Định nghĩa 1. Cho S là một tập hữu hạn, dãy các biến ngẫu nhiên $\{X_0, X_1, \dots\}$ nhận giá trị trên S được gọi là một **xích Markov** (Markov chain) nếu

$$\Pr(X_{n+1} = i | X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = j) = \Pr(X_{n+1} = i | X_n = j) = \Pr(X_1 = i | X_0 = j) = p_{ij}$$

với mọi $x_0, x_1, \dots, i, j \in S$ và $n \in \mathbb{N}$.

Tập S được gọi là tập trạng thái hay **không gian trạng thái** (state space) của xích.

Khi $X_n = s$, ta thường nói là xích ở trạng thái s tại thời điểm n.

Lưu ý: Với định nghĩa trên, ta có xích Markov *thời gian rời rạc* (discrete-time), *đồng nhất* (time-homogeneous) và *hữu hạn trạng thái* (finite state space).

Định nghĩa 2. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ có tập trạng thái S với $|S| = k$, ma trận $P \in \mathbb{R}^{k \times k}$ sau được gọi là **ma trận chuyển** (transition matrix) của xích

$$P_{ij} = p_{ij} = \Pr(X_1 = i | X_0 = j).$$

Nhận xét: P là ma trận gồm các số không âm và tổng các phần tử trên mỗi cột là 1.

Định nghĩa 3. Cho biến ngẫu nhiên rời rạc X nhận giá trị trên tập hữu hạn $S = \{1, 2, \dots, k\}$, vector $\pi \in \mathbb{R}^k$ sau được được gọi là (vector) **phân phối** (distribution) của X

$$\pi_i = \Pr(X = i).$$

Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$, phân phối của X_n được gọi là phân phối của xích tại thời điểm n. Phân phối của X_0 được gọi là **phân phối đầu** (initial distribution) của xích.

Mệnh đề 4. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ có tập trạng thái S và ma trận chuyển P, với mọi $n \in \mathbb{N}$ ta có

$$P^n_{ij} = \Pr(X_{t+n} = i | X_t = j) = \Pr(X_n = i | X_0 = j)$$

với mọi $i, j \in S$ và $t \in \mathbb{N}$.

P^n được gọi là **ma trận chuyển n bước** (n-step transition matrix) của xích.

Mệnh đề 5. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ với ma trận chuyển P và π_t là phân phối của xích tại thời điểm t, ta có

$$\pi_{t+n} = P^n \pi_t$$

với mọi $t, n \in \mathbb{N}$. Đặc biệt,

$$\pi_n = P^n \pi_0$$

với mọi $n \in \mathbb{N}$.

Lưu ý: các vector phân phối được xem như là vector cột.

Định nghĩa 6. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ với ma trận chuyển P, phân phối π có tính chất

$$\lim_{n \to \infty} P^n_{ij} = \pi_i$$

với mọi i, j được gọi là **phân phối giới hạn** (limiting distribution) của xích.

Mệnh đề 7. Các phát biểu sau đây tương đương nhau

(i) π là phân phối giới hạn của xích $\{X_0, X_1, \dots\}$.
(ii) Với mọi phân phối đầu và mọi trạng thái i,
$$\lim_{n\to\infty} \Pr(X_n = i) = \pi_i.$$
(iii) Với mọi phân phối đầu α,
$$\lim_{n\to\infty} P^n\alpha = \pi.$$
(iv)
$$\lim_{n\to\infty} P^n = \Pi$$
với Π là ma trận có tất cả các cột đều là π.

Nhận xét:

- Xích có thể không có phân phối giới hạn nhưng nếu có thì là duy nhất.
- Khi xích có phân phối giới hạn là π, ta có thể hiểu π_i là "xác suất dài hạn" xích ở trạng thái i, nghĩa là xác suất xích ở trạng i sau một thời gian rất dài, không phụ thuộc vào phân phối đầu.

Định nghĩa 8. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ với ma trận chuyển P, phân phối π có tính chất
$$\pi = P\pi$$
được gọi là **phân phối dừng** (stationary distribution) của xích.

Nhận xét:

- Xích có thể không có, có 1 hoặc nhiều phân phối dừng.
- Khi xích "rơi" vào một phân phối dừng thì xích sẽ "dừng" ở phân phối đó (xích không thay đổi phân phối), nghĩa là nếu có n để $\pi_n = \pi$ là một phân phối dừng thì $\pi_t = \pi, \forall t \ge n$.
- Phân phối giới hạn nếu có, là một phân phối dừng.

Định nghĩa 9. Ma trận chuyển P được gọi là **chính qui** (regular) nếu có n để P^n gồm toàn các phần tử dương.

Mệnh đề 10. Nếu xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ có ma trận chuyển P chính qui thì xích có phân phối giới hạn cũng là phân phối dừng duy nhất.

Ví dụ 11. Cho xích Markov $\{X_0, X_1, \dots\}$ với tập trạng thái $S = \{1, 2, 3\}$, ma trận chuyển
$$P = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array} & \begin{bmatrix} 0.2 & 0 & 1 \\ 0.8 & 0.4 & 0 \\ 0 & 0.6 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$
và phân phối đầu $\pi_0 = (0.5, 0.5, 0)$. Ta có ma trận chuyển 3 bước
$$P^3 = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array} & \begin{bmatrix} 0.488 & 0.360 & 0.040 \\ 0.224 & 0.544 & 0.480 \\ 0.288 & 0.096 & 0.480 \end{bmatrix} \end{array}$$
Phân phối của X_3

$$\pi_3 = P^3\pi_0 = \begin{bmatrix} 0.424 \\ 0.384 \\ 0.192 \end{bmatrix}$$

Do đó ta có

$$\Pr(X_{10} = 2|X_7 = 1, X_6 = 3) = \Pr(X_{10} = 2|X_7 = 1) = P^3_{2,1} = 0.224$$

$$\Pr(X_4 = 2, X_3 = 1) = \Pr(X_3 = 1)\Pr(X_4 = 2|X_3 = 1) = (\pi_3)_1 P_{2,1} = 0.424 \times 0.8 = 0.3392$$

Vì P^3 gồm toàn các số dương nên P chính qui nên P có phân phối giới hạn π cũng là phân phối dừng duy nhất, do đó π là nghiệm (duy nhất) của hệ sau:

$$\begin{cases} \pi = (a, b, c) \\ a, b, c \geq 0 \\ a + b + c = 1 \\ P\pi = \pi \end{cases}$$

Giải hệ này (hệ PTTT với điều kiện không âm) ta có nghiệm

$$\pi = \left(\frac{15}{47}, \frac{20}{47}, \frac{12}{47}\right)$$

Như vậy, không phụ thuộc vào phân phối đầu, sau một khoảng thời gian rất dài, ta có xích ở các trạng thái 1, 2, 3 với xác suất lần lượt là 0.3192, 0.4255, 0.2553.

<u>Lưu ý</u>: ta cũng có thể tìm giới hạn của P^n (nhờ chéo hóa để tìm công thức của P^n) nhưng khó hơn (tốn thời gian hơn).