

Abstract

With the growing demand for predictive models, the need for automation in traditional, resource-intensive machine-learning tasks has increased. Automated Data Science (AutoDS) aims to streamline this process, making advanced algorithms more accessible and assisting experts with complex aspects of pipeline generation. However, AutoDS faces significant challenges in developing innovative methods for Data Exploration, Data Engineering, Model Building, and Exploitation. Beyond creating new algorithms or frameworks, there is a crucial necessity to build user trust in the automation system.

This thesis addresses trust improvement in AutoDS systems from two viewpoints. The first involves clarifying and expanding the evaluation of pipeline building steps, while the second includes incorporating domain knowledge in model building. Both issues are frequently raised by AutoDS users.

In the first part of the thesis, we tackle the challenge of broadening the evaluation of AutoDS stages, specifically in Data Engineering, Model Building, and Exploitation. We introduce a unique contribution - benchmarking imputation techniques. Additionally, we provide a methodology for employing eXplainable Artificial Intelligence (XAI) to improve the validation of meta-features in meta-models for hyperparameter optimization. The presented methods offer deeper insight into the impact of the imputation technique and the chosen meta-measure representation on model performance. Furthermore, we integrate the Elo-based predictive power (EPP) meta-score into the model performance benchmark for the OpenML repository. EPP provides a probabilistic interpretation of model performance differences, facilitating model evaluation for non-experts.

The second part of the thesis introduces methodologies for incorporating domain knowledge into Model Building and Data Exploration. A Consolidated Learning methodology demonstrates how domain-specific hyperparameters can enhance model performance compared to generic ones. Conversely, Semantic Feature Net (SeFNet) proposes enriching understanding and interactions with domain experts by integrating ontologies into Data Exploration.

The presented results and methods advance the AutoDS field comprehensively, addressing all four subfields. This thesis is of significant research importance as user trust building in AutoDS systems has been largely overlooked, with the focus primarily on well-defined problems such as model selection. This dissertation aligns with the new

paradigm of human-centered AutoDS.

Keywords: automation, machine learning, Automated Data Science (AutoDS), human-centered AutoDS, trustworthy AutoDS

Streszczenie

Wraz z rosnącym zapotrzebowaniem na modele predykcyjne, wzrosła potrzeba automatyzacji tradycyjnych, zasobochłonnych zadań uczenia maszynowego. Automated Data Science (AutoDS) ma na celu usprawnienie tego procesu, czyniąc zaawansowane algorytmy bardziej dostępnymi i pomagając ekspertom w złożonych aspektach generowania procesów. AutoDS stoi jednak przed poważnymi wyzwaniami w zakresie opracowywania innowacyjnych metod eksploracji danych, inżynierii danych, tworzenia modeli i eksploatacji. Oprócz tworzenia nowych algorytmów lub frameworków, istnieje kluczowa konieczność budowania zaufania użytkowników do systemu automatyzacji.

Niniejsza rozprawa dotyczy zwiększenia zaufania do systemów AutoDS z dwóch perspektyw. Pierwsza z nich obejmuje wyjaśnienie i rozszerzenie oceny etapów tworzenia pipeline'u, podczas gdy druga obejmuje włączenie wiedzy dziedzinowej do tworzenia modeli. Obie kwestie są często poruszane przez użytkowników AutoDS.

W pierwszej części rozprawy podejmujemy wyzwanie rozszerzenia oceny etapów AutoDS, w szczególności w dziedzinie inżynierii danych, budowania modeli i eksploatacji. Przedstawiliśmy w niej analizę porównawczą technik imputacji. Dodatkowo zaprezentowano metodologię wykorzystania technik eXplainable Artificial Intelligence (XAI) w celu poprawy walidacji meta-funkcji w meta-modelach do optymalizacji hiperparametrów. Przedstawione metody oferują głębszy wgląd w wpływ techniki imputacji i wybranej reprezentacji meta-miary na wydajność modelu. Ponadto, zintegrowaliśmy meta-miarę Elo-based predictive power (EPP) w benchmark wydajności modeli dla repozytorium OpenML. EPP zapewnia probabilistyczną interpretację różnic w wydajności modelu, ułatwiając ocenę modelu osobom niebędącym ekspertami.

Druga część rozprawy wprowadza metodologie włączania wiedzy dziedzinowej do budowania modeli i eksploracji danych. Metodologia Consolidated Learning pokazuje, w jaki sposób hiperparametry specyficzne dla domeny mogą poprawić wydajność modelu w porównaniu z hiperparametrami ogólnymi. Z kolei Semantic Feature Net (SeFNet) proponuje wzbogacenie zrozumienia i interakcji z ekspertami dziedzinowymi poprzez integrację ontologii z eksploracją danych.

Przedstawione wyniki i metody kompleksowo rozwijają dziedzinę AutoDS, odnosząc się do wszystkich czterech poddziedzin. Ma to duże znaczenie badawcze, ponieważ bu-

dowanie zaufania użytkowników w systemach AutoDS zostało w dużej mierze pominięte, a skupiano się głównie na dobrze zdefiniowanych problemach, takich jak wybór modelu. Niniejsza rozprawa wpisuje się w nowy paradygmat AutoDS skoncentrowanego na człowieku.

Słowa kluczowe: automatyzacja, uczenie maszynowe, Automated Data Science (AutoDS), Human-centered AutoDS, AutoDS godne zaufania