Question 2

1.

La première étape est d'importer le jeu de données *marks* et les librairies qu'on va utiliser :

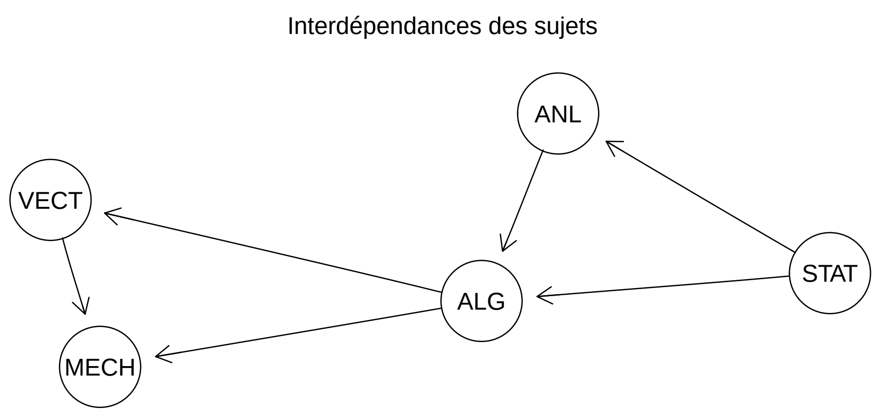
```
# import libs and data
library("bnlearn")
library("Rgraphviz")

data(marks)
dagNotes = empty.graph(names(marks))
arcs(dagNotes) = matrix(c("VECT", "MECH","ALG", "MECH",
                        "ALG", "VECT","ANL", "ALG",
                        "STAT", "ALG","STAT", "ANL"),
                        ncol = 2, byrow = TRUE, dimnames = list(c(), c("from", "to")))

vStructs = list(arcs = vstructs(dagNotes, arcs = TRUE))
```

On peut aussi visualiser la SRB associée :

```
graphviz.plot(dagNotes, highlight = vStructs, layout = "fdp", main = "Interdépendances des sujets")
```



On peut maintenant construire la matrice *notesReussite* : il est important de noter la transformation en facteur de chacune de ses colonnes. En effet, cela est nécessaire pour l'exécution de la fonction *bn.fit* ultérieurement.

```
notesReussite = as.data.frame((marks >= 45) * 1)
notesReussite[notesReussite == 1] = "R"
notesReussite[notesReussite == 0] = "E"

#to set a column as factor
toFactor <- function(x)
{
  as.factor(x)
}

#set factors
notesReussite[] = lapply(notesReussite, toFactor)
```

2.

- $f_1(x,p_1) = p_1^x \times (1-p_1)^{(1-x)}$ avec :
  $\begin{cases} p_1 = \mathbb{P}(X_{i5} = 1) \end{cases}$
- $f_2(x,y,p_2,p_3) = (p_2^x \times (1-p_2)^{(1-x)})^y \times (p_3^x \times (1-p_3)^{(1-x)})^{(1-y)}$ avec :
  $\begin{cases} p_2 = \mathbb{P}(X_{i4} = 1 | X_{i5} = 1) \\ p_3 = \mathbb{P}(X_{i4} = 1 | X_{i5} = 0) \end{cases}$
- $f_3(x,y,z,p_4,p_5,p_6,p_7) = (p_4^x \times (1-p_4)^{(1-x)})^{yz} \times (p_5^x \times (1-p_5)^{(1-x)})^{(1-y)z} \times (p_6^x \times (1-p_6)^{(1-x)})^{y(1-z)}$
  $\times\ (p_7^x \times (1-p_7)^{(1-x)})^{(1-y)(1-z)}$ avec :
  $\begin{cases} p_4 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 1, X_{i5} = 1) \\ p_5 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 0, X_{i5} = 1) \\ p_6 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 1, X_{i5} = 0) \\ p_7 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 0, X_{i5} = 0) \end{cases}$
- $f_4(x,y,p_8,p_9) = (p_8^x \times (1-p_8)^{(1-x)})^y \times (p_9^x \times (1-p_9)^{(1-x)})^{(1-y)}$ avec :
  $\begin{cases} p_8 = \mathbb{P}(X_{i2} = 1 | X_{i3} = 1) \\ p_9 = \mathbb{P}(X_{i2} = 1 | X_{i3} = 0) \end{cases}$
- $f_5(x,y,z,p_{10},p_{11},p_{12},p_{13}) = (p_{10}^x \times (1-p_{10})^{(1-x)})^{yz} \times (p_{11}^x \times (1-p_{11})^{(1-x)})^{(1-y)z}$
  $\times\ (p_{12}^x \times (1-p_{12})^{(1-x)})^{y(1-z)} \times (p_{13}^x \times (1-p_{13})^{(1-x)})^{(1-y)(1-z)}$ avec :
  $\begin{cases} p_{10} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 1, X_{i3} = 1) \\ p_{11} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 0, X_{i3} = 1) \\ p_{12} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 1, X_{i3} = 0) \\ p_{13} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 0, X_{i3} = 0) \end{cases}$

