

# Introduction\_caret

Thomas Servant

06/12/2020

## Introduction du package CARET

Le package CARET (Classification And REgression Training) contient des fonctions permettant de rationaliser le processus de formation des modèles pour les problèmes complexes de régression et de classification.

Pour installer caret il faut utiliser :

```
install.packages("caret", dependencies = c("Depends", "Suggests"))
```

Si l'utilisation d'autres paquets est nécessaire, une invite de commande apparaîtra pour les installer.

Les ressources de CARET sont disponibles a <https://topepo.github.io/caret/> (<https://topepo.github.io/caret/>).

CARET a plusieurs fonctions qui tentent de rationaliser le processus de construction et d'évaluation des modèles, ainsi que la sélection des caractéristiques et d'autre techniques.

---

Un de ces principaux outils est la fonction `train` qui peut être utilisé pour :

- \* Evaluer les effets d'un model
- \* Choisir le model le plus optimal
- \* Estimer la performance d'un model selon un set d'entraînement

---

Il y a des options pour customiser a peu près toutes les étapes du process. Nous allons ici utiliser les data Sonar de **mlbench**.

Ce dataset contient 208 point de donnée collecté a l'aide de 60 unité de prédiction. Le but est prédire les deux classes `M` pour les cylindres de metal et `R` pour les pierres.

Premièrement nous allons diviser les data en deux groupes : un set d'entraînement et un set de test. Pour cela nous utiliserons la fonction `createDataPartition` .

```

library(ggplot2)
library(lattice)
library(caret)
library(mlbench)

data(Sonar)

set.seed(107)
inTrain <- createDataPartition(
  y = Sonar$Class,
  ## Les données sur les résultats sont nécessaires
  p = .75,
  ## Tle pourcentage de data
  ## dans le set d'entraînement
  list = FALSE
)
## Le format du résultat

## Le résultat est un set d'entier pour les lignes du Sonar
## cela fait partie du set d'entraînement
str(inTrain)
#> int [1:157, 1] 1 2 3 4 5 7 10 11 12 13 ...
#> - attr(*, "dimnames")=List of 2
#> ..$ : NULL
#> ..$ : chr "Resample1"

```

Par défaut, `createDataPartition` crée une répartition des données de façon aléatoire.

```

training <- Sonar[ inTrain,]
testing  <- Sonar[-inTrain,]

nrow(training)
#> [1] 157
nrow(testing)
#> [1] 51

```

Pour régler le modèle en utilisant l'algorithme au-dessus, la fonction `train` peut être utilisée.

Ici, un modèle partiel d'analyse discriminante des moindres carrés sera accordé sur le nombre de composantes PLS qui devraient être retenues.

La syntaxe est la suivante :

```

plsFit <- train(
  Class ~ .,
  data = training,
  method = "pls",
  ## centre et adapte les unités de prédiction pour l'entraînement
  preProc = c("center", "scale")
)

```

Il est possible donc de modifier les valeurs candidates :

`train` permet de générer un set de paramètres `tuneLength` contrôle combien d'arguments sont contrôlés `tuneGrid` est utilisé quand des valeurs spécifiques sont requises.

```
plsFit <- train(  
  Class ~ .,  
  data = training,  
  method = "pls",  
  preProc = c("center", "scale"),  
  ## added:  
  tuneLength = 15  
)
```

Pour modifier la repartition des données on peut utiliser `trainControl`. la fonction `method` controle le type de données. La méthode par défaut est "boost" mais ici nous utiliserons la méthode "repeatdvcv".

```
ctrl <- trainControl(method = "repeatedcv", repeats = 3)  
  
plsFit <- train(  
  Class ~ .,  
  data = training,  
  method = "pls",  
  preProc = c("center", "scale"),  
  tuneLength = 15,  
  ## added:  
  trControl = ctrl  
)
```

Finalement, pour choisir différentes méthodes de calcul de performance on peut ajouter des arguments a `trainControl`. `summaryFunction` est utilisé pour afficher une estimation du calcul de la performance. `classProbs = TRUE` est utilisé pour inclure les calculs : `defaultSummary` et `twoClassSummary`.

