



TRƯỜNG ĐẠI HỌC THỦ ĐÔ HÀ NỘI
HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

TẠP CHÍ KHOA HỌC

SCIENCE JOURNAL OF HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

ISSN 2354-1504

SỐ 14 – KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ

THÁNG 3 – 2017

TẠP CHÍ KHOA HỌC TRƯỜNG ĐẠI HỌC THỦ ĐÔ HÀ NỘI

SCIENTIFIC JOURNAL OF HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

(Tập chí xuất bản định kì 1 tháng/số)

Tổng Biên tập

Đặng Văn Soa

Editor-in-Chief

Dang Van Soa

Phó Tổng biên tập

Vũ Công Hảo

Associate Editor-in-Chief

Vu Cong Hao

Hội đồng Biên tập

Bùi Văn Quân
Đặng Thành Hưng
Nguyễn Mạnh Hùng
Nguyễn Anh Tuấn
Châu Văn Minh
Nguyễn Văn Mã
Đỗ Hồng Cường
Nguyễn Văn Cư
Lê Huy Bắc
Phạm Quốc Sử
Nguyễn Huy Kỷ
Đặng Ngọc Quang
Nguyễn Thị Bích Hà
Nguyễn Ái Việt
Phạm Văn Hoan
Lê Huy Hoàng

Editorial Board

Bui Van Quan
Dang Thanh Hung
Nguyen Manh Hung
Nguyen Anh Tuan
Chau Van Minh
Nguyen Van Ma
Do Hong Cuong
Nguyen Van Cu
Le Huy Bac
Pham Quoc Su
Nguyen Huy Ky
Dang Ngoc Quang
Nguyen Thi Bich Ha
Nguyen Ai Viet
Pham Van Hoan
Le Huy Hoang

Thư kí tòa soạn

Lê Thị Hiền

Secretary of the Journal

Le Thi Hien

Biên tập kỹ thuật

Phạm Thị Thanh

Technical Editor

Pham Thi Thanh

*Giấy phép hoạt động báo chí số 571/GP-BTTTT cấp ngày 26/10/2015
In 200 cuốn tại Trường ĐH Thủ đô Hà Nội. In xong và nộp lưu chiểu tháng 3/2017*

MỤC LỤC

Trang

1. MỘT KỸ THUẬT KIỂM CHỨNG MÔ HÌNH VỚI JAVA PATH FINDER.....	5
<i>A model checking technique with Java Path Finder</i>	
Nguyễn Đức Giang, Lưu Thị Bích Hương, Trần Bá Hùng, Trần Thị Thu Ngân	
2. BÀI TOÁN CỰC TRỊ TRONG KHÔNG GIAN HAI CHIỀU TỪ KHÍA CẠNH HÌNH HỌC.....	16
<i>Presented about the exploration of extreme value problems in geometric aspects</i>	
Nguyễn Văn Hào	
3. TEMPERATURE AND THICKNESS-DEPENDENT THERMODYNAMIC PROPERTIES OF METAL THIN FILMS	29
<i>Các tính chất nhiệt động học phụ thuộc độ dày và nhiệt độ của màng mỏng kim loại</i>	
Nguyen Thi Hoa, Duong Dai Phuong	
4. XÁC SUẤT THIẾT HẠI TRONG BẢO HIỂM VỚI MÔ HÌNH RỦI RO PHỤ THUỘC MARKOV	41
<i>Ruin probabilities in insurance for risk models with sequences of Markov dependent random variables</i>	
Nguyễn Thị Thúy Hồng	
5. HIỆU QUẢ XỬ LÝ NƯỚC THẢI SINH HOẠT BẰNG MÀNG LỌC SINH HỌC MBR.....	48
<i>Treatment efficiency of domestic wastewater by Membrane Bioreactor</i>	
Nguyễn Minh Kỳ, Lê Thị Ngọc Phương, Lê Văn Trung, Nguyễn Hoàng Lâm	
6. MICHEL PARAMETER IN 3-3-1 MODEL WITH THREE LEPTON SINGLET.....	57
<i>Tham số michel trong mô hình 3-3-1 với 3 hạt singlet lepton</i>	
Hoang Ngọc Long	
7. XỬ LÝ ION KIM LOẠI NẶNG Pb^{2+} BẰNG BỘT HYDROXYAPATITE PHA TẬP ION Mg^{2+} (HAp)	69
<i>Pb^{2+} heavy metal ion treatment by Mg^{2+} ion dope hydroxyapatite powder (Mg-HAp)</i>	
Phạm Thị Minh, Vũ Thúy Hương, Hoàng Khánh Linh, Trần Mỹ Linh, Hoàng Phương Mai	
8. NGHIÊN CỨU VỀ HỌC CHUYỂN ĐỔI TRONG GP (GENETIC PROGRAMMING).....	79
<i>A study on transfer learning in Genetic Programming</i>	
Ngô Thúy Ngân	
9. THE DEPENDENCE OF MAGNETORESISTANCE IN DOPING SUPERLATTICE ON THE FREQUENCY OF ELECTROMAGNETIC WAVE.....	86
<i>Sự phụ thuộc của từ trở trong siêu mạng pha tạp vào tần số sóng điện từ</i>	
Nguyen Vu Nhan, Nguyen Dinh Nam, Nguyen Quyet Thang	
10. DÒNG ÂM - ĐIỆN PHI TUYẾN TRONG DÂY LƯỢNG TỬ HÌNH CHỮ NHẬT VỚI HỒ THỂ CAO VÔ HẠN	91
<i>A nonlinear acoustoelectric current in a rectangular quantum wire with ifinity high potential</i>	
Nguyễn Quyết Thắng, Nguyễn Vũ Nhân	

11. ĐÁNH GIÁ HIỆN TRẠNG QUẢN LÝ MÔI TRƯỜNG VÀ ĐỀ XUẤT CÁC GIẢI PHÁP CHO QUÁ TRÌNH HOÀN NGUYÊN TẠI MỎ THAN HỒNG THÁI, TỈNH QUẢNG NINH..... 99
Environmental status assessment and proposing solutions for recovery process in the Hong Thai coal mining, Quang Ninh province
Ngô Thanh Sơn
12. XÁC ĐỊNH HÀM LƯỢNG MANGAN VÀ KẼM TRONG CÁ ĐIỀU HỒNG (*Oreochromis sp.*) NUÔI Ở KHU VỰC PHƯỜNG BẮC NGHĨA THÀNH PHỐ ĐỒNG HỚI TỈNH QUẢNG BÌNH..... 107
Determination the manganese and zinc content in Red` Tilapia at Bac Nghia ward, Dong Hoi city, Quang Binh province
Nguyễn Mậu Thành
13. NGHIÊN CỨU XÂY DỰNG BẢN ĐỒ BUGHE KHU VỰC THềm LỤC ĐỊA VIỆT NAM..... 115
Study on designing bughe map of Viet Nam's continental shelf
Dương Thị Hoài Thu
14. NHỮNG BIẾN ĐỔI HÌNH THÁI CỦA CÂY LÚA XUẤT HIỆN TRONG HAI THẾ HỆ ĐẦU DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA CÁC TÁC NHÂN GÂY ĐỘT BIẾN..... 122
The morphological changes of rice appear in the two first generation under the effect of agents causing mutation
Nguyễn Như Toàn, Hoàng Quang Minh
15. NGHIÊN CỨU THIẾT KẾ BỂ USAB XỬ LÝ NƯỚC THẢI CHO NHÀ MÁY CHẾ BIẾN MỦ CAO SU..... 130
Designing the USAB wastewater treatment system for rubber processing factory
Nguyễn Xuân Trinh, Nguyễn Văn Anh
16. ĐÁNH GIÁ MỘT SỐ CÁCH THỨC TÍNH XÁC SUẤT SPAM CỦA TOKEN ỨNG DỤNG TRONG PHÂN LOẠI THƯ RÁC..... 139
Assessing some methods of calculating spam probability of Tokens applied in spam email classification
Nguyễn Tu Trung, Nguyễn Ngọc Hưng, Phạm Thanh Giang, Trần Thành Trung
17. SỬ DỤNG TÍNH NGUYÊN TỐ ĐỂ GIẢI BÀI TOÁN CỰC TRỊ TRÊN TẬP ĐỐI SỐ NGUYÊN..... 153
Finding the extrema of a function on integers by using prime properties
Hoàng Ngọc Tuyền

MỘT KỸ THUẬT KIỂM CHỨNG MÔ HÌNH VỚI JAVA PATH FINDER

Nguyễn Đức Giang⁽¹⁾, Lưu Thị Bích Hương², Trần Bá Hùng¹, Trần Thị Thu Ngân³

¹Viện Công nghệ Thông tin, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

²Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

³Trường Đại học Ngoại thương

Tóm tắt: Trong bài báo này, chúng tôi trình bày một kỹ thuật kiểm chứng mô hình với java path finder (JPF). Đây là một kỹ thuật kiểm chứng hỗ trợ các miền dữ liệu trừu tượng nhằm co lại miền dữ liệu lớn trong chương trình java, miền dữ liệu hữu hạn làm cho việc kiểm chứng trở nên dễ dàng hơn. Kỹ thuật này sử dụng dữ liệu trừu tượng để tính toán một cách xấp xỉ của chương trình ban đầu, nếu một tính chất an toàn là đúng trong miền trừu tượng thì cũng đúng trong chương trình ban đầu. Bài báo cũng đưa ra cách tiếp cận tăng cường JPF với một trình thông dịch trừu tượng và cơ chế phù hợp với trạng thái trừu tượng, từ đó, người dùng có thể chọn các trừu tượng để sử dụng cho một ứng dụng cụ thể. Để cụ thể hóa kỹ thuật này, cần phân tích các chương trình đa luồng trong java, nơi mà vết thời gian không thể tiết kiệm bộ nhớ bằng việc sử dụng JPF.

Từ khóa: Kiểm chứng mô hình, tìm kiếm đường dẫn Java, diễn giải trừu tượng, không gian trạng thái ngang

1. GIỚI THIỆU

Trong ngành công nghệ phần mềm, ngoài việc cung cấp các ý tưởng hay ứng dụng công nghệ thông tin (CNTT) trong đời sống kinh tế xã hội hiện đại thì việc kiểm chứng và phân tích một cách kỹ lưỡng nhằm đảm bảo chất lượng cũng như giảm thiểu rủi ro thiệt hại cho sản phẩm ứng dụng trước khi đưa ra ngoài thị trường là cần thiết. Hiện nay các phương pháp kiểm chứng hình thức được áp dụng khá phổ biến.

Kỹ thuật đặc tả trạng thái không gian như việc kiểm tra mô hình là phương pháp phổ biến để kiểm chứng mô hình và tìm lỗi chương trình. Kiểm tra mô hình là một phương pháp phân tích rất hữu ích, đặc biệt cho việc phân tích các chương trình đa luồng. Công cụ sử dụng để kiểm tra các tính chất vi phạm (lỗi) của chương trình đa luồng với kỹ thuật kiểm chứng mô hình là java path finder (JPF), với mục tiêu là bytecode java.

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 11.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Đức Giang; Email: ndgiang@ioit.ac.vn

JPF là một máy ảo Java đặc biệt có hỗ trợ quay lui, kết hợp trạng thái, không bất định trong cả dữ liệu và các quyết định lập kế hoạch. JPF xây dựng không gian trạng thái chương trình on-the-fly trong việc thực hiện các chương trình trong máy ảo. Sự chuyển tiếp trong không gian trạng thái là một chuỗi các hướng dẫn bytecode thực hiện bởi một chủ đề duy nhất, nơi mà các đường dẫn đầu tiên trong chuỗi đại diện cho một sự lựa chọn không xác định tương ứng với một quy tắc. Tại mỗi ranh giới chuyển tiếp, JPF ghi nhớ mỗi trạng thái JVM hiện tại (chương trình trạng thái) trong một hình thức tuần tự cho các mục đích của quay lui và trạng thái tương ứng. Các trạng thái JVM hoàn chỉnh bao gồm tất cả các đối tượng heap, ngăn xếp của tất cả các chủ đề và tất cả dữ liệu tĩnh. Những thay đổi của trạng thái JVM được thực hiện bên trong thông dịch các lệnh bytecode, đây là một phần của JPF.

JPF chứa một thông dịch cụ thể, trong đó mô hình chung cho tất cả các lệnh bytecode Java và lưu giữ giá trị cụ thể của các biến chương trình. JPF thực thi cụ thể chỉ thị trong dòng chảy không gian trạng thái. Hạn chế chính của JPF đối với tính hữu dụng thực tế là nếu thực hiện một dòng chảy đầy đủ thì rất dễ bị nổ trạng thái. Mặc dù JPF hỗ trợ nhiều tối ưu, bao gồm giảm thứ tự từng phần và giảm đối xứng, việc kiểm tra tất cả các chủ đề với việc thực hiện cụ thể tốn nhiều thời gian và đòi hỏi nhiều bộ nhớ chương trình. Một giải pháp có thể sử dụng dữ liệu trừu tượng để làm giảm các miền lớn của các biến chương trình, lựa chọn miền nhỏ hơn và việc kiểm chứng chương trình thuận lợi thông qua dòng chảy không gian trạng thái khả thi hơn.

Hãy xem xét ví dụ trong *Hình 6*. Đây là một biến thể đơn giản cổ điển - vấn đề người dùng với một đối tượng chia sẻ của lớp dữ liệu. Các tính chất an toàn quan tâm ở đây là sự vắng mặt của các kiểu dữ liệu. JPF sẽ đưa ra những hành vi chương trình cho tất cả các giá trị có thể có của các biến còn lại, nghĩa là tất cả các giá trị số nguyên từ 0 đến 1000000, và không gian trạng thái chương trình sẽ do đó sẽ rất lớn. Người ta có thể sử dụng các dấu hiệu trừu tượng trên các biến còn lại để thay thế miền lớn của kiểu dữ liệu int trong Java với một nhỏ miền hữu hạn {POS, ZERO, NEG}, mà chỉ mã hóa các dấu hiệu của biến còn lại, trong khi trừu tượng đi những giá trị thực tế. Tất cả các trạng thái chương trình có sự khác biệt về giá trị của các biến sẽ được thu gọn để ba trạng thái khác nhau với các giá trị trừu tượng tương ứng. Do đó, không gian trạng thái đưa ra bởi JPF với một khái niệm trừu tượng như vậy sẽ nhỏ hơn nhiều, làm giảm thời gian cần thiết để xác minh các tính chất an toàn nhất định, trong khi tất cả các hành vi của chương trình sẽ được phân tích.

Trong các phần tiếp theo của bài báo, chúng tôi trình bày nền tảng của JPF. Phần ba của bài báo là kết quả sử dụng truy vết thực thi và kiểm chứng mô hình trong JAVA. Phần cuối cùng là kết luận của bài báo.

2. NỀN TẢNG

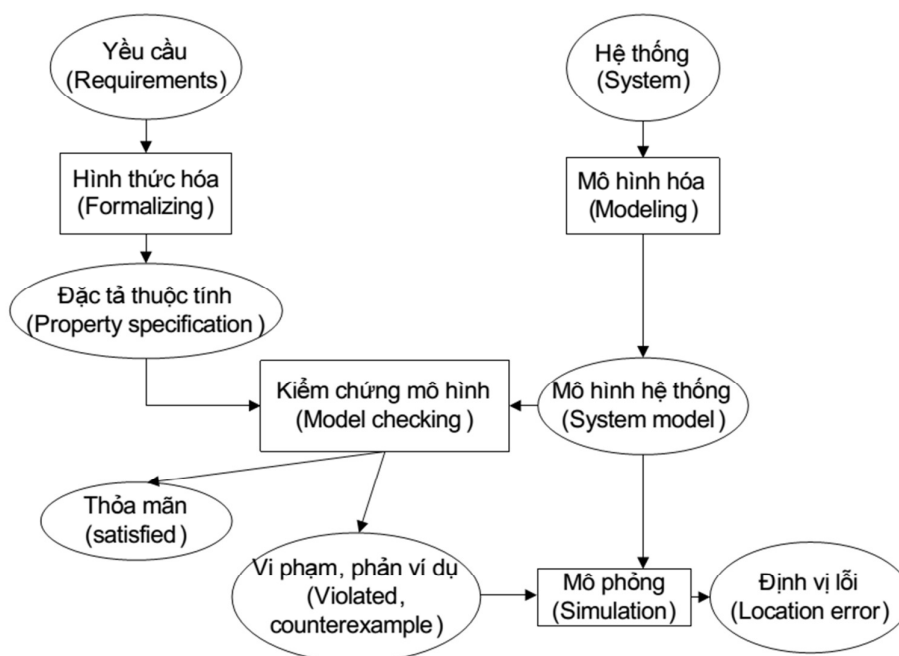
2.1. Trừu tượng hóa miền dữ liệu với JPF

2.1.1. Khái niệm

a) Kiểm chứng mô hình

Kiểm chứng mô hình là một kỹ thuật xác minh khám phá tất cả các trạng thái hệ thống có thể có một cách brute-force.

Kỹ thuật kiểm chứng mô hình mô tả các hành vi hệ thống có thể có được một cách giải toán học chính xác và rõ ràng. Nó chỉ ra rằng - trước khi thực hiện bất kỳ kiểm chứng hình thức - các mô hình chính xác của hệ thống này, thường dẫn đến việc phát hiện ra sự bất toàn, không rõ ràng, không nhất quán trong hệ thống hình thức kiểm chứng cụ thể. Vấn đề như vậy thường chỉ được phát hiện ở giai đoạn muộn hơn nhiều của thiết kế. Các mô hình hệ thống được đi kèm bởi các thuật toán có hệ thống khám phá tất cả các chi tiết của mô hình hệ thống. Đây là cơ sở cho một loạt các kỹ thuật kiểm chứng khác nhau, từ một thăm dò đầy đủ (kiểm chứng mô hình) để thí nghiệm với một tập hạn chế của kịch bản trong mô hình (mô phỏng), hoặc trong thực tế (thử nghiệm). Dưới đây là sơ đồ tiếp cận phương pháp kiểm chứng mô hình:

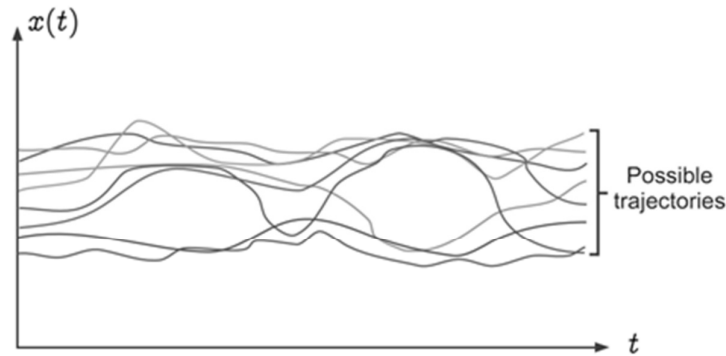


Hình 1: Sơ đồ tiếp cận phương pháp kiểm chứng mô hình

b) Diễn giải trừu tượng

Một số nội dung bao hàm trong lý thuyết của diễn giải trừu tượng:

- Kiểm chứng (verification): Xác định và chứng minh một cách tự động tính chất của hành vi có thể của một chương trình máy tính phức tạp.
- Trừu tượng (abstraction): Lý luận / tính toán có thể thực hiện bởi sự trừu tượng hóa của những giao dịch giữa các hành vi và chỉ với những yếu tố của những hành vi liên quan đến các tính chất cần xem xét.
- Chứng minh (theory): Sử dụng kỹ thuật diễn giải trừu tượng (abstraction interpretation).
- Ngữ nghĩa (semantics): Các ngữ nghĩa cụ thể của một hình thức hóa chương trình (là một mô hình toán học) của tập hợp toàn bộ các thực thi có thể trong môi trường thực thi.



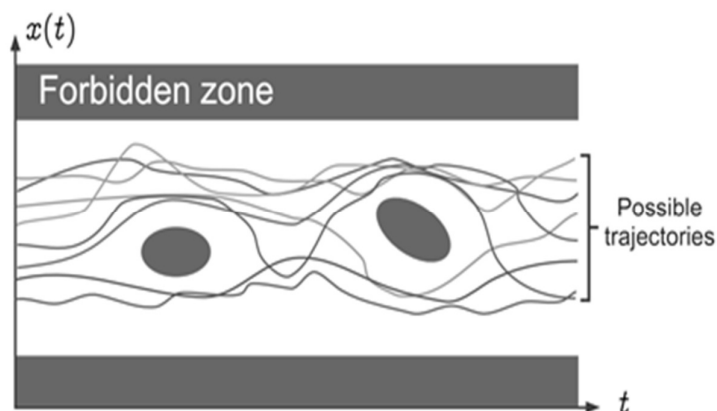
Hình 2: Ví dụ đồ họa cho các hành vi có thể xảy ra

Về mặt logic học: Các ngữ nghĩa toán học cụ thể của chương trình là "vô hạn" đối tượng toán học, không tính toán; tất cả các câu hỏi khó về ngữ nghĩa chương trình cụ thể là không thể quyết định.

Ví dụ: đối số Kurt Godel về việc hủy bỏ. Giả sử hủy bỏ (P) sẽ trả về giá trị true nếu như P luôn hủy bỏ trên tất cả các dữ liệu đầu vào. Chính vì vậy, chương trình sau đưa ra các mâu thuẫn:

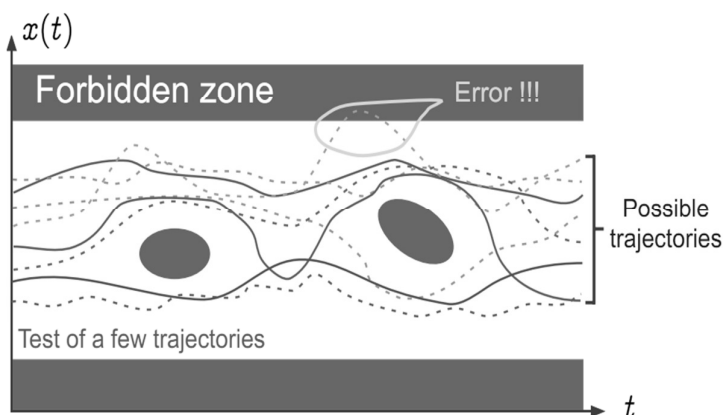
$$P \equiv \text{while termination}(P) \text{ do skip od}$$

Tính an toàn (safety property): Một bằng chứng xác định an toàn bao gồm việc chứng minh rằng giao điểm của các ngữ nghĩa cụ thể của chương trình và các khu vực cấm là bằng rỗng. Hình 3 mô tả đồ thị quỹ đạo có thể của tính an toàn. Còn về vấn đề logic học (các ngữ nghĩa cụ thể là không thể tính toán) không thể cung cấp câu trả lời hoàn toàn tự động với các nguồn tài nguyên máy tính hữu hạn và không tương tác của con người nếu không chắc chắn về câu trả lời.



