

XÍCH MARKOV (Markov chain)

Xích Markov là mô hình ngẫu nhiên đóng vai trò ứng dụng quan trọng trong nhiều lĩnh vực đa dạng như sinh học, tài chính và sản xuất công nghiệp. Xích Markov được sử dụng để mô hình hóa một hệ thống chuyển từ trạng thái này sang trạng thái khác theo thời gian, sự chuyển đổi giữa các trạng thái là ngẫu nhiên và được điều chỉnh bởi phân bố xác suất có điều kiện xác định khả năng chuyển tình trạng hiện tại của hệ thống vào một trạng thái mới. Sự phụ thuộc này thể hiện trí nhớ của hệ thống. Lý thuyết này được A. A. Markov đề xuất vào năm 1907, khi bắt đầu nghiên cứu dãy các thử nghiệm phụ thuộc nhau và tổng các biến ngẫu nhiên tương ứng.

Ví dụ cơ bản của xích Markov là khái niệm *du động ngẫu nhiên* trên các số nguyên dương không âm, được định nghĩa ngay sau đây. Cho $X_t \in \mathbb{N}$, $t \in \mathbb{N}$, là một dãy các biến ngẫu nhiên có giá trị ban đầu $X_0 = 0$. Với một giá trị $p \in [0, 1]$ cho trước, giả sử $\mathbb{P}(X_{t+1} = X_t + 1 | X_t \geq 1) = p = 1 - \mathbb{P}(X_{t+1} = X_t - 1 | X_t \geq 1)$ và $\mathbb{P}(X_{t+1} = 1 | X_t = 0) = 1$. Chuỗi X_t , $t \in \mathbb{N}$ được gọi là một du động ngẫu nhiên trên các số nguyên không âm và là một ví dụ của một xích Markov. Các khía cạnh thường được quan tâm đến của xích X bao gồm: (i) Liệu X có quay trở về 0 sau một số hữu hạn các bước hay không (điều này được đảm bảo nếu $0 \leq p \leq 1/2$), (ii) Trung bình số bước tính đến khi xích trở về 0 là bao nhiêu (số đó là hữu hạn nếu $0 \leq p \leq 1/2$), và (iii) Dạng điệu giới hạn của X_t khi $t \rightarrow \infty$ là như thế nào.

Sau đây là một số ví dụ khác minh họa cho khái niệm xích Markov. Mô hình truyền nhiễm bệnh giả định rằng có bốn trạng thái có thể xảy ra: Nhảy cảm (S), Nhiễm bệnh (I), Miễn dịch (M), Chết (D). Có thể xảy ra việc chuyển trạng thái từ S sang I , sang S hoặc sang D ; từ I đến M hoặc D ; từ M đến M hoặc D ; từ D đến D . Các xác suất chuyển từ S đến I , S đến D và vòng lặp S đến S , cộng lại phải bằng 1 và có thể phụ thuộc vào đặc điểm của cá thể như tuổi tác, giới tính, phong cách sống ... Tất cả các cá thể bắt đầu bằng S , chuyển trạng thái tại mỗi đơn vị thời gian (một ngày chẳng hạn). Khi quan sát được dãy các trạng thái một mẫu cá thể lần lượt chuyển đến (được gọi là quỹ đạo), với các đặc tính của cá thể, người ta có thể ước lượng xác suất chuyển, bằng hồi quy logit chẳng hạn. Mô hình này giả định rằng xác suất chuyển ở thời điểm t từ một trạng thái A đến trạng thái B chỉ phụ thuộc vào trạng thái A chứ không phải vào toàn bộ quỹ đạo dẫn đến A .

Điều này có thể không thực tế, ví dụ ở trạng thái bệnh I nhiều ngày có thể làm tăng khả năng chuyển sang D . Để khắc phục điều đó, có thể mô hình hóa hệ thống với trí nhớ dài hơn, song lại phải rời bỏ thiết chế đơn giản của xích Markov (tuy có thể xây dựng mô hình kiểu đó như một xích Markov trên không gian trạng thái phức tạp hơn có thêm thành phần độ dài thời gian ở lại mỗi trạng thái).

