

マルコフ連鎖入門 第9回

永幡幸生
新潟大学

nagahata@eng.niigata-u.ac.jp

2021 第 1 学期

SIR モデル

SIR モデルは感染症の分野で基本的に使われる数理モデルであるが、（何も言わなければ）常微分方程式系のモデルである。同じ言葉を使う Markov 連鎖のモデルがあるが、常微分方程式モデルは Markov 連鎖のモデルの対応する物理量の期待値を与えるモデルと考えられる。

SIR モデルの名前の由来は Susceptible 感受性保持者（まだ感染していない者）Infected 感染者 Recovered 免疫保持者（感染して復帰した者）の頭文字である。

このモデルは、これらの3種類の人数の時間発展を表すモデルである。基本的には時刻0ではほぼ全ての者はSの状態、極少数のIの状態の者がいることを想定する。このIの状態の者がSの状態の者と接触して、非感染者Sを感染者Iに変化させる。またIの状態の者は感染から復帰してRの状態に変化する。一度Rになった場合は再度感染することは考えない。(Rの人間が再度Sに戻った後に、再感染するモデルも考えられるが、それはSIRSモデルと呼ばれる。)

Markov 連鎖

Markov 連鎖のモデルは連続時間 Markov 連鎖で、 S, I, R を対応する状態の者の数を表すものとしてこの3つの物理量を並べたベクトル (S, I, R) を見る。このため状態空間を

$$\mathbf{S} = \{(x, y, z); x, y, z \in \mathbb{Z}, x, y, z \geq 0, x + y + z = N\}$$

ととる。ここで $N \in \mathbb{Z}$ はパラメータで総人口に対応する量である。対応する作用素は2つのパラメータ $\beta, \gamma > 0$ を用いて

$$\begin{aligned} Lf((x, y, z)) = & \beta xy \{f((x-1, y+1, z)) - f((x, y, z))\} \\ & + \gamma y \{f((x, y-1, z+1)) - f((x, y, z))\} \end{aligned}$$

と取る。

この作用素においては、瞬間的に（理想的に）見れば、非感染者が、感染者になる時間や感染者が復帰する時間は分離でき、一つの遷移は別の時間になることを仮定している。

1 行目が非感染者が感染者になることに対応しているが、その比率はその時間における感染者数と非感染者数のそれぞれに比例している。これは（直接的、間接的はおいておくとして）感染者と非感染者が接触することにより感染するという自然な仮定からきており、接触機会が感染者数と非感染者数のそれぞれに比例していることに対応している。

2 行目が感染者が復帰することに対応するが、その比率はその時間における感染者数に比例している。これも各々の感染者が治癒して復帰していくため感染者数に比例しているのは自然な仮定である。

この講義の範囲内では、この Markov 連鎖の時間発展の様子を見ることが、平均値の時間発展が常微分方程式系

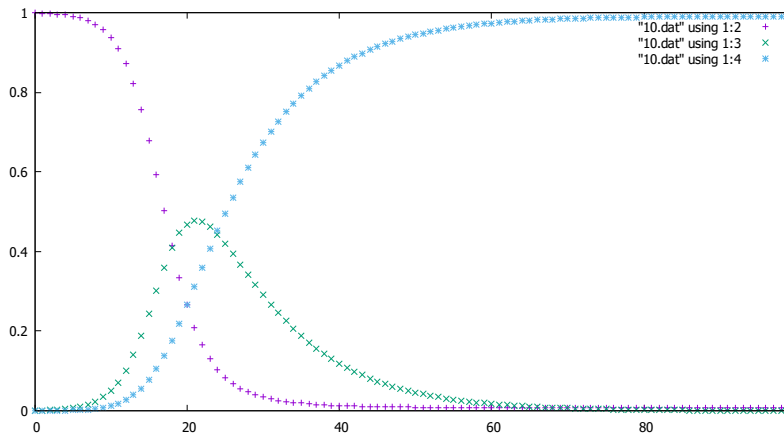
$$\begin{cases} \dot{S}(t) = -\beta S(t)I(t) \\ \dot{I}(t) = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t) \\ \dot{R}(t) = \gamma I(t) \end{cases}$$