Voici maintenant l'implémentation de chacune de ces fonctions :

```r
f1 = function(x, p1)
{
  a = 0

  if((x == 0) || (x == 1))
  {
    a = p1^x * (1 - p1)^(1 - x)
  }

  return(a)
}

f2 = function(x, y, p2, p3)
{
  a = 0

  if(((x == 0) || (x == 1)) && ((y == 0) || (y == 1)))
  {
    a = f1(x, p2)^y * f1(x, p3)^(1 - y)
  }

  return(a)
}
```

```r
f3 = function(x, y, z, p4, p5, p6, p7)
{
  a = 0

  if(((x == 0) || (x == 1)) && ((y == 0) || (y == 1)) && ((z == 0) || (z == 1)))
  {
    tmp1 = f1(x, p4)^(y*z) * f1(x, p5)^((1 - y)*z)
    tmp2 = f1(x, p6)^((1 - z)*y) * f1(x, p7)^((1 - y)*(1 - z))
    a = tmp1 * tmp2
  }

  return(a)
}

f4 = function(x, y, p8, p9)
{
  return(f2(x, y, p8, p9))
}

f5 = function(x, y, z, p10, p11, p12, p13)
{
  return(f3(x, y, z, p10, p11, p12, p13))
}

# Xi = (x1, x2, ..., x5)
# P = (p1, p2, ..., p13)
L = function(Xi, P)
{
  F1 = f1(Xi[5], P[1])
  F2 = f2(Xi[4], Xi[5], P[2], P[3])
  F3 = f3(Xi[3], Xi[4], Xi[5], P[4], P[5], P[6], P[7])
  F4 = f4(Xi[2], Xi[3], P[8], P[9])
  F5 = f5(Xi[1], Xi[2], Xi[3], P[10], P[11], P[12], P[13])

  return(F1 * F2 * F3 * F4 * F5)
}
```

3.

Tout d'abord, on note que $L(X_i, p) = f_1 \times f_2 \times f_3 \times f_4 \times f_5$. Par conséquent, le maximum de vraisemblance s'écrit :

$$
\begin{aligned}
p* &= argmin \prod_{i=1}^{n} L(X_i, p) \\
&= argmin \prod_{i=1}^{n} f_1 \times f_2 \times f_3 \times f_4 \times f_5 \\
&= argmin \ln(\prod_{i=1}^{n} f_1 \times f_2 \times f_3 \times f_4 \times f_5) \\
&= argmin \sum_{i=1}^{n} [\ln(f_1) + \ln(f_2) + \ln(f_3) + \ln(f_4) + \ln(f_5)]
\end{aligned}
$$

$$p* = argmin \sum_{i=1}^{n} \ln(f_1) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_2) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_3) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_4) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_5) \tag{1}$$

où :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} \ln(f_1) = \sum_{i=1}^{n} [x_{i5} \ln(p1) + (1 - x_{i5}) \ln(1 - p_1)] \\ \sum_{i=1}^{n} \ln(f_2) = \sum_{i=1}^{n} [x_{i4}x_{i5} \ln(p2) + (1 - x_{i4})x_{i5} \ln(1 - p_2) + x_{i4}(1 - x_{i5}) \ln(p3) + (1 - x_{i4})(1 - x_{i5}) \ln(1 - p3)] \\ \sum_{i=1}^{n} \ln(f_3) = \sum_{i=1}^{n} [x_{i3}x_{i4}x_{i5} \ln(p4) + (1 - x_{i3})x_{i4}x_{i5} \ln(1 - p_4) + x_{i3}(1 - x_{i4})x_{i5} \ln(p5) + (1 - x_{i3})(1 - x_{i4})x_{i5} \ln(1 - p5) \\ +x_{i3}x_{i4}(1 - x_{i5}) \ln(p6) + (1 - x_{i3})x_{i4}(1 - x_{i5}) \ln(1 - p6) + x_{i3}(1 - x_{i4})(1 - x_{i5}) \ln(p7) + (1 - x_{i3})(1 - x_{i4})(1 - x_{i5}) \\ \ln(1 - p7)] \\ \dots \end{cases}$$