Ví dụ thứ hai đề cập đến thị trường tài chính, khi theo dõi giá trị hàng ngày của một cổ phiếu, không gian trạng thái là liên tục và có thể mô hình hóa xác suất chuyển đổi giá trị cổ phiếu từ trạng thái x đồng sang y đồng bằng hàm mật độ chuẩn với trung bình $x - y$. Thực tế, chuỗi thời gian của giá trị cổ phiếu có thể cho thấy trí nhớ dài hơn, mà thông thường được mô hình hóa bằng một số hạng tử tự hồi quy, lại dẫn đến quá trình phức tạp hơn nữa. Do vậy dùng chuỗi Markov để mô hình hóa dòng giá trị cổ phiếu cũng không thật xác đáng.

Như một ví dụ khác, xét tập hợp tất cả các trang web trên Internet như không gian trạng thái của một xích Markov khổng lồ, nơi người dùng nhấp chuột từ trang này sang trang khác, theo một xác suất chuyển nào đó. Xác suất chuyển này có thể được mô hình hóa như là sự pha trộn của hai thành phần: người dùng sẽ sử dụng các kết nối nội bộ của trang web hiện tại với xác suất λ , lựa chọn theo xác suất đều để vào một trong các đường liên kết đang hiển diện trên trang web đó; người dùng rời trang web hiện tại với xác suất $1 - \lambda$ và chọn ngẫu nhiên một trang web trong số tất cả các trang web khác. Thông thường $\lambda = 0,85$. Tỷ phần dài hạn đó của lần ghé lại mỗi trạng thái của xích Markov có thể được coi là thứ hạng của trang web, như đã được giải thuật của Google thực hiện để xếp hạng các trang web. Tuy nhiên, một lần nữa lại có thể bàn cãi tại sao xác suất chuyển sang một trang tiếp theo chỉ do trang web hiện tại xác định mà không có vai trò của các trang web trong quá khứ.

Cuối cùng, các *giải thuật xích Markov Monte Carlo* (MCMC) là các xích Markov, trong đó tại mỗi bước lặp, một trạng thái mới được chuyển đến theo xác suất chuyển phụ thuộc vào trạng thái hiện tại. Giải thuật ngẫu nhiên này được sử dụng để lấy mẫu từ một phân bố trên không gian trạng thái, là phân bố của xích tại giới hạn, khi đã thực hiện đủ số bước lặp. Người lập mô hình phải kiểm tra gắt gao các giả thiết về tính Markov và tính thuần nhất trước khi tin tưởng rằng các kết quả thực sự được dựa trên mô hình

xích Markov, hay là trên các chuỗi có trí nhớ bậc cao hơn. Giải thuật này được sử dụng rất rộng rãi trong các nghiên cứu Thống kê hiện đại, Phân tích dữ liệu lớn, Học máy, và đặc biệt là Thống kê Bayes.

Nói chung một quá trình ngẫu nhiên có tính Markov nếu xác suất chuyển sang một trạng thái trong tương lai là độc lập với các trạng thái đã trải qua trong quá khứ, dưới điều kiện của trạng thái hiện tại.

Xích Markov thời gian rời rạc. Cho không gian trạng thái là tập các số tự nhiên \mathbb{N} hoặc một tập con hữu hạn S của \mathbb{N} . Ký hiệu $\xi(t)$ là trạng thái của xích Markov tại thời điểm t . Tính chất cơ bản của một xích Markov là *tính Markov*, được định nghĩa như sau đối với xích Markov thời gian rời rạc (thời gian chỉ nhận các giá trị nguyên không âm): Đối với mọi $i, j \in \mathbb{N}$, mọi bộ số nguyên không âm $t_1 < \dots < t_k < t$ và mọi bộ số tự nhiên i_1, \dots, i_k , đẳng thức

$$\mathbb{P}\{\xi(t) = j \mid \xi(t_1) = i_1, \dots, \xi(t_k) = i_k\} = \mathbb{P}\{\xi(t) = j \mid \xi(t_k) = i_k\} \quad (1)$$

luôn được thỏa mãn.