で表されることは難しいが、キーワードである「8割削減」の8割がどこから出てきたか程度は見る事ができる。

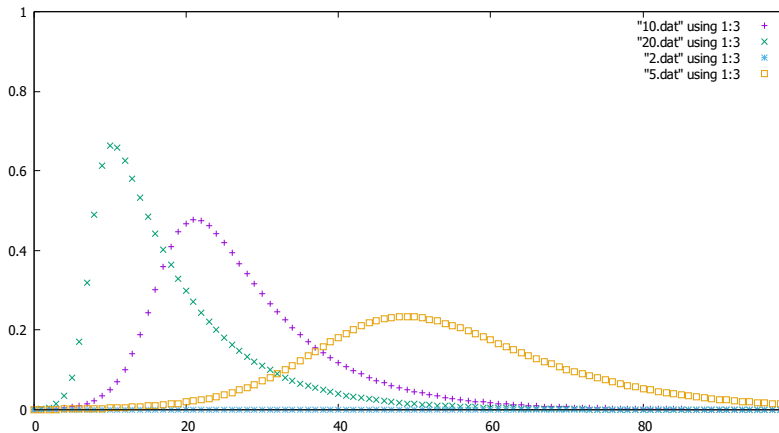
この常微分方程式系は線形ではないので解析的に解くことは難しいが、時間発展として、非感染者数を表す $S(t)$ は単調減少、感染者数を表す $I(t)$ はある時刻まで増加していきその後減少する、復帰した者の数を表す $R(t)$ は単調増加であることが、予想可能である。

また数値的に解くことは容易で、次のページのグラフは $\beta : \gamma = 5 : 1$ と取った時の $S(t), I(t), R(t)$ の相対比率をグラフにしたもの、次々ページは $I(t)$ だけを取り出し、 β を 10, 5, 2.5, 1 と変化させたもの ($\beta = 1$ のケースはほぼ 0 で良く見えていない。)

Markov 連鎖



Markov 連鎖



SIR モデルにおいて、初期条件として $S \gg I + R$ すなわち初めてこの感染症が発見され、ほとんどの人が感染していない（感染したのち復帰した者も含める）状態を考える。この条件の下でさらに時間が 0 に近い間は、作用素の 1 行目 β_{xy} を βN_y と近似してもあまり差がないと思える。

今回のコロナの件のように感染爆発を考えるケースでは、全人口の 0.1% 日本で考えればおおよそ 10 万人感染しないように政策を考える状況であればこの近似を考えることに違和感を感じない。この近似の下では I だけをみても Markov 連鎖になり、その作用素が

$$Lf(y) = \beta N_y \{f(y+1) - f(y)\} + \gamma_y \{f(y-1) - f(y)\}$$

とかけ、 βN_y , γ_y をパラメータとして持つ出生死滅過程になる。

出生死亡過程

ランダムウォークを一般化する。 S を変えずに L を

$$Lf(i) = b_i\{f(i+1) - f(i)\} + d_i\{f(i-1) - f(i)\}$$

とする。但し $d_1 = 0, b_n = 0$ でそれ以外は $b_i > 0, d_i > 0$ とする。
名前から想像されるように、(ある生物種の) 人口 (個体数) だけを
観察する。このモデル化として、(1) 増減は 1 単位ずつ (2) 増減
のおこりやすさは現在の人口に依存するこの 2 つの性質を持つ

Markov 過程はこの生成作用素 L を用いて書ける。

なお今回は $S = \{1, 2, \dots, n\}$ としたが $S = \{0, 1, 2, \dots\}$ のように
絶滅状態 0 を加えると同時に人口はいくらでも大きくなれ、絶滅
状態からは人口は増えない、すなわち $b_0 = 0$ を設定にするのが
もともとのモデル。

