補題 1 とその証明 (2009/5/29)

$\mathsf{R} = (R_{i,j})_{i,j=1,\ldots,\Omega}$ が遷移率行列。これは連結性（既約性）をみたす。

連結性： R のゼロでない（正の）非対角成分を介して、$1, 2, \ldots, \Omega$ がすべて「つながっている」。正確にいうと、$i \neq j$ なる任意の $i, j = 1, \ldots, \Omega$ に対して、ある正整数 n がとれ、列 $i(0), i(1), \ldots, i(n)$ があって、$i(0) = j$, $i(n) = i$ であり、$R_{i(\ell),i(\ell-1)} > 0$ が $\ell = 1, 2, \ldots, n$ について成り立つ。

任意の正の時間間隔 $\tau > 0$ を選び固定し、

$$\mathsf{T} := \exp(\tau\mathsf{R}) \tag{1}$$

とする。成分表示は $\mathsf{T} = (T_{i,j})_{i,j=1,\ldots,\Omega}$ である。

補題 1： (i) 任意の j について、

$$\sum_{i=1}^{\Omega} T_{i,j} = 1 \tag{2}$$

が成り立つ。
(ii) 任意の i, j について $T_{i,j} > 0$ である。

<u>証明</u>：指数関数の表式 (6.7.16) を用いて、

$$\mathsf{T} = \exp(\tau\mathsf{R}) = \lim_{N\nearrow\infty} \left\{\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right\}^N \tag{3}$$

と書く。行列の積の成分表示を使って

$$\left(\left\{\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right\}^N\right)_{i,j} = \sum_{k_1=1}^{\Omega} \cdots \sum_{k_{N-1}=1}^{\Omega} \left(\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right)_{i,k_1} \left(\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right)_{k_1,k_2} \cdots \left(\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right)_{k_{N-1},j} \tag{4}$$

と書ける事に注意しておく。

まず、(i) を示す。任意の ℓ について $\sum_{k=1}^{\Omega} R_{k,\ell} = 0$ だから、

$$\sum_{k=1}^{\Omega} \left(\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right)_{k,\ell} = 1 \tag{5}$$

である。(4) に注意して、この関係を何度も使うと、

$$\sum_{i=1}^{\Omega} \left(\left\{\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\right\}^N\right)_{i,j} = 1 \tag{6}$$

が言える。(3) より、(2) がいえた。

次に (ii) を言う。N を十分に大きくとれば、任意の $k, k' = 1, \ldots, \Omega$ について $(\mathsf{I}+\tau\mathsf{R}/N)_{k,k'} > 0$。よって、(4) の和の中にある Ω^{N-1} 個の項はすべて正。その中から好きなものだけ選んでくれば、厳密な下界が得られる。

まず $i = j$ のとき。ひたすら対角項だけを拾って、

$$\left(\{\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\}^N\right)_{i,i} \geq \left(1 + \frac{\tau R_{i,i}}{N}\right)^N \tag{7}$$

が得られる。右辺は $N \nearrow \infty$ で $\exp(\tau R_{i,i}) > 0$ となるので、

$$T_{i,i} \geq \exp(\tau R_{i,i}) > 0 \tag{8}$$

が言えた。

次は $i \neq j$ のとき。連結性の条件で存在を保証された整数 n と列 $i(0), i(1), \ldots, i(n)$ をとり、$r_{i,j} := R_{i(n),i(n-1)} R_{i(n-1),i(n-2)} \cdots R_{i(1),i(0)} > 0$ とする。やはり展開 (4) の中から好きな項だけを選んでくるのだが、今回は、なるべく多く対角成分を使い必要最低限だけ非対角項を使うように、

$$\begin{aligned}\left(\{\mathsf{I} + \frac{\tau\mathsf{R}}{N}\}^N\right)_{i,j} \geq \sum_{\substack{m_0,\ldots,m_N \\ (\sum m_k = N-n)}} &\left(1 + \frac{\tau R_{i(n),i(n)}}{N}\right)^{m_n} \frac{\tau R_{i(n),i(n-1)}}{N} \left(1 + \frac{\tau R_{i(n-1),i(n-1)}}{N}\right)^{m_{n-1}} \\ &\cdots \left(1 + \frac{\tau R_{i(1),i(1)}}{N}\right)^{m_1} \frac{\tau R_{i(1),i(0)}}{N} \left(1 + \frac{\tau R_{i(0),i(0)}}{N}\right)^{m_0}\end{aligned}$$

とする。ここで、$m_0, \ldots, m_n$ は各々の対角成分を何回拾うかを表しており、和が $N - n$ になる非負の整数の組全てについてたしあげる。さらに、$r_0 := \min_i R_{i,i} < 0$ とすれば、これを

$$\begin{aligned}&\geq \frac{N!}{(N-n)!n!} \left(1 + \frac{\tau r_0}{N}\right)^{N-n} \frac{\tau^n r_{i,j}}{N^n} \\ &= \left(1 + \frac{\tau r_0}{N}\right)^{N-n} \frac{\tau^n r_{i,j}}{n!} \left(1 - \frac{1}{N}\right)\left(1 - \frac{2}{N}\right) \cdots \left(1 - \frac{n-1}{N}\right)\end{aligned} \tag{9}$$

と書き直すことができる。ここで、$N!/\{(N-n)!\,n!\}$ は、N 項のうちのどこに n 個の非対角成分をはさむかの場合の数である。$N \nearrow \infty$ とすれば、

$$T_{i,j} \geq \exp(\tau r_0) \frac{\tau^n r_{i,j}}{n!} > 0 \tag{10}$$

が得られる。 ∎