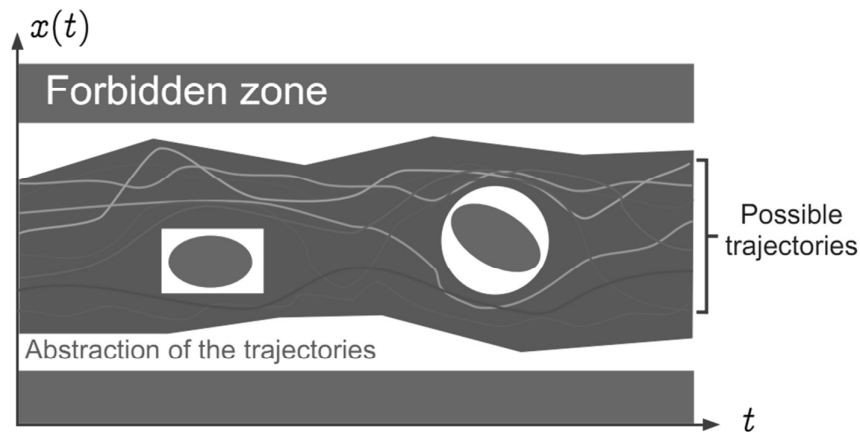
Hình 3: Ví dụ về tính an toàn

Kiểm tra và gỡ lỗi: Việc kiểm tra và gỡ lỗi chương trình bao gồm việc xem xét tập con của tập có khả năng thực thi tốt, đồng thời xem xét các chứng minh xem đó có phải là một chứng minh đúng đắn không, và xem xét đến các khía cạnh không đảm bảo cho các vấn đề chính của chương trình. Hình 4 dưới đây là minh họa của việc kiểm tra và mô phỏng các lỗi chương trình:



Hình 4: Kiểm tra tính chất/mô phỏng lỗi chương trình

Dựa vào các lý thuyết trên, tiến hành việc mô tả và trừu tượng hóa chương trình bằng diễn giải trừu tượng, bao gồm việc xem xét một ngữ nghĩa trừu tượng. Việc xem xét một ngữ nghĩa trừu tượng nói lên một siêu ngữ nghĩa cụ thể của một chương trình. Vì vậy ngữ nghĩa trừu tượng bao gồm tất cả các trường hợp cụ thể của chương trình. Ngữ nghĩa cụ thể được diễn giải trừu tượng như sau: nếu ngữ nghĩa trừu tượng đảm bảo tính an toàn (có nghĩa là không giao nhau trong khu vực cấm) thì có thể kết luận đó là ngữ nghĩa cụ thể. Hình 5 sẽ mô tả cho vấn đề ngữ nghĩa cụ thể là như thế nào.



Hình 5: Ngữ nghĩa cụ thể của chương trình được diễn giải trừu tượng

2.1.2. Trừu tượng miền dữ liệu với JPF

Rất nhiều công việc đã được thực hiện trong dữ liệu trừu tượng (ví dụ, trừu tượng vị ngữ, trừu tượng ngữ nghĩa [1,2,6]), nhưng chỉ có vài phương pháp nhắm mục tiêu Java. Một ngoại lệ đáng chú ý là bộ công cụ Bandera [4]. Nó thực hiện thành công trừu tượng trạng thái của một chương trình Java cho bởi phương pháp chuyển đổi nguồn tới nguồn dựa trên các đặc tả trừu tượng của dữ liệu đã chọn (và định nghĩa) của người dùng.

```
public class ProdConsExample {
    public static final int DAILY_LIMIT = 1000000;

    public static void main(String[] args) {
        Data d = new Data();
        new Producer(d).start();
        new Consumer(d).start();
    }

    class Producer extends Thread {
        public void run() {
            int remaining = ProdConsExample.DAILY_LIMIT;
            while (remaining > 0) {
                synchronized (d) {
                    d.value = 10;
                    d.isNew = true;
                }
                remaining--;
            }
        }
    }

    class Consumer extends Thread {
        public void run() {
            while (true) {
                synchronized (d) {
                    if (d.isNew) {
                        d.isNew = false;
                        System.out.println(d.value);
                    }
                }
            }
        }
    }
}
```

Hình 6: Ví dụ về luồng procedure – Consumer

Tiếp theo, chúng tôi trình bày về JPF hỗ trợ trừu tượng các kiểu dữ liệu số trong Java. cách tiếp cận này được dựa trên một thông dịch tùy chỉnh các hướng dẫn bytecode. Các giá

trị được truyền vào tự động trong khi thực hiện, sử dụng các cơ chế thuộc tính của JPF nhờ đó loại bỏ được việc sử dụng thủ công để truyền giá trị, và cách truyền giá trị cụ thể một cách thủ công hiện tại không còn được duy trì. Phương pháp của JPF thực hiện và đánh giá một số trừu tượng hữu ích, bao gồm cả các ký hiệu và khoảng thời gian, các trừu tượng hóa khác có thể được thêm vào một cách dễ dàng bởi người sử dụng, và JPF cũng cung cấp một cơ chế trừu tượng chung chung và mở rộng.

Ý tưởng cơ bản của phương pháp tiếp cận này là: (1) sử dụng miền dữ liệu trừu tượng nhỏ đặc tả cho các biến chương trình cụ thể thay vì các kiểu dữ liệu định nghĩa cụ thể được xác định bởi ngôn ngữ Java, chẳng hạn như kiểu `int` và `float`, và (2) để thay thế việc giải thích các hành động cụ thể liên quan đến việc trừu tượng biến chương trình, với giải thích trừu tượng phi tiêu chuẩn hướng dẫn bytecode Java hoạt động trên các lĩnh vực trừu tượng, trong cách này những hành vi của chương trình trừu tượng là một xấp xỉ các hành vi của chương trình gốc. Ví dụ, kết quả của việc thêm hai giá trị POS là POS, trong khi kết quả của việc thêm một POS và một NEG có thể là POS, NEG hoặc ZERO. Kỹ thuật này tuân theo các khuôn khổ lý thuyết diễn giải trừu tượng [5].

2.2. Sự ngang bằng và khoảng thời gian nghỉ trong java pathfinder

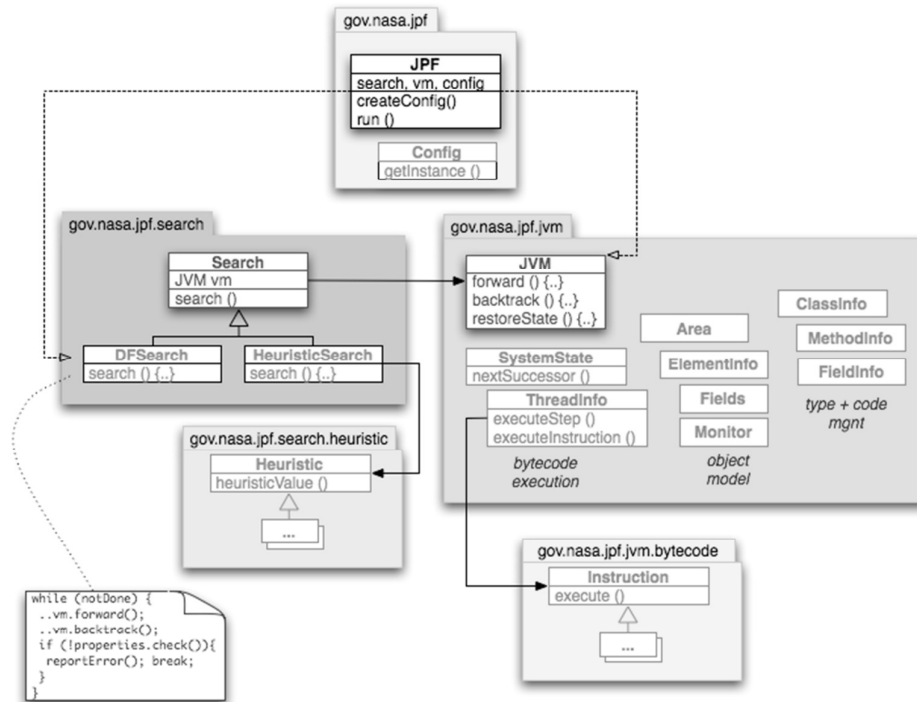
Các lĩnh vực trừu tượng ngang bằng nhau là tập hợp `{ODD, EVEN}`, mà các thành phần đại diện cho số lẻ và thậm chí giá trị tương ứng. Trừu tượng này có thể được sử dụng cho các giá trị số nguyên (các hằng số, và biến chương trình của các kiểu dữ liệu trong Java như `int` và `long`), như các khái niệm kỳ quặc và ngang bằng nhau không có ý nghĩa cho các giá trị floating-point với non-zero phần thập phân.

JPF hỗ trợ hai biến thể của sự trừu tượng khoảng. Cả hai đều là tham số với hai định nghĩa người dùng đó là giá trị `MIN` và `MAX`. Sự trừu tượng khoảng cơ bản được định nghĩa như sau: Tên miền trừu tượng cho được hai số nguyên hoặc fl giá trị thả nổi điểm `MIN` và `MAX` là tập hợp `{LESS, INSIDE, LỚN}`, mà các thành phần thể hiện thực tế là một giá trị nhỏ hơn `MIN`, giữa `MIN` và `MAX`, hoặc lớn hơn `MAX`, tương ứng, trừu tượng này có thể được sử dụng cho cả các giá trị số nguyên và giá trị floating-point (tức là, cho các hằng số và biến chương trình của tất cả các kiểu dữ liệu nguyên thủy của Java, bao gồm cả `long` và `double`).

Các biến thể thứ hai của sự trừu tượng khoảng thời gian này chính xác hơn nó bảo tồn các giá trị cụ thể trong khoảng `[MIN, MAX]`. Tên miền trừu tượng cho hai giá trị nguyên `MIN` và `MAX` là tập hợp `{LESS, MIN, MIN + 1, ..., MAX-1, MAX, LỚN}`. Tuy nhiên, trừu tượng sử dụng với khoảng nhỏ, trừu tượng hóa khác có thể định nghĩa tương tự.

3. THỰC THI TRUY VẾT VỚI JPF TRÊN MIỀN TRỪU TƯỢNG

3.1. Các thành phần của JPF



Hình 7: Kiến trúc tổng quan của JPF

3.1.1. Các JVM

Các JVM là các bộ sinh các trạng thái java cụ thể. Bằng cách thực hiện các hướng dẫn bytecode, các JVM tạo ra các biểu diễn trạng thái mà có thể:

- Kiểm tra đẳng thức (có một trạng thái được truy cập trước đó)
- Truy vấn (các trạng thái chủ đề, các giá trị dữ liệu,...)
- Lưu trữ
- Phục hồi

3.1.2. Các đối tượng tìm kiếm

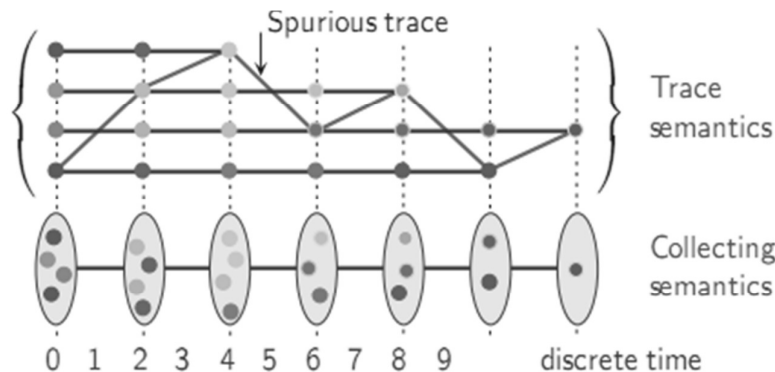
Các đối tượng tìm kiếm chịu trách nhiệm cho việc lựa chọn các trạng thái mà từ đó các JVM nên tiếp tục, hoặc bằng cách chỉ đạo JVM để tạo ra trạng thái kế tiếp (forward), hoặc bằng cách nói với nó để quay lại theo dõi với một tạo ra trước đó. đối tượng tìm kiếm có thể được dùng như trình điều khiển cho các đối tượng JVM

Đối tượng tìm kiếm cũng cấu hình và đánh giá đối tượng sở hữu. Việc triển khai kiểm chính bao gồm một tìm kiếm theo chiều sâu đơn giản (Tìm kiếm DF), và tìm kiếm dựa trên ưu tiên hàng đợi có thể được tham số để làm các loại tìm kiếm khác nhau dựa trên việc lựa chọn trạng thái thú vị nhất của bộ sưu tập của tất cả các thừa kế của một trạng thái nhất định (tìm kiếm Heuristic). Một thực hiện tìm kiếm chủ yếu là cung cấp một phương pháp tìm kiếm duy nhất, trong đó bao gồm các vòng lặp chính thông qua không gian trạng thái có liên quan cho đến khi nó đã được khám phá hết, hoặc tìm kiếm tìm thấy một sự vi phạm sở hữu.

3.2. Kết quả sử dụng truy vết thực thi và kiểm chứng mô hình trong JAVA

3.2.1. Khả năng giảm không gian trạng thái

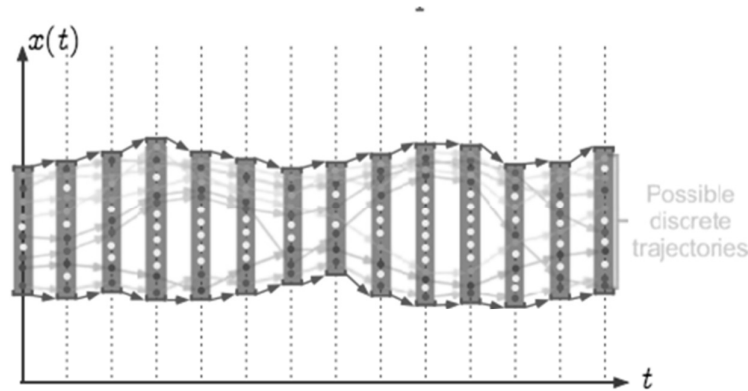
Quá trình trừu tượng hoá các vết thực thi của chương trình java đem lại khả năng giảm không gian trạng thái của chương trình. Sử dụng phương pháp trừu tượng hoá gộp để thu gọn không gian trạng thái. Trong phương pháp này, các điểm dịch chuyển cùng một mức sẽ được gộp chung thành một nhóm nhằm tối thiểu không gian trạng thái có thể xảy ra của tập các vết thực thi. Hình 8 mô phỏng trừu tượng hóa gộp ứng với vết thực thi.



Hình 8: Trừu tượng hóa gộp ứng với vết thực thi

3.2.2. Khả năng xác định miền giá trị của các dịch chuyển

Tiếp theo, trừu tượng hoá cũng có khả năng giúp xác định các khoảng giá trị của các điểm dịch chuyển trong chương trình. Sử dụng phương pháp trừu tượng hoá khoảng thời gian giúp ích rất lớn cho việc kiểm lỗi vượt ngưỡng giá trị trong một chương trình java. Với phương pháp trừu tượng này, các điểm dịch chuyển sẽ được xác định các dưới và trên về thời gian nhằm tìm ra cách dịch chuyển theo các khoảng thời gian xác định. Hình 9 là mô phỏng trạng thái kết thúc của trừu tượng hóa theo khoảng thời gian.



Hình 9: Trạng thái kết thúc của trừu tượng hóa theo khoảng thời gian

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo chúng tôi đã trình bày một kỹ thuật trừu tượng để thực thi truy vết và kiểm chứng mô hình trong java dựa trên JPF. Kết quả của bài báo là đưa ra một kỹ thuật để thực hiện diễn giải trừu tượng thay thế cho mô hình chương trình ban đầu nhằm tiết kiệm tối đa tài nguyên bộ nhớ. Tuy nhiên, độ chính xác của kỹ thuật này chỉ là tương đối, vì nó sử dụng miền dữ liệu trừu tượng để truy vết chứ không sử dụng miền dữ liệu thực.

Sắp tới, chúng tôi dự kiến tiếp tục nghiên cứu các kỹ thuật kiểm chứng để phát triển công cụ truy vết dựa trên nền tảng diễn giải trừu tượng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. T. Ball, V. Levin, and S. K. Rajamani (2011), "A Decade of Software Model Checking with SLAM", *Communications of the ACM*, 54(7).
2. D. Beyer, T. A. Henzinger, R. Jhala, and R. Majumdar (2007), *The Software Model Checker Blast*, STTT 9(5-6).
3. I. Bogudlov, T. Lev-Ami, T. W. Reps, and M. Sagiv (2007), *Revamping TVLA: Making Parametric Shape Analysis Competitive*. CAV.
4. J. C. Corbett, M. B. Dwyer, J. Hatcliff, S. Laubach, C. S. Pasareanu, Robby, and H. Zheng (2000), *Bandera: Extracting Finite-State Models from Java Source Code*. ICSE, ACM.
5. P. Cousot and R. Cousot. *Abstract Interpretation: A Unified Lattice Model for Static Analysis of Programs by Construction or Approximation of Fixpoints*. In POPL 1977, ACM.
6. S. Graf and H. Saidi. *Construction of Abstract State Graphs with PVS*. In CAV 1997, LNCS, vol. 1254.
7. C. S. Pasareanu, P. C. Mehltz, D. H. Bushnell, K. Gundy-Burlet, M. R. Lowry, S. Person, and M. Pape (2008), *Combining Unit-level Symbolic Execution and System-level Concrete Execution for Testing NASA Software*. ISSTA.

A MODEL CHECKING TECHNIQUE WITH JAVA PATH FINDER

Abstracts: *In this paper, we introduce a model checking technique with Java Path Finder (JPF). This is checking technique that supports abstract data domains in order to shrink large data domains in Java programs, finite data domain makes verification easier. This technique uses abstract data to calculate the approximation of the initial program. If a safety feature is true in the abstraction domain, it is also true in the initial program. The paper also provides the JPF with an abstract interpreter and mechanism that matches the abstract state from which users can select abstract to use for a specific application. To concretize this technique, we analyze of multi-threaded programs in Java where time traces can't save the memory by using JPF.*

Keywords: *Model checking, Java Path Finder, abstraction interpretation, state space traversal*

BÀI TOÁN CỰC TRỊ TRONG KHÔNG GIAN HAI CHIỀU TỪ KHÍA CẠNH HÌNH HỌC

Nguyễn Văn Hào¹

Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

Tóm tắt: Trong bài báo này, bằng việc sử dụng phương pháp Lagrange, chúng tôi trình bày một số cách phát triển bài toán cực trị có điều kiện từ khía cạnh hình học trong không gian hai chiều.

Từ khóa: Cực trị có điều kiện, phương pháp Lagrange, không gian hai chiều, cực đại cực tiểu

1. MỞ ĐẦU

Trong sự phát triển mạnh mẽ của khoa học kỹ thuật thế kỷ XVII, một trong những điều quan tâm của các nhà Toán học thời đó là giải quyết những vấn đề tối ưu hóa trên nhiều lĩnh vực khác nhau. Để giải quyết rất nhiều vấn đề đó, yêu cầu đặt ra cho các nhà Toán học là phải nghĩ đến bài toán cực trị. Đối với hàm một biến, về cơ bản, đã được giải quyết gần như toàn vẹn vào thời đó. Trong bài báo này, chúng tôi mở rộng phương pháp nhân tử Lagrange trên không gian hai chiều.

2. MỘT SỐ KIẾN THỨC CHUẨN BỊ

2.1. Khái niệm về hàm số nhiều biến số

Cho S là một tập trong $\mathbb{R}^n$. Ánh xạ $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ được gọi là hàm số xác định trên tập S hay f là hàm số n biến số xác định trên S .

Biến số ở đây là các phần tử của $\mathbb{R}^n$ nên có n tọa độ và mỗi tọa độ xem như một biến độc lập. Do đó, người ta thường gọi hàm số xác định trên tập con trong $\mathbb{R}^n$ là hàm nhiều biến.

¹ Nhận bài ngày 4.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017

Liên hệ tác giả: Nguyễn Văn Hào; Email: nguyenvanhaodhsphn2@gmail.com

2.2. Đạo hàm riêng của hàm số nhiều biến số

Cho f là hàm số nhiều biến xác định trên tập mở U trong $\mathbb{R}^n$ và $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ là một điểm trong U . Khi đó, với số Δx_i đủ nhỏ sao cho điểm $(x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n) \in U$, ta có thể thiết lập đại lượng :

$$\frac{f(x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\Delta x_i}.$$

Nếu đại lượng trên có giới hạn hữu hạn khi Δx_i dần đến 0 thì người ta gọi giới hạn đó là đạo hàm riêng của f theo biến thứ i tại x và ký hiệu là $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ hay $D_i f(x)$.

Ta cũng gọi gradient của hàm f tại x là vector trong không gian $\mathbb{R}^n$ được ký hiệu và xác định bởi :

$$\text{grad} f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right).$$

Khi tính đạo hàm riêng của hàm f theo một biến nào đó thì ta xem các biến khác là hằng số và áp dụng các quy tắc tính đạo hàm của một biến số.

2.3. Cực trị của hàm số nhiều biến số

2.3.1. Khái niệm cực trị hàm số nhiều biến số

Cho tập U mở trong $\mathbb{R}^n$ và hàm số $f : U \rightarrow \mathbb{R}$. Điểm $x_0 \in U$ được gọi là điểm cực đại (cực tiểu) địa phương của hàm f nếu tồn tại hình cầu mở $B(x_0, r)$ tâm x_0 bán kính r nằm trong U sao cho $f(x) \leq f(x_0)$ (tương ứng $f(x) \geq f(x_0)$) với mọi $x \in B(x_0, r)$. Ta cũng gọi $f(x_0)$ là giá trị cực đại (cực tiểu) địa phương của hàm f .

2.3.2. Điều kiện cần để hàm số có cực trị

Định lý (Fecmat). Giả sử hàm f xác định trên tập mở $U \subset \mathbb{R}^n$ và khả vi tại điểm $x_0 \in U$. Nếu f đạt cực trị địa phương tại x_0 thì $\text{grad} f(x_0) = 0$ hay

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_0) = 0; \text{ với mọi } i = \overline{1, n}.$$

2.4. Cực trị có điều kiện

2.4.1. Bài toán cực trị có điều kiện

Bài toán mà ta xét trong phần trước là bài toán tìm cực trị của hàm f trên một tập điểm không có bất kì điều kiện ràng buộc nào. Người ta gọi đó là bài toán cực trị tự do hay bài toán cực trị không điều kiện. Tuy nhiên trong thực tế người ta thường gặp phải các bài toán tìm cực trị của một hàm f trên tập điểm thỏa mãn một số điều kiện nào đó. Những bài toán như vậy gọi là bài toán cực trị có điều kiện.

Một trường hợp đặc biệt, khi tập điểm là một mặt cong, thì ta có bài toán tìm cực trị của hàm f trên tập tất cả các điểm $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ thỏa mãn phương trình biểu diễn mặt cong đó. Bài toán tìm cực tiểu (P) của hàm f trên mặt cong với phương trình biểu diễn $g(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ thường được mô tả như sau :

$$\begin{cases} \min f = (x_1, x_2, \dots, x_n) \\ g(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} (P)$$

Trong đó, người ta gọi $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ là hàm mục tiêu và điều kiện $g(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ được gọi là điều kiện ràng buộc của bài toán (P) .

Nếu $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$ là một lời giải của bài toán và giả sử rằng

$$\text{grad } g(\bar{x}) \neq 0 (CQ)$$

Khi đó, với mọi đường cong khả vi $p(t)$ nằm trọn trên mặt cong g (nghĩa là thỏa mãn $g(p(t)) = 0$ với mọi t) và đi qua điểm $\bar{x}$ (tức là có số t_0 sao cho $p(t_0) = \bar{x}$), thì hàm $f(p(t))$ đạt cực tiểu tại điểm $t = t_0$. Điều này có nghĩa nó có đạo hàm bằng 0 tại điểm $t = t_0$, theo quy tắc dây xích ta có:

$$\text{grad } f(p(t_0)) \cdot p'(t_0) = \text{grad } f(\bar{x}) \cdot p'(t_0) = 0$$

Như vậy $\text{grad } f(\bar{x})$ vuông góc với vector tiếp tuyến của đường cong $p(t)$ tại điểm $\bar{x}$. Điều đó xảy ra với mọi đường cong khả vi nằm trên mặt cong và đi qua điểm $\bar{x}$ nên $\text{grad } f(\bar{x})$ vuông góc với mặt phẳng tiếp xúc của mặt cong g tại điểm $\bar{x}$. Ta thấy rằng $\text{grad } f(\bar{x})$ phải song song với vector $\text{grad } g(\bar{x})$. Điều đó có nghĩa là tồn tại số thực λ sao cho:

Ký hiệu $L(x, \lambda) = f(x) - \lambda.g(x)$ và gọi là hàm Lagrange của bài toán (P) . Từ đẳng thức (1) ta suy ra kết quả sau.