$\tilde{\mu} = (\tilde{\mu}_1, \dots, \tilde{\mu}_n)$ を漸化的に

$$\tilde{\mu}_1 = 1, \quad \tilde{\mu}_{x+1} = \frac{b_x}{d_{x+1}} \tilde{\mu}_x$$

とおくと明らかに L は $\tilde{\mu}$ に関して対称になる。 $Z = \sum_i \tilde{\mu}_i$ とおき $\mu = \frac{1}{Z} \tilde{\mu}$ と規格化することで確率分布 μ とする。

SIR モデルとの対応で、(総人口に対応する N は β の中に入っているものとして)

$$b_i = \beta i, \quad d_i = \gamma i$$

の場合に μ がどのようなものかを見ておく。
定義通りに $\tilde{\mu}_x$ を計算すると

$$\tilde{\mu}_x = \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^x \frac{1}{x}$$

$1/x$ の項の関係で、規格化をするのは難しいが、 n が十分大きければ $(\beta/\gamma)^x$ の部分がメインのパートになり、 $\beta/\gamma > 1$ では x が大きいところにほぼ全ての重みがあり、 $\beta/\gamma < 1$ では x が小さいところにほぼ全ての重みがある。例外的に $\beta/\gamma = 1$ では $1/x$ に比例するため $\beta/\gamma < 1$ のところと同じように x が小さいところに重みが集中する。

SIR モデルとの関係を、考えれば十分時間がたてば、状態は重みのあるところに集中していると思えるので、 $\beta/\gamma > 1$ では x が大きいところ、すなわち感染者だらけになっており、 $\beta/\gamma < 1$ では x が小さいところ、すなわち許容できる状態になっていることが予想できる。

キーワードとして出てきている「8割削減」の8割は、現状の（当時の）感染率や、治癒率（回復までにかかる日数）から推定される β, γ に対して $\beta/\gamma < 1$ を確実に成立させるための条件として出されたものであり、かなり余裕を持った（持たせるべき）値である。

この結果だけではあくまで十分時間がたてばという条件だけなので、ワクチンや特效薬を開発する時間をとれるのか、取れないのかは分からない。これを見るには、平均値の時間発展が常微分方程式で表されることをみるのが良いが、先に見た極限へ収束していく速さ（緩和時間）をみても同じようなことは分かるはずなので、スペクトルギャップを調べることに少しは意味がある。

この生成死滅過程に対応する L のスペクトルギャップの下からの評価を行うが、まず、見通しがよくなるように完全グラフ (平均場近似) に対応するような Dirichlet 形式 D_m を導入して二段階で評価を試みる。先ほどのランダムウォークの場合と同じように分散 $V[f]$ を式変形すると、

$$V[f] = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \{f(j) - f(i)\}^2 \mu_i \mu_j$$

この右辺を $D_m[f]$ と思うことにすると対応する L_m は

$$L_m f(i) = \sum_j \mu_j \{f(j) - f(i)\}$$

と書ける。

この L_m に対応する D_m ともとの D との比較をするが次のように式変形をする。

$$\begin{aligned} D_m[f] &= \sum_{i < j} \{f(j) - f(i)\}^2 \mu_i \mu_j \\ &= \sum_{i < j} \left\{ \sum_{k=i+1}^j (f(k) - f(k-1)) \sqrt{a_k} \frac{1}{\sqrt{a_k}} \right\}^2 \mu_i \mu_j \end{aligned}$$

ここで $\{a_k; k\}$ を導入したがどのようにとるかは後にしてここで意味を持つように $a_k > 0$ だけを仮定する。

Cauchy Schwarz の不等式を適用すると次のように書ける。

$$D_m[f] \leq \sum_{i < j} \mu_i \mu_j \left\{ \sum_{k=i+1}^j (f(k) - f(k-1))^2 a_k \right\} \left\{ \sum_{k=i+1}^j \frac{1}{a_k} \right\}$$

