

Paquete **caret**

Guía Rápida

Especificando el Modelo

Posibles sintaxis para especificar las variables en el modelo:

```
train(y ~ x1 + x2, data = dat, ...)  
train(x = predictor_df, y = outcome_vector, ...)  
train(recipe_object, data = dat, ...)
```

- **rfe**, **sbef**, **gafs**, y **safs** solo tienen el interfaz **x/y**.

- El método para la formula **train** creará **siempre** variables dummy

- El interfaz **x/y** de **train** no creará variables dummy (pero la función del modelo representado podría hacerlo).

Recuerda:

- Tener nombres en las columnas de tus datos.
- Usar factores para las variables objetivo en los modelos de clasificación (no usar 0/1 o enteros).
- Tener nombres de R válidos para los niveles de las clases (no "0"/"1")
- Fijar una semilla aleatoria antes de llamar a la función **train** repetidamente para obtener las mismas muestras en las diferentes llamadas.
- Usar la opción **na.action = na.pass** de **train** si vas a imputar valores faltantes. También, usa esta opción cuando vayas a predecir nuevos datos que contengan faltantes.

Para pasar opciones a la función del modelo, se puede hacer a través de **train** via las *elipses*:

```
train(y ~ ., data = dat, method = "rf",  
      # options to `randomForest`:  
      importance = TRUE)
```

Procesamiento en Paralelo

Se usa el paquete **foreach** para ejecutar modelos en paralelo. El código de **train** no cambia pero se tiene que llamar al "do" primero.

# en MacOS o Linux	# en Windows
library(doMC)	library(doParallel)
registerDoMC(cores=4)	cl <- makeCluster(2)
	registerDoParallel(cl)

La función **parallel::detectCores** puede ayudar también.

Preprocesado

Se pueden aplicar transformaciones, filtros y otras operaciones a las variables *predictoras* con la opción **preProc**.

```
train(, preProc = c("method1", "method2"), ...)
```

Incluye los siguientes métodos:

- **"center"**, **"scale"**, y **"range"** para normalizar.
- **"BoxCox"**, **"YeoJohnson"**, o **"expoTrans"** para transformar.
- **"knnImpute"**, **"bagImpute"**, o **"medianImpute"** para imputar.
- **"corr"**, **"nzv"**, **"zv"**, y **"conditionalX"** para filtrar.
- **"pca"**, **"ica"**, o **"spatialSign"** para transformar grupos.

train determina el orden de las operaciones: el orden en el que se declaran los métodos no importa.

El paquete **recipes** contiene una lista más extensa de operaciones de preprocesamiento.

Añadiendo Opciones

Muchas opciones de **train** se pueden especificar usando la función **trainControl**:

```
train(y ~ ., data = dat, method = "cubist",  
      trControl = trainControl(<opciones>))
```

Opciones de Remuestreo

trainControl se usa para elegir el método de remuestreo:

```
trainControl(method = <método>, <opciones>)
```

Los métodos y las opciones son:

- **"cv"** para K-iteraciones validación-cruzada (**number** define el # de iteraciones).
- **"repeatedcv"** para validación-cruzada repetida (**repeats** para el # de repeticiones).
- **"boot"** para bootstrap (**number** define las iteraciones).
- **"LGOVCV"** para dejar-grupo-fuera (**number** y **p** son opciones).
- **"LOO"** para dejar-uno-fuera validación-cruzada.
- **"oob"** para el remuestreo fuera-de-la-bolsa (solo para algunos modelos).
- **"timeslice"** para series temporales (las opciones son **initialWindow**, **horizon**, **fixedWindow**, y **skip**).

Métricas de Rendimiento

Para elegir cómo resumir un modelo, se usa de nuevo la función **trainControl**

```
trainControl(summaryFunction = <función R>,  
             classProbs = <lógico>)
```

Se pueden usar funciones de R a la medida, aunque **caret** incluye varias: **defaultSummary** (para Precisión, RMSE, etc), **twoClassSummary** (para curvas ROC), y **prSummary** (para recuperación de información). Para estas dos últimas funciones, se tiene que ajustar a TRUE la opción **classProbs**.

Búsqueda en Grid

Para conseguir que **train** determine los valores de el/los parámetro/s de ajuste, la opción **tuneLength** controla cuántos valores se evalúan **por parámetro de ajuste**.

De forma alternativa, se pueden declarar valores específicos de los parámetros de ajuste usando el argumento de **tuneGrid**:

```
grid <- expand.grid(alpha = c(0.1, 0.5, 0.9),  
                  lambda = c(0.001, 0.01))
```

```
train(x = x, y = y, method = "glmnet",  
      preProc = c("center", "scale"),  
      tuneGrid = grid)
```

Búsqueda Aleatoria

Para ajustar **train** también se pueden generar combinaciones de parámetros de ajuste de forma aleatoria sobre un rango. **tuneLength** controla el número total de combinaciones a evaluar. Para usar la búsqueda aleatoria:

```
trainControl(search = "random")
```

Submuestreos

Para un gran desbalanceo entre clases, **train** puede submuestrear los datos para balancear las clases antes de ajustar el modelo.

```
trainControl(sampling = "down")
```

Otros valores son **"up"**, **"smote"**, o **"rose"**. Los dos últimos pueden requerir la instalación de paquetes adicionales.