabilizzare la varianza, rendere i dati più normali come una distribuzione, migliorare la validità delle misure di associazione (come la correlazione di Pearson tra le variabili) e per altre procedure di stabilizzazione dei dati.

Le trasformazioni di potenza sono utilizzate in più campi, tra cui analisi multi-risoluzione e wavelet,[1] analisi dei dati statistici, ricerca medica, modellazione di processi fisici,[2] analisi dei dati geochimici,[3] epidemiologia[4] e molti altri clinici, aree di ricerca ambientale e sociale.

.8 Docker

Docker è un progetto open-source che automatizza il processo di deployment di applicazioni all'interno di contenitori software, fornendo un'astrazione aggiuntiva grazie alla virtualizzazione a livello di sistema operativo di Linux.[14]

.9 Kubernetes

Kubernetes (abbreviato K8s) è un sistema open-source di orchestrazione e gestione di container.[1] Inizialmente sviluppato da Google, adesso è mantenuto da Cloud Native Computing Foundation. Funziona con molti sistemi di containerizzazione, compreso Docker.[15]

.10 Exponential Smoothing di Holt Winter

L'Exponential Smoothing di Holt Winter. Holt (1957) e Winters (1960) ha esteso il metodo di Holt per catturare la stagionalità. Il metodo stagionale di Holt- Winters comprende l'equazione di previsione e tre equazioni di livellamento: una per il livello l , una per l'andamento b e una per la componente stagionale s , con i corrispondenti parametri di livellamento α , β e γ . Usiamo m per indicare la frequenza della stagionalità, cioè il numero di stagioni in un anno. Ad esempio, per i dati trimestrali $m=4$ e i dati mensili $m = 12$. Esistono due varianti di questo metodo che differiscono come la componente stagionale. Il metodo additivo è preferito quando le variazioni stagionali sono grosso modo costanti lungo la serie, mentre il metodo moltiplicativo è preferito quando le variazioni stagionali cambiano proporzionalmente al livello della serie. Con il metodo additivo la componente stagionale è espressa in termini assoluti nella scala della serie osservata e nell'equazione di livello la serie è destagionalizzata sottraendo la componente stagionale. All'interno di ogni anno, la componente stagionale raggiungerà approssimativamente lo zero. Con il metodo moltiplicativo la componente stagionale è espressa in termini relativi (percentuali) e la serie è destagionalizzata dividendo per la componente stagionale. All'interno di ogni anno, la componente stagionale si sommerà a circa m . Questo metodo è più efficiente del precedente perché gestisce i componenti della stagione, ma ha lo stesso svantaggio di non gestire i nuovi articoli nell'assortimento.

.11 ARIMA/SARIMA

ARIMA, abbreviazione di "Auto-Regressive Integrated Moving Average" (Media mobile integrata auto-regressiva), è in realtà una classe di modelli che "spiega" una determinata serie temporale in base ai propri valori passati, ovvero i propri ritardi e gli errori

di previsione ritardati, in modo che l'equazione possa essere utilizzato per prevedere i valori futuri. Qualsiasi "serie temporale non stagionale che mostra modelli e non è un rumore bianco casuale" può essere modellata con i modelli ARIMA. Le serie temporali sono una sequenza di punti dati presi in punti temporali successivi equidistanti. Le principali componenti da analizzare sono: trend, stagionalità, irregolarità, ciclicità. I modelli ARIMA mirano, quindi, a descrivere le autocorrelazioni nei dati delle serie temporali. Quando si pianificano previsioni a breve termine, ARIMA può fare previsioni accurate. Fornendo valori previsti per periodi specificati dall'utente, mostra chiaramente i risultati per domanda, vendite, pianificazione e produzione.

Un modello ARIMA è caratterizzato da 3 termini: p , d , q dove,

- p è l'ordine del termine AR
- q è l'ordine del termine MA
- d è il numero di differenze necessarie per rendere stazionaria la serie storica

Se una serie temporale ha modelli stagionali, è necessario aggiungere termini stagionali e diventa SARIMA, abbreviazione di "Seasonal ARIMA". Più su quello una volta che finiamo ARIMA. Come modello precedente, costruirò un modello separato per ogni coppia di articoli del negozio. Quindi l'idea principale è trovare i parametri giusti per i nostri modelli.