Enfin, la fonction choisira selon les meilleures résultat quel paramètre garder.

```

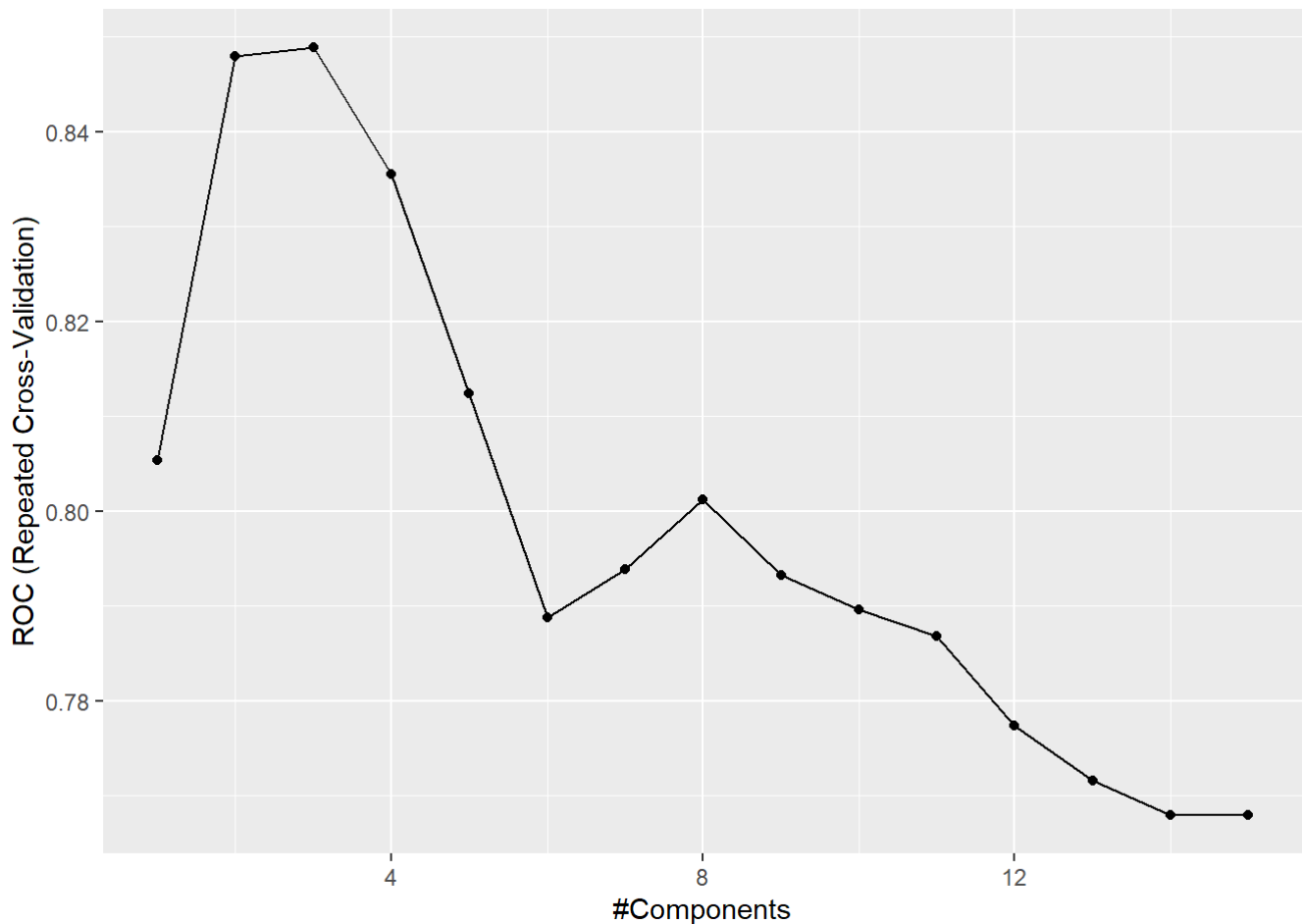
ctrl <- trainControl(
  method = "repeatedcv",
  repeats = 3,
  classProbs = TRUE,
  summaryFunction = twoClassSummary
)

set.seed(123)
plsFit <- train(
  Class ~ .,
  data = training,
  method = "pls",
  preProc = c("center", "scale"),
  tuneLength = 15,
  trControl = ctrl,
  metric = "ROC"
)
plsFit
#> Moindre carrés
#>
#> 157 samples
#> 60 predictor
#> 2 classes: 'M', 'R'
#>
#>
#>   ncomp  ROC    Sens  Spec
#>   1     0.805 0.726 0.690
#>   2     0.848 0.750 0.801
#>   3     0.849 0.764 0.748
#>   4     0.836 0.765 0.736
#>   5     0.812 0.748 0.755
#>   6     0.789 0.724 0.699
#>   7     0.794 0.744 0.689
#>   8     0.801 0.739 0.698
#>   9     0.793 0.758 0.677
#>  10     0.790 0.741 0.690
#>  11     0.787 0.742 0.710
#>  12     0.777 0.737 0.715
#>  13     0.772 0.738 0.700
#>  14     0.768 0.718 0.690
#>  15     0.768 0.715 0.690