ここで $c_{i,j} = \sum_{k=i+1}^j \frac{1}{a_k}$ とおき、和の順序交換を行なうことで

$$\begin{aligned} D_m[f] &\leq \sum_{i < j} \mu_i \mu_j \left\{ \sum_{k=i+1}^j (f(k) - f(k-1))^2 a_k \right\} c_{i,j} \\ &= \sum_{k=2}^n (f(k) - f(k-1))^2 a_k \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=k}^n c_{i,j} \mu_i \mu_j \end{aligned}$$

と書ける。この式の最後に表れる和の部分は k だけに依存するので A_k と書くことにし、さらにその k に関する最大値を A と書くことにする。特に $a_k = d_k \mu_k$ とおくと

$$A_k := \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=k}^n c_{i,j} \mu_i \mu_j = \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=k}^n \sum_{l=i+1}^j \frac{1}{d_l \mu_l} \mu_i \mu_j, \quad A = \max_k A_k$$

と書ける。

上の $D_m[f]$ の右辺に $a_k = d_k \mu_k$ を代入することで

$$\begin{aligned} D_m[f] &\leq \sum_{k=2}^n (f(k) - f(k-1))^2 d_k \mu_k A_k \\ &\leq A \sum_{k=2}^n (f(k) - f(k-1))^2 d_k \mu_k = AD[f] \end{aligned}$$

と書けるので全てをあわせるとこの $1/A$ は L のスペクトルギャップの下からの評価になっている。

一方で上からの評価はスペクトルギャップの変分表現から関数 f を持ってくることにするが、次のような方針で関数を求める。
下からの評価を行った式変形では本質的に 2 回しか不等式を用いていない。順番に

(1) Cauchy Schwarz の不等式

(2) A_k をその最大値 A で置き換える

であるが、(1) が本質的で (2) は (少なくとも n に関するオーダーを評価するにあたっては) あまり効いていないと予想して f の候補を探す。(実際には (2) をうまく使う方法を出せるかは不明)

Cauchy Schwarz の不等式を用いているので等号成立条件を考えれば (定数倍を除いて)

$$(f(k) - f(k-1))\sqrt{a_k} = \frac{1}{\sqrt{a_k}}$$

を満たすことである。

定数項は意味を持たないので簡単のため $f(1) = 0$ となるものとする

$$f(k) = f(k-1) + \frac{1}{a_k} = \sum_{l=2}^k \frac{1}{d_l \mu_l}$$

と書くことができる。この関数に対して $V[f], D[f]$ を計算してみると

$$E[f] = \sum_{k=1}^n \mu_k \sum_{l=2}^k \frac{1}{d_l \mu_l}, \quad E[f^2] = \sum_{k=1}^n \mu_k \left(\sum_{l=2}^k \frac{1}{d_l \mu_l} \right)^2,$$
$$V[f] = E[f^2] - (E[f])^2, \quad D[f] = \sum_{k=2}^n \frac{1}{d_k \mu_k}$$

であるので、モデルにあわせて計算してみるしかないようである。

もう少し一般化したものが Saloff-Coste [Sal] にあるが (記号などはこちらの書き方に変えるが) さらに少し拡張したものをここにあげる。

記号の準備

状態空間 $S = \{x_1, \dots, x_n\}$ とし、生成作用素は

$Lf(x) = \sum_y C_{x,y}(f(y) - f(x))$ で与えられ、 $C_{x,y}$ は既約、さらにある確率分布 $\mu = (\mu_{x_1}, \dots, \mu_{x_n})$ に関して対称とする。