Pour trouver $p*$, il faut calculer le gradient de l'équation (1) par rapport au vecteur de paramètres $p = (p_1, \dots, p_{13})$ et voir quand est-ce qu'il s'annule. Pour simplifier le calcul de toutes les dérivées partielles, soit la fonction $L' = \sum_{i=1}^{n} \ln(f_1) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_2) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_3) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_4) + \sum_{i=1}^{n} \ln(f_5)$ et on peut remarquer que $\forall j \in \{1 \dots 13\}$, la dérivée partielle de L' par rapport au paramètre p_j peut s'écrire :

$$\frac{\partial L'}{\partial p_j} = \frac{\partial(\sum_{i=1}^{n}[a_{ik} \ln(p_j) + b_{ik} \ln(1 - p_j)])}{\partial p_j} \tag{2}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j} - \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{1 - p_j} \tag{3}$$

où a_{ik} et b_{ik} sont des entiers dépendants uniquement des paramètres $(x_{i1}, \dots, x_{i5})$ provenant de la fonction f_k et d'où p_j est aussi l'un des paramètres. En effet, nous arrivons à cette expression car L' s'écrit comme une somme de différentes sommes de fonctions $\ln(f_k)$ pour $\forall k \in \{1 \dots 5\}$. Bien plus, comme nous l'avons vu, $\forall k \in \{1 \dots 5\}$ la somme suivante $\sum_{i=1}^{n} \ln(f_k)$ s'exprime aussi comme une somme de différentes expressions $\sum_{i=1}^{n}[a_{ik} \ln(p_j) + b_{ik} \ln(1 - p_j)]$ où les p_j sont les paramètres de la fonction f_k et a_{ik}, b_{ik} sont des variables dépendantes uniquements des paramètres $(x_{i1}, \dots, x_{i5})$ de f_k. Par conséquent, en prenant en compte les règles de dérivation de la somme, la dérivée partielle de L' par rapport au paramètre p_j est de la forme de l'équation (3). Essayons maintenant de montrer quand est-ce l'équation (3) s'annule :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j} - \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{1 - p_j} &= 0 \\ \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j} &= \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{1 - p_j} \\ \frac{1 - p_j}{p_j} \sum_{i=1}^{n} a_{ik} &= \sum_{i=1}^{n} b_{ik} \\ \frac{1 - p_j}{p_j} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} \\ \frac{1}{p_j} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} + 1 \\ p_j &= \frac{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik} + \sum_{i=1}^{n} b_{ik}} \end{aligned}$$

Pour achever la démonstration, il faut montrer que les points trouvés $(p_1, \dots, p_{13})$ donnent bien le minimum de la fonction $L(X_i, p)$. Pour cela, on peut calculer la hessienne de la fonction $L(X_i, p)$ et montrer qu'elle est définie positive aux points p_j trouvés. Tout d'abord, calculons la dérivée partielle seconde par rapport à p_j :

$$\frac{\partial^2 L'}{\partial p_j\,\partial p_j} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j^2} - \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{(1-p_j)^2} \tag{4}$$

Notons tout d'abord que $\forall p_j \in \{p_1, \ldots, p_{13}\}$ on a $\frac{\partial^2 L'}{\partial p_j\,\partial p_j} < 0$ (ce qui est évident). Maintenant, montrons que l'équation (4) est strictement supérieure à 0 en tout point $p_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik} + \sum_{i=1}^{n} b_{ik}}$:

