AutoML - Projekt 2

Szymon Kiełtyka, Ryszard Czarnecki, Antoni Rakowski

26 stycznia 2026

1 Cel projektu

Celem było stworzenie prostego systemu automatycznego uczenia maszynowego do klasyfikacji binarnej, który miał spełniać poniższe założenia:

- osiadać portfolio zawierające maksymalnie 50 konfiguracji modeli.
- Potrafić wybrać najlepszy model (lub modele) na podstawie dostarczonych danych treningowych (X_train, y_train).
- Umożliwiać wykonanie ensemblingu (łączenia predykcji) z wykorzystaniem do 5 modeli.
- Być w pełni powtarzalny i możliwy do wykonania na dowolnym zbiorze danych przeznaczonym do klasyfikacji binarnej.

2 Portfolio modeli

2.1 Zewnętrzny screening

Portfolio modeli zostało stworzone na podstawie zewnętrznego screeningu, do którego użyto danych zawartych w MementoML. Ten zbiór danych zawiera wyniki trenowania modeli z różnymi konfiguracjami w języku R dla 7 algorytmów:

- catboost
- gbm
- glmnet
- kknn
- randomforest
- ranger
- xgboost

2.2 Wybór najlepszych modeli

W celu określenia optymalnej liczby konfiguracji dla danego modelu, przeprowadzono porównanie efektywności danych modeli, które można zobaczyć w poniższej tabeli:

Model	Średnie AUC
xgboost	0.9147
randomForest	0.9120
catboost	0.9093
ranger	0.9029
gbm	0.8726
glmnet	0.8654
kknn	0.8589

Tabela 1: Porównanie jakości predykcji modeli

Na podstawie wyników porównania efektywności modeli, do naszego portfolio zostanie dodanych po 10 konfiguracji modeli agtboost, xgboost i ranger, oraz po 5 konfiguracji modeli randomForest, gbm, kknn i svm. Konfiguracje te zostaną wybrane na podstawie najlepszego średniego AUC.

2.3 Zmiana nazw parametrów

Gdyż wyliczenia w MementoML zostały przeprowadzone w języku R, należy przekonwertować pramtery danych modeli na ich odpowiedniki w języku Python. Dokładne zmiany przedstawione są w poniższej tabeli:

Algorytm	**R**	**Parametr R**	**Python**	**Parametr Python**
XGBoost	`xgboost`	nrounds eta	`xgboost`	n_estimators learning_rate
Ranger	`ranger`	num.trees min.node.size	`RandomForest`	n_estimators min_samples_leaf
Random Forest	`randomForest`	ntree nodesize replace	`RandomForest`	n_estimators min_samples_leaf bootstrap
GBM	`gbm`	n.trees shrinkage interaction.depth n.minobsinnode bag.fraction	`LGBMClassifier`	n_estimators learning_rate max_depth min_samples_leaf subsample
k-NN	`kknn`	k distance	`KNeighbors`	n_neighbors p
ElasticNet	`glmnet`	alpha lambda	`LogisticRegression z penalty='elasticnet'`	l1_ratio C (jako $1/\lambda$)

Tabela 2: Porównanie parametrów między pakietami R a implementacjami w Python

Do modeli które mają elementy losowe dodano również parametr random_state=42

3 Działanie modelu

3.1 Wczytywanie portfolio

Podczas inicjacji klasy naszego systemu, wczytywane są konfiguracje modeli z pliku selected_models.json

3.2 Preprocessing

W początkowej części działania metody fit(), nasz system wykonuje podstawowy preprocessing. Usuwane są wtedy braki danych za pomocą SimpleImputer(), dla zmiennych liczbowych wykonywana jest standaryzacja za pomocą MinMaxScaler(), a dla zmiennych kategorycznych one-hot-encoding

3.3 Wybór najlepszych modeli

W kolejnej części działania metody fit(), nasz system wykonuje 5-krotna waldiację krzyżową dla każdej konfiguracji modelu z portfolio przy użyciu funkcji cross_val_score() i oblicza dla każdej konfiguracji średnią wartość AUC.

3.4 Ensembling

Po obliczeniu śreniego AUC dla każdej konfiguracji, nasz system wykonuje ensembling 5 najlepszych konfiguracji, za pomocą VotingClassifier() z głosowaniem miękkim. Finalny model trenowany jest na całym zbiorze danych treningowych.

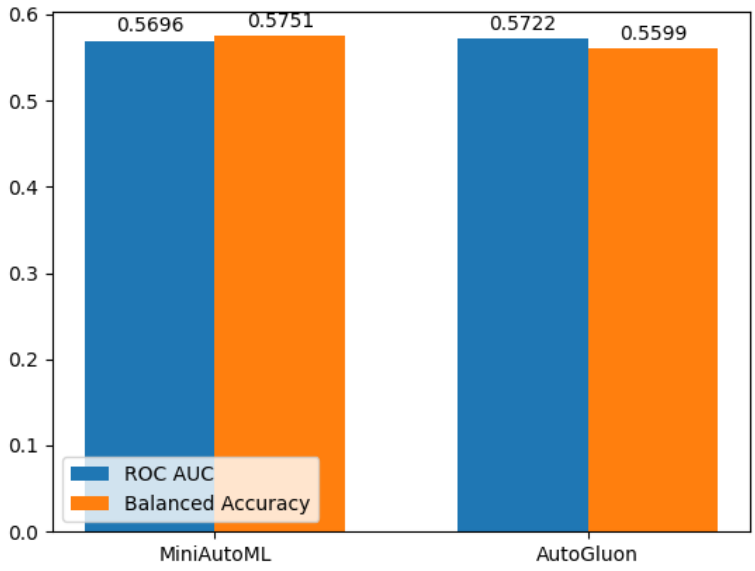
4 Wnioski

4.1 Czas działania

Ponieważ do portfolio dodawane były konfiguracje modeli, które miały najelpszy średni wynik AUC, są to w większości bardzo złożone modele, które wymagają dużej mocy obliczeniowej, zatem czas działania naszego systemu jest znacznie dłuższy, niż np. systemu AutoGluon.

4.2 Jakość predykcji

Dla przykładowego udostępnionego zbioru danych, jakość predykcji naszego systemu jest zbliżona do jakości predykcji systemu AutoGluon, co można zobaczyć na poniższym wykresie:



Rysunek 1: Porównanie jakości predykcji

5 Literatura

[Kretowicz and Biecek, 2020] Kretowicz, W. and Biecek, P. (2020). Mementoml: Performance of selected machine learning algorithm configurations on openml100 datasets.