2.4.2. Phương pháp nhân tử Lagrange

Định lý (Nguyên lý Lagrange). *Nếu $\bar{x}$ là một lời giải của bài toán (P) và thỏa mãn điều kiện (CQ) thì tồn tại số thực λ sao cho*

$$\text{grad}L(\bar{x},\lambda)=\left(\frac{\partial L}{x_1}(\bar{x},\lambda),\frac{\partial L}{x_2}(\bar{x},\lambda),...,\frac{\partial L}{x_n}(\bar{x},\lambda)\right)=0 \quad (2)$$

Số λ được gọi nhân tử Lagrange đối với điểm cực trị $\bar{x}$.

Nhận xét. Định lý cho thấy sự tồn tại của nhân tử Lagrange chính là điều kiện cần cho tính cực trị của điểm $\bar{x}$. Như vậy, muốn tìm cực trị của bài toán (P) trước hết ta tìm những điểm của mặt cong g thỏa mãn điều kiện (2) với một nhân tử λ nào đó.

Từ nguyên lý Lagrange, ta có thể thiết lập phương pháp chung để giải bài toán tìm cực trị có điều kiện của hàm nhiều biến $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ với điều kiện ràng buộc $g(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ như sau.

Bước 1. Lập hàm Lagrange

$$L(x_1, x_2, \dots, x_n, \lambda) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) - \lambda g(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

như một hàm của $(n + 1)$ biến.

Bước 2. Giải hệ phương trình.

[illegible]

Nghiệm $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n, \bar{\lambda})$ của hệ phương trình trên là điểm nghi ngờ có cực trị $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n, \bar{\lambda})$ ứng với nhân tử $\bar{\lambda}$ tìm được.

Bước 3. Tùy theo đặc tính của hàm $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ta kiểm tra xem điểm $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$ có là điểm cực trị của hàm đó hay không.

Dưới đây ta sẽ minh họa phương pháp Lagrange bằng một cách kiểm tra điểm nghi ngờ có là điểm cực trị hay không?

Ví dụ. Tìm cực tiểu địa phương của hàm số $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ trên mặt cong xác định bởi phương trình $x^2 + 2y^2 - z^2 - 1 = 0$.

Theo quy trình đã nêu, trước hết ta lập hàm Lagrange:

$$L(x, y, z, \lambda) = (x^2 + y^2 + z^2) - \lambda(x^2 + 2y^2 - z^2 - 1).$$

Khi đó, điểm cực trị cần tìm của hàm f phải thỏa mãn các điều kiện sau:

$$\begin{cases} L'_x(x, y, z, \lambda) = 2x - \lambda.2x = 0 & (1) \\ L'_y(x, y, z, \lambda) = 2y - \lambda.4y = 0 & (2) \\ L'_z(x, y, z, \lambda) = 2z - \lambda(-2z) = 0 & (3) \\ L'_\lambda(x, y, z, \lambda) = x^2 + 2y^2 - z^2 - 1 = 0 & (4) \end{cases}$$

Giả sử (x_0, y_0, z_0) là một nghiệm. Nếu $z_0 \neq 0$ thì từ phương trình (3) ta suy ra $\lambda = -1$. Thay giá trị đó của λ vào các phương trình (1) và (2) ta nhận được $x = y = 0$. Điều đó mâu thuẫn với phương trình (4). Do đó $z_0 = 0$ và ta tìm được bốn điểm nghi ngờ có cực trị là :

$$(1; 0; 0) \text{ và } (-1; 0; 0) \text{ ứng với } \lambda = 1;$$

$$\left(0; \frac{1}{\sqrt{2}}; 0\right) \text{ và } \left(0; -\frac{1}{\sqrt{2}}; 0\right) \text{ ứng với } \lambda = \frac{1}{2}.$$

Để tìm cực tiểu của hàm $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$. Ta chú ý hai điểm sau vì tại đó giá trị của hai hàm mục tiêu nhỏ hơn. Tại điểm $\left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$, ta có số gia của hàm số là:

$$\begin{aligned}
\Delta f &= f\left(0+h, \frac{1}{\sqrt{2}}+k, 0+l\right)-f\left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right) \\
&= h^2 + \left(k + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + l^2 - \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \\
&= h^2 + k^2 + l^2 + k\sqrt{2}.
\end{aligned}$$

Mặt khác, các tọa độ $\left(h, k + \frac{1}{\sqrt{2}}, l\right)$ phải thỏa mãn điều kiện ràng buộc của bài toán

$x^2 + 2y^2 - z^2 - 1 = 0$. Tức là ta phải có:

$$h^2 + 2\left(k + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 - l^2 - 1 = 0 \text{ hay } h^2 + 2k^2 + 2k\sqrt{2} - l^2 = 0.$$

Từ đó, ta suy ra: $k\sqrt{2} = \frac{1}{2}(l^2 - h^2 - 2k^2)$. Thay vào biểu thức của Δf ta được:

$$\begin{aligned}
\Delta f &= h^2 + k^2 + l^2 + k\sqrt{2} = h^2 + k^2 + l^2 + \frac{1}{2}(l^2 - h^2 - 2k^2) \\
&= \frac{3}{2}l^2 + \frac{1}{2}h^2 \geq 0.
\end{aligned}$$

Điều đó chứng tỏ các điểm $\left(0; \frac{1}{\sqrt{2}}; 0\right)$ là điểm cực tiểu của hàm số và tính được

$$\min f(x, y, z) = \frac{1}{2}.$$

3. PHÁT TRIỂN BÀI TOÁN CỰC TRỊ CÓ ĐIỀU KIỆN TỪ KHÓA CẠNH HÌNH HỌC TRONG KHÔNG GIAN HAI CHIỀU

Xuất phát từ bài toán tìm cực trị của hàm số:

$$u(x, y) = x^2 + y^2; (P)$$

với điều kiện điểm (x, y) nằm trên đường thẳng (Δ) có phương trình:

$$x + y = 1. (CQ)$$

Lập toán tử Lagrange $L(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(x + y - 1)$. Các điểm nghi ngờ cực trị là nghiệm của hệ phương trình:

$$\begin{cases} L'_x(x, y, \lambda) = 2x + \lambda = 0 \\ L'_y(x, y, \lambda) = 2y + \lambda = 0 \\ L'_\lambda(x, y, \lambda) = x + y - 1 = 0 \end{cases}$$

Giải hệ trên ta được $(x, y) = \left(\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right)$. Để xác định được điểm đó có là điểm cực trị không ta xét số gia của hàm số tại điểm đó:

$$\begin{aligned} \Delta u &= u\left(\frac{1}{2} + h, \frac{1}{2} + k\right) - u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{1}{2} + h\right)^2 + \left(\frac{1}{2} + k\right)^2 - \frac{1}{2} \\ &= h + k + h^2 + k^2. \end{aligned}$$

Mặt khác điểm $\left(\frac{1}{2} + h, \frac{1}{2} + k\right)$ thỏa mãn điều kiện ràng buộc $x + y - 1 = 0$ nên ta phải có:

$$\frac{1}{2} + h + \frac{1}{2} + k - 1 = 0 \Leftrightarrow h + k = 0.$$

Do đó $\Delta u = h^2 + k^2 \geq 0$. Vậy điểm đó là điểm cực tiểu của hàm số và giá trị cực tiểu của hàm số đã cho là:

$$u_{CT}(x, y) = \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}.$$

Phân tích bài toán. Về mặt hình học hàm $u(x, y) = x^2 + y^2$ là bình phương khoảng cách từ một điểm $M(x, y)$ trong không gian $\mathbb{R}^2$ đến gốc tọa độ $O(0; 0)$. Điều kiện ràng buộc cho thấy rằng điểm $M(x, y)$ phải nằm trên đường thẳng $x + y = 1$. Như thế, bài toán này được hiểu rằng tìm khoảng cách ngắn nhất hoặc dài nhất từ điểm $O(0; 0)$

đến đường thẳng $x + y = 1$. Dĩ nhiên về trục giác hình học ta thấy rằng chỉ tồn tại khoảng cách ngắn nhất từ một điểm đến một đường thẳng. Ta có

$$d(O, \Delta) = \frac{|ax_0 + by_0 + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}} = \frac{|1.0 + 1.0 - 1|}{\sqrt{1^2 + 1^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

Nên:

$$u_{CT}(x, y) = d^2(O, \Delta) = \frac{1}{2}.$$

Giữ nguyên hàm của bài toán (P) thay điều kiện (CQ) của nó bằng đường thẳng tổng quát ta nhận được.

Bài toán 1. Tìm cực trị của hàm số:

$$u(x, y) = x^2 + y^2; (P)$$

với điều kiện điểm (x, y) nằm trên đường thẳng (Δ) có phương trình:

$$ax + by = c; a^2 + b^2 \neq 0. (CQ)$$

Lập toán tử Lagrange:

$$L(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(ax + by - c).$$

Các điểm nghi ngờ cực trị là nghiệm của hệ:

$$\begin{cases} L'_x(x, y, \lambda) = 2x + \lambda a = 0 \\ L'_y(x, y, \lambda) = 2y + \lambda b = 0 \\ L'_\lambda(x, y, \lambda) = ax + by - c = 0 \end{cases}$$

Giải hệ ta được điểm nghi ngờ cực trị là $(x, y) = \left(\frac{ca}{a^2 + b^2}, \frac{cb}{a^2 + b^2} \right)$. Để xác định được điểm đó có là điểm cực trị không ta xét số gia của hàm số tại điểm đó:

$$\begin{aligned} \Delta u &= u\left(\frac{ca}{a^2 + b^2} + h, \frac{cb}{a^2 + b^2} + k\right) - u\left(\frac{ca}{a^2 + b^2}, \frac{cb}{a^2 + b^2}\right) \\ &= h^2 + k^2 + \frac{2hca}{a^2 + b^2} + \frac{2kcb}{a^2 + b^2} = h^2 + k^2 + \frac{2c}{a^2 + b^2}(ha + kb). \end{aligned}$$

Mặt khác điểm $\left(\frac{ca}{a^2+b^2}+h, \frac{cb}{a^2+b^2}+k\right)$ thỏa mãn điều kiện ràng buộc $ax+by-c=0$ nên ta có:

$$\begin{aligned} a\left(\frac{ca}{a^2+b^2}+h\right)+b\left(\frac{cb}{a^2+b^2}+k\right)-c &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{ca^2}{a^2+b^2}+ah+\frac{cb^2}{a^2+b^2}+bk-c &= 0 \\ \Leftrightarrow ah+bk &= 0. \end{aligned}$$

Do đó: $\Delta u = h^2 + k^2 \geq 0$. Vậy điểm đó là điểm cực tiểu của hàm số và giá trị cực tiểu của hàm số đã cho là:

$$u_{CT}(x, y) = \left(\frac{ca}{a^2+b^2}\right)^2 + \left(\frac{cb}{a^2+b^2}\right)^2 = \frac{c^2}{a^2+b^2}.$$

Thay bài toán (P) khoảng cách từ điểm gốc $O(0,0)$ đến đường thẳng $x+y=1$ bằng khoảng cách từ một điểm $H(m,n)$ đến đường thẳng trên ta nhận được:

Bài toán 2. Tìm cực trị của hàm số:

$$u(x, y) = (x-m)^2 + (y-n)^2; (P)$$

với điều kiện ràng buộc điểm (x, y) nằm trên đường thẳng (Δ) có phương trình:

$$x+y=1. (CQ)$$

Lập toán tử Lagrange:

$$L(x, y, \lambda) = (x-m)^2 + (y-n)^2 + \lambda(x+y-1).$$

Các điểm nghi ngờ cực trị là nghiệm của hệ phương trình:

$$\begin{cases} L'_x(x, y, \lambda) = 2(x-m) + \lambda = 0 \\ L'_y(x, y, \lambda) = 2(y-n) + \lambda = 0 \\ L'_\lambda(x, y, \lambda) = x+y-1 = 0 \end{cases}$$

Giải hệ ta được nghiệm $(x, y) = \left(\frac{m-n+1}{2}, \frac{n-m+1}{2} \right)$. Để xác định được điểm đó có là điểm cực trị không ta xét số gia của hàm số tại điểm đó:

$$\begin{aligned}\Delta u &= u\left(\frac{m-n+1}{2} + h, \frac{n-m+1}{2} + k\right) - u\left(\frac{m-n+1}{2}, \frac{n-m+1}{2}\right) \\ &= h^2 + k^2 + 2 \cdot \frac{m+n-1}{2}(h+k)\end{aligned}$$

Mặt khác điểm $\left(\frac{m-n+1}{2} + h, \frac{n-m+1}{2} + k\right)$ thỏa mãn điều kiện ràng buộc $x + y = 1$ nên ta có:

$$\begin{aligned}\frac{m-n+1}{2} + h, \frac{n-m+1}{2} + k &= 1 \\ \Leftrightarrow h + k &= 0\end{aligned}$$

Do đó: $\Delta u = h^2 + k^2 \geq 0$. Vậy điểm đó là điểm cực tiểu của hàm số và giá trị cực tiểu của hàm số đã cho là:

$$u_{CT}(x, y) = \left(\frac{m-n+1}{2} - m\right)^2 + \left(\frac{n-m+1}{2} - n\right)^2 = \frac{(m+n-1)^2}{2}.$$

Tổng hợp hai bài toán trên ta nhận được bài toán tổng quát trong không gian hai chiều.

Bài toán 3. Tìm cực trị của hàm số

$$u(x, y) = (x - m)^2 + (y - n)^2 \quad (P)$$

với điều kiện ràng buộc điểm (x, y) nằm trên đường thẳng (Δ) có phương trình:

$$ax + by = c; a^2 + b^2 \neq 0. \quad (CQ)$$

Lập toán tử Lagrange:

$$L(x, y, \lambda) = (x - m)^2 + (y - n)^2 + \lambda(ax + by - c)$$

Các điểm nghi ngờ cực trị là nghiệm của hệ phương trình:

$$\begin{cases} L'_x(x, y, \lambda) = 2(x - m) + \lambda a = 0 \\ L'_y(x, y, \lambda) = 2(y - n) + \lambda b = 0 \\ L'_\lambda(x, y, \lambda) = ax + by - c = 0 \end{cases}$$

Giải hệ phương trình trên ta nhận được:

$$(x, y) = \left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2}, \frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} \right).$$

Để xác định được điểm đó có là điểm cực trị không, ta xét số gia của hàm số tại điểm đó:

$$\begin{aligned} \Delta u &= u \left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2} + h, \frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} + k \right) \\ &\quad - u \left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2}, \frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} \right) \\ &= h^2 + k^2 + \frac{2}{a^2 + b^2} (c - nb - ma)(ha + kb). \end{aligned}$$

Mặt khác điểm $\left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2} + h, \frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} + k \right)$ thỏa mãn điều

kiện ràng buộc $ax + by - c = 0$ nên ta có:

$$\begin{aligned} &a \left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2} + h \right) + b \left(\frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} + k \right) - c = 0 \\ &\Leftrightarrow \left(\frac{mab^2 - na^2b + ca^2}{a^2 + b^2} + ah + \frac{na^2b - mab^2 + cb^2}{a^2 + b^2} + bk - c = 0 \right) \\ &\Leftrightarrow \frac{c(a^2 + b^2)}{a^2 + b^2} + ah + bk - c = 0 \\ &\Leftrightarrow ah + bk = 0. \end{aligned}$$

Do đó:

$$\Delta u = h^2 + k^2 \geq 0.$$

Vậy điểm đó là điểm cực tiểu của hàm số và giá trị cực tiểu của hàm số đã cho là:

$$\begin{aligned} u_{CT}(x, y) &= \left(\frac{mb^2 - nab + ca}{a^2 + b^2} - m \right)^2 + \left(\frac{na^2 - mab + cb}{a^2 + b^2} - n \right)^2 \\ &= \frac{m^2a^2 + n^2b^2 + c^2 + 2mnab - 2mac - 2nbc}{a^2 + b^2} \\ &= \frac{(ma + nb - c)^2}{a^2 + b^2}. \end{aligned}$$

Như vậy, về mặt hình học hàm $u(x, y) = (x - m)^2 + (y - n)^2$ là bình phương khoảng cách từ một điểm $M(x, y)$ trong không gian $\mathbb{R}^2$ đến điểm $H(m, n)$. Điều kiện ràng buộc cho thấy rằng điểm $M(x, y)$ phải nằm trên đường thẳng $ax + by = c$. Như thế, bài toán này được hiểu rằng tìm khoảng cách ngắn nhất hoặc dài nhất từ điểm $H(m, n)$ đến đường thẳng $ax + by = c$. Dĩ nhiên về trực giác hình học ta thấy rằng chỉ tồn tại khoảng cách ngắn nhất từ một điểm đến một đường thẳng. Ta có:

$$d(H, \Delta) = \frac{|ax_0 + by_0 + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}} = \frac{|a.m + b.n - c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

Nên:

$$u_{CT}(x, y) = d^2(H, \Delta) = \frac{(ma + nb - c)^2}{a^2 + b^2}.$$

4. KẾT LUẬN

Bài báo khai thác một số bài toán cực trị có điều kiện từ khía cạnh hình học trong không gian hai chiều theo phương pháp nhân tử Lagrange.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Tiếng Việt

1. Trần Đức Long, Nguyễn Đình Sang, Hoàng Quốc Toàn (2008), *Giáo trình giải tích tập 2*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.
2. Đinh Thế Lục, Phạm Huy Điểm, Tạ Duy Phụng (2008), *Giải tích các hàm nhiều biến*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.

Tiếng Anh

1. W. J. Kaczor, M.T.NoWak (2000), *Problems in Mathematical Analysis I, Read numbers, Sequences and Series*, AMS.
2. W. Rudin (1964), *Principle of Mathematical Analysis*, McGraw – Hill Book company, NewYork.

PRESENTED ABOUT THE EXPLORATION OF EXTREME VALUE PROBLEMS IN GEOMETRIC ASPECTS

Abstract: *In this paper, by using Lagrange method, we presented about the exploration of geometric extreme value problems in two-dimensional space.*

Keywords: *Condition extreme, Lagrange method, two-dimensional spaces, maximum, minimum*

TEMPERATURE AND THICKNESS-DEPENDENT THERMODYNAMIC PROPERTIES OF METAL THIN FILMS

Nguyen Thi Hoa¹⁽¹⁾, Duong Dai Phuong²

¹Fundamental Science Faculty, University of Transport and Communications

²Fundamental Science Faculty, Tank Armour Officers Training School, Vinh Phuc

Abstract: The thermodynamic properties of metal thin films with body-centered cubic (BCC) structure at ambient conditions were investigated using the statistical moment method (SMM), including the anharmonic effects of thermal lattice vibrations. The analytical expressions of Helmholtz free energy, lattice constant, linear thermal expansion coefficients, specific heats at the constant volume and those at the constant pressure, C_V and C_P were derived in terms of the power moments of the atomic displacements. Numerical calculations of thermodynamic quantities have been performed for W and Nb thin films are found to be in good and reasonable agreement with those of the other theoretical results and experimental data. This research proves that thermodynamic quantities of thin films approach the values of bulk when the thickness of thin films is about 150 nm.

Keywords: thin films, thermodynamic...

1. INTRODUCTION

The knowledge about the thermodynamic properties of metal thin film, such as heat capacity, coefficient of thermal expansion,... are of great important to determine the parameters for the stability and reliability of the manufactured devices.

In many cases of the thermodynamic properties of metal thin film are not well known or may differ from the values for the corresponding bulk materials. A large number of experimental and theoretical studies have been carried out on the thermodynamic properties of metal and nonmetal thin films [1-5]. Most of them describe the method for measuring the thermodynamic properties of crystalline thin films on the substrates [6-9].

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 20.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Thị Hòa; Email: hoanguyen1974@gmail.com

The main purpose of this article is to provide an analysis of the thermodynamic properties of metal free-standing thin film with body-centered cubic structure using the analytic statistical moment method (SMM) [10-12]. The major advantage of our approach is that the thermodynamic quantities are derived from the Helmholtz free energy, and the explicit expressions of the thermal lattice expansion coefficient, specific heats at constant volume and those at the constant pressure C_V , C_P and the coefficient of thermal expansion α are presented taking into account the anharmonic effects of the thermal lattice vibrations. In the present study, the influence of surface and size effects on the thermodynamic properties have also been studied.

2. THEORY

2.1. The anharmonic oscillations of thin metal films

Let us consider a metal free standing thin film has n^* layers with the thickness d . We assume the thin film consists of two atomic surface layers, two next surface atomic layers and $(n^* - 4)$ atomic internal layers. (see Fig. 1).

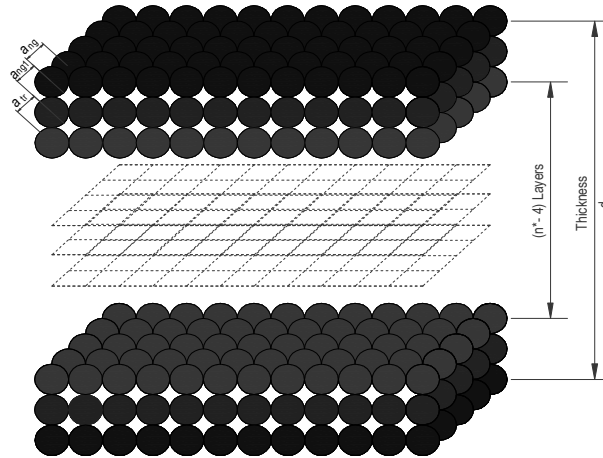


Fig. 1. *The free-standing thin film*

For internal layers atoms of thin films, we present the statistical moment method formulation for the displacement of the internal layers atoms of the thin film y_{ir} is solution of equation [11]

$$\gamma_{ir} \theta^2 \frac{d^2 y_{ir}}{dp^2} + 3\gamma_{ir} \theta y_{ir} \frac{dy_{ir}}{dp} + \gamma_{ir} y_{ir}^3 + k_{ir} y_{ir} + \gamma_{ir} \frac{\theta}{k_{ir}} (x_{ir} \coth x_{ir} - 1) y_{ir} - p = 0, \quad (1)$$

where

$$\begin{aligned}
 y_{tr} &\equiv \langle u_{i,tr} \rangle_p; x_{tr} = \frac{\hbar \omega_{tr}}{2\theta}; \theta = k_B T, \\
 k_{tr} &= \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \phi_{io}^{tr}}{\partial u_{i\alpha}^2} \right)_{eq} \equiv m_0 \omega_{tr}^2, \\
 \gamma_{1tr} &= \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \phi_{io}^{tr}}{\partial u_{i\alpha}^4} \right)_{eq}, \quad \gamma_{2tr} = \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \phi_{io}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^2 \partial u_{i\gamma}^2} \right)_{eq}, \\
 \gamma_{tr} &= \frac{1}{12} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \phi_{io}^{tr}}{\partial u_{i\alpha}^4} \right)_{eq} + 6 \left(\frac{\partial^4 \phi_{io}^{tr}}{\partial u_{i\beta}^2 \partial u_{i\gamma}^2} \right)_{eq} \right] \quad (3)
 \end{aligned}$$

where k_B is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature, m_0 is the mass of atom, ω_{tr} is the frequency of lattice vibration of internal layers atoms; k_{tr} , γ_{1tr} , γ_{2tr} , γ_{tr} are the parameters of crystal depending on the structure of crystal lattice and the interaction potential between atoms; ϕ_{io}^{tr} is the effective interatomic potential between o^{th} and i^{th} internal layers atoms; $u_{i\alpha}$, $u_{i\beta}$, $u_{i\gamma}$ are the displacements of i^{th} atom from equilibrium position on direction $\alpha, \beta, \gamma (\alpha, \beta, \gamma = x, y, z)$, respectively, and the subscript eq indicates evaluation at equilibrium.