$$\begin{aligned}
-\sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j^2} - \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{(1-p_j)^2} &< 0 \\
-\sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ik}}{p_j^2} &< \sum_{i=1}^{n} \frac{b_{ik}}{(1-p_j)^2} \\
-\frac{(1-p_j)^2}{p_j^2} &< \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} \\
\frac{-p_j^2 + 2p_j - 1}{p_j^2} &< \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} \\
-p_j + 2 - \frac{1}{p_j} &< p_j \times \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} \\
-2 \times \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} &< \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}\right)^2 + \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} \\
\left(\frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}\right)^2 + 3 \times \frac{\sum_{i=1}^{n} b_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}} &> 0
\end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant conclure : en effet, la matrice hessienne de la fonction $L(X_i, p)$ est de la forme suivante :

$$H(L(X_i, p))(p_1 \ldots p_{13}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L'}{\partial p_1\,\partial p_1}(p_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 L'}{\partial p_2\,\partial p_2}(p_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial^2 L'}{\partial p_{13}\,\partial p_{13}}(p_{13}) \end{bmatrix}$$

$H(L(X_i, p))(p_1 \ldots p_{13})$ est une matrice diagonale et ses valeurs propres sont donc ceux de sa diagonale. Or, sa diagonale contient que des valeurs strictement positives car on a démontré que pour $\forall p_j \in \{p_1, \ldots, p_{13}\}$ on a $\frac{\partial^2 L'}{\partial p_j\,\partial p_j}(pj) > 0$. Ainsi, ses valeurs propres sont aussi strictement positives et $H(L(X_i, p))(p_1 \ldots p_{13})$ est donc définie positivement. Par conséquent, les points trouvés $(p_1, \ldots, p_{13})$ à l'aide de la formule $p_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik} + \sum_{i=1}^{n} b_{ik}}$ fournissent bien le minimum de la fonction $L(X_i, p)$.

Pour estimer le vecteur de paramètres $p = (p_1, \ldots, p_{13})$ à l'aide de la matrice *notesReussite*, nous allons passer par deux étapes :

- la première c'est de déterminer pour chaque p_j ses sommes $\sum_{i=1}^{n} a_{ik}$ et $\sum_{i=1}^{n} b_{ik}$ à l'aide de la matrice *notesReussite*.
- lorsqu'on a obtenu la valeur de ces deux sommes, on peut appliquer la formule trouvée auparavant à l'aide du maximum de vraisemblance (i.e $p_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}}{\sum_{i=1}^{n} a_{ik} + \sum_{i=1}^{n} b_{ik}}$) afin d'estimer au mieux p_j.

Voici maintenant l'implémentation de la solution analytique sous R :

```r
maxVraisemblance = function(notesReussite)
{
  n = nrow(notesReussite)
  res = matrix(0, nrow = 13, ncol = 2)

  # compute sum(aik) and sum(bik) for each pj
  for(i in 1:n)
  {
    Xi = unlist(notesReussite[i,], use.names = FALSE)

    res[1,1] = res[1,1] + Xi[5]
    res[1,2] = res[1,2] + (1-Xi[5])

    res[2,1] = res[2,1] + Xi[4]*Xi[5]
    res[2,2] = res[2,2] + (1-Xi[4])*Xi[5]
    res[3,1] = res[3,1] + Xi[4]*(1-Xi[5])
    res[3,2] = res[3,2] + (1-Xi[4])*(1-Xi[5])

    res[4,1] = res[4,1] + Xi[3]*Xi[4]*Xi[5]
    res[4,2] = res[4,2] + (1-Xi[3])*Xi[4]*Xi[5]
    res[5,1] = res[5,1] + Xi[3]*(1-Xi[4])*Xi[5]
    res[5,2] = res[5,2] + (1-Xi[3])*(1-Xi[4])*Xi[5]
    res[6,1] = res[6,1] + Xi[3]*Xi[4]*(1-Xi[5])
    res[6,2] = res[6,2] + (1-Xi[3])*Xi[4]*(1-Xi[5])
    res[7,1] = res[7,1] + Xi[3]*(1-Xi[4])*(1-Xi[5])
    res[7,2] = res[7,2] + (1-Xi[3])*(1-Xi[4])*(1-Xi[5])

    res[8,1] = res[8,1] + Xi[2]*Xi[3]
    res[8,2] = res[8,2] + (1-Xi[2])*Xi[3]
    res[9,1] = res[9,1] + Xi[2]*(1-Xi[3])
    res[9,2] = res[9,2] + (1-Xi[2])*(1-Xi[3])

    res[10,1] = res[10,1] + Xi[1]*Xi[2]*Xi[3]
    res[10,2] = res[10,2] + (1-Xi[1])*Xi[2]*Xi[3]
    res[11,1] = res[11,1] + Xi[1]*(1-Xi[2])*Xi[3]
    res[11,2] = res[11,2] + (1-Xi[1])*(1-Xi[2])*Xi[3]
    res[12,1] = res[12,1] + Xi[1]*Xi[2]*(1-Xi[3])
    res[12,2] = res[12,2] + (1-Xi[1])*Xi[2]*(1-Xi[3])
    res[13,1] = res[13,1] + Xi[1]*(1-Xi[2])*(1-Xi[3])
    res[13,2] = res[13,2] + (1-Xi[1])*(1-Xi[2])*(1-Xi[3])
  }

  p = c(rep(0,13))

  # compute each pj
  for(i in 1:13)
  {
    p[i] = res[i,1] / (res[i,1] + res[i,2])
  }

  return(p)
}
```

```r
# use the int version of notesReussite instead
notesReussiteInt = as.data.frame((marks >= 45) * 1)
p = maxVraisemblance(notesReussiteInt)
print(p)
```

```
##  [1] 0.3863636 0.8529412 0.5555556 0.9655172 0.8000000 0.8333333 0.4166667
##  [8] 0.7761194 0.2857143 0.5576923 0.3333333 0.3333333 0.1333333
```