$\gamma = \gamma(x, y) = \{x_0, x_1, \dots, x_k\}$ が道 (path) であるとは

$x_0 = x, x_k = y$ かつ $C_{x_{i-1}, x_i} > 0 \ \forall 1 \leq i \leq k$ を満たすこととする。
(この k を道 γ の長さと呼ぶ。)

$\delta = \delta(x, y) = (\gamma_1, \dots, \gamma_l, a_1, \dots, a_l)$ が重み付き道であるとは

$\gamma_1, \dots, \gamma_l$ は全て道でかつ $\sum_i a_i = 1, a_i > 0, \forall 1 \leq i \leq l$ を満たすこととする。(この道 γ_i のそれぞれの長さは違って構わない。)

同じ名前重み付きの道、同じ記号 δ を用いて各 x, y を止める毎に重み付きの道 $\delta(x, y)$ を固定したものとし、これらの δ を全て集めた集合を Γ とする。

Markov 連鎖

辺の重み w は $\forall x, y \in S$ に対して $w_{x,y} = w_{y,x} > 0$ と定義されているものとする。(実際は $C_{x,y} > 0$ となる x, y の組だけ定義されていれば十分。) この重み w と道 $\gamma = (x_1, \dots, x_k)$ に対して

$$|\gamma|_w = \sum_{j=1}^k \frac{1}{w_{x_{j-1}, x_j}}$$

と定義する。

定理 (Saloff-Coste の拡張)

重み付き道 δ と辺の重み w を決める毎に

$$A = A(\delta, w) := \max\left\{\frac{w_{u,v}}{C_{u,v}\mu_v} \sum_{x,y,i} \mu_x \mu_y a_i |\gamma_i(x,y)|_w; u, v, C_{u,v} > 0\right\}$$

が定まる。但し $\sum_{x,y,i}$ は $\{x, y, i; \exists j \text{ s.t. } x_{j-1}^i = u, x_j^i = v\}$ の上での和を取っている。このとき $\lambda \geq 1/A$ である。

系

$B = \min\{A(\delta, w); \delta, w\}$ とおくと $\lambda \geq 1/B$ である。

注意

生成死滅過程で導出した A はこの定理において、 x から y への道が一步一步進むものしかないので自然な一通りだけ、その辺の重みが $(x-1, x)$ で $w_{x-1, x} = d_x \mu_x$ として与えたものに対応する。

証明

先ほどの証明と同様に δ を一つ固定すると各 x, y に対して $(x, y$ と y, x で表記上は同じように見えるが違うものであっても構わない。)

$$f(x) - f(y) = \sum_{i=1}^l \sqrt{a_i} \sqrt{a_i} \left\{ \sum_{j=1}^m (f(x_j^i) - f(x_{j-1}^i)) \sqrt{w_j} \frac{1}{\sqrt{w_j}} \right\}$$

但し $\delta = (\gamma_1, \dots, \gamma_l, a_1, \dots, a_l)$ に対して $\gamma_i = \{x_1^i, x_2^i, \dots, x_m^i\}$, $m = m_i$, $w_j = w_{x_{j-1}^i, x_j^i}$ である。Cauchy Schwarz の不等式を適用することで以下のように評価できる。

$$\begin{aligned} \{f(x) - f(y)\}^2 &\leq \sum_i a_i \sum_i a_i \left\{ \sum_{j=1}^m (f(x_j^i) - f(x_{j-1}^i)) \sqrt{w_j} \frac{1}{\sqrt{w_j}} \right\}^2 \\ &\leq \sum_i a_i \sum_{j=1}^m (f(x_j^i) - f(x_{j-1}^i))^2 w_j |\gamma_i(x, y)|_w \end{aligned}$$