```

L'output de cette grille est une moyenne des estimation de performance.

```
ggplot(plsFit)
```



## Visualisation

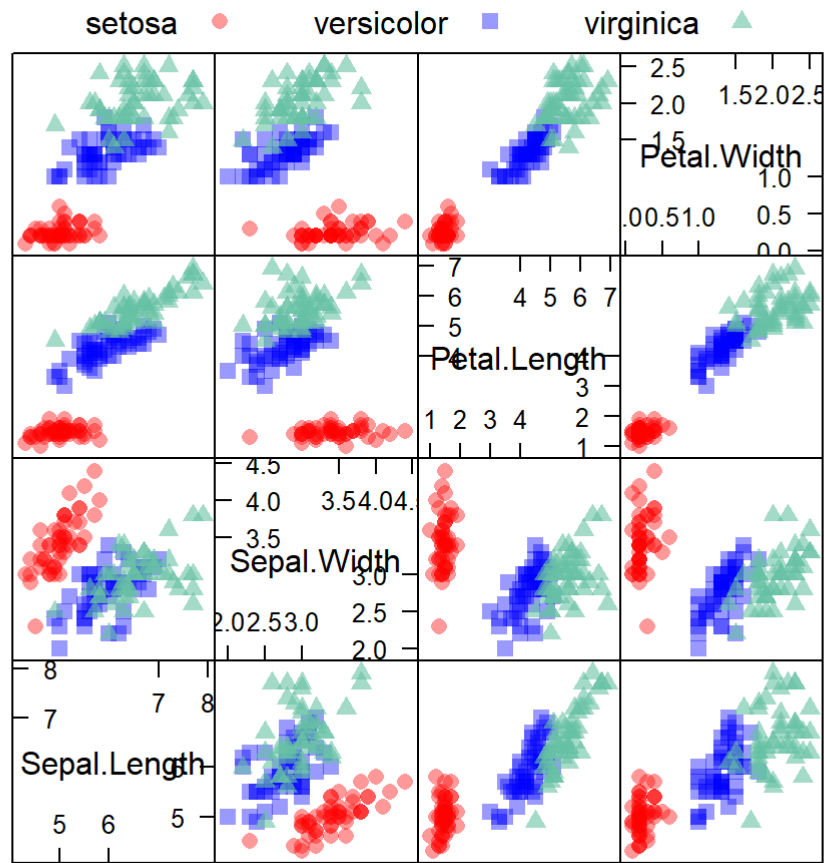
La fonction plot est un wrapper pour différents "lattice plots" pour visualiser les données. Par exemple, les figures suivantes montrent le tracé par défaut des résultats continus générés à l'aide de la featurePlot fonction.