The solutions of the nonlinear differential equation of Eq. (1) can be expanded in the power series of the supplemental force p as [11]

$$y_{tr} = y_0^{tr} + A_1^{tr} p + A_2^{tr} p^2. \quad (4)$$

Here, y_0^{tr} is the average atomic displacement in the limit of zero of supplemental force p . Substituting the above solution of Eq. (4) into the original differential Eq. (1), one can get the coupled equations on the coefficients A_1^{tr} and A_2^{tr} , from which the solution of y_0^{tr} is given as [10]

$$y_0^{tr} \approx \sqrt{\frac{2\gamma_{tr}\theta^2}{3k_{tr}^3}} A_{tr}, \quad (5)$$

where

$$A_{tr} = a_1^{tr} + \frac{\gamma_{tr}^2 \theta^2}{k_{tr}^4} a_2^{tr} + \frac{\gamma_{tr}^3 \theta^3}{k_{tr}^6} a_3^{tr} + \frac{\gamma_{tr}^4 \theta^4}{k_{tr}^8} a_4^{tr} + \frac{\gamma_{tr}^5 \theta^5}{k_{tr}^{10}} a_5^{tr} + \frac{\gamma_{tr}^6 \theta^6}{k_{tr}^{12}} a_6^{tr}. \quad (6)$$

with a_η^{tr} ($\eta = 1, 2, \dots, 6$) are the values of parameters of crystal depending on the structure of crystal lattice [10].

Similar derivation can be also done for next surface layers atoms of thin film, their displacement are solution of equations, respectively

$$\gamma_{ng1} \theta^2 \frac{d^2 y_{ng1}}{dp^2} + 3\gamma_{ng1} \theta y_{ng1} \frac{dy_{ng1}}{dp} + \gamma_{ng1} y_{ng1}^3 + k_{ng1} y_{ng1} + \gamma_{ng1} \frac{\theta}{k_{ng1}} (x_{ng1} \coth x_{ng1} - 1) y_{ng1} - p = 0 \quad (7)$$

For surface layers atoms of thin films, the displacement of the surface layers atoms of the thin film $y_{ng} = \langle u_i^{ng} \rangle$ is solution of equation

$$k_{ng} \langle u_i^{ng} \rangle_a + \gamma_{ng} \left[\langle u_i^{ng} \rangle_a^2 + \theta \frac{\partial \langle u_i^{ng} \rangle_a}{\partial a} + \frac{\theta}{m\omega_{ng}^2} (x_{ng} \coth x_{ng} - 1) \right] - p = 0 \quad (8)$$

where

$$x_{ng} = \frac{\hbar\omega_{ng}}{2\theta}, \quad k_{ng} = \frac{3}{2} \sum_i \left[(0^2 \phi_{i0}^{ng}) a_{ix}^2 + (0\phi_{i0}^{ng}) \right] = m\omega_{ng}^2, \\ \gamma_{ng} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i,\alpha,\beta,\gamma \\ \alpha \neq \beta}} \left[\left(\frac{\partial^3 \phi_{i\alpha}^{ng}}{\partial u_{i\alpha,ng}^3} \right)_{eq} + \left(\frac{\partial^3 \phi_{i\alpha}^{ng}}{\partial u_{i\alpha,ng}^2 \partial u_{i\gamma}^{ng}} \right)_{eq} \right] \quad (9)$$

The solutions of equation (8) can be expanded in the power series of the supplemental force p as

$$y_{ng} = y_0^{ng} + A_1 p + A_2 p^2. \quad (10)$$

Here, y_0^{tr} is the average atomic displacement in the limit of zero of supplemental force p . The solution of y_0^{tr} is given as

$$y_0^{ng} = -\frac{\gamma_{ng} \theta}{k_{ng}^2} x_{ng} \coth x_{ng}. \quad (11)$$

2.2. Free energy of the thin metal film

Usually, the theoretical study of the size effect has been carried by introducing the surface energy contribution in the continuum mechanics or by the computational simulations reflecting the surface stress, or surface relaxation influence. In this paper, the

influence of the size effect on thermodynamic properties of the metal thin film is studied by introducing the surface energy contribution in the free energy of the system atoms.

For the internal layers and next surface layers. Free energy of these layer are

$$\Psi_{tr} = \left\{ U_0^{tr} + 3N_{tr} \theta \left[x_{tr} + \ln(1 - e^{-2x_{tr}}) \right] \right\} + \frac{3N_{tr} \theta^2}{k_{tr}^2} \left\{ \gamma_{2tr} X_{tr}^2 - \frac{2\gamma_{1tr}}{3} \left(1 + \frac{X_{tr}}{2} \right) \right\} + \quad (12)$$

$$\frac{6N_{tr} \theta^3}{k_{tr}^4} \left\{ \frac{4}{3} \gamma_{2tr}^2 \left(1 + \frac{X_{tr}}{2} \right) X_{tr} - 2(\gamma_{1tr}^2 + 2\gamma_{1tr} \gamma_{2tr}) \left(1 + \frac{X_{tr}}{2} \right) (1 + X_{tr}) \right\}.$$

$$\Psi_{ng1} = \left\{ U_0^{ng1} + 3N_{ng1} \theta \left[x_{ng1} + \ln(1 - e^{-2x_{ng1}}) \right] \right\} + \frac{3N_{ng1} \theta^2}{k_{ng1}^2} \left\{ \gamma_{2ng1} X_{ng1}^2 - \frac{2\gamma_{1ng1}}{3} \left(1 + \frac{X_{ng1}}{2} \right) \right\} + \quad (13)$$

In Eqs. (12), (13), using $X_{tr} = x_{tr} \coth x_{tr}$, $X_{ng1} = x_{ng1} \coth x_{ng1}$; and

$$U_0^{tr} = \frac{N_{tr}}{2} \sum \varphi_{i0}^{tr}(r_{i,tr}); U_0^{ng1} = \frac{N_{ng1}}{2} \sum \varphi_{i0}^{ng1}(r_{i,ng1}); \quad (14)$$

where r_i is the equilibrium position of i^{th} atom, u_i is its displacement of the i^{th} atom from the equilibrium position; φ_{i0}^{tr} , φ_{i0}^{ng1} , are the effective interatomic potential between the 0^{th} and i^{th} internal layers atom, the 0^{th} and i^{th} next surface layers atom, ; N_{tr} , N_{ng1} and are respectively the number of internal layers atoms, next surface layers atoms and of this thin film; U_0^{tr} , U_0^{ng1} represent the sum of effective pair interaction energies for internal layers atom, next surface layers atom, respectively.

For the surface layers, the Helmholtz free energy of the system in the harmonic approximation given by [11]

$$\Psi_{ng} = \left\{ U_0^{ng} + 3N_{ng} \theta \left[x_{ng} + \ln(1 - e^{-2x_{ng}}) \right] \right\} \quad (15)$$

Let us assume that the system consists N atoms with n^* layers, the atom number on each layer is N_L , then we have

$$N = n^* N_L \Rightarrow n^* = \frac{N}{N_L}.$$

The number of atoms of internal layers, next surface layers and surface layers atoms are , respectively determined as

$$N_{tr} = (n^* - 4)N_L = \left(\frac{N}{N_L} - 4 \right) N_L = N - 4N_L,$$

$$N_{ng1} = 2N_L = N - (n^* - 2)N_L \text{ and } N_{ng} = 2N_L = N - (n^* - 2)N_L. \quad (17)$$

Free energy of the system and of one atom, respectively, are given by

$$\Psi = N_{tr}\psi_{tr} + N_{ng1}\psi_{ng1} + N_{ng}\psi_{ng} - TS_c = (N - 4N_L)\psi_{tr} + 2N_L\psi_{ng1} + 2N_L\psi_{ng} - TS_c, \quad (18)$$

$$\frac{\Psi}{N} = \left[1 - \frac{4}{n^*} \right] \psi_{tr} + \frac{2}{n^*} \psi_{ng1} + \frac{2}{n^*} \psi_{ng} - \frac{TS_c}{N}, \quad (19)$$

where S_c is the entropy configuration of the system; ψ_{ng} , ψ_{ng1} and ψ_{tr} are respectively the free energy of one atom at surface layers, next surface layers and internal layers.

Using $\bar{a}$ as the average nearest-neighbor distance and $\bar{b}$ is the average thickness two-layers and $\bar{a}_c$ is the average lattice constant. Then we have

$$\bar{b} = \frac{\bar{a}}{\sqrt{3}} \text{ and } \bar{a}_c = \frac{2}{\sqrt{3}} \bar{a}. \quad (20)$$

The thickness d of thin film can be given by

$$d = 2b_{ng} + 2b_{ng1} + (n^* - 5)b_{tr} = (n^* - 1)\bar{b} = (n^* - 1)\frac{\bar{a}}{\sqrt{3}} \quad (21)$$

From equation (21), we derived

$$n^* = 1 + \frac{d}{\bar{b}} = 1 + \frac{d\sqrt{3}}{\bar{a}}.$$

The average nearest-neighbor distance of thin film

$$\bar{a} = \frac{2a_{ng} + 2a_{ng1} + (n^* - 5)a_{tr}}{n^* - 1}. \quad (23)$$

In above equation, a_{ng} , a_{ng1} and a_{tr} are correspondingly the average between two intermediate atoms at surface layers, next surface layers and internal layers of thin film at a given temperature T . These quantities can be determined as

$$a_{ng} = a_{0,ng} + y_0^{ng}, a_{ng1} = a_{0,ng1} + y_0^{ng1}, a_{tr} = a_{0,tr} + y_0^{tr}, \quad (24)$$

where $a_{0,ng}$, $a_{0,ng1}$ and $a_{0,tr}$ denotes the values of a_{ng} , a_{ng1} and a_{tr} at zero temperature which can be determined from experiment or from the minimum condition of the potential energy of the system.

Substituting Eq. (22) into Eq. (19), we obtained the expression of the free energy per atom as follows

$$\frac{\Psi}{N} = \frac{d\sqrt{3}-3\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \Psi_{tr} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \Psi_{ng} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \Psi_{ng1} - \frac{TS_c}{N}. \quad (25)$$

2.3. Thermodynamic quantities of the thin metal films

The average thermal expansion coefficient of thin metal films can be calculated as

$$\alpha = \frac{k_B}{\bar{a}_0} \frac{d\bar{a}}{d\theta} = \frac{d_{ng}\alpha_{ng} + d_{ng1}\alpha_{ng1} + (d - d_{ng} - d_{ng1})\alpha_{tr}}{d}, \quad (26)$$

where d_{ng} and d_{ng1} are the thickness of surface layers and next surface layers, and

$$\alpha_{tr} = \frac{k_B}{a_{0,tr}} \frac{\partial y_0^{tr}(T)}{\partial \theta}; \alpha_{ng} = \frac{k_B}{a_{0,ng}} \frac{\partial y_0^{ng}(T)}{\partial \theta}; \alpha_{ng1} = \frac{k_B}{a_{0,ng1}} \frac{\partial y_0^{ng1}(T)}{\partial \theta}. \quad (27)$$

The specific heats C_V at constant volume temperature T is derived from the free energy of the system and has the form

$$C_V = \left[\frac{\partial W}{\partial T} \right]_V = -T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial T^2} = \frac{d\sqrt{3}-3\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} C_V^{tr} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} C_V^{ng} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} C_V^{ng1}, \quad (28)$$

where

$$C_V^{tr} = 3k_B N \left\{ \frac{x_{tr}^2}{\sinh^2 x_{tr}} + \frac{2\theta}{k_{tr}^2} \left[\left(2\gamma_{2tr} + \frac{\gamma_{1tr}}{3} \right) \frac{x_{tr}^3 \coth x_{tr}}{\sinh^2 x_{tr}} + \frac{2\gamma_{1tr}}{3} - \gamma_{2tr} \left(\frac{x_{tr}^4}{\sinh^4 x_{tr}} + 2 \frac{x_{tr}^4 \coth^2 x_{tr}}{\sinh^2 x_{tr}} \right) \right] \right\}. \quad (29)$$

The isothermal compressibility λ_T is given by

$$\lambda_T = -\frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{3 \left(\frac{\bar{a}}{\bar{a}_0} \right)^3}{2P + \frac{\bar{a}^2}{3V} \left(\frac{d\sqrt{3}-3\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \frac{\partial^2 \Psi_{tr}}{\partial a_{tr}^2} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \frac{\partial^2 \Psi_{ng}}{\partial a_{ng}^2} + \frac{2\bar{a}}{d\sqrt{3}+\bar{a}} \frac{\partial^2 \Psi_{ng1}}{\partial a_{ng1}^2} \right)_T} \quad (30)$$

Furthermore, the specific heats at constant pressure C_P is determined from the thermodynamic relations

$$C_P = C_V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P^2 \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = C_V + 9TV \alpha^2 B_T. \quad (31)$$

3. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSION

In this section, the derived expressions in previous section will be used to investigate the thermodynamic as well as mechanical properties of metallic thin films with BCC structure for Nb and W at zero pressure. For the sake of simplicity, the interaction potential between two intermediate atoms of these thin films is assumed as the Mie-Lennard-Jones potential which has the form as

$$\varphi(r) = \frac{D}{(n-m)} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right] \quad (32)$$

where D describing dissociation energy; r_0 is the equilibrium value of r ; and the parameters n and m can be determined by fitting experimental data (e.g., cohesive energy and elastic modulus). The potential parameters D, m, n and r_0 of some metallic thin films are showed in Table 1.

Table 1. Mie-Lennard-Jones potential parameters for Nb of thin metal films [12]

Metal	n	m	$r_0, (A^0)$	$D / k_B, (K)$
Nb	7.5	1.72	2.8648	21706.44
W	8.58	4.06	2.7365	25608.93

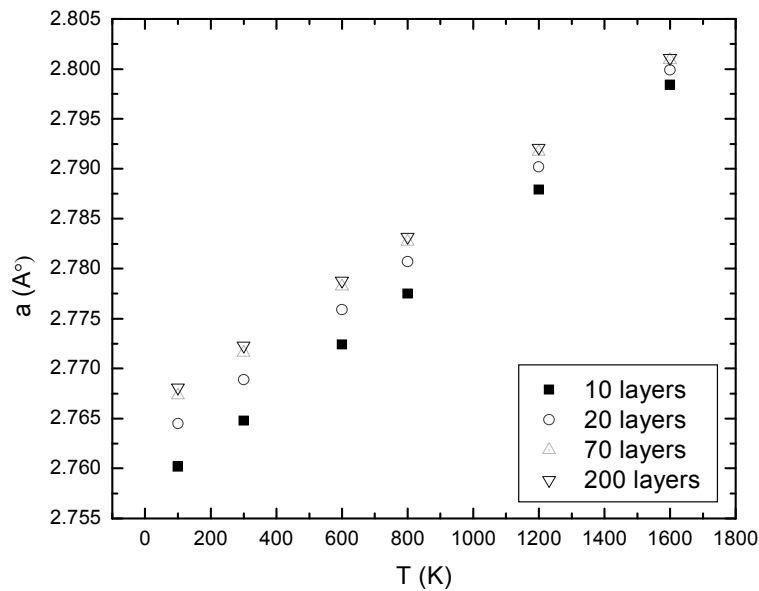


Fig. 2. Dependence on thickness of the nearest-neighbor distance for Nb thin film

Using the expression (23), we can determine the average nearest-neighbor distance of thin film as functions of thickness and temperature. In Fig. 2, we present the temperatures dependence of the average nearest-neighbor distance of thin film for Nb using SMM. One can see that the value of the average nearest-neighbor distance increases with the increasing of absolute temperature T . These results showed the average nearest-neighbor distance for Nb increases with increasing thickness. We realized that for Nb thin film when the thickness larger value 150 nm then the average nearest-neighbor distance approach the bulk value. The obtained results of dependence on thickness are in agreement between our works with the results presented in [14].

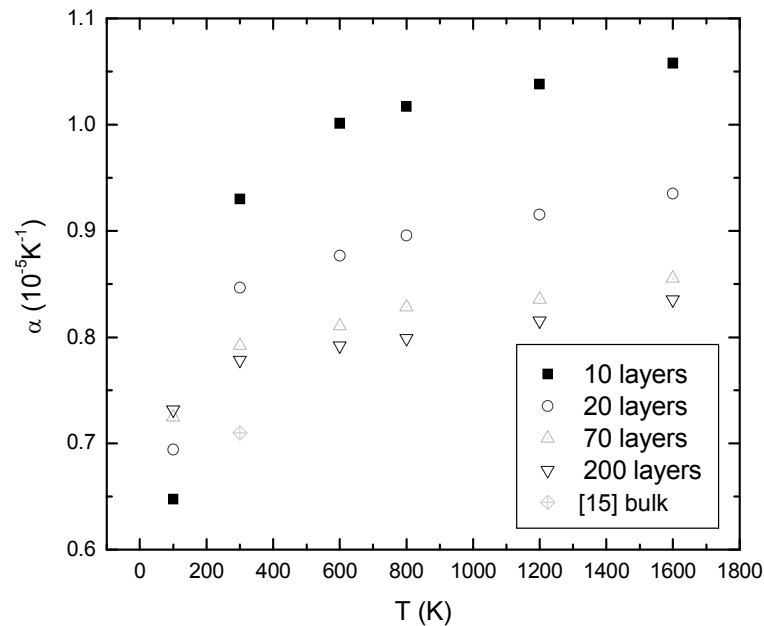


Fig. 3. Temperature dependence of the thermal expansion coefficients for Nb thin film

In Fig. 3, we present the temperature dependence of the thermal expansion coefficients of Nb thin fillm as functions of thickness and temperature. We showed the theoretical calculations of thermal expansion coefficients of Nb thin film with various layer thicknesses. The experimental thermal expansion coefficients [15] of bulk material have also been reported for comparison. One can see that the value of thermal expansion coefficient increases with the increasing of absolute temperature T . It also be noted that, at a given temperature, the lattice parameter of thin film is not a constant but strongly depends on the layer thickness, especially at high temperature. Interestingly, the thermal expansion coefficients decreases with increasing thickness and approach the bulk value.

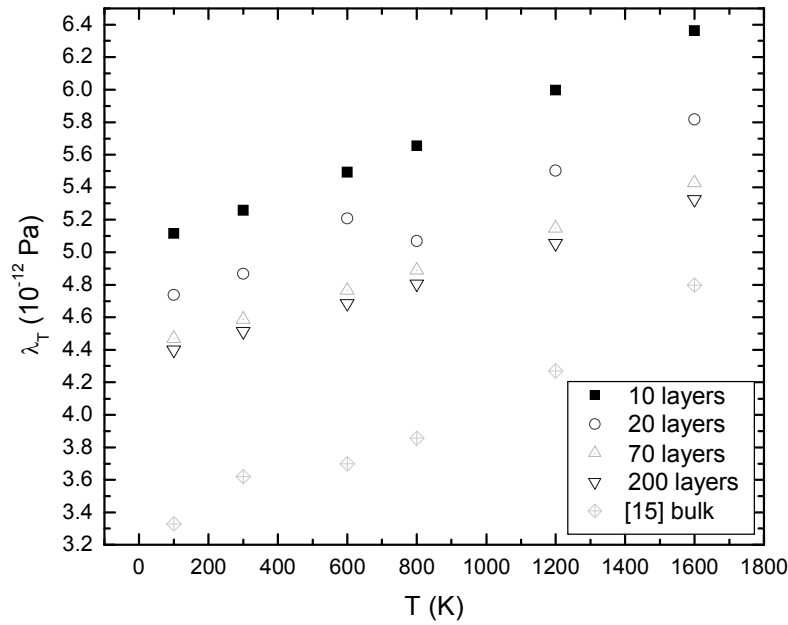


Fig. 4. Temperature dependence of the isothermal compressibility for Nb thin film

In Fig. 4, we present the temperature dependence of the isothermal compressibility of the Ag films as a function of the temperature in various thicknesses and the bulk Nb [15] by the SMM. We realized that also, it increases with absolute temperature T . When the thickness increases, the average of the isothermal compressibility approach the bulk values. These results are in agreement with the laws of the bulk isothermal compressibility depends on the temperature of us [10].

The specific heat at constant pressure C_p is one of important thermodynamic quantities of solid. Its dependence on thickness and temperature was showed in Fig. 5 for Nb thin film. Experimental data of C_p of Nb bulk crystal were also displayed for comparison [15]. It is clearly seen that at temperature range below 700 K, the specific heat C_p of thin film follows very well the value of bulk material. When temperatures and the thickness of thin film increase, the specific heat at constant pressure increase with the absolute temperature, therefore the specific heat C_p depends strongly on the temperature.

In Fig. 6, we presented SMM results of the specific heats at constant volume of Nb thin film with various thickness as functions of temperature. It is clearly seen that at temperature in range $T < 300$ K, the specific heat at constant volume C_v depends strongly on the temperature. It increases robustly with the increasing of absolute temperature. In

temperature range $T > 300$ K, the specific heat C_V reduces and depends weakly on the temperature. The thicker thin film is the less dependent on temperature specific heat C_V becomes. In our SMM calculations, when the thicknesses of Nb and W thin films are larger than 150 nm, the specific heats C_V are almost independent on the layer thickness and reach the values of bulk materials.

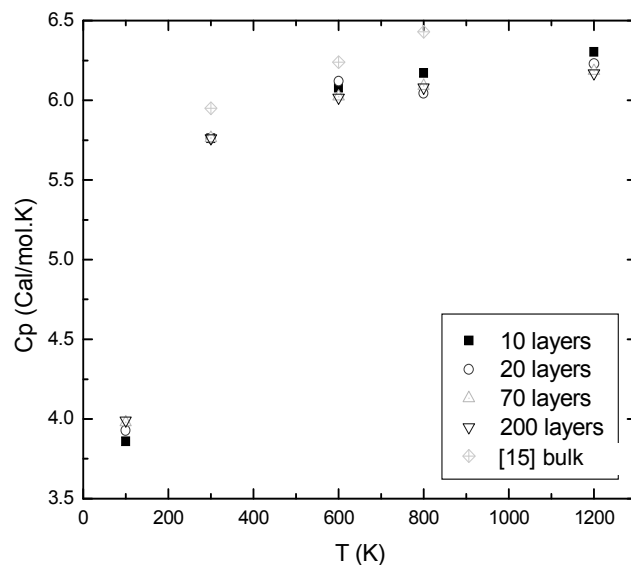


Fig. 5. Temperature dependence of the specific heats at constant pressure for Nb thin film

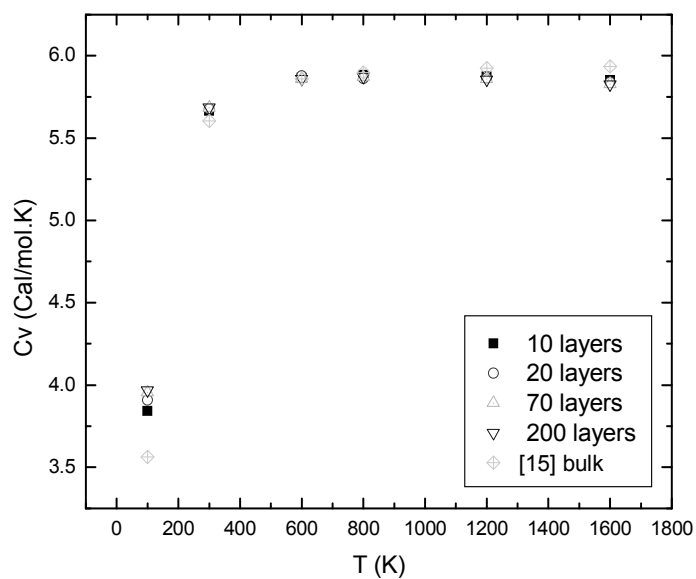


Fig. 6. Temperature dependence of the specific heats at constant volume for Nb thin film

4. CONCLUSIONS

The SMM calculations are performed by using the effective pair potential for the W and Nb thin metal films. The use of the simple potentials is due to the fact that the purpose of the present study is to gain a general understanding of the effects of the anharmonic of the lattice vibration and temperature on the thermodynamic properties for the BCC thin metal films.

In general, we have obtained good agreement in the thermodynamic quantities between our theoretical calculations and other theoretical results, and experimental values.