Trong định nghĩa của tính Markov, thời điểm t và biến cố dạng $\{\xi(t) = j\}$ được gọi là “hiện tại” của quá trình; các biến cố xác định bởi các giá trị $\{\xi(u), u < t\}$, được gọi là “quá khứ” của quá trình; các biến cố xác định bởi $\{\xi(u), u > t\}$, được gọi là “tương lai” của quá trình. Lúc đó (1) tương đương với phát biểu sau: Với mọi $t \in \mathbb{N}$ và “hiện tại” $\xi(t) = j$ cố định, bất kỳ biến cố “quá khứ” A và biến cố “tương lai” B nào cũng đều độc lập với nhau dưới điều kiện đã biết “hiện tại”, có nghĩa là

$$\mathbb{P}\{A \cap B \mid \xi(t) = j\} = \mathbb{P}\{A \mid \xi(t) = j\} \mathbb{P}\{B \mid \xi(t) = j\}.$$

Khi diễn giải theo xác suất đối với xích Markov $\xi(t)$, *xác suất chuyển trạng thái*

$$\mathbb{P}\{\xi(t+1) = j \mid \xi(t) = i\} \quad (2)$$

đóng một vai trò chủ đạo. Khi (2) không phụ thuộc vào t , xích Markov được gọi là *thuần nhất* (theo thời gian); trái lại thì xích được gọi là *không thuần nhất*. Dưới đây ta chỉ xét xích Markov thuần nhất. Ký hiệu

$$p_{ij} = \mathbb{P}\{\xi(t+1) = j \mid \xi(t) = i\}.$$

Ma trận $\mathbf{P} = [p_{ij}]$ được gọi là *ma trận xác suất chuyển*. Xác suất của một quỹ đạo bất kỳ $\xi(k) = i_k, k = 0, \dots, t$, được tính theo các xác suất chuyển p_{ij} và phân bố ban đầu $\mathbb{P}\{\xi(0) = i\}$ theo công thức:

$$\mathbb{P}\{\xi(k) = i_k, k = 0, \dots, t\} = \mathbb{P}\{\xi(0) = i_0\} \prod_{k=1}^t p_{i_{k-1}i_k}.$$

Xác suất chuyển t -bước $p_{ij}(t)$ của xích Markov cũng được tính theo xác suất chuyển p_{ij} qua đẳng thức:

$$p_{ij}(t) = \mathbb{P}\{\xi(t_0 + t) = j \mid \xi(t_0) = i\}.$$

Các xác suất chuyển đó thỏa mãn *phương trình Kolmogorov–Chapman*

$$p_{ij}(t_1 + t_2) = \sum_k p_{ik}(t_1)p_{kj}(t_2).$$

Ký hiệu $\mathbf{P}_t = [p_{ij}(t)]$ là ma trận xác suất chuyển t -bước của xích Markov, ta có $\mathbf{P}_t = \mathbf{P}^t$.

Để xác định xích Markov, cần biết phân bố ban đầu $\boldsymbol{\mu} = (\mu_i = \mathbb{P}\{\xi(0) = i\} : i \in \mathbf{S})$. Lúc đó phân bố biên tại thời điểm t có thể được tính như sau:

$$\mathbb{P}\{\xi(t) = j\} = \sum_{i \in \mathbf{S}} p_{ij}(t) \mathbb{P}\{\xi(0) = i\}.$$

Như vậy, phân bố của xích Markov xác định hoàn toàn và duy nhất khi biết trước phân bố ban đầu $\boldsymbol{\mu}$ và ma trận xác suất chuyển \mathbf{P} .

Một xích Markov được gọi là *không chu trình* nếu với mỗi cặp trạng thái (i, j) , ước số chung lớn nhất của tập tất cả t sao cho $p_{ij}(t) > 0$ là 1. Nếu ngược lại thì xích Markov được gọi là *có chu trình*. Du động ngẫu nhiên trong ví dụ phía trên là một xích Markov có chu trình vì bất kỳ một đường đi nào từ bất đầu bằng 0 và trở lại đó đều có chiều dài là bội số của 2.