.12 Root-mean-square deviation (RMSD)

La deviazione quadratica media (RMSD) o errore quadratico medio (RMSE) è una misura utilizzata di frequente delle differenze tra i valori (campioni o valori della popolazione) previsti da un modello o da uno stimatore e i valori osservati. L'RMSD rappresenta la radice quadrata del secondo momento campionario delle differenze tra valori previsti e valori osservati o la media quadratica di queste differenze. Queste deviazioni sono chiamate residui quando i calcoli vengono eseguiti sul campione di dati utilizzato per la stima e sono chiamate errori (o errori di previsione) quando vengono calcolati fuori campione. L'RMSD serve ad aggregare le grandezze degli errori nelle previsioni per vari punti dati in un'unica misura del potere predittivo. RMSD è una misura di accuratezza, per confrontare gli errori di previsione di diversi modelli per un particolare set di dati e non tra set di dati, poiché dipende dalla scala.[1]

.13 Mean absolute percentage error (MAPE)

L'errore percentuale medio assoluto (MAPE), noto anche come deviazione percentuale media assoluta (MAPD), è una misura dell'accuratezza della previsione di un metodo

di previsione nelle statistiche. Di solito esprime l'accuratezza come un rapporto definito dalla formula:

$$MAPE = \frac{100}{n} \sum_{t=1}^n \left| \frac{A_t - F_t}{A_t} \right| \quad (1)$$

dove A_t è il valore effettivo e F_t è il valore previsto. La loro differenza viene divisa per il valore effettivo A_t . Il valore assoluto in questo rapporto viene sommato per ogni momento previsto e diviso per il numero di punti montati n .

.14 DICOM

DICOM (Digital Imaging and COmmunications in Medicine, immagini e comunicazione digitali in medicina) è uno standard che definisce i criteri per la comunicazione, la visualizzazione, l'archiviazione e la stampa di informazioni di tipo biomedico quali ad esempio immagini radiologiche.

.15 PACS

PACS è l'acronimo anglosassone di Picture archiving and communication system (sistema di archiviazione e trasmissione di immagini) e consiste in un sistema hardware e software dedicato all'archiviazione, trasmissione, visualizzazione e stampa delle immagini diagnostiche digitali.

Bibliografia

- [1] AI4EU. r.aid.ologist — ai4eu, universidad politécnica de madrid, 2020.
- [2] Imon Banerjee, Yuan Ling, Matthew C Chen, Sadid A Hasan, Curtis P Langlotz, Nathaniel Moradzadeh, Brian Chapman, Timothy Amrhein, David Mong, Daniel L Rubin, et al. Comparative effectiveness of convolutional neural network (cnn) and recurrent neural network (rnn) architectures for radiology text report classification. *Artificial intelligence in medicine*, 97:79–88, 2019.
- [3] David Roxbee Cox and Alan Stuart. Some quick sign tests for trend in location and dispersion. *Biometrika*, 42(1/2):80–95, 1955.
- [4] Zeynep Hilal Kilimci, A Okay Akyuz, Mitat Uysal, Selim Akyokus, M Ozan Uysal, Berna Atak Bulbul, and Mehmet Ali Ekmiş. An improved demand forecasting model using deep learning approach and proposed decision integration strategy for supply chain. *Complexity*, 2019, 2019.
- [5] Trent Kyono, Fiona J Gilbert, and Mihaela van der Schaar. Improving workflow efficiency for mammography using machine learning. *Journal of the American College of Radiology*, 17(1):56–63, 2020.
- [6] Spyros Makridakis, Evangelos Spiliotis, and Vassilios Assimakopoulos. Statistical and machine learning forecasting methods: Concerns and ways forward. *PloS one*, 13(3):e0194889, 2018.
- [7] MetaFLow. Netflix - python framework for data science.
- [8] MLRun. Open-source mlops orchestration framework.
- [9] MobiDev. How to apply machine learning to demand forecasting.
- [10] Emmanuel Montagnon, Milena Cerny, Alexandre Cadrin-Chênevert, Vincent Hamilton, Thomas Derennes, André Ilinca, Franck Vandenbroucke-Menu, Simon Turcotte, Samuel Kadoury, and An Tang. Deep learning workflow in radiology: a primer. *Insights into imaging*, 11(1):1–15, 2020.

- [11] Jeffrey Pennington, Richard Socher, and Christopher D Manning. Glove: Global vectors for word representation. In *Proceedings of the 2014 conference on empirical methods in natural language processing (EMNLP)*, pages 1532–1543, 2014.
- [12] Towards Data Science. Demand forecast with different data science approaches, 2021.
- [13] Sonit Singh, Sarvnaz Karimi, Kevin Ho-Shon, and Len Hamey. From chest x-rays to radiology reports: a multimodal machine learning approach. In *2019 Digital Image Computing: Techniques and Applications (DICTA)*, pages 1–8. IEEE, 2019.
- [14] Wikipedia. Docker — wikipedia, l’enciclopedia libera, 2021. [Online; in data 25-settembre-2021].
- [15] Wikipedia. Kubernetes — wikipedia, l’enciclopedia libera, 2021. [Online; in data 25-settembre-2021].
- [16] ZenML. Open-source mlops framework.
- [17] Yuhao Zhang, Daisy Yi Ding, Tianpei Qian, Christopher D Manning, and Curtis P Langlotz. Learning to summarize radiology findings. *arXiv preprint arXiv:1809.04698*, 2018.