Par conséquent :

$$\begin{cases} p_1 = \mathbb{P}(X_{i5} = 1) = 0.3863636 \\ p_2 = \mathbb{P}(X_{i4} = 1 | X_{i5} = 1) = 0.8529412 \\ p_3 = \mathbb{P}(X_{i4} = 1 | X_{i5} = 0) = 0.5555556 \\ p_4 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 1, X_{i5} = 1) = 0.9655172 \\ p_5 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 0, X_{i5} = 1) = 0.8000000 \\ p_6 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 1, X_{i5} = 0) = 0.8333333 \\ p_7 = \mathbb{P}(X_{i3} = 1 | X_{i4} = 0, X_{i5} = 0) = 0.4166667 \\ p_8 = \mathbb{P}(X_{i2} = 1 | X_{i3} = 1) = 0.7761194 \\ p_9 = \mathbb{P}(X_{i2} = 1 | X_{i3} = 0) = 0.2857143 \\ p_{10} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 1, X_{i3} = 1) = 0.5576923 \\ p_{11} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 0, X_{i3} = 1) = 0.3333333 \\ p_{12} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 1, X_{i3} = 0) = 0.3333333 \\ p_{13} = \mathbb{P}(X_{i1} = 1 | X_{i2} = 0, X_{i3} = 0) = 0.1333333 \end{cases}$$

4.

```r
bn.fit(dagNotes, data = notesReussite)
```

```
##
##   Bayesian network parameters
##
##   Parameters of node MECH (multinomial distribution)
##
## Conditional probability table:
##
## , , ALG = E
##
##     VECT
## MECH         E         R
##    E 0.8666667 0.6666667
##    R 0.1333333 0.3333333 p12
##        p13
## , , ALG = R
##
##     VECT
## MECH         E         R
##    E 0.6666667 0.4423077
##    R 0.3333333 0.5576923 p10
##         p11
##
##   Parameters of node VECT (multinomial distribution)
##
```

```
## Conditional probability table:
##
##      ALG
## VECT         E         R
##    E 0.7142857 0.2238806
##    R 0.2857143 0.7761194 p8
##         p9
##   Parameters of node ALG (multinomial distribution)
##
## Conditional probability table:
##
## , , STAT = E
##
##    ANL
## ALG          E          R
##   E 0.58333333 0.16666667
##   R 0.41666667 0.83333333 p6
##        p7
## , , STAT = R
##
##    ANL
## ALG          E          R
##   E 0.20000000 0.03448276
##   R 0.80000000 0.96551724 p4
##         p5
##
##   Parameters of node ANL (multinomial distribution)
##
## Conditional probability table:
##
##    STAT
## ANL         E         R
##   E 0.4444444 0.1470588
##   R 0.5555556 0.8529412 p2
##      p3
##   Parameters of node STAT (multinomial distribution)
##
## Conditional probability table:
##         E         R
## 0.6136364 0.3863636 p1
```

On remarque que nous obtenons les mêmes résultats qu'à la section 4) (voir les annotations au niveau de l'output de la faction *bn.fit*).