Phân bố dừng. Một phân bố xác suất $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i = \mathbb{P}\{\xi(0) = i\} : i \in \mathbf{S})$ trên không gian trạng thái được gọi là *phân bố dừng* đối với ma trận xác suất chuyển \mathbf{P} nếu $\boldsymbol{\pi}\mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}$. Với $\boldsymbol{\mu}$ là phân bố ban đầu của xích Markov \mathbf{P} thì xích đó có thể có phân bố giới hạn

$$\boldsymbol{\nu} = \lim_{t \rightarrow \infty} \boldsymbol{\mu}\mathbf{P}_t. \quad (3)$$

Phân bố giới hạn này đúng đối với \mathbf{P} . Ta nói xích Markov \mathbf{P} là *ergodic* nếu phân bố giới hạn trong (3) không phụ thuộc vào phân bố ban đầu μ . Như vậy, xích Markov ergodic có phân bố giới hạn duy nhất và phân bố giới hạn đó đúng đối với \mathbf{P} . Nếu xích Markov có chu trình thì giới hạn trong (3) có thể không tồn tại, nhưng có thể thay thế bằng giới hạn Cesaro, luôn tồn tại đối với xích Markov hữu hạn:

$$\nu = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{k=1}^t \mu \mathbf{P}_k.$$

Nếu $f(\cdot)$ là một hàm trên không gian trạng thái của một xích Markov ergodic $\xi(t)$ thì

$$\mathbb{P}\left\{ \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n f(\xi(t)) = \sum_j p_j f(i) \right\} = 1,$$

với $p_j = \lim_{t \rightarrow \infty} p_{ij}(t)$. Đối với xích Markov ergodic thời gian liên tục (xem định nghĩa phía dưới), tổng bên phải trong đẳng thức trên được thay bằng tích phân.

Hai trạng thái i và j được gọi là *liên thông nhau* nếu tồn tại $t_1, t_2 > 0$ sao cho $p_{ij}(t_1) > 0$ và $p_{ji}(t_2) > 0$. Trạng thái k được gọi là *không cốt yếu* nếu có một trạng thái l sao cho $p_{kl}(t_1) > 0$ với $t_1 \geq 1$ nào đó và $p_{lk}(t) \equiv 0$ với mọi $t \in \mathbb{N}$. Tất cả các trạng thái còn lại được gọi là *cốt yếu*. Như vậy, toàn bộ không gian trạng thái của xích Markov được chia thành các trạng thái cốt yếu và không cốt yếu. Tập tất cả các trạng thái cốt yếu được phân tách thành các lớp rời nhau, mỗi lớp bao gồm các trạng thái liên thông nhau, đồng thời $p_{ij}(t) \equiv 0$, $p_{ji}(t) \equiv 0$, đối với các trạng thái i, j thuộc hai lớp khác nhau.

Một xích Markov mà mọi trạng thái của nó đều thuộc vào lớp trạng thái liên thông duy nhất được gọi là *xích không tách được*. Ngược lại, xích Markov được gọi là *tách được*. Nếu không gian trạng thái là hữu hạn thì phân hoạch không gian đó thành các lớp liên thông như vậy sẽ xác định các tính chất tiệm cận của xích Markov. Chẳng hạn, đối với xích Markov không

tách được hữu hạn, luôn tồn tại giới hạn

$$p_j = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T+1} \sum_{t=0}^T p_{ij}(t), \quad (4)$$

với $\sum_j p_j = 1$. Nếu thêm vào đó xích Markov không có chu trình, khi đó tồn tại t_0 sao cho $p_{ij}(t) > 0$ với mọi $t \geq t_0$ và mọi trạng thái i và j , thì

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_{ij}(t) = p_j. \quad (5)$$

Nếu không gian trạng thái là vô hạn đếm được thì các tính chất tiệm cận của xích Markov sẽ phụ thuộc vào các tính chất tinh tế hơn của các lớp trạng thái liên thông. Khi đó đối với mọi trạng thái i của một lớp cho trước, chuỗi

$$\sum_t p_{ii}(t) \quad (6)$$

sẽ đồng thời hội tụ hoặc đồng thời phân kỳ.