Pour les ensembles de données de classification, les iris données sont utilisées à des fins d'illustration.

```
str(iris)
```

```
## 'data.frame': 150 obs. of 5 variables:
## $ Sepal.Length: num 5.1 4.9 4.7 4.6 5 5.4 4.6 5 4.4 4.9 ...
## $ Sepal.Width : num 3.5 3 3.2 3.1 3.6 3.9 3.4 3.4 2.9 3.1 ...
## $ Petal.Length: num 1.4 1.4 1.3 1.5 1.4 1.7 1.4 1.5 1.4 1.5 ...
## $ Petal.Width : num 0.2 0.2 0.2 0.2 0.2 0.4 0.3 0.2 0.2 0.1 ...
## $ Species : Factor w/ 3 levels "setosa","versicolor",...: 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
```

## Scatterplot Matrix

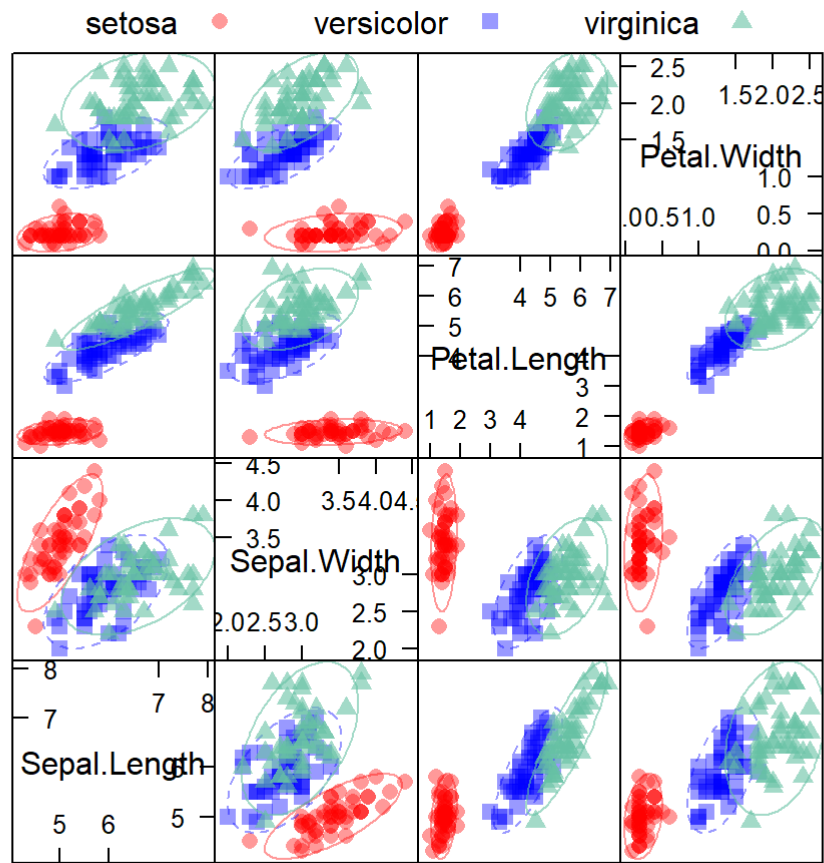


Scatter Plot Matrix

## Scatterplot Matrix avec Ellipses

```
featurePlot(x = iris[, 1:4],
            y = iris$Species,
            plot = "ellipse",

            auto.key = list(columns = 3))
```