REFERENCES

1. D. S. Campbell, *Handbook of Thin Film Technology* (McGraw-Hill, New York, 1970).
2. F. C. Marques et al., *J. Appl. Phys.* **84** (1998) 3118.
3. [T. Iwaoka, S. Yokoyama, and Y. Osaka, *J. Appl. Phys.* **24** (1985) 112.
4. F. Rossi et al., *J. Appl. Phys.* **75** (1994) 3121.
5. T. A. Friedmann et al., *Appl. Phys. Lett.* **71** (1997) 3820.
6. M. Janda, *Thin Solid Films*, **112** (1984) 219; **142** (1986) 37.
7. O. Kraft and W.D. Nix, *J. Appl. Phys.* **83** (6) (1998) 3035-3038.
8. M. M. De Lima et al., *J. Appl. Phys.* **86** (9) (1999) 4936-4942.
9. R. Knepper and S. P. Baker, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 181908.
10. V. V. Hung, D. D. Phuong, and N. T. Hoa, *Com. Phys.* **23** (4) (2013) 301–311.
11. V. V. Hung et al., *Thin Solid Films*, **583** (2015) 7–12.
12. M. Magomedov, *High Temperature*, **44** (4) (2006) 513.
13. D. Hazra et al., *J. Appl. Phys.* **103** (2008) 103535.
14. W. Fang, L. Chun-Yen, *Sensors and Actuators*, **84** (2000) 310-314.
15. B. H. Billings et al., *Americal Institute of Physics Hand Book* (McGraw-Hill Book company, New York, 1963).

CÁC TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG HỌC PHỤ THUỘC ĐỘ DÀY VÀ NHIỆT ĐỘ CỦA MÀNG MỎNG KIM LOẠI

Tóm tắt: Ứng dụng phương pháp thống kê mô men vào nghiên cứu tính chất nhiệt động của màng mỏng kim loại với cấu trúc lập phương tâm khối. Quá trình nghiên cứu có kể đến đóng góp của hiệu ứng phi điều hòa trong dao động mạng tinh thể. Đã thu được các biểu thức giải tích cho phép tính năng lượng tự do Helmholtz của hệ, các hàng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt của màng mỏng,... Các kết quả nghiên cứu lý thuyết được áp dụng tính số với màng mỏng kim loại Nb và so sánh với số liệu thực nghiệm và các kết quả tính bằng phương pháp khác cho thấy có sự phù hợp tốt.

Từ khóa: màng mỏng, nhiệt động lực học...

XÁC SUẤT THIẾT HẠI TRONG BẢO HIỂM VỚI MÔ HÌNH RỦI RO PHỤ THUỘC MARKOV

Nguyễn Thị Thúy Hồng¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Nội dung chính của bài báo là đưa ra được công thức tính chính xác xác suất thiệt hại cho mô hình rủi ro trong bảo hiểm khi dãy tiền thu bảo hiểm và chi trả bảo hiểm là dãy biến ngẫu nhiên phụ thuộc Markov.

Từ khóa: Mô hình rủi ro, xác suất thiệt hại (không thiệt hại), phí bảo hiểm, dãy tiền thu bảo hiểm.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Bảo hiểm là hoạt động qua đó một cá nhân hay tổ chức có quyền được hưởng trợ cấp nhờ vào một khoản đóng góp cho mình hoặc cho người thứ ba trong trường hợp xảy ra rủi ro. Khoản trợ cấp này do một tổ chức trả, tổ chức này có trách nhiệm đối với toàn bộ các rủi ro và đền bù các thiệt hại theo hợp đồng bảo hiểm. Bảo hiểm góp phần bảo đảm cho các quá trình tái sản xuất và đời sống xã hội được diễn ra bình thường.

Các công ty khi tiến hành đầu tư tài chính có thể gặp rủi ro (dẫn đến thua lỗ hoặc phá sản). Các công ty bảo hiểm mở ra nhằm mục đích chịu trách nhiệm và chia sẻ một phần rủi ro này, nhưng ngay chính hoạt động bảo hiểm cũng là một hoạt động đầu tư tài chính nên bản thân nó cũng chứa đựng sự rủi ro. Hiện nay, đứng trước khó khăn của nền kinh tế, các doanh nghiệp ngành bảo hiểm đã không ngừng nỗ lực, vượt khó để tiếp tục phát triển. Một trong những việc quan trọng của các công ty này là đánh giá được mức độ rủi ro, đây là nhu cầu cấp thiết, đòi hỏi cần được nghiên cứu và giải quyết, để hạn chế tối thiểu thiệt hại có thể xảy ra.

Đối với các mô hình rủi ro cổ điển, bài toán thường được nghiên cứu với các giả thiết liên quan tới dãy biến ngẫu nhiên độc lập. Chẳng hạn, như trong kết quả của Cramer – Lundberg về ước lượng xác suất thiệt hại trong mô hình rủi ro với thời gian liên tục, dãy

¹ Nhận bài ngày 5.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Thị Thúy Hồng; Email: ntthong05@gmail.com

các số tiền đòi trả bảo hiểm, cũng như dãy thời gian giữa hai lần đòi trả liên tiếp, đều giả thiết là dãy biến ngẫu nhiên không âm, độc lập, cùng phân phối.

Trong lý thuyết rủi ro, hai mô hình cổ điển sau đây là rất quan trọng và được nghiên cứu nhiều: Mô hình nhị thức hỗn hợp và mô hình Poisson hỗn hợp. Hai tác giả Picard và Lefèvre (xem [8]) đưa ra công thức dưới dạng hiện để tính xác suất phá sản với thời gian hữu hạn trong mô hình Poisson với các quá trình chi trả nhận giá trị nguyên. Một số tác giả (xem De Vylder[3], [4] và Ignatov [5], [6]) đã chỉ ra tầm quan trọng của công thức Picard – Lefèvre cũng như phạm vi ứng dụng rộng rãi của nó. Gần đây hai tác giả Claude Lefèvre và Stephane Loisel (xem [2]) đã mở rộng công thức trong [8] cho mô hình rủi ro bảo hiểm nhị thức và mô hình Poisson. Hơn nữa công thức tính xác suất phá sản còn được cho dưới dạng hiện, song các tác giả này chỉ xét mô hình rủi ro có dãy tiền thu bảo hiểm được giả thiết đơn giản là tắt định, tuyến tính theo thời gian, còn dãy tiền chi trả bảo hiểm là dãy biến ngẫu nhiên độc lập, cùng phân phối và có phân phối nhị thức. Trong [1], chúng tôi xét mô hình mà dãy tiền thu và chi trả bảo hiểm là các dãy biến ngẫu nhiên nhận giá trị nguyên, không âm, độc lập và đã tìm ra công thức tính chính xác xác suất phá sản cho mô hình rủi ro nhị thức tổng quát. Kết quả trong [1] là mở rộng đáng kể kết quả trước đó của Claude Lefèvre và Stephane Loisel trong [2].

Trong bài báo này, chúng tôi đưa ra công thức tính chính xác xác suất thiệt hại (xác suất rủi ro) cho mô hình rời rạc, khi dãy tiền thu bảo hiểm và chi trả bảo hiểm là phụ thuộc Markov. Đây là mở rộng đáng kể cho công thức tính chính xác xác suất phá sản trong [1].

2. NỘI DUNG

Trước hết, chúng tôi xin giới thiệu mô hình rủi ro có dãy tiền thu và chi trả bảo hiểm là phụ thuộc Markov.

2.1. Mô hình rủi ro nhị thức tổng quát với dãy biến ngẫu nhiên phụ thuộc Markov

Bây giờ, chúng ta khảo sát hoạt động của công ty bảo hiểm mà việc hạch toán thu, chi, lỗ, lãi được xét theo những chu kỳ cố định cho trước (ví dụ theo tháng, theo quý hoặc theo năm...), công ty có số vốn ban đầu là $u \in \mathbb{N}^*$.

Tại mỗi chu kỳ t ($t=1, 2, \dots$), ta ký hiệu X_t, Y_t tương ứng là tổng số tiền chi trả và tổng số tiền thu bảo hiểm trong chu kỳ thứ t . Ta ký hiệu U_t là thặng dư của công ty bảo hiểm ở cuối mỗi chu kỳ t , khi đó ta có biểu diễn:

$$U_t \equiv u + \sum_{i=1}^t Y_i - \sum_{i=1}^t X_i. \quad (2.1)$$

Thặng dư phải dương thì công ty mới có lãi, ngược lại tại cuối chu kỳ t xảy ra rủi ro nếu như $U_t < 0$.

Ký hiệu T_u là thời điểm đầu tiên xảy ra rủi ro, T_u là một thời điểm dừng ngẫu nhiên được định nghĩa bởi:

$$T_u := \inf\{t: 1 \leq t \leq T, U_t < 0\},$$

Ở đây, T là một thời điểm nào đó, $0 < T < +\infty$, với quy ước:

$$\inf \emptyset = \infty.$$

Xác suất rủi ro trong thời gian hữu hạn ký hiệu là $\Psi(u, T)$ được định nghĩa bởi:

$$\Psi(u, T) := P\{U_t < 0 \text{ với một } t \text{ nào đó } \leq T\}, \quad (2.2)$$

Ta có $T_u \geq t+1$, có nghĩa là: Trước thời điểm t , rủi ro chưa xảy ra, tức là tại thời điểm $1 \leq i \leq t$ thì thặng dư $U_i > 0$.

Khi đó, xác suất thiệt hại trong (2.2) có quan hệ với xác suất không thiệt hại $P(T_u \geq t+1)$ thông qua biểu thức:

$$\Psi(u, T) = 1 - P(T_u \geq t+1). \quad (2.3)$$

Trong phần tiếp theo, thay cho việc tính xác suất thiệt hại, chúng ta đưa ra công thức tính chính xác xác suất không thiệt hại với mốc thời gian hữu hạn $P(T_u \geq t+1)$ cho mô hình rủi ro (2.1), từ đó tính được xác suất thiệt hại tương ứng (nhờ (2.3)), khi xét dãy tiền chi trả bảo hiểm và thu bảo hiểm $(X_i)_{i \geq 1}$ và $(Y_i)_{i \geq 1}$ là phụ thuộc Markov. Điều đó được thể hiện trong nội dung của định lý sau đây.

2.2. Định lý 2.1

Giả sử công ty bảo hiểm có vốn ban đầu là $u \in \mathbb{N}^$.*

Tại cuối mỗi chu kỳ t , vốn của công ty là biến ngẫu nhiên

$$U_t \equiv u + \sum_{i=1}^t Y_i - \sum_{i=1}^t X_i$$

Trong đó X_i, Y_i tương ứng là tổng số tiền chi ra và tổng số tiền thu được trong chu kỳ thứ i .

Giả sử rằng:

Quá trình chi trả bảo hiểm $(X_i)_{i \geq 1}$ là một xích Markov rời rạc, thuần nhất, nhận giá trị nguyên, không âm với phân phối ban đầu của X_1 : $P(X_1 = k) = p_k, \sum_{k=0}^M p_k = 1$ và ma trận xác suất chuyển $[p_{ij}]$ với $p_{ij} = P(X_{n+1} = j | X_n = i)$.

Quá trình thu bảo hiểm $(Y_i)_{i \geq 1}$ là xích Markov rời rạc, thuần nhất, nhận giá trị nguyên, không âm với phân phối ban đầu của Y_1 : $P(Y_1 = k) = q_k, \sum_{k=0}^M q_k = 1$ và ma trận xác suất chuyển $[q_{ij}]$ với $p_{ij} = P(Y_{n+1} = j | Y_n = i)$.

Tồn tại số nguyên dương $M < \infty$ sao cho $P(Y_1 \leq M) = 1$ và $P(X_1 \leq M) = 1$ (vì số tiền thu và chi trả bảo hiểm chỉ hữu hạn).

Khi đó ta có công thức tính chính xác xác suất không thiệt hại với mốc thời gian hữu hạn $P(T_u \geq t+1)$ như sau:

$$P(T_u \geq t+1) = \left(\sum_{\substack{0 \leq (k_i - k_{i-1}) \leq M \\ 1 \leq i \leq t \\ k_0 = 0}} q_{k_1} q_{k_1, k_2 - k_1} q_{k_2 - k_1, k_3 - k_2} \dots q_{k_{t-1} - k_{t-2}, k_t - k_{t-1}} \left(\sum_{\substack{0 \leq i_1 < k_1 + u \\ 0 \leq i_1 + i_2 < k_2 + u \\ \dots \\ 0 \leq i_1 + \dots + i_t < k_t + u}} p_{i_1} p_{i_1, i_2} \dots p_{i_{t-1}, i_t} \right) \right) \quad (2.4)$$

Chứng minh:

Để cho tiện, ta kí hiệu trong công thức (2.1) dưới dạng:

$$U_t = u + V_t - S_t$$

Trong đó:

$V_t = \sum_{i=1}^t Y_i$ là tổng số tiền thu bảo hiểm của công ty bảo hiểm tính cho đến thời điểm t

(tính theo chu kỳ).

$S_t = \sum_{i=1}^t X_i$ tổng số tiền chi trả bảo hiểm của công ty bảo hiểm tính cho đến thời điểm t (tính theo chu kỳ).

T_u là thời điểm đầu tiên xảy ra rủi ro.

Hiển nhiên ta có quan hệ ngẫu nhiên sau:

$$\{T_u \geq t+1\} = \{U_i > 0, i=1,2,\dots,t\}$$

Mục đích là ta đưa ra công thức tính xác suất không thiệt hại $P(T_u \geq t+1)$.

Ta có:

$$\begin{aligned} (T_u \geq t+1) &= (U_i > 0, 1 \leq i \leq t) = (S_i < V_i + u, 1 \leq i \leq t) \\ &= \bigcap_{i=1}^t \bigcup_{k=0}^{iM} (S_i < k+u)(V_i = k) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Lí do là vì :

$$P(0 \leq Y_i \leq M) = 1 \text{ nên } P(0 \leq V_i = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i \leq iM) = 1$$

Từ (2.5) ta có:

$$\begin{aligned} P(T_u \geq t+1) &= P[(S_1 < u)(V_1 = 0) \cup (S_1 < 1+u)(V_1 = 1) \cup \dots \cup (S_1 < M+u)(V_1 = M)] \cap \\ &\quad \cap [(S_2 < u)(V_2 = 0) \cup (S_2 < 1+u)(V_2 = 1) \cup \dots \cup (S_2 < 2M+u)(V_2 = 2M)] \cap \dots \cap \\ &\quad \cap [(S_t < u)(V_t = 0) \cup (S_t < 1+u)(V_t = 1) \cup \dots \cup (S_t < tM+u)(V_t = tM)] \\ &= P[(S_1 < u) \cap (S_2 < u) \cap \dots \cap (S_t < u)(V_1 = 0)(V_2 = 0) \dots (V_t = 0)] \cup \dots \cup \dots \\ &= \bigcup_{\substack{0 \leq (k_i - k_{i-1}) \leq M \\ 1 \leq i \leq t \\ k_0 = 0}} P\{[(S_1 < k_1 + u) \cap (S_2 < k_2 + u) \cap \dots \cap (S_t < k_t + u)](V_1 = k_1)(V_2 = k_2) \dots (V_t = k_t)\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ta có (2.6) bởi vì do tính chất sau của V_i , chú ý rằng các Y_i nhận giá trị nguyên không âm. Từ đó ta suy ra nếu $i < j$ và $k_i > k_j$ thì:

$$\begin{aligned} P[(V_i = k_i)(V_j = k_j)] &= P[(Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i = k_i)(Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i + \dots + Y_j = k_j)] \\ &= P[(V_i = k_i)(Y_{i+1} + \dots + Y_j = k_j - k_i)] = 0 \end{aligned}$$

Từ (2.6) ta tiếp tục viết lại:

$$P(T_u \geq t+1) = \sum_{\substack{0 \leq (k_i - k_{i-1}) \leq M \\ 1 \leq i \leq t \\ k_0 = 0}} P[(S_1 < k_1 + u)(S_2 < k_2 + u) \dots (S_t < k_t + u)] P[(Y_1 = k_1) \\ (Y_2 = k_2 - k_1) \dots (Y_t = k_t - k_{t-1})]. \quad (2.7)$$

Theo công thức nhân xác suất, ta nhận thấy:

$$P[(Y_1 = k_1)(Y_2 = k_2 - k_1) \dots (Y_t = k_t - k_{t-1})] \\ = P(Y_1 = k_1)P(Y_2 = k_2 - k_1 | Y_1 = k_1)P(Y_3 = k_3 - k_2 | Y_1 = k_1, Y_2 = k_2 - k_1) \dots \\ \dots P(Y_t = k_t - k_{t-1} | Y_1 = k_1, Y_2 = k_2 - k_1, \dots, Y_{t-1} = k_{t-1} - k_{t-2}).$$

Do tính Markov, ta có:

$$P[(Y_1 = k_1)(Y_2 = k_2 - k_1) \dots (Y_t = k_t - k_{t-1})] \\ = P(Y_1 = k_1)P(Y_2 = k_2 - k_1 | Y_1 = k_1)P(Y_3 = k_3 - k_2 | Y_2 = k_2 - k_1) \dots \\ \dots P(Y_t = k_t - k_{t-1} | Y_{t-1} = k_{t-1} - k_{t-2}) \\ = q_{k_1} q_{k_1, k_2 - k_1} q_{k_2 - k_1, k_3 - k_2} \dots q_{k_{t-1} - k_{t-2}, k_t - k_{t-1}}. \quad (2.8)$$

Ta tiếp tục tính toán về phải của (2.7). Theo công thức nhân xác suất thì:

$$P[(S_1 < k_1 + u)(S_2 < k_2 + u) \dots (S_t < k_t + u)] \\ = P(S_1 < k_1 + u)P(S_2 < k_2 + u | S_1 < k_1 + u)P(S_3 < k_3 + u | S_1 < k_1 + u, S_2 < k_2 + u) \dots \\ \dots P(S_t < k_t + u | S_1 < k_1 + u, S_2 < k_2 + u, \dots, S_{t-1} < k_{t-1} + u)$$

Tương tự như trên, do tính Markov, ta có:

$$P[(S_1 < k_1 + u)(S_2 < k_2 + u) \dots (S_t < k_t + u)] \\ = P(S_1 < k_1 + u)P(S_2 < k_2 + u | S_1 < k_1 + u)P(S_3 < k_3 + u | S_2 < k_2 + u) \dots \\ \dots P(S_t < k_t + u | S_{t-1} < k_{t-1} + u) \\ = p_{i_1} p_{i_1, i_2} p_{i_2, i_3} \dots p_{i_{t-1}, i_t} \quad (2.9)$$

Kết hợp các kết quả (2.7), (2.8) và (2.9) lại, ta có công thức tính chính xác xác suất không thiệt hại (2.4).

Vậy định lý đã được chứng minh xong.

3. KẾT LUẬN

Trong mô hình rủi ro (2.1), khi xét hai dãy tiền thu bảo hiểm và chi trả bảo hiểm $\{X_i\}_{i \geq 1}$; $\{Y_i\}_{i \geq 1}$ là các dãy biến ngẫu nhiên phụ thuộc Markov, ta thu được công thức tính chính xác xác suất thiệt hại (2.4) cho dưới dạng hiển với ưu điểm lớn là không phạm phải sai số phương pháp.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bùi Khởi Đàm, Nguyễn Thị Thúy Hồng (2014), "Xác suất phá sản với mô hình rủi ro nhị thức tổng quát", *Vietnam Journal Mathematical Applications*, Vol. 12, N.1.
2. Claude Lefèvre and Stephane Loisel, "On finite – time Ruin probabilities for classical risk models", *Scandinavian Actuarial Journal*, 2008, 1, 41-60.
3. De Vylder, F. E., (1997), "La formule de Picard et Lefèvre pour la probabilité de ruine en temps fini", *Bulletin Francais d'Actuariat*, 1, 30-41.
4. De Vylder, F. E., (1999), "Numerical finite-time ruin probabilities by the Picard-Lefèvre formula", *Scandinavian Actuarial Journal*, 2, 375-386.
5. Ignatov, Z. G., Kaishev, V. K. and Krachunov, R. S., (2001), "An improved finite-time ruin probability formula and its Mathematica implementation", *Insurance: Mathematics and Economics*, 29, 375-386.
6. Ignatov, Z. G., and Kaishev, V. K., (2004), "A finite-time ruin probability formula for continuous claim severities", *Journal of Applied Probability*, 41, 570-578.
7. Nguyễn Quý Hỷ (2004), *Phương pháp mô phỏng số Monte Carlo*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.
8. Picard, Ph. and Lefèvre, Cl., (1997), "The probability of ruin in finite time with discrete claim size distribution", *Scandinavian Actuarial Journal*, 58-69.

RUIN PROBABILITIES IN INSURANCE FOR RISK MODELS WITH SEQUENCES OF MARKOV DEPENDENT RANDOM VARIABLES

Abstract: In this article, we proved the exact formula for the ruin (non-ruin) probability for risk model with sequences of Markov dependent random variables.

Keywords: Risk models, ruin probability, premiums, sequences of premium

HIỆU QUẢ XỬ LÝ NƯỚC THẢI SINH HOẠT BẰNG MÀNG LỌC SINH HỌC MBR

Nguyễn Minh Kỳ¹⁽¹⁾, Lê Thị Ngọc Phương², Lê Văn Trung², Nguyễn Hoàng Lâm³

¹Trường Đại học Nông Lâm TP. Hồ Chí Minh

²Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật TP. Hồ Chí Minh

³Trường Đại học Bách khoa - Đại học Đà Nẵng

Tóm tắt: Mô hình thí nghiệm MBR được vận hành trong thời gian 120 ngày với các tải trọng hữu cơ từ 1,7 đến 6,8 kgCOD/m³.ngày. Hàm lượng BOD₅ và COD đầu ra duy trì ở mức khá thấp cho thấy khả năng xử lý hiệu quả chất hữu cơ của bể phản ứng màng lọc sinh học MBR. Nghiên cứu về mối liên hệ tương quan giữa các thông số ô nhiễm sau xử lý với các yếu tố ảnh hưởng trong quá trình vận hành hệ thống ở mức độ khá chặt ($p < 0,05$). Ưu điểm của công nghệ màng lọc sinh học có thể áp dụng xử lý đạt hiệu quả cao các hợp chất hữu cơ cũng như các chất dinh dưỡng trong nước thải sinh hoạt.

Từ khóa: Loại bỏ, nước thải, sinh hoạt, sinh học, MBR.

1. MỞ ĐẦU

Công nghệ màng lọc sinh học MBR (Membrane Bioreactor) là sự kết hợp quá trình bùn hoạt tính sinh học và màng lọc [2]. Trong đó, gồm hai quá trình cơ bản: Phân hủy sinh học chất hữu cơ và kỹ thuật tách sinh khối vi sinh bằng màng. Đây là một trong những phương pháp hiện đại, đã được áp dụng xử lý thành công nhiều loại đối tượng nước thải khác nhau. Với việc sử dụng màng lọc có kích thước lỗ màng dao động từ 0,01-0,4μm nên vi sinh vật, chất ô nhiễm, bùn bị giữ lại tại bề mặt màng. Nhờ nồng độ sinh khối cao nên gia tăng hiệu quả xử lý nước thải so với phương pháp truyền thống. Hiệu quả xử lý chất ô nhiễm thường đạt mức cao đối với các thông số ô nhiễm như BOD₅, COD, TSS, TN, TP [6,9]. Nhìn chung, công nghệ màng MBR thích hợp xử lý nước thải công nghiệp lẫn sinh hoạt (Roest, et al. 2002) [8,10].