前回と同じような計算をすると

$$\begin{aligned} V[f] &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} (f(y) - f(x))^2 \mu_x \mu_y \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{x,y} \mu_x \mu_y \sum_i a_i \sum_{j=1}^m (f(x_j^i) - f(x_{j-1}^i))^2 w_j |\gamma_i(x, y)|_w \\ &= \frac{1}{2} \sum_{u,v} (f(u) - f(v))^2 w_{u,v} \sum_{x,y,i} \mu_x \mu_y a_i |\gamma_i(x, y)|_w \\ &= \frac{1}{2} \sum_{u,v} (f(u) - f(v))^2 C_{u,v} \mu_v \frac{w_{u,v}}{C_{u,v} \mu_v} \sum_{x,y,i} \mu_x \mu_y a_i |\gamma_i(x, y)|_w \\ &\leq \max \left\{ \frac{w_{u,v}}{C_{u,v} \mu_v} \sum_{x,y,i} \mu_x \mu_y a_i |\gamma_i(x, y)|_w; u, v \right\} D[f] \end{aligned}$$

但し $\sum_{x,y,i}$ は $\{x, y, i; \exists j \text{ s.t. } x_{j-1}^i = u, x_j^i = v\}$ の上での和を取っている。 □

実際に出生死亡過程で (特殊な) レート b_k, d_k を代入してみた場合のスペクトルギャップを評価してみる。今までの結果をまとめると次のような計算をすればよいことが分かるが、和ではなく積分で近似して (できるものとして) 計算する。また基本的にはサイズ n に関するオーダーが出れば (上からと下からの評価のオーダーが一致すれば) 十分と思うことにする。

$$\tilde{\mu}_1 = 1, \quad \tilde{\mu}_{x+1} = \frac{b_x}{d_{x+1}} \mu_x, \quad Z = \sum_i \tilde{\mu}_i, \quad \mu = \frac{1}{Z} \tilde{\mu}$$

$$A_k = \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=k}^n \sum_{l=i+1}^j \frac{1}{d_l \mu_l} \mu_i \mu_j, \quad A = \max_k A_k$$

$$E[f] = \sum_{k=1}^n \mu_k \sum_{l=2}^k \frac{1}{d_k \mu_k}, \quad E[f^2] = \sum_{k=1}^n \mu_k \left(\sum_{l=2}^k \frac{1}{d_k \mu_k} \right)^2,$$

$$V[f] = E[f^2] - (E[f])^2, \quad D[f] = \sum_{k=2}^n \frac{1}{d_k \mu_k}, \quad C = \frac{D[f]}{V[f]}$$

$$\frac{1}{A} \leq \lambda \leq C$$

[1] $b_k = d_{k+1}$ のケース。

このとき μ が一様分布になることに注意する。

(1) $d \equiv 1$

$$A_k \cong \int_0^k \left(\int_k^n \left(\int_x^y \frac{1}{n} du \right) dy \right) dx = \frac{1}{2}(nk - k^2) \leq \frac{1}{8}n^2$$

$$E[f] \cong \int_0^n \frac{1}{n} \int_0^x n du dx = \frac{1}{2}n^2,$$

$$E[f^2] \cong \int_0^n \frac{1}{n} \left(\int_0^x n du \right)^2 dx = \frac{1}{3}n^4$$

$$V[f] \cong \frac{1}{12}n^4, \quad D[f] \cong \int_0^n n dx = n^2$$

$$8n^2 \leq \lambda \leq 12n^2$$

実際は $f(x) = \cos(\pi x/n)$ がほぼ固有関数になるため $\lambda \cong \pi^2 n^2$

(2) $d_k = k^\alpha$ ($\alpha < 0$) のケース。

$$A_k \cong \int_0^k \left(\int_k^n \left(\int_x^y \frac{1}{n} \frac{1}{u^\alpha} du \right) dy \right) dx = O(n^{-\alpha+2})$$

$$E[f] \cong \int_0^n \frac{1}{n} \int_0^x n \frac{1}{u^\alpha} du dx = O(n^{-\alpha+2}),$$

$$E[f^2] \cong \int_0^n \frac{1}{n} \left(\int_0^x n \frac{1}{u^\alpha} du \right)^2 dx = O(n^{-2\alpha+4})$$

$$V[f] \cong O(n^{-2\alpha+4}), \quad D[f] \cong \int_0^n n \frac{1}{u^\alpha} dx = O(n^{-\alpha+2})$$

$$\lambda \cong O(n^{\alpha-2})$$

[2] SIR モデルに対応する $b_k = \beta k$, $d_k = \gamma k$ のケース。
なおこのケースでは上で挙げた A はあまり良い値を与えない。