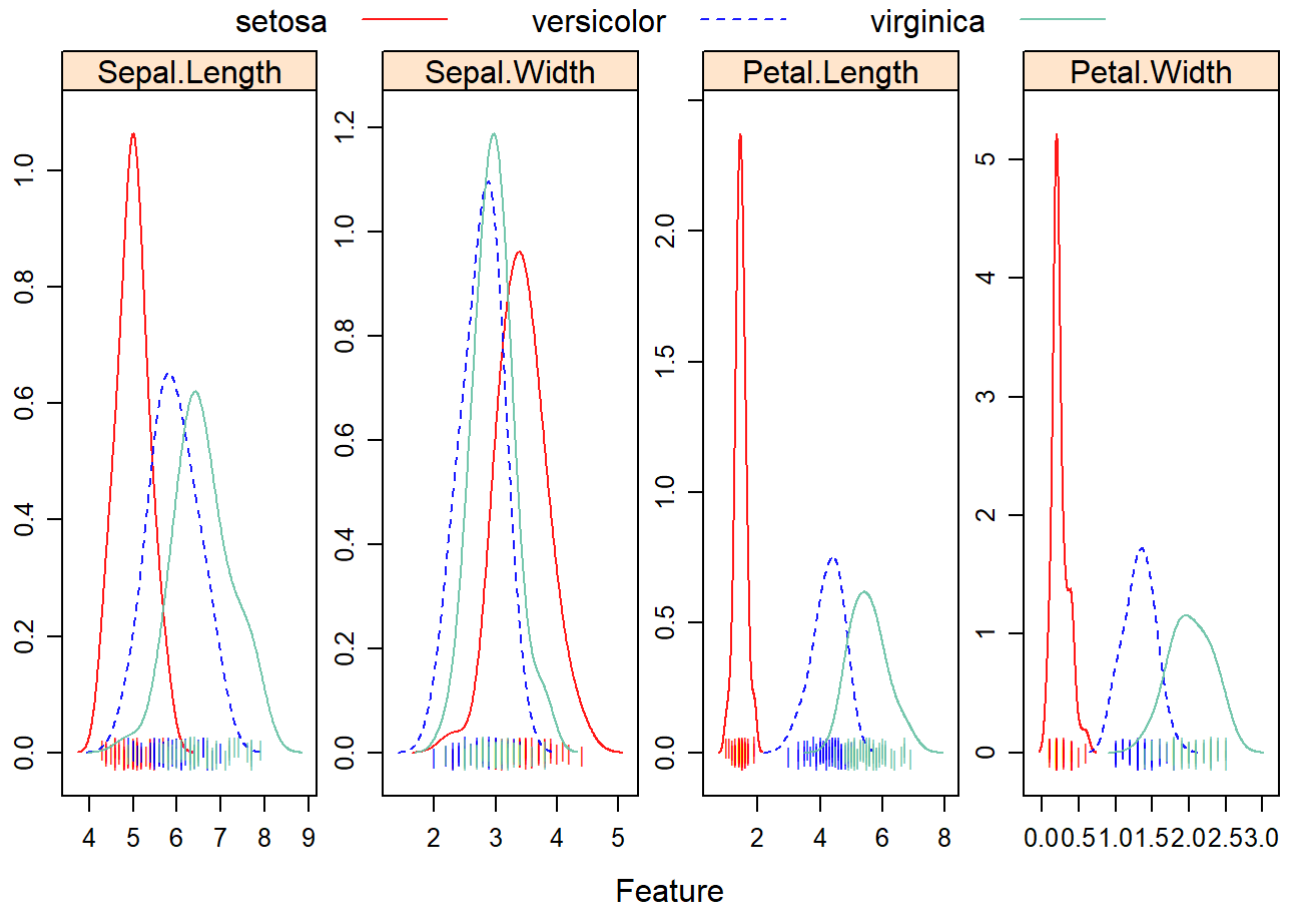


Scatter Plot Matrix

## ## Overlaid Density Plots

```
transparentTheme(trans = .9)
featurePlot(x = iris[, 1:4],
            y = iris$Species,
            plot = "density",

            scales = list(x = list(relation="free"),
                           y = list(relation="free")),
            adjust = 1.5,
            pch = "|",
            layout = c(4, 1),
            auto.key = list(columns = 3))
```