Trong bể phản ứng MBR, hoạt động sống của vi sinh vật trong việc sử dụng cơ chất, thúc đẩy các quá trình hóa sinh và giảm thiểu các chất ô nhiễm. Nồng độ MLSS cao có vai

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 5.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Minh Kỳ; Email: nmky@hcmuaf.edu.vn

trò quan trọng trong quá trình phân hủy các hợp chất hữu cơ (Xing et al., 2000) [12]. Do tầm quan trọng của phương pháp nên có khá nhiều nghiên cứu đã được thực hiện từ trước đến nay [7,13]. Mục đích của nghiên cứu nhằm khảo sát đánh giá hiệu quả xử lý của công nghệ màng lọc MBR trên đối tượng nước thải sinh hoạt.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu nghiên cứu

Màng MBR sử dụng là màng sợi rỗng và có kích thước lỗ lọc 0.4 μ m, nhãn hiệu Mitsubishi (Japan). Nước thải nghiên cứu có thành phần và hàm lượng các chất ô nhiễm được thể hiện chi tiết ở Bảng 1.

Bảng 1. Kết quả chất lượng nước thải sinh hoạt và giới hạn tiếp nhận

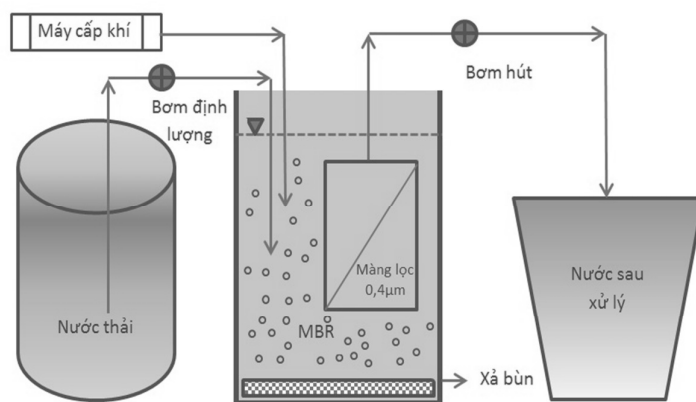
TT	Chỉ tiêu	Đơn vị	Kết quả		QCVN 14:2008/BTNMT (Cột A)
			Mean	SD	
1	pH	-	7,6	0,4	5-9
2	DO	mg/l	1,1	0,13	$\geq 2^a$
3	BOD ₅	mg/l	312	14,5	30
4	COD	mg/l	630	27,8	75 ^b
5	TSS	mg/l	4027	98,3	50
6	Nito tổng	mg/l	33	4,7	20 ^b
7	Photpho tổng	mg/l	21	3,2	4 ^b
8	Coliforms	MPN/100 ml	2,1.10 ⁶	10 ²	3000

Chú thích: QCVN 14:2008/BTNMT – Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia về nước thải sinh hoạt ^aQCVN 39:2011/BTNMT – Quy chuẩn quốc gia về chất lượng nước dùng cho tưới tiêu ^bQCVN 40:2011/BTNMT – Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia về nước thải công nghiệp (cột A)

2.2. Mô hình thí nghiệm

Bể phản ứng được thiết kế với dung tích hữu ích 36 lít (kích thước L.W.H = 24*20*75cm) và module màng nhúng chìm có kích thước lỗ lọc 0,4 μ m, diện tích bề mặt 0,9 m² (Mitsubishi, Japan). Thời gian lưu bùn SRT được kiểm soát theo chế độ 25 ngày. Chu kỳ hoạt động và nghỉ của màng lọc với thời gian 10:1 phút. Để duy trì DO $\geq$ 2,0 mg/l trong quá trình vận hành, nghiên cứu bố trí sử dụng thiết bị cấp khí có lưu lượng 1,7 m³/h. Hiệu suất lọc qua màng tương đương 15-20 l/(m².h). Không khí được cung cấp để vi sinh

vật phân hủy chất hữu cơ, thúc đẩy quá trình nitrate hóa và giảm tắc nghẽn màng. Nồng độ MLSS ban đầu trong bể phản ứng duy trì tương đương 10.000 mg/l.



Hình 1. Sơ đồ mô hình thí nghiệm

Mô hình nghiên cứu tiến hành điều chỉnh pH dao động trong khoảng 6,5-8,0 và vận hành trong thời gian 120 ngày để khảo sát, đánh giá ảnh hưởng lên hiệu quả xử lý BOD₅, COD, TSS, N, P. Trong quá trình vận hành chỉ rửa súc màng bằng nước sạch, súc khí bề mặt và không bổ sung dinh dưỡng. Thí nghiệm với dòng nước thải: 4, 8, 12, 16 lít/giờ. Tương ứng thời gian lưu thủy lực HRT lần lượt 9,0; 4,5; 3,0 và 2,25 giờ. Tải trọng hữu cơ OLR dao động trong khoảng 1,7 đến 6,8 kgCOD/m³.ngày.

2.3. Phương pháp phân tích và xử lý số liệu

Phương pháp phân tích các thông số chất lượng nước theo phương pháp chuẩn APHA, 2005 [1]. Tần suất đo đạc các chỉ tiêu chất lượng nước được thực hiện 3 lần/tuần. Các giá trị pH, nhiệt độ, DO được đo bằng thiết bị đo nhanh. Xác định chỉ tiêu BOD₅ bằng phương pháp ủ trong tủ cấy ở điều kiện 20⁰C và 5 ngày. Hàm lượng COD, TN, TP đo bằng máy quang phổ UV-VIS. Chỉ số TSS, MLSS được xác định theo phương pháp trọng lượng. Các số liệu nghiên cứu được thống kê và xử lý bằng các phần mềm Microsoft Excel 2010, SPSS 13.0 for Windows.

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ BÀN LUẬN

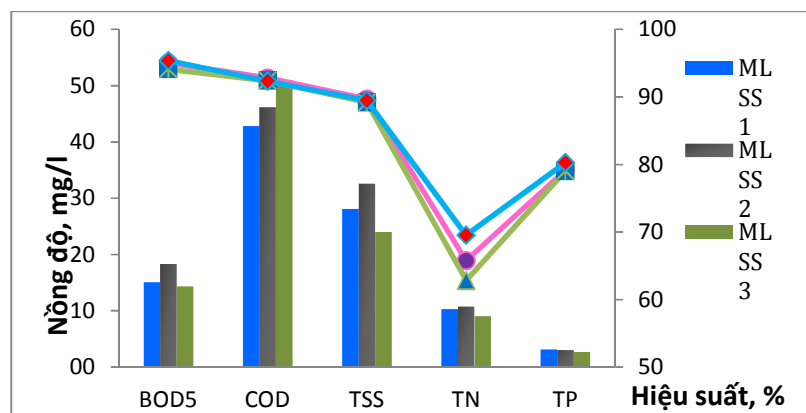
Theo Metcalf & Eddy, 2002 [4], bể phản ứng MBR duy trì nồng độ bùn ở mức cao và có tính hiệu quả về chất lượng thông số sau xử lý cao hơn các bể phản ứng bùn hoạt tính truyền thống. Bùn sinh học sẽ được giữ lại trong bể phản ứng, mật độ vi sinh cao nên nâng cao hiệu suất xử lý chất ô nhiễm [11]. Hiệu suất xử lý BOD₅, COD, TSS, TN, TP lần lượt

tương ứng 94,6; 92,6; 89,4; 64,6 và 79,2%. Ở các ngưỡng giá trị MLSS khác nhau, hiệu quả loại bỏ chất ô nhiễm cũng khá tương đồng.

Bảng 2. Hiệu quả xử lý trong mỗi liên hệ với nồng độ MLSS

Thông số		MLSS							
		MLSS ₁		MLSS ₂		MLSS ₃		Tổng	
		Mean	SD	Mean	SD	Mean	SD	Mean	SD
BOD ₅	mg/l	15,1	5,1	18,4	5,3	14,3	6,1	16,6	5,4
	H,%	95,0	1,7	94,1	1,7	95,4	1,8	94,6	1,7
COD	mg/l	42,8	5,6	46,2	5,9	51,0	8,7	45,1	6,3
	H,%	92,8	1,2	92,4	1,2	92,3	1,2	92,6	1,2
TSS	mg/l	28,1	8,4	32,6	8,6	24,0	5,6	30,0	8,7
	H,%	89,7	3,9	89,2	3,3	89,5	4,7	89,4	3,6
TN	mg/l	10,3	2,6	10,8	2,5	9,1	4,1	10,5	2,6
	H,%	65,8	8,0	62,8	7,8	69,5	11,0	64,6	8,1
TP	mg/l	3,1	0,5	3,1	0,7	2,7	1,2	3,1	0,6
	H,%	79,2	4,9	79,0	5,5	80,3	6,1	79,2	5,2

Hiệu suất xử lý BOD₅ và COD cao và được thể hiện bởi hiệu suất thấp nhất cũng lần lượt đạt 90,5 và 89,6%. Trong khi, mức độ loại bỏ chất ô nhiễm cao nhất đạt 97,1 và 94,9% lần lượt đối với BOD₅ và COD. Kết quả loại các chất rắn lơ lửng TSS và dinh dưỡng N, P thấp nhất và cao nhất tương ứng 80,8; 52,5; 64,6% và 94,2; 81,3; 85,1%. Quá trình loại Nito khá cao do nguyên nhân thời gian lưu bùn SRT dài (25 ngày) nên vi khuẩn nitrate hóa được giữ lại trong bể phản ứng MBR và qua đó thúc đẩy việc xử lý Nito [5].



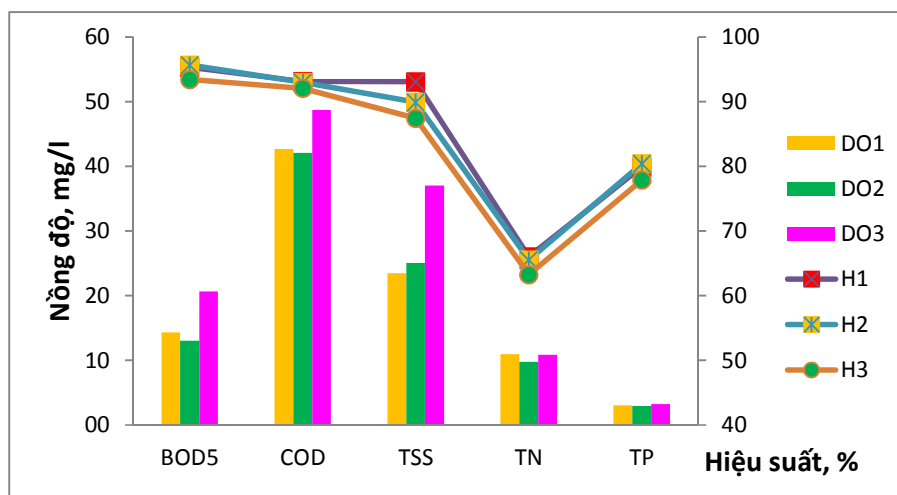
Hình 2. Ảnh hưởng của MLSS lên nồng độ các chất ô nhiễm

Hình 2 cho thấy nồng độ bùn MLSS không có tác động tiêu cực nào đến hiệu quả xử lý các chất ô nhiễm trong bể phản ứng. Thông thường, nồng độ bùn cao trong bể phản ứng thường ảnh hưởng đến chất lượng nước đầu ra trong hệ thống bùn hoạt tính truyền thống. Tuy nhiên, đối với bể MBR có ưu điểm có thể khắc phục và hạn chế tình trạng này nhờ màng lọc với kích thước siêu nhỏ, có chức năng lọc các hạt chất bẩn trong hệ thống. Nghiên cứu xem xét đánh giá ảnh hưởng của nồng độ MLSS tác động lên hiệu quả xử lý các chất rắn, chất hữu cơ và dinh dưỡng trong nước thải với các ngưỡng giá trị khác nhau: $MLSS1 < 10 \text{ g/l}$; $MLSS2 = 10-14 \text{ g/l}$ và $MLSS3 > 14 \text{ g/l}$. Những ảnh hưởng của hàm lượng MLSS được thể hiện ở Hình 2. Phần lớn các thông số có giá trị hàm lượng sau xử lý thấp, ổn định và thuộc trong ngưỡng giới hạn xả thải cho phép của Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia về nước thải sinh hoạt và công nghiệp. Bởi lẽ, với thời gian lưu bùn dài, bể phản ứng MBR duy trì nồng độ sinh khối ở mức cao và dẫn đến tăng hiệu quả xử lý chất các chất ô nhiễm (Katayon et al., 2004) [3]. Hàm lượng BOD₅ và COD đầu ra duy trì ở mức khá thấp, điều này cho thấy khả năng xử lý hiệu quả chất hữu cơ của bể phản ứng màng lọc sinh học MBR. Kết quả phân tích ANOVA cho thấy không có sự khác nhau giữa các nhóm nồng độ MLSS lên quá trình xử lý ($p > 0,05$). Điều này có thể lý giải khoảng biến thiên MLSS trong bể phản ứng rộng hơn so với quá trình bùn hoạt tính truyền thống.

Bảng 3. Hiệu quả xử lý chất ô nhiễm trong mối liên hệ với nồng độ DO

Thông số		DO							
		DO ₁		DO ₂		DO ₃		Tổng	
		Mean	SD	Mean	SD	Mean	SD	Mean	SD
BOD ₅	mg/l	14,3	4,3	13,0	3,2	20,7	4,6	16,6	5,4
	H,%	95,3	1,4	95,7	1,1	93,4	1,6	94,6	1,7
COD	mg/l	42,6	4,7	42,1	6,8	48,7	4,7	45,1	6,3
	H,%	93,1	1,1	93,0	1,1	92,0	1,1	92,6	1,2
TSS	mg/l	23,5	2,4	25,1	4,5	37,0	8,0	30,0	8,7
	H,%	93,0	0,7	89,9	3,3	87,4	3,2	89,4	3,6
TN	mg/l	10,9	2,3	9,7	2,6	10,9	2,7	10,5	2,6
	H,%	66,0	7,3	65,5	8,7	63,2	8,2	64,6	8,1
TP	mg/l	3,0	0,3	3,0	0,5	3,2	0,8	3,1	0,6
	H,%	79,9	2,8	80,4	4,2	77,9	6,5	79,2	5,2

Trong quá trình vận hành bể phản ứng MBR, nồng độ oxy hòa tan có vai trò quan trọng cung cấp dưỡng khí để vi sinh vật oxy hóa cơ chất. Nồng độ các thông số chất ô nhiễm đầu ra và hiệu suất xử lý được trình bày ở Bảng 3 và Hình 3. Để đánh giá sự ảnh hưởng và khác biệt liên quan đến chất lượng sau xử lý, nghiên cứu tiến hành kiểm định thống kê bằng phép phân tích ANOVA với các khoảng giá trị DO_{1-3} : $DO_1 < 4,0$ mg/l; $DO_2 = 4,0-5,0$ mg/l và $DO_3 > 5,0$ mg/l.



Hình 3. Ảnh hưởng của DO lên nồng độ các chất ô nhiễm

Trung bình hiệu quả xử lý BOD5 lần lượt có giá trị 95,3% (SD=1,4); 95,7% (SD=1,1) và 93,4% (SD=1,6) ứng với các khoảng giá trị số DO_{1-3} . Mức độ loại bỏ hàm lượng COD trung bình ổn định và được dao động từ 92,0% đến 93,1%. Giá trị COD sau xử lý trong các khoảng giá trị DO tương ứng 42,6 (SD=4,7); 42,1 (SD=6,8) và 48,7 (SD=4,7) mg/l. Mức độ xử lý khác nhau giữa các khoảng giá trị DO được khẳng định bởi quá trình kiểm định ANOVA với các đại lượng thống kê $df=2$; $F=16,200$; $Sig.<0,001$ (BOD5) và $df=2$; $F=6,682$; $Sig.=0,003$ (COD). Về sự khác nhau về hàm lượng TSS trong quá trình vận hành bể phản ứng MBR cũng được thể hiện rõ trong các khoảng DO ($df=2$; $F=21,315$; $Sig.<0,001$). Tuy nhiên, sự chênh lệch hàm lượng các chất dinh dưỡng N và P không có sự khác biệt mang ý nghĩa thống kê ($p>0,05$).

Ngoài ra, mối liên hệ tương quan giữa các thông số ô nhiễm với các yếu tố trong quá trình vận hành hệ thống xử lý nước thải sinh hoạt bằng màng lọc sinh học MBR được khám phá.

Bảng 4. Hệ số tương quan giữa các thông số chất ô nhiễm với các yếu tố vận hành

		BOD₅	COD	TSS	TN	TP
HRT	Hệ số Pearson	0,6(**)	0,4(*)	0,8(**)	0,4(*)	0,5(**)
	Sig.(2-tailed)	0,000	0,016	0,000	0,017	0,003
	N	41	41	41	41	41
MLSS	Hệ số Pearson	-0,1	0,04	-0,2	-0,2	-0,2
	Sig.(2-tailed)	0,627	0,802	0,356	0,345	0,320
	N	41	41	41	41	41
DO	Hệ số Pearson	0,6(**)	0,4(**)	0,8(**)	0,2	0,2
	Sig.(2-tailed)	0,000	0,008	0,000	0,184	0,125
	N	41	41	41	41	41

Chú thích: ** $\alpha=0,01$; * $\alpha=0,05$.

Thời gian lưu thủy lực HRT có mối tác động thuận với chất lượng các thông số đầu ra như BOD₅, COD, TSS, TN và TP. Hệ số tương quan thể hiện mối liên hệ khá tốt giữa thông số chất lượng nước sau xử lý với thời gian lưu HRT và đều có ý nghĩa thống kê ($p<0,05$). Trong đó, mối liên hệ giữa HRT với TSS thể hiện rõ nhất với hệ số tương quan chặt, với $r = 0,8$ ($p<0,01$). Các mối tương tác còn lại lần lượt thể hiện với hệ số tương quan khá chặt, tương ứng lần lượt bằng 0,4 (COD-HRT, TN-HRT); 0,5 (TP-HRT) và 0,6 (BOD₅-HRT). Khác với những ảnh hưởng của HRT, ảnh hưởng của MLSS lên chất lượng nước đầu ra không có ý nghĩa thống kê, $p>0,05$. Hệ số tương giữa chúng cũng khá thấp và dao động từ -0,2 đến 0,2 (Bảng 4). Có thể thấy, mối liên hệ hay tác động của hàm lượng MLSS lên nồng độ BOD₅, COD, TSS, TN, TP là không được thể hiện rõ ràng với các khoảng giá trị MLSS được khảo sát. Trong khi, mức độ tương quan cùng chiều của hàm lượng DO với các thông số chất lượng nước được thể hiện khá tốt, cụ thể như trường hợp của BOD₅ ($r=0,6$; $p<0,01$); COD ($r=0,4$; $p<0,001$) và TSS ($r=0,8$; $p<0,01$). Đối với hệ số tương quan Pearson giữa hàm lượng DO với nồng độ TN và TP khá nhỏ ($r=0,2$; $p>0,05$) cho thấy mức ảnh hưởng tương quan giữa chúng không thực sự chặt chẽ.

4. KẾT LUẬN

Công nghệ màng lọc sinh học có ưu điểm xử lý đạt hiệu quả cao các hợp chất hữu cơ cũng như các chất dinh dưỡng. Phần lớn các thông số có giá trị hàm lượng sau xử lý thấp, ổn định và thuộc trong ngưỡng giới hạn xả thải cho phép của Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia

về nước thải. Kết quả nghiên cứu cho thấy vai trò quan trọng của nồng độ MLSS và DO đối với việc xử lý các chất ô nhiễm trong quá trình màng sinh học MBR. Quá trình vận hành bể phản ứng MBR, nồng độ oxy hòa tan có vai trò quan trọng cung cấp dưỡng khí để vi sinh vật oxy hóa cơ chất. Nhìn chung, phương pháp này có thể khắc phục và hạn chế tình trạng này nhờ màng lọc với kích thước siêu nhỏ, có chức năng lọc các hạt chất bẩn trong hệ thống. Ngoài ra, hệ số tương quan giữa các thông số vận hành với các chỉ tiêu ô nhiễm nước được khám phá và có ý nghĩa thống kê.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. APHA, AWWA, WEF (2005), *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater*, 21st Ed, Washington DC: American Public Health Association.
2. Baker R.W., (2004), *Membrane Technology and Application*, 2nd Ed, USA: John Wiley & Sons Ltd.
3. Katayon S., M.J. Megat Mohd Nool, J. Ahmad, L.A. Abdul Ghani, H. Nagaoka, H. Aya, (2004), *Effects of mixed liquor suspended solid concentrations on membrane bioreactor efficiency for treatment of food industry wastewater*, Journal of Desalination, 167, pp.153-158.
4. Metcalf & Eddy (2002), *Wastewater Engineering, Treatment, Reuse*, 4th Edition, New York: MC Graw-Hill.
5. Muller E.B., A.H. Stouthamer, Van Verseveld H. W., (1995), *A novel method to determine maximal nitrification rates by sewage sludge at a non-inhibitory nitrite concentration applied to determine maximal rates as a function of the nitrogen load*, Water Research, 29(4), pp.1191-1197
6. Porntip, C.S., Jansongkod, K., Anthony, P., & Christelle, W. (2006), *Benefits of MBR in seafood wastewater treatment and water reuse: study case in Southern part of Thailand*, Desalination., 200, pp.712-714.
7. Ren N., Z. Chen, A. Wang, D. Hu (2005), *Removal of organic pollutants and analysis of MLSS-COD removal relationship at different HRTs in a submerged membrane bioreactor*, Int. Biodeterior. Biodegrad., 55, pp.279-284.
8. Rosenburger, S., Kruger, U., Witzig, W., Manz, W., Szewzyk, U., Kraume, M. (2002), *Performance of a Bioreactor with Submerged membranes for Anaerobic Treatment of Municipal Waste Water*, Water Research., 36(2), pp.413-420.
9. Saima Fazal, Beiping Zhang, Zhengxing Zhong, Lan Gao, Xiejuan Lu (2015), *Membrane Separation Technology on Pharmaceutical Wastewater by Using MBR (Membrane Bioreactor)*, Journal of Environmental Protection, 6, pp.299-307.
10. Van der Roest, H.F., Lawrence, D.P., Van Bentem, A.G.N., (2002), *Membrane bioreactors for municipal wastewater treatment*, Cornwall, UK: IWAI Publishing.
11. Water Environment Federation (2006), *Membrane systems for wastewater treatment*, New York: Press McGraw-Hill.
12. Xing C.H., Tardieu E., Qian Y., Wen W.H., (2000), *Ultrafiltration membrane bioreactor for urban wastewater reclamation*, J. Membr. Sci., 177, pp.73-82.
13. Zhang J., H.C.Chua, J.Zhou, Fane A.G., (2006), *Factors affecting the membrane performance in submerged membrane bioreactors*, J. Membr. Sci., 284, pp.54-66.

TREATMENT EFFICIENCY OF DOMESTIC WASTEWATER BY BIOLOGICAL MEMBRANE REACTOR MBR

Abstract: *This paper presents results of the influence of operational parameters on pollutants removal efficiency by Membrane Bioreactor (MBR). The experiment model is operated during 120 days with the organic loading rates from 1.7 to 6.8 kgCOD/m³.day. An effluent BOD₅ and COD levels are remained lowly, showing the effective treatment possibility of organic matters by MBR. The correlated relationship between the effluent polluted parameters and affecting factors on operational process are quite strong ($p < 0.05$). The advantages of MBR can be applied for effective removal organic compounds as well as nutrients in domestic wastewater.*

Keywords: *Removal, wastewater, biological, MBR.*

MICHEL PARAMETER IN 3-3-1 MODEL WITH THREE LEPTON SINGLETS

Hoang Ngoc Long¹

Institute of Physics, Vietnam Academy of Science and Technology

Abstract: We show that the mass matrix of electrically neutral gauge bosons in the recently proposed model based on $SU(3)_C \otimes SU(3)_L \otimes U(1)_X$ group with three lepton singlets [1] has two exact eigenvalues: a zero corresponding the photon mass and the second one equaling the mass of the imaginary component $A_{5\mu}$. Hence the neutral non-Hermitian gauge boson X_μ^0 (defined as $\sqrt{2}X_\mu^0 = A_{4\mu} - iA_{5\mu}$) is properly determined. With extra vacuum expectation value of the Higgs field n_2 , there are mixings among the Standard Model W boson and the extra charged gauge boson Y carrying lepton number 2 (bilepton) as well as among neutral gauge bosons Z , Z' and X^0 . These mixings lead to very rich phenomenology of the model. The leading order of the Michel parameter (ρ) has quite special form requiring an equality of the vacuum expectation values in the second step of spontaneous symmetry breaking, namely, $k_1 = k_2$.