補題

$\alpha > 0$ として

$$\int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx = \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n} (1 + o(1)), \quad (n \rightarrow \infty)$$

証明

次のように評価する。

$x \in [1, n]$ であれば

$$\int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx \geq \int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{n} dx = \frac{1}{\alpha n} (e^{\alpha n} - e) = \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n} (1 + o(1))$$

である。

$1 \ll k = n - l < n$ として (後で l のオーダーを決める。)

$$\int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx = \int_1^k \frac{e^{\alpha x}}{x} dx + \int_k^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx$$

であるが、先ほどと同様に $1/x$ を区間の最大値で評価することで

$$\begin{aligned} \int_1^k \frac{e^{\alpha x}}{x} dx &\leq \int_1^k e^{\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha} (e^{\alpha k} - e) \leq \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n} \frac{n}{e^{\alpha l}} \\ \int_k^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx &\leq \int_k^n \frac{e^{\alpha x}}{k} dx = \frac{1}{\alpha k} (e^{\alpha n} - e^{\alpha k}) = \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n} \frac{n}{n-l} \left(1 - \frac{1}{e^{\alpha l}}\right) \end{aligned}$$

と評価できるが、

$$\frac{n}{e^{\alpha l}} = o(1), \quad \frac{n}{n-l} = 1 + o(1), \quad e^{-\alpha l} = o(1)$$

と取れば上からの評価も得られる。

実際 $l = \sqrt{n}$ と取れば良い。



SIR モデルの A を積分で近似して

$$\tilde{\mu}_1 = 1, \quad \tilde{\mu}_k = \frac{b_k}{d_{k+1}} \tilde{\mu}_k = \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^k \frac{1}{k}, \quad Z = \sum_{k=1}^n \tilde{\mu}_k$$

ここで $\alpha = \log \frac{\beta}{\gamma}$ すなわち $e^\alpha = \frac{\beta}{\gamma}$ とすると、

$$Z \cong \int_1^n e^{\alpha x} \frac{1}{x} dx \cong \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n}$$

$$\begin{aligned} A_k &\cong \int_1^k \left(\int_k^n \left(\int_x^y \frac{1}{Z} \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{x+y-u} \frac{1}{xy} du \right) dy \right) dx \\ &= \frac{1}{Z} \frac{1}{\gamma} \frac{1}{\alpha} \int_1^k \left(\int_k^n \{e^{\alpha y} - e^{\alpha x}\} \frac{1}{xy} dy \right) dx \\ &= \frac{1}{Z} \frac{1}{\gamma} \frac{1}{\alpha} \left\{ \log k \int_k^n e^{\alpha y} \frac{1}{y} dy - (\log n - \log k) \int_1^k e^{\alpha x} \frac{1}{x} dx \right\} \end{aligned}$$

この A_k を k の関数とみなして微分を取って最大値をとる k の候補を計算すると

$$A'_k = -\log n \frac{e^{\alpha k}}{k} + \frac{1}{k} \int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx$$

より、 $\alpha > 0$ の場合は

$$\int_1^n \frac{e^{\alpha x}}{x} dx \cong \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n}$$