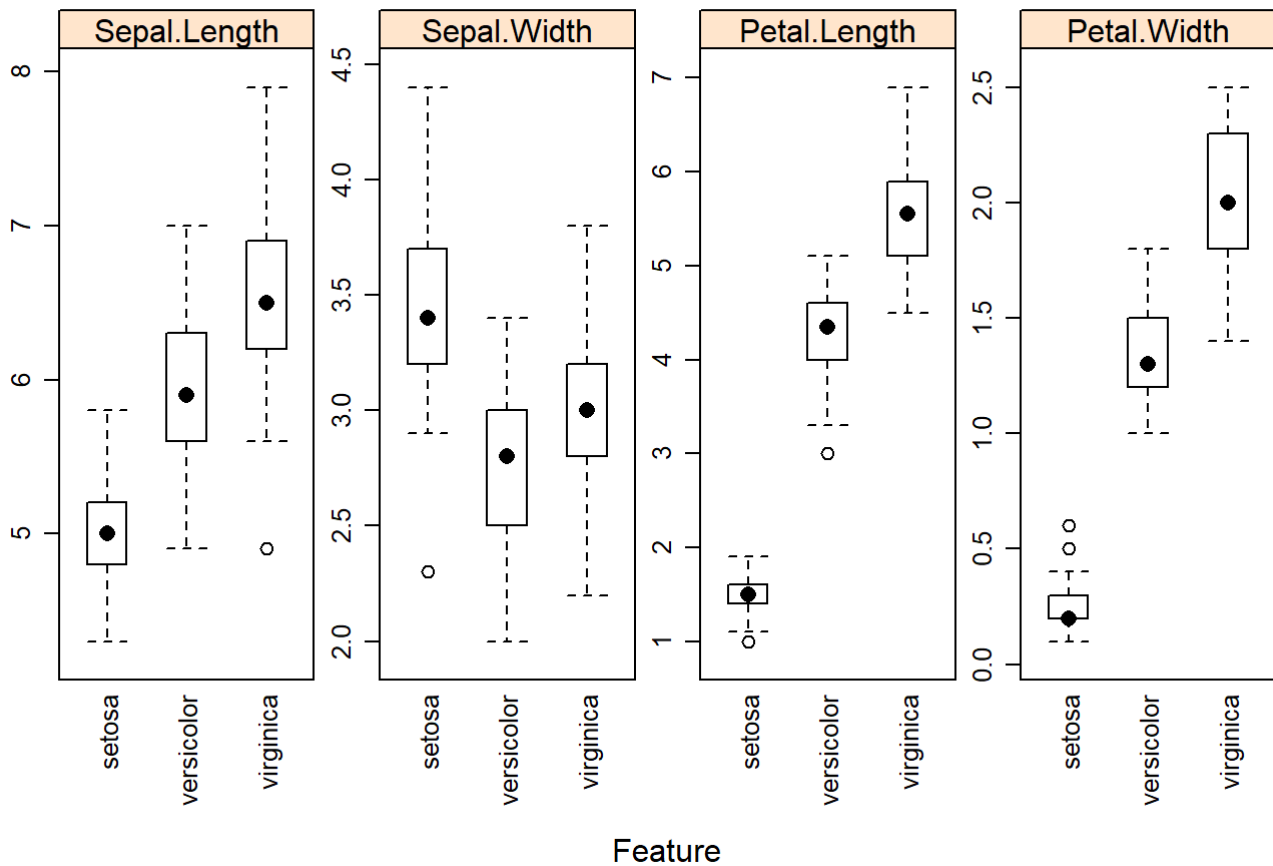


## Box Plots

```
featurePlot(x = iris[, 1:4],
            y = iris$Species,
            plot = "box",

            scales = list(y = list(relation="free"),
                          x = list(rot = 90)),
            layout = c(4,1 ),
            auto.key = list(columns = 2))
```