Keywords: 12.10.Dm, 12.60.Cn, 12.60.Fr, 12.15.Mm

1. INTRODUCTION

At present, it is well known that neutrinos are massive that contradicts the Standard Model (SM). The experimental data [2] show that masses of neutrinos are tiny small and neutrinos mix with special pattern in approximately tribimaximal form [3]. The neutrino masses, dark matter and the baryon asymmetry of Universe (BAU) are the facts requiring extension of the SM.

Among the extensions beyond the SM, the models based on $SU(3)_C \otimes SU(3)_L \otimes U(1)_X$ (3-3-1) gauge group [4, 5] have some interesting features including the ability to explain why there exist three families of quarks and leptons [4, 5] and the electric charge quantization [6]. In this scheme the gauge couplings can be unified at the scale of order TeV *without supersymmetry* [7].

¹ Nhận bài ngày 11.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Hoàng Ngọc Long; Email: hnlong@iop.vast.ac.vn

Concerning the content in lepton triplet, there exist two main versions of 3-3-1 models: the minimal version [4] without extra lepton and the model with right-handed neutrinos [5] without exotic charged particles. Due to the fact that particles with different lepton numbers lie in the same triplet, the lepton number is violated and it is better to deal with a new conserved charge $\mathcal{L}$ commuting with the gauge symmetry [8]

$$L = \frac{4}{\sqrt{3}}T_8 + \mathcal{L}. \quad (1.1)$$

In the framework of the 3-3-1 models, almost issues concerning neutrino physics are solvable. In the minimal 3-3-1 model where perturbative regime is trustable until 4-5 TeV, to realize idea of seesaw, the effective dimension-5 operator is used [9]. In regard to the 3-3-1 model with right-handed neutrinos, effective-5 operators are sufficient to generate light neutrino masses. The effective dimension-5 operator may be realized through a kind of type-II seesaw mechanism implemented by a sextet of scalars belonging to the GUT scale [10]. There are some ways to explain smallness of neutrino masses: the radiative mechanism, the seesaw one or their combination - radiative seesaw. The seesaw mechanism is the most easy and elegant way of generating small neutrino masses by using the Majorana neutrinos with mass belonging to GUT scale. With such high scale, the Majorana neutrinos are unavailable for laboratory searches. The existence of sextet is unfavorableness because of lack predictability associated with it. There are attempts to improve the situation.

In the recently proposed model [1], the authors have introduced three lepton/neutrino singlets and used radiative mechanism to get a model, where the seesaw mechanism is realized at quite low scale of few TeVs. We remind that in the 3-3-1 model with right-handed neutrinos, there are two scalar triplets η, χ ¹ containing two electrically neutral components lying at top and bottom of triplets: η_1^0, χ_1^0 and η_3^0, χ_3^0 . In the previous version [5], only η_1^0 and χ_3^0 have vacuum expectation values (VEVs). However, in the new version, the η_3^0 carrying lepton number 2 has larger VEV of new physics scale. This leads to the mixings in both charged and neutral gauge boson sectors. In the neutral gauge boson sector, the mass mixing matrix is 4×4 . In general, the diagonalizing process for 4×4 matrix is approximate only. However, in this paper, we show that the matrix has two exact eigenvalues and eigenstates. As a result, the diagonalization is exact!

This paper is organized as follows. In Sect.2, we briefly give particle content of the model. Sect.3 is devoted for gauge boson sector. Mass mixing matrices for charged and neutral gauge bosons are presented. The exact solutions of 4×4 with some special feature

¹ In this work, the Higgs triplets are labeled as ρ, χ, η instead of ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 as in Ref. [1].

are presented. In Sect.4 we present the ρ parameter of the model and the equality of two VEVs at the second step of spontaneous symmetry breaking. We give the conclusions in the last section - Sect.5.

2. THE MODEL

As usual [5], the left-handed leptons are assigned to the triplet representation of $SU(3)_L$

$$f_L^\ell = (v_\ell, \ell^-, N_\ell^c) \sim \left(1, 3, -\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right), \ell_R \sim (1, 1, -1, 1), \quad (2.1)$$

where $\ell = 1, 2, 3 \equiv e, \mu, \tau$. The numbers in bracket are assignment in $SU(3)_C, SU(3)_L, U(1)_X$ and $\mathcal{L}$.

The third quark generation is in triplet

$$Q_L^3 = (t, b, T)_L^T \sim \left(3, 3, \frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\right), T_R \sim \left(3, 1, \frac{2}{3}, -2\right) t_R \sim \left(3, 1, \frac{2}{3}, 0\right), b_R \sim \left(3, 1, -\frac{1}{3}, 0\right).$$

Two first quark generations are in antitriplet

$$Q_L^i = (d_i, -u_i, D_i)_L^T \sim \left(3, 3^*, 0, -\frac{2}{3}\right), i = 1, 2, D_{iR} \sim \left(3, 1, \frac{1}{3}, 2\right), \\ u_{iR} \sim \left(3, 1, \frac{2}{3}, 0\right), d_{iR} \sim \left(3, 1, -\frac{1}{3}, 0\right)$$

In addition to the new two-component neutral fermions present in the lepton triplet $N_L^c \equiv (N^c)_L \equiv (v_R)^c$ where $\psi^c = -C\bar{\psi}^T$, ones introduce new sequential lepton-number-carrying gauge singlets $S = \{S_1, S_2, S_3\}$ with the following number [1]

$$S_i \sim (1, 1, 0, -1).$$

With the above $\mathcal{L}$ assignment the electric charge operator is given in terms of the $U(1)_X$ generator X and the diagonal generators of the $SU(3)_L$ as

$$Q = T_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}T_3 + X \quad (2.2)$$

Note that in the electric charge operator given in Ref.[1], here, the sign in front of T_3 is *opposite*, because the leptons lie in antitriplet. If so the electrically neutral gauge bosons in the gauge matrix below [see Eq.(3.3)] are A_4, A_5 instead of A_6, A_7 .

In order to spontaneously break the weak gauge symmetry, ones introduce three scalar triplets with VEVs

$$\chi = (\chi'^0, \chi^-, \chi^0)^T \sim \left(1, 3, -\frac{1}{3}, \frac{4}{3}\right); \langle \chi \rangle = (0, 0, n_1)^T, \quad (2.3)$$

$$\eta = (\eta^0, \eta^-, \eta'^0)^T \sim \left(1, 3, -\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}\right); \langle \eta \rangle = (k_2, 0, n_2)^T \quad (2.4)$$

$$\rho = (\rho^+, \rho^0, \rho'^+)^T \sim \left(1, 3, \frac{2}{3}, -\frac{2}{3}\right); \langle \rho \rangle = (0, k_1, 0,)^T \quad (2.5)$$

With this VEVs structure, as we see below, the simplest consistent neutrino mass, avoiding the linear seesaw contribution is realized [11]. Remind that n_2 is a VEV of the lepton number carrying scalar, while all of other VEVs do not.

The spontaneous symmetry breaking follows the pattern

$$SU(3)_L \otimes U(1)_X \xrightarrow{n_{1,2}} SU(2)_L \otimes U(1)_Y \xrightarrow{k_{1,2}} U(1)_Q.$$

The Yukawa Lagrangian of quark sector is as follows [1, 5]

$$\mathcal{L}_{\text{quarks}} = y \overline{Q}_L^3 \hat{T}_R \chi + y_{ij}^D \overline{Q}_L^i \hat{T}_R^j \chi^* + y_{i\alpha}^u \overline{Q}_L^i \hat{u}_R^\alpha \rho + y_{3,\alpha}^u \overline{Q}_L^3 \hat{u}_R^\alpha \eta + y_{3,\alpha}^d \overline{Q}_L^3 \hat{d}_R^\alpha + y_{i,\alpha}^d \eta + H.c. \quad (2.6)$$

The VEV n_1 provides masses for exotic quarks, while n_2 causes mixing among exotic quarks T , D_i and ordinary ones.

For the lepton sector, we have [1]

$$\mathcal{L}_{\text{leptons}} = y_{i,j}^\ell \overline{f}_L^j l_R^i \rho + y_{i,j}^A \varepsilon^{abc} (\overline{f}_L^j)_b^c (\rho^*)_c + y_{i,j}^s \overline{f}_L^j S^i \chi + H.c. \quad (2.7)$$

where $i, j = 1, 2, 3$ is the flavor index and $a, b, c = 1, 2, 3$ is the $SU(3)$ index. Note that only y^A is antisymmetric and η does not couple to leptons. The charged leptons get masses the same as in the 3-3-1 model with right-handed neutrino [5]. The neutrino mass matrix at the tree level, in the basis (ν_L, N^c, S) is given by [1]

$$M_\nu = \begin{pmatrix} 0 & m_D & 0 \\ & 0 & M \\ & & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

where $m_D = k_1 y^A$, and $M = n_1 y^s$. At this level, one state ν_1 is massless. The one-loop radiative corrections, with gauge bosons in the loop, yield a calculable Majorana mass term [1]. Note that the radiative seesaw is implied for the minimal version in Ref.[12], where the scalar bilepton is in the loop. The obtained neutrino mass matrix and the charged lepton masses have a strong correlation leading to leptogenesis of the model. However, in this work, we focus our attention only in the gauge boson sector.

3. GAUGE BOSON SECTOR

The kinetic term for the scalar fields is

$$\mathcal{E}Kin = \sum_{H=\chi, \eta, \rho} (D^\mu H)^\dagger (D_\mu H) \quad (3.1)$$

The covariant derivative is

$$D_\mu = \partial_\mu - ig A_{a\mu} T_a - ig' X B_\mu T_9, \quad (3.2)$$

where X is the $U(1)_X$ charge of the field, $A_{a\mu}$ and B_μ are the gauge bosons of $SU(3)_L$ and $U(1)_X$, respectively. The above equation applies for triplet is as follows: $T_a \rightarrow \lambda_a/2$, $T_9 \rightarrow \lambda_9/2$, where λ_i are the Gell-Mann matrices, and $\lambda_9 = \sqrt{\frac{2}{3}} \text{diag}(1, 1, 1)$. The matrix $A_\mu \equiv \sum_a A_\mu^\alpha \lambda_a$ is

$$A^\mu = \begin{pmatrix} A_3^\mu + \frac{1}{\sqrt{3}}A_8^\mu & \sqrt{2}W_{12}^{\mu+} & A_4^\mu - iA_5^\mu \\ \sqrt{2}A_{12}^{\mu-} & -A_3^\mu + \frac{1}{\sqrt{3}}A_8^\mu & \sqrt{2}W_{67}^{\mu-} \\ A_4^\mu + iA_5^\mu & \sqrt{2}W_{67}^{\mu+} & -\frac{2}{\sqrt{3}}A_8^\mu \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

The charged states are defined as

$$W_{12}^{\mu\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_1^\mu \pm iA_2^\mu), \quad W_{67}^{\mu\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_6^\mu \pm iA_7^\mu) \quad (3.4)$$

The mass Lagrangian of gauge fields is given by

$$\mathcal{E}_{mas} = \sum_{H=\chi, \eta, \rho} (D^\mu \langle H \rangle)^\dagger (D_\mu \langle H \rangle) \quad (3.5)$$

In the charged gauge boson sector, the mass Lagrangian in (3.5) gives one decoupled A_5^μ with mass

$$m_{A_5}^2 = \frac{g^2}{4}(n_1^2 + n_2^2 + k_2^2) \quad (3.6)$$

and two others with the mass matrix given in the basis of (W_{12}^μ, W_{67}^μ) as

$$M_{charge} = \frac{g^2}{2} \begin{pmatrix} k_1^2 + k_2^2 & n_2 k_2 \\ n_2 k_2 & n_1^2 + n_2^2 + k_1^2 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

The matrix in Eq. (3.7) has two eigenvalues

$$\lambda_{1,2} - k_1^2 = \frac{1}{2}(n_1^2 + n_2^2 + k_1^2 + \sqrt{\Delta}), \quad (3.8)$$

Where

$$\Delta = (n_1^2 + n_2^2 + k_2^2)^2 + 4n_2^2 k_2^2 = (n_1^2 + n_2^2)^2 \left\{ 1 + \frac{k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)^2} [2(n_2^2 - n_1^2) + k_2^2] \right\} \quad (3.9)$$

In the limit $n_1 \sim n_2 \gg k_1 \sim k_2$, one has

$$\sqrt{\Delta} = n_1^2 + n_2^2 + k_2^2 - \frac{2n_1^2 k_2^2}{n_1^2 + n_2^2} + \frac{k_2^4 n_1^2}{(n_1^2 + n_2^2)^2} = (n_1^2 + n_2^2)^2 \left[1 - \frac{2n_1^2}{n_1^2 + n_2^2} \right] + O(k^8) \quad (3.10)$$

We will identify the light eigenvalue with square mass of the SM W boson, while the heavy one with that of the new charged gauge boson Y carrying lepton number 2 (bilepton):

$$m_W^2 = \frac{g^2}{2} \lambda_1 = \frac{g^2}{2} \left[k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} - \frac{n_1^2 k_2^4}{(n_1^2 + n_2^2)^2} \right] + O(k^6) \quad (3.11)$$

$$m_Y^2 = \frac{g^2}{2} \lambda_2 = \frac{g^2}{2} \left[n_1^2 + n_2^2 + k_1^2 + k_2^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} + \frac{n_1^2 k_2^4}{(n_1^2 + n_2^2)^2} \right] + O(k^6) \quad (3.12)$$

In the limit $n_1 \sim n_2 \gg k_1 \sim k_2$, our result is consistent with that in [1].

Two physical bosons are determined as [13]

$$W_\mu^- = \cos\theta W_{\mu 12}^- - \sin\theta W_{\mu 67}^-; Y_\mu^- = \sin\theta W_{\mu 12}^- + \cos\theta W_{\mu 67}^- \quad (3.13)$$

where the $W - Y$ mixing angle θ characterizing lepton number violation is given by

$$\tan\theta \equiv \epsilon \sim \frac{2n_1^2 k_2^2}{n_1^2 + n_2^2 - k_2^2} \quad (3.14)$$

We emphasize that due to $W - Y$ mixing, both the W boson of the SM and the bilepton Y contribute to the neutrinoless double beta decay [14].

Now we turn to the electrically neutral gauge boson sector. Four neutral fields, namely, $A_3^\mu, A_8^\mu, B^\mu, A_4^\mu$ mix

$$M^2 = \frac{g^2}{2} \begin{pmatrix} k_1^2 + k_2^2 & \frac{1}{\sqrt{3}}(k_2^2 + k_1^2) & -t\sqrt{\frac{2}{27}}(k_2^2 + 2k_1^2) & n_2 k_2 \\ \frac{1}{3}\{4(n_1^2 + n_2^2) + (k_1^2 + k_2^2)\} & M_{23} & -\frac{1}{\sqrt{3}}n_2 k_2 \\ M_{33} & n_1^2 + n_2^2 + k_2^2 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

where we have denoted

$$M_{23} = \frac{\sqrt{2}}{9} t [2(n_1^2 + n_2^2) + (2k_1^2 - k_2^2)], M_{33} = \frac{2t^2}{27} [(n_1^2 + n_2^2) + (4k_1^2 + k_2^2)]$$

and t is given by (see the last paper in Ref. [5])

$$t = \frac{g'}{g} = \frac{3\sqrt{2}\sin\theta_w(m_Z)}{\sqrt{3-4\sin^2\theta_w(m_Z)}} \quad (3.16)$$

For the matrix in (3.15), using the programming Mathematica9, we get two *exact* eigenvalues, namely, one *massless* state

$$A_\mu = \frac{1}{\sqrt{18+4t^2}} (\sqrt{3}tA_{3\mu} - tA_{8\mu} + 3\sqrt{2}B_\mu)$$

which is identified to the photon; and the second eigenvalue defined with

$$m_{A_4'}^2 = \frac{g^2}{2} (n_1^2 + n_2^2 + k_2^2), \quad (3.17)$$

associated with the eigenstate

$$A_{4\mu}' = \frac{n_2 k_2}{n_1^2 + n_2^2 - k_2^2} A_{3\mu} + \frac{\sqrt{3}n_2 k_2}{n_1^2 + n_2^2 - k_2^2} A_{8\mu} + A_{4\mu} \quad (3.18)$$

In a normalized form, the state $A'_{4\mu}$ re witten as

$$A'_{4\mu} = \frac{t_{2\theta}}{\sqrt{1+4t_{2\theta}^2}} A_{3\mu} + \frac{\sqrt{3}t_{2\theta}}{\sqrt{1+4t_{2\theta}^2}} A_{8\mu} + \frac{1}{\sqrt{1+4t_{2\theta}^2}} A_{4\mu} \quad (3.19)$$

where $t_{2\theta} \equiv \tan 2\theta$. It is emphasized that, here the angle θ has *the same value* as in the charged gauge boson sector given in (3.14).

Comparing (3.6) with (3.17) we see that two components of W_{45} have, as expected, the same mass. Hence we can identify

$$\chi_\mu^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (A'_{4\mu} - iA_{5\mu}) \quad (3.20)$$

as physical electrically neutral non-Hermitian gauge boson. It is easy to see that this gauge boson χ_μ^0 carries lepton number 2, hence it is called bilepton gauge boson.

The programming Mathematica9 also gives us two masses of heavy physical bosons:

$$m_{Z_1}^2 = \frac{g^2}{2} \frac{1}{27} [(n_1^2 + n_2^2)(18 + t^2) + k_2^2(18 + 4t^2) + k_1^2(18 + t^2) - \sqrt{\Delta'}] \quad (3.21)$$

$$m_2^2 = \frac{g^2}{2} \frac{1}{27} [(n_1^2 + n_2^2)(18 + t^2) + k_2^2(18 + 4t^2) + k_1^2(18 + t^2) + \sqrt{\Delta'}] \quad (3.22)$$

Where

$$\begin{aligned} \Delta' = & [(n_1^2 + n_2^2 + k_2^2)(18 + t^2) + 2k_1^2(9 + 2t^2)]^2 - 108(9 + 2t^2)[n_1^2 k_2^2 + (n_1^2 + n_2^2 + k_2^2)k_1^2] \\ = & (n_1^2 + n_2^2)(18 + t^2)^2 \left\{ 1 + \frac{2k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} + \frac{4(9+2t^2)k_1^2}{(n_1^2 + n_2^2)(18+t^2)} \right\} - \\ & 108 \frac{(9+2t^2)}{(n_1^2 + n_2^2)(18+t^2)^2} \left[k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} \right] + \frac{1}{(n_1^2 + n_2^2)^2} \left[k_2^4 + \frac{4(9+2t^2)k_1^4}{(18+t^2)^2} + \frac{4(9+2t^2)(t^2-9)k_1^2 k_2^2}{(18+t^2)^2} \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

Then

$$\begin{aligned} \sqrt{\Delta'} = & (n_1^2 + n_2^2)(18 + t^2) + k_2^2(18 + t^2) + 2(9 + 2t^2)k_1^2 - 54 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} \right) \\ & + \frac{(18+t^2)}{(n_1^2 + n_2^2)} \left\{ 54 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)^4} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} \right) \left[k_2^2(18 + t^2)^2 + 2k_1^2(18 + t^2)(9 + 2t^2) - \right. \right. \\ & \left. \left. 54(9 + 2t^2) \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)} \right) \right] - 56 \frac{(9+2t^2)k_1^2 k_2^2}{(18+t^2)} \right\} + O(k^6) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Substituting (3.24) into (3.21) yields the mass of the physical Z_1 boson:

$$m_{Z_1}^2 = \frac{g^2}{54} \left\{ \begin{aligned} & 54 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) + 3t^2(k_2^2 - k_{21}^2) - \\ & - \frac{(18+t^2)}{(n_1^2+n_2^2)} \left[54 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)^4} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) \right] * \\ & * \left[k_2^2(18+t^2)^2 + 2k_1^2(18+t^2)(9+2t^2) - \right. \\ & \left. - 54(9+2t^2) \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) \right] - 56 \frac{(9+2t^2)k_1^2 k_2^2}{(18+t^2)} \end{aligned} \right\} +$$

$O(k^6)$

(3.25)

It is emphasized that, at the leading order, there are two terms (in first line of Eq.(3.25)): one is the main mass term of the Z boson and the second one is the unusual difference of square VEVs: $(k_1^2 - k_2^2)$. This term leads to an interesting equality below.

Similarly, for the physical heavy extra neutral gauge boson Z_2 , one obtains

$$m_{Z_2}^2 = \frac{g^2}{27} \left\{ \begin{aligned} & (n_1^2 + n_2^2 + k_1^2 + k_2^2)(18+t^2) + \frac{3}{2}t^2(k_1^2 + k_2^2) - \\ & - 27 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) + \\ & + \frac{(18+t^2)}{(n_1^2+n_2^2)} * \\ & * \left(\begin{aligned} & 27 \frac{(9+2t^2)}{(18+t^2)^4} \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) * \\ & \left[k_2^2(18+t^2)^2 + 2k_1^2(18+t^2)(9+2t^2) - \right. \\ & \left. - 54(9+2t^2) \left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2+n_2^2)} \right) \right] - \\ & - 28 \frac{(9+2t^2)k_1^2 k_2^2}{(18+t^2)} \end{aligned} \right) \end{aligned} \right\}$$

$+ O(k^6) \cong \frac{g^2(n_1^2+n_2^2)(18+t^2)}{27}$

(3.26)

Due to the quark family discrimination in the model, Z'/Z_2 couples nonuniversally to the ordinary quarks, it gives rise to tree-level flavour-changing neutral current (FCNC) [15]. This would induce gauge-mediated FCNCs, e.g., $b \rightarrow s\mu^+\mu^-$ [16], providing a test of the model. We finish this section by remark that the gauge boson mixing here is completely similar to that of the economical 3-3-1 model (ECN331) [13]. However, the key difference is that, here the lepton number carrying VEV n_2 is very large ($n_2 \sim n_1 \gg k_1 \sim k_2$), while in the ECN331 model, the lepton number carrying VEV u is very small ($u \ll v$) with $v \simeq 245$ GeV. Within our result, in the figure 1 of Ref.[1], the unphysical gauge field W_6 is replaced by *physical field* X^0 , while W^3, W^8, B are replaced by physical neutral gauge bosons Z_1, Z_2 . However, the result is the same.

The diagonalization process of the mass matrix of neutral gauge bosons, the currents and the model phenomenology will be analyzed in details elsewhere.

4. MICHEL PARAMETER ρ

As seen from above, the unusual term in the Z_1 boson mass will affect the well-determined parameter ρ . Thus, for our purpose we consider the ρ parameter - one of the most important quantities of the SM, having a leading contribution in terms of the T parameter

$$\rho = 1 + \alpha T. \quad (4.1)$$

In the usual 3-3-1 model, T gets contribution from the $Z - Z'$ mixing and the oblique correction [17]

$$T = T_{ZZ'} + T_{oblique},$$

Where $T_{ZZ'} \cong \frac{\tan^2 \alpha}{\alpha} \left(\frac{m_{Z_2}^2}{m_{Z_1}^2} - 1 \right)$ is negligible for $m_{Z'}$ less than 1 TeV, $T_{oblique}$ depends on masses of the top quark and the SM Higgs boson.