Tính tách được của xích Markov tương đương với khả năng phân rã của ma trận xác suất chuyển $\mathbf{P} = [p_{ij}]$ của xích Markov thời gian rời rạc và ma trận mật độ xác suất chuyển $\mathbf{Q} = [q_{ij}(0)]$ của xích Markov thời gian liên tục (xem định nghĩa phía dưới). Không gian trạng thái của một xích Markov tách được bao gồm các trạng thái không cốt yếu hoặc nhiều hơn một lớp các trạng thái liên thông. Không gian trạng thái của một xích Markov không tách được bao gồm một lớp duy nhất các trạng thái liên thông.

Một lớp các trạng thái được gọi là *tái hiện*, nếu đối với một trạng thái nào đó, chuỗi (6) phân kỳ, được gọi là *không tái hiện* nếu (6) hội tụ. Trong một lớp tái hiện, với xác suất 1 xích Markov sẽ trở về một trạng thái bất kỳ, còn trong lớp không tái hiện thì xác suất của sự quay trở lại như vậy luôn nhỏ hơn 1. Nếu trung bình thời gian quay trở lại trong một lớp tái hiện là hữu hạn, thì lớp đó được gọi là *lớp tích cực*; nếu ngược lại thì nó được gọi là *lớp không tích cực*. Nếu i và j thuộc cùng một lớp các trạng thái tích cực, thì giới hạn (4) tồn tại, đồng thời giới hạn (5) cũng tồn tại trong trường hợp xích không có chu trình. Nếu j thuộc về một lớp các trạng thái không tích cực hoặc không cốt yếu, thì $p_{ij}(t) \rightarrow 0$ khi $t \rightarrow \infty$.

Một xích Markov được gọi là *tối giản* nếu đối với cặp trạng thái $i, j \in \mathbf{S}$ bất kỳ luôn tồn tại đường đi từ i đến j với xác suất dương. Nói cách khác, bất kỳ một trạng thái nào cũng có thể đạt được từ một trạng thái bất kỳ khác với xác suất dương. Một xích Markov tối giản được gọi là *tái hiện* nếu số bước từ trạng thái i tới lần truy cập đầu tiên vào một trạng thái j (được ký hiệu bởi $\tau_{i,j}$) là hữu hạn hầu chắc chắn đối với tất cả $i, j \in \mathbf{S}$, và được gọi là *tái hiện tích cực* nếu $\mathbb{E}\tau_{i,i} < \infty$ tại ít nhất một $i \in \mathbf{S}$. Trong xích Markov tái hiện không có trạng thái không cốt yếu và các trạng thái cốt yếu sẽ phân rã thành các lớp tái hiện. Lưu ý rằng du động ngẫu nhiên trên đường thẳng là xích Markov tái hiện nếu $p = 1/2$ và là xích Markov tái hiện tích cực nếu $p < 1/2$. Du động ngẫu nhiên đối xứng trên lưới nguyên hai chiều là xích Markov tái hiện, trong khi đó du động ngẫu nhiên đối xứng trên lưới nguyên ba chiều lại là xích Markov không tái hiện.

Mọi xích Markov tối giản không chu trình và tái hiện tích cực với ma trận xác suất chuyển \mathbf{P} đều có duy nhất một phân bố dừng $\boldsymbol{\pi}$ là vector xác suất duy nhất thỏa mãn $\boldsymbol{\pi}\mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}$ (đó cũng là sự phân bố giới hạn duy nhất). Định lý ergodic này là một trong những kết quả quan trọng và đã được xây dựng thành nhiều biến thể và mở rộng. Có sẵn các thuật toán hiệu quả để tính toán $\boldsymbol{\pi}$, nhưng không dùng được cho các không gian trạng thái quá lớn.

Cho $f(\cdot)$ là một hàm giá trị thực được định nghĩa trên các trạng thái của một xích Markov $\xi(t)$. Nếu xích Markov đó không tách được và các trạng thái của nó tạo thành một lớp tích cực thì Định lý giới hạn trung tâm có hiệu lực đối với tổng

$$\eta_t = \sum_{u=0}^t f(\xi(u)),$$

tức là:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}\left\{\frac{\eta_t - At}{\sqrt{Bt}} < x\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-u^2/2} du \quad (7)$$

đối với các hằng số A và $B > 0$ nào đó. Để cho (7) nghiệm đúng, chỉ cần thêm điều kiện $\eta_t \sim Bt, t \rightarrow \infty$.