## ## Scatter Plots

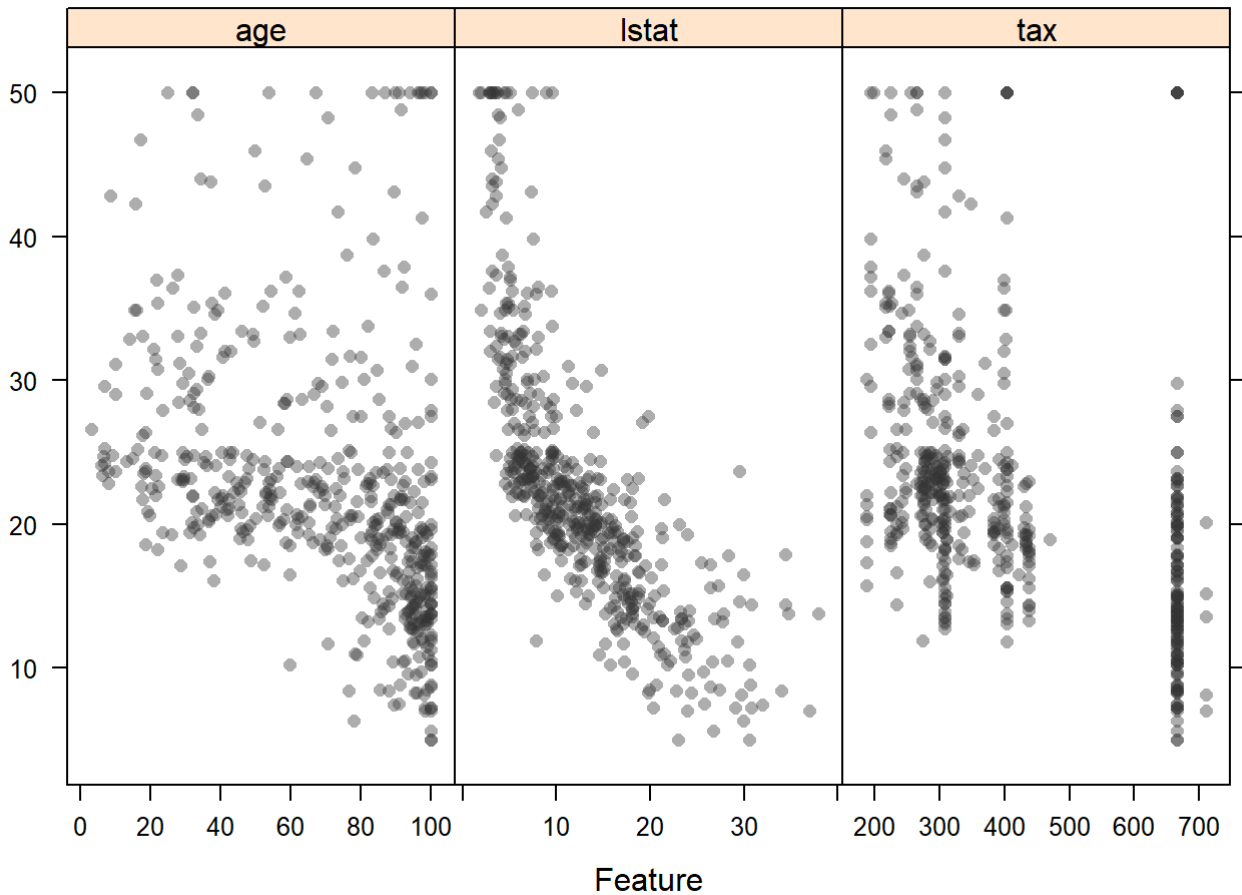
```
#install.packages("mlbench")
library(mlbench)
data(BostonHousing)
regVar <- c("age", "lstat", "tax")
str(BostonHousing[, regVar])
```

```
## 'data.frame':  506 obs. of  3 variables:
## $ age : num  65.2 78.9 61.1 45.8 54.2 58.7 66.6 96.1 100 85.9 ...
## $ lstat: num  4.98 9.14 4.03 2.94 5.33 ...
## $ tax : num  296 242 242 222 222 222 311 311 311 311 ...
```

Lorsque les prédictions sont continues, featurePlot peut être utilisé pour créer des nuages de points qui permettront avec le résultat de pouvoir faire des prédictions.

Par exemple:

```
theme1 <- trellis.par.get()
theme1$plot.symbol$col = rgb(.2, .2, .2, .4)
theme1$plot.symbol$pch = 16
theme1$plot.line$col = rgb(1, 0, 0, .7)
theme1$plot.line$lwd <- 2
trellis.par.set(theme1)
featurePlot(x = BostonHousing[, regVar],
            y = BostonHousing$medv,
            plot = "scatter",
            layout = c(3, 1))
```



Notez que les échelles de l'axe des x sont différentes. La fonction utilise automatiquement `scale = list` (`y = list` (relation = "free")) afin que vous n'ayez pas à l'ajouter. On peut également passer des options à la fonction `treillis xyplot`. Par exemple, nous pouvons ajouter un nuage de points plus lisse en passant de nouvelles options :

```
featurePlot(x = BostonHousing[, regVar],
            y = BostonHousing$medv,
            plot = "scatter",
            type = c("p", "smooth"),
            span = .5,
            layout = c(3, 1))
```