を使って

$$k_0 \cong n - \frac{1}{\alpha} \log(\alpha n \log n)$$

で最大値を取っている。

この k_0 に対して

$$\log k_0 = \log\{n + O(\log(n \log n))\} = \log\{n(1 + O(\frac{\log(n \log n)}{n}))\}$$

$$= \log n + O(\frac{\log(n \log n)}{n})$$

$$n - k_0 = \frac{1}{\alpha} \log(\alpha n \log n)$$

$$e^{\alpha k_0} = \exp \alpha \{n - \frac{1}{\alpha} \log(\alpha n \log n)\} = e^{\alpha n} \frac{1}{\alpha n \log n}$$

$$e^{\alpha n} - e^{\alpha k_0} = e^{\alpha n} (1 + o(1))$$

これらを使って k_0 を先の A_k の計算に代入することで

$$A_{k_0} \cong \frac{1}{Z} \frac{1}{\gamma} \frac{1}{\alpha} \frac{e^{\alpha n}}{\alpha n} \log n \times (1 + o(1)) = \frac{1}{\gamma \alpha} \log n \times (1 + o(1))$$

と $\log n$ のオーダーが出てくる。

Markov 連鎖

定理 (Saloff-Coste の拡張) に戻って特別な道 (重み) を取ることでスペクトルギャップを評価する A としてより良い値を出す。
(A に関して上からの評価を与える。)

この方法 (道の取り方) は本質的に $[Ka]$ による。 $[Ka]$ では $b_k = \beta$, $d_k = \gamma$ の非対称ランダムウォークの時の適用例として挙げられたもの)

$0 < \delta < \alpha$ として $w_{k-1,k} = e^{\delta k}$ とする。

このとき $x < y$ に対して

$$\gamma_{x,y} = \sum_{k=x}^y \frac{1}{w_{k-1,k}} = \sum_{k=x+1}^y e^{-\delta k} \cong \int_x^y e^{\delta k} dk = \frac{1}{\delta} (e^{-\delta x} - e^{-\delta y})$$

(定理中定義されていないが $\max$ を取る前のものを A_k ととることで)

$$\begin{aligned}
 A_k &= \frac{e^{\delta k}}{\frac{1}{Z} \gamma e^{\alpha k}} \sum_{1 \leq x < y \leq n} \frac{1}{Z} e^{\alpha x} \frac{1}{x} \frac{1}{Z} e^{\alpha y} \frac{1}{y} \gamma_{x,y} \\
 &\cong \frac{1}{Z} \frac{1}{\gamma \delta} e^{(\delta-\alpha)k} \int_1^k \left(\int_k^n \frac{e^{\alpha x}}{x} \frac{e^{\alpha y}}{y} (e^{-\delta x} - e^{-\delta y}) dy \right) dx \\
 &\leq \frac{1}{\gamma \delta} \frac{1}{Z} e^{(\delta-\alpha)k} \int_1^k \frac{e^{(\alpha-\delta)x}}{x} dx \int_k^n \frac{e^{\alpha y}}{y} dy \\
 &\cong \frac{1}{\gamma \delta} \frac{1}{Z} e^{(\delta-\alpha)k} \frac{e^{(\alpha-\delta)k}}{k} \frac{e^{\alpha n}}{n} \cong \frac{1}{\gamma \delta} \frac{1}{k}
 \end{aligned}$$

これを k に関して最大を取るので $A = \frac{1}{\gamma \delta}$ と定数のオーダーであることが分かる。

なお逆側の不等式に関しては、

$$f(x) = \begin{cases} 1 & x = n \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

のような極端な関数を使うと定数オーダーになる。

この結果を SIR モデルに戻すと $\alpha > 0$ すなわち $\beta > \gamma$ と感染者が増える率が感染者が復帰する率に比べて大きい場合には、人口サイズによらず、感染者はすぐに爆発することを示唆している。

注意：もしスペクトルギャップが n に依存して小さくなる（ A が n の関数として大きくなる）場合は、総人口が多いほど、感染者の割合が大きくなる時間が遅くなることを示唆している。