Xích Markov thời gian liên tục. Nếu t nhận giá trị trong $[0; \infty)$, thì $\xi(t)$ được gọi là *xích Markov thời gian liên tục*, hoặc *quá trình Markov*, được định nghĩa tương tự như trên bằng cách sử dụng tính chất Markov (1).

Thông thường, đối với xích Markov thời gian liên tục ta cần giả thiết tồn tại và hữu hạn của đạo hàm một phía phải $dp_{ij}(t)/dt|_{t=0} = q_{ij}$, được gọi là mật độ xác suất chuyển. Đối với một xích Markov thời gian liên tục hữu hạn, từ phương trình Kolmogorov-Chapman sẽ nhận được các phương trình vi phân Kolmogorov

$$\frac{dp_{ij}(t)}{dt} = \sum_k p_{ik}(t)q_{kj}, \quad (8)$$

và

$$\frac{dp_{ij}(t)}{dt} = \sum_k q_{ik}p_{kj}(t), \quad (9)$$

với điều kiện ban đầu $p_{ij}(0) = \delta_{ij}$, trong đó δ_{ij} là ký hiệu Kronecker. Các phương trình (8) và (9) cũng đúng cho xích Markov thời gian rời rạc đếm được, nếu có thêm một vài điều kiện nữa.

Nếu xích Markov thời gian liên tục có *phân bố dừng* $\mathbb{P}\{\xi(t) = i\} = p_i$, tức là phân bố của $\xi(t)$ không phụ thuộc vào thời gian t , thì $\{p_i\}$ thỏa mãn hệ phương trình tuyến tính

$$\left. \begin{aligned} \sum_i p_i &= 1, \\ \sum_i p_i q_{ij} &= 0, \quad j = 1, 2, \dots \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Xích Markov được sử dụng rộng rãi để giải quyết nhiều bài toán ứng dụng khác nhau. Chẳng hạn trong lý thuyết xếp hàng, để tính toán phân bố của số hàng bận trong một hệ phục vụ $M|M|n$ với các dòng yêu cầu Poisson và thời gian phục vụ tuân theo luật mũ, người ta sử dụng một xích Markov hữu hạn thời gian liên tục với các trạng thái $0, \dots, n$,

và các mật độ xác suất chuyển như sau:

$$\begin{aligned} q_{i,i+1} &= \lambda, \quad 0 \leq i < n; \quad q_{i,i-1} = i\mu, \quad 0 \leq i \leq n; \\ q_{i,i} &= -(\lambda + i\mu), \quad 0 \leq i \leq n; \quad q_{n,n} = -n\mu; \\ q_{i,i} &= 0 \quad khi \quad |i - j| > 1, \end{aligned}$$

với λ là cường độ của dòng yêu cầu Poisson và μ^{-1} là thời gian phục vụ trung bình. Áp dụng (10) ta thấy phân bố dừng của số hàng bận được xác định qua biểu thức

$$p_i = \frac{\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^i \frac{1}{i!}}{\sum_{k=0}^n \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^k \frac{1}{k!}}, \quad i = 0, \dots, n,$$

$$p_i = 0, \quad i > n,$$

được gọi là *phân bố Erlang*.

HỒ ĐĂNG PHÚC

Tài liệu tham khảo

1. W. Anderson, *Continuous-time Markov Chains, An Applications Oriented Approach*, Springer, New York, 1991.
2. W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Vol. I, Third edition, Wiley, New York, 1968.
3. M. Iosifescu, *Finite Markov Processes and Their Applications*, Wiley, New York, 1980.
4. M. Kijima, *Markov Processes for Stochastic Modelling*, Chapman - Hall, London, 1997.
5. S. Meyn, R. Tweedie, *Markov Chains and Stochastic Stability*, Springer, London, 1993.
6. E. Nummelin, *General Irreducible Markov Chains and Non-negative Operators*, Cambridge University Press, Cambridge, 1984.
7. D. Revuz, *Markov Chains*, Second Edition. Noth-Holland, Amsterdam, 1984.