At the tree level, from (3.11) and (3.25) we get an expression for the ρ parameter in the model under consideration

$$\rho = \frac{m_w^2}{c_w^2 m_{Z_1}^2} = \frac{18 + t^2}{2(9 + 2t^2)c_w^2} * \left\{ 1 + \frac{(18+t^2)(k_1^2 - k_2^2)}{18(9+2t^2)\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right)} - \frac{n_1^2 k_2^4}{(n_1^2 + n_2^2)\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right)} + \right. \\ \left. + \frac{1}{(n_1^2 + n_2^2)(18+t^2)^2} \left(\left[k_2^2(18+t^2)^2 + 2k_1^2(18+t^2)(9+2t^2) - 54(9+2t^2)\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right) \right] - \frac{56k_1^2 k_2^2}{54\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right)} \right) \right\} + O(k^6) \quad (4.2)$$

where we have denoted $s_w \equiv \sin \theta_w$, $c_w \equiv \cos \theta_w$, $t_w \equiv \tan \theta_w$, and so forth. Two terms in the first line of Eq. (4.2) do not depend on perturbative small value (k/n) , where $k \approx k_1, k_2$, $n \approx n_1, n_2$; and they are the leading order of the ρ parameter.

Experimental data [2] show that the ρ parameter is very close with the unit

$$\rho = 1.01031 \pm 0.00011. \quad (4.3)$$

$$\frac{(18+t^2)}{(9+2t^2)c_w^2} \left[1 + \frac{t^2(18+t^2)(k_1^2 - k_2^2)}{18(9+2t^2)\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right)} \right] = 1 \quad (4.4)$$

Hence, at the leading order, the following requirement should be fulfilled

Substituting (3.16) into (4.4) yields

$$\frac{2c_\omega^2 s_\omega^2}{(3-4s_\omega^2)} \frac{(k_1^2 - k_2^2)}{\left(k_1^2 + \frac{n_1^2 k_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)}\right)} = 0 \quad (4.5)$$

Thus, we obtain the relation

$$k_1 = k_2. \quad (4.6)$$

Note that, *in the first time*, the equality in (4.6) exists in the model under consideration. This will be helpful in our future study. To get constraint from ρ parameter, we should include oblique corrections; and for more details, the reader is referred to [18].

5. CONCLUSION

In this paper, we have showed that the mass matrix of electrically neutral gauge bosons in the recently proposed 3-3-1 model with three lepton/neutrino singlets [1] has two exact eigenvalues and corresponding eigenvectors. With two determined eigenvalues, the 4×4 mass matrix is diagonalized exactly. Two components of neutral bilepton boson X_μ^0 have the same mass, hence the neutral non-Hermitian gauge boson X_μ^0 is properly determined. With extra vacuum expectation values of the Higgs fields, there are mixings among charged gauge bosons $W^\pm$ and $Y^\pm$ as well as among neutral gauge bosons Z, Z' and X^0 . Due to these mixings, the lepton number violating interactions exist in leptonic currents not only in bileptons Y and X^0 but also in both SM W and Z bosons. The mixing of gauge bosons in the model under consideration leads to some anomalous couplings of both W and Z bosons, which are subject of our next works.

The scale of new physics was estimated to be in range of few TeVs. With this limit, masses of the exotic quarks are also not high, in the range of few TeVs. The leading order of the Michel parameter requires the equality: $k_1 = k_2$, which is obtained in the first time. The derived relation will ease our future study. The above mentioned mixings lead to new anomalous currents and very rich phenomenology. The model is interesting and deserves further intensive studies.

Acknowledgment: This research is funded by Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under grant number 103.01-2017.22.

REFERENCES

1. S. Boucenna, S. Morisi, and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D **90**, 013005 (2014).
2. K. A. Olive et al. (Particle Data Group). Chin. Phys. C, 2014, **38**(9): 09001

3. P. F. Harrison, D. H. Perkins and W. G. Scott, Phys. Lett. B **530**, 167(2002).
4. F. Pisano and V. Pleitez, Phys. Rev. D **46**, 410 (1992); P. H. Frampton, Phys. Rev. Lett. **69**, 2889 (1992); R. Foot *et al*, Phys. Rev. D **47**, 4158 (1993).
5. M. Singer, J. W. F. Valle and J. Schechter, Phys. Rev. D **22**, 738 (1980); R. Foot, H. N. Long and Tuan A. Tran, Phys. Rev. D **50**, 34 (R)(1994) [arXiv:hep-ph/9402243]; J. C. Montero, F. Pisano and V. Pleitez, Phys. Rev. D **47**, 2918 (1993); H. N. Long, Phys. Rev. D **54**, 4691 (1996); H. N. Long, Phys. Rev. D **53**, 437 (1996).
6. C. A. de S. Pires, O. P. Ravinez, Phys. Rev. D **58**, 035008 (1998); A. Doff, F. Pisano, Mod. Phys. Lett. A **14**, 1133 (1999); Phys. Rev. D **63**, 097903 (2001); P.V. Dong, H. N. Long, Int. J. Mod. Phys. A **21**, 6677 (2006), [arXiv:hep-ph/0507155].
7. S. M. Boucenna, R. M. Fonseca, F. Gonzlez-Canales, and J. W. F. Valle, Phys. Rev. D **92**, 031702 (R) (2015), *Rapid Communications*, arXiv:1411.0566[hep-ph].
8. D. Chang and H. N. Long, Phys. Rev. D **73**, 053006 (2006), [arXiv: hep-ph/0603098]. See also, M. B. Tully and G. C. Joshi, Phys. Rev. D **64**, 011301 (2001).
9. C. A. de Pires, *Physics International* 2015, 6 (1): 33, [arXiv:1412.1002(hep-ph)] (2014).
10. P. V. Dong and H. N. Long, *Phys. Rev. D* **77**, (2008) 057302. [arXiv:0801.4196(hep-ph)].
11. M. Malinsky, J. C. Ramao, and J. W. F. Valle, Phys. Rev. Lett. **95**, 161801 (1996); E. Akhmedov, M. Lindner, E. Schnapka, and J. W. F. Valle, Phys. Lett. B **368**, 270 (1996); Phys. Rev. D **53**, 2752 (1996).
12. H. Okada, N. Okada and Y. Orikasa, Phys. Rev. D **93** (2016) 073006, [arXiv:1504.01204 (hep-ph)].
13. P. V. Dong, H. N. Long, D. T. Nhung and D. V. Soa, Phys. Rev. D **73**, 035004 (2006), [arXiv: hep-ph/0601046]; P. V. Dong and H. N. Long, *Advances in High Energy Physics*, **2008**, 739492 (2008), [arXiv:0804.3239(hep-ph)]; P. V. Dong, H. T. Hung and H. N. Long, *Phys. Rev. D* **86**, 033002 (2012), [arXiv:1205.5648 (hep-ph)].
14. D. V. Soa, P. V. Dong, Tr. T. Huong, H. N. Long, J. Exp. Theor. Phys. **108** (2009) 757, [arXiv:0805.4456]
15. D. G. Dumm, F. Pisano and V. Pleitez, Mod. Phys. Lett. A **9**, 1609 (1994); H. N. Long and V. T. Van, *J. Phys. G* **25**, 2319 (1999), [arXiv:hep-ph/9909302]; A. C. B. Machado, J. C. Montero and V. Pleitez, Phys. Rev. D **88**, 113002 (2014); D. Cogollo, A. V. de Andrade, F. S. Quiroz and P. R. Teles, Eur. Phys. J. C **72**, 2029 (2012)
16. A. J. Buras, F. De Fazio and J. Girbach, JHEP **02** (2014) 112; A. J. Buras, F. De Fazio, J. Girbach-Noe, JHEP **1408** (2014) 039.
17. H. N. Long and T. Inami, Phys. Rev. D **61**, 075002 (2000), [arXiv: hep-ph/9902475]. See also, K. Sasaki, Phys. Lett. B **308**, 297 (1993); P. H. Frampton and M. Harada, Phys. Rev. D **58**, 095013 (1998).
18. P. V. Dong and D. T. Si, Phys. Rev. D **90**, 117703 (2014).

THAM SỐ MICHEL TRONG MÔ HÌNH 3-3-1 VỚI 3 HẠT SINGLET LEPTON

Tóm tắt: Bài viết giới thiệu về ma trận khối lượng của các hạt gauge bosons trung hòa trong các mô hình gần đây được đề xuất dựa trên nhóm $SU(3)_C \otimes SU(3)_L \otimes U(1)_X$ với 3 đơn tuyến lepton có hai giá trị riêng chính xác như sau: một là giá trị 0 tương ứng với khối lượng photon, hai là khối lượng khác 0 ứng với các thành phần ảo $A5\mu$. Từ đó, cần xác định hạt gauge boson trung hòa phi Hermitian $X\mu_0$. Với giá trị trung bình chân không của trường Higgs n_2 , có sự pha trộn giữa các gauge boson W trong mô hình chuẩn với gauge boson ngoại phụ Y mang số Lepton bằng 2 (bilepton) như là giữa gauge boson trung hòa với X_0 . Sự pha trộn này dẫn tới mẫu có hiện tượng luận phong phú. Bậc chính của tham số Michel (ρ) có đặc điểm khá đặc biệt đòi hỏi tính cân bằng của các giá trị trung bình chân không ở bước thứ hai của sự phá vỡ đối xứng tự phát, cụ thể là $k_1 = k_2$.

Từ khóa: 12.10.Dm, 12.60.Cn, 12.60.Fr, 12.15.Mm

XỬ LÝ ION KIM LOẠI NẶNG Pb^{2+} BẰNG BỘT HYDROXYAPATITE PHA TẠP ION Mg^{2+} (HAp)

Phạm Thị Minh¹, Vũ Thúy Hương, Hoàng Khánh Linh,
Trần Mỹ Linh, Hoàng Phương Mai
Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Bột hydroxyapatite pha tạp ion Mg^{2+} (Mg-HAp) được tổng hợp bằng phương pháp kết tủa hóa học từ các muối nitrat: $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, $Mg(NO_3)_2$ và muối amoni $(NH_4)_2HPO_4$, hiệu suất tổng hợp đạt 89,3%. Sau khi tổng hợp, bột Mg-HAp được ứng dụng xử lý ion kim loại nặng Pb^{2+} trong dung dịch nước. Kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của các yếu tố: Thời gian tiếp xúc, khối lượng bột Mg-HAp, độ pH và nồng độ ion Pb^{2+} trong dung dịch xử lý cho thấy, bột Mg-HAp có khả năng loại bỏ hoàn toàn ion Pb^{2+} . Tại pH từ 2-5, chỉ với khối lượng 0,05g, trong thời gian 15 phút tiếp xúc, bột Mg-HAp đã loại bỏ hoàn toàn (hiệu suất đạt tới 100%) ion Pb^{2+} trong dung dịch với hàm lượng ion Pb^{2+} lên tới 3,31g/l (gấp hàng chục lần so với hàm lượng ion Pb^{2+} có trong nước thải ô nhiễm). Kết quả nghiên cứu mở ra triển vọng ứng dụng bột Mg-HAp làm vật liệu xử lý ion kim loại nặng trong các nguồn nước ô nhiễm, đạt hiệu quả kinh tế cao và thân thiện với môi trường.

Từ khóa: kim loại nặng, bột hydroxyapatite pha tạp ion Mg^{2+} , xử lý, hiệu quả kinh tế

1. MỞ ĐẦU

Trong những thập niên gần đây, trước sự phát triển ngày càng lớn mạnh của đất nước về kinh tế và xã hội, đặc biệt là sự phát triển mạnh mẽ của các ngành công nghiệp đã ảnh hưởng rất lớn đến môi trường sống của con người. Bên cạnh sự lớn mạnh của nền kinh tế đất nước là hiện trạng các cơ sở hạ tầng xuống cấp trầm trọng và sự ô nhiễm môi trường đang ở mức báo động. Hầu hết các nguồn nước ngầm phục vụ cho sinh hoạt, tưới tiêu đều bị ô nhiễm bởi kim loại nặng như As, Pb, Cd... Tác động của việc ô nhiễm kim loại nặng tới môi trường là rất lớn, gây tổn hại đối với sức khỏe con người. Trước thực tế như vậy, đã có nhiều nhà khoa học đã và đang nỗ lực nghiên cứu để tìm ra những phương pháp hiệu quả nhất nhằm giảm thiểu liều lượng và độc tính của các dòng thải công nghiệp.

¹ Nhận bài ngày 4.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Phạm Thị Minh; Email: ptminh@daihocthudo.edu.vn

Hiện nay, trên thế giới cũng như ở Việt Nam đã và đang áp dụng nhiều phương pháp xử lý ion kim loại nặng bằng các vật liệu hấp phụ khác nhau như: than hoạt tính, zeolit, đất sét, các loại vật liệu polyme và quặng apatit. Trong đó, quặng apatit là một trong những vật liệu hấp phụ mới đầy hứa hẹn với đặc tính hóa học đặc biệt và khả năng xử lý nước có chứa flo và kim loại nặng bằng hấp phụ, trao đổi ion, kết tủa hoặc tạo phức với hiệu suất cao, chi phí thấp và sẵn có.

Một vài nghiên cứu chỉ ra rằng bột HAp pha tạp thêm ion M^{2+} đã cải thiện được diện tích bề mặt riêng, tăng khả năng xúc tác, tăng khả năng hấp phụ [1-5]. Mặc dù vậy, chưa có nghiên cứu nào ứng dụng bột HAp pha tạp các ion kim loại Mg^{2+} trong xử lý các kim loại nặng trong nước. Vì vậy, vấn đề nghiên cứu xử lý ion kim loại nặng sử dụng bột hydroxyapatit pha tạp Mg (Mg-HAp) là hướng nghiên cứu mới, cần thiết hiện nay, nhằm tìm ra chế độ tối ưu, xử lý hiệu quả các ion kim loại nặng trong nước, giảm thiểu ô nhiễm môi trường.

2. CÁC PHƯƠNG PHÁP THỰC NGHIỆM

2.1. Hóa chất

- $Mg(NO_3)_2$, $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, $(NH_4)_2HPO_4$, NH_3 đặc 25-28%, HCl 37%, NaOH 5% là các hóa chất tinh khiết của Trung Quốc.
- $Pb(NO_3)_2$ là hóa chất tinh khiết của Merk.
- Nước cất 2 lần được cất tại phòng thí nghiệm Công nghệ môi trường, Trường Đại học Thủ đô Hà Nội.

2.2. Phương pháp tổng hợp

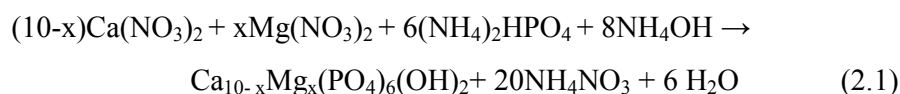
Trong đề tài này, bột Mg-HAp được tổng hợp bằng phương pháp kết tủa hóa học, đi từ các muối nitrat $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, $Mg(NO_3)_2$ và muối amoni $(NH_4)_2HPO_4$. Các bước thực hiện như sau:

- Pha dung dịch muối chứa các ion Ca^{2+} và Mg^{2+} với tổng nồng độ Ca^{2+} và Mg^{2+} là 0,5M, với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$ hay tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Mg^{2+} + Ca^{2+}] = 2/10$.
- Nhỏ từ từ 112,5 ml dung dịch $(NH_4)_2HPO_4$ 0,3M, tốc độ 1 ml/phút vào dung dịch trên (tương ứng với thời gian tổng hợp 2 giờ) dưới tác dụng của khuấy từ (800 vòng/phút) gia nhiệt $35^\circ C$. pH của dung dịch được điều chỉnh trong khoảng 10-12 trong suốt quá trình tổng hợp sử dụng dung dịch NH_4OH đặc 28%.

– Sau khi nhỏ dung dịch $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ xong, già hóa mẫu 2 giờ dưới tác dụng của khuấy từ (800 vòng/phút), lưu mẫu 24 giờ ở nhiệt độ phòng.

– Lọc rửa kết tủa thu được bằng nước cất nhiều lần. Sau đó sấy ở 80°C trong 48 giờ, nghiền mẫu trong cối mã nã với lượng 2,3g trong thời gian 60 phút thu được bột Mg-HAp.

Phương trình phản ứng:



2.3. Phương pháp phân tích

2.3.1. Phương pháp phổ hồng ngoại (IR)

Phổ hồng ngoại FT-IR dùng để xác định các nhóm chức đặc trưng trong phân tử bột Mg-HAp với tỉ lệ $[\text{Mg}^{2+}]/[\text{Ca}^{2+}] = 2/8$ hay tỉ lệ $[\text{Mg}^{2+}]/[\text{Mg}^{2+} + \text{Ca}^{2+}] = 2/10$, đo trên thiết bị FT - IR 6700 của hãng Nicolet tại Viện Kỹ thuật nhiệt đới.

2.3.2. Phương pháp nhiễu xạ tia X (XRD)

Giản đồ nhiễu xạ tia X dùng để xác định cấu trúc pha của bột Mg-HAp được thực hiện trên máy SIEMENS D5005 Bruker - Germany của Viện Khoa học vật liệu- Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Các điều kiện đo như sau: bức xạ Cu - K α với bước sóng $\lambda = 0,15406$ nm, cường độ dòng điện bằng 30 mA, điện áp 40 kV, góc quét $2\theta = 10^\circ - 70^\circ$, tốc độ quét $0,03^\circ/\text{giây}$.

2.3.3. Phương pháp kính hiển vi điện tử quét (SEM)

Phương pháp SEM được sử dụng để xác định hình thái học bề mặt của bột Mg-HAp đo trên thiết bị kính hiển vi điện tử quét phát xạ trường, S4800 của hãng Hitachi (Nhật Bản), tại Viện Vệ sinh dịch tễ trung ương.

2.4. Phương pháp xác định hiệu suất tổng hợp bột Mg-HAp

– Cân mẫu sau tổng hợp trên cân phân tích Precica XR 205SM-DR, Thụy Sĩ để xác định khối lượng bột Mg-HAp thực nghiệm (m_{TN}).

– Từ phương trình (2.1), tính khối lượng bột Mg-HAp thu được theo lý thuyết (m_{LT}).

– Hiệu suất tổng hợp bột Mg-HAp được tính theo phương trình:

$$H(\%) = \frac{m_{\text{TN}}}{m_{\text{LT}}} \cdot 100\% \quad (2.2)$$

2.5. Phương pháp xác định hàm lượng ion kim loại nặng Pb^{2+}

2.5.1. Điều kiện xử lý ion kim loại nặng Pb^{2+}

– Chuẩn bị 50 ml dung dịch $Pb(NO_3)_2$ nồng độ $5.10^{-3}M$. Chuẩn pH của dung dịch xử lý bằng máy đo pH của Đức, đặt tại phòng thí nghiệm Khoa CNMT, Trường ĐH Thủ đô HN.

– Xử lý ion Pb^{2+} : Bột Mg-HAp phân tán vào dung dịch chứa ion Pb^{2+} ở các điều kiện khảo sát khác nhau, bao gồm: thời gian tiếp xúc: 5, 10, 15, 30, 40 phút; pH từ 2-5 được điều chỉnh bằng dung dịch axit HCl 37%; khối lượng bột: 0,01; 0,02; 0,05; 0,075; 0,1 g; nồng độ ion Pb^{2+} trong dung dịch xử lý: $10^{-3}M$; $2,5.10^{-3}M$; $5.10^{-3}M$; $7,5.10^{-3}M$; $10.10^{-3}M$. Tốc độ khuấy dung dịch trong quá trình xử lý 600 vòng/phút, ở nhiệt độ phòng.

2.5.2. Phương pháp quang phổ hấp thụ nguyên tử (AAS)

Nồng độ ion Pb^{2+} còn lại trong dung dịch sau xử lý được xác định trên máy hấp thụ nguyên tử AAS Thermo Fisher M6 (Britain) tại phòng thí nghiệm trọng điểm, Viện Kỹ thuật Nhiệt đới – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

2.5.3. Phương pháp xác định hiệu suất và dung lượng hấp phụ

Dựa vào đường chuẩn sự phụ thuộc của độ hấp thụ quang vào nồng độ ion, xác định được nồng độ ion Pb^{2+} trong dung dịch sau khi được xử lý bằng bột Mg-HAp, từ đó tính toán các thông số hiệu suất H (%) và dung lượng hấp phụ Q (mg/g) theo các công thức sau:

Hiệu suất xử lý:

$$H = \frac{(C_o - C_i) \times 100}{C_o} \quad (\%) \quad (2.3)$$

Dung lượng hấp phụ ion kim loại :

$$Q = \frac{(C_o - C_i) \times V}{m} \quad (mg / g) \quad (2.4)$$

Trong đó:

Q: Dung lượng hấp phụ tại thời điểm cân bằng (mg/g).

H: Hiệu suất hấp phụ (%).

C_o : Nồng độ ion kim loại ban đầu (mg/l).

C_i : Nồng độ ion kim loại tại thời điểm hấp phụ đạt cân bằng (mg/l).

V: Thể tích dung dịch ion kim loại (l).

m: Khối lượng bột Mg-HAp (g).

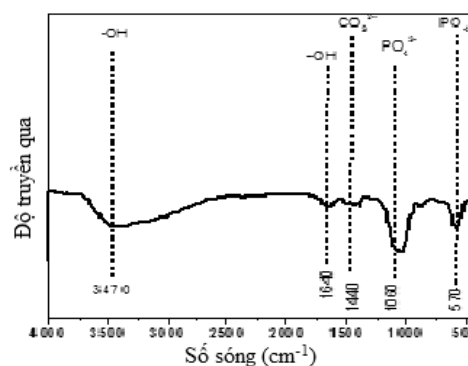
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Tổng hợp bột Mg-HAp từ muối nitrat

Phổ FT-IR của bột Mg-HAp với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$ hay tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Mg^{2+} + Ca^{2+}] = 2/10$ được biểu diễn trên hình 3.1. Trên phổ có xuất hiện các pic đặc trưng cho các dao động của nhóm -OH và PO_4^{3-} trong phân tử HAp. Pic hấp thụ với cường độ mạnh, vân phổ rộng, tù tại số sóng khoảng 3470 cm^{-1} đặc trưng cho dao động của -OH. Ngoài ra dao động của nhóm này còn đặc trưng bởi một số vân phổ ở vị trí số sóng khoảng 1640 cm^{-1} , tương ứng cho dao động hóa trị và dao động biến dạng của nhóm -OH. Vùng hấp thụ tại 1440 cm^{-1} đặc trưng cho dao động của nhóm cacbonat CO_3^{2-} và pic hấp thụ tại khoảng bước sóng 1060 cm^{-1} ; 570 cm^{-1} ứng với dao động biến dạng của nhóm PO_4^{3-} .

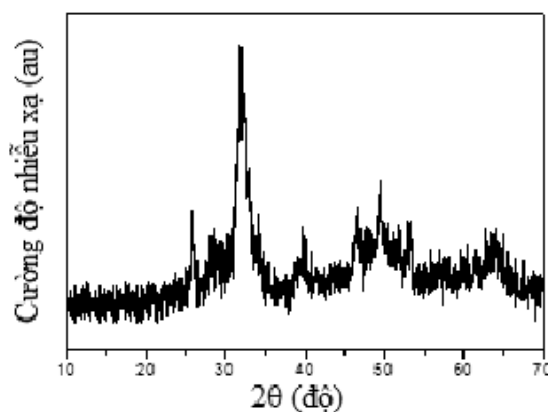
Bảng 3.1. Dao động của các nhóm chức đặc trưng trong phân tử Mg-Hap

Nhóm	$\nu\text{ (cm}^{-1}\text{) [1]}$	$\nu\text{ (cm}^{-1}\text{) thực nghiệm}$
$\nu\text{ (OH}^-)\text{ liên kết}$	3572	3570
$\nu_3\text{ (PO}_4^{3-}\text{)}$	1087; 1046	1095; 1032
$\delta\text{ (OH)}$	630	634,4
$\nu_2\text{ (PO}_4^{3-}\text{)}$	601; 571	608,9; 570,7
$\nu_4\text{ (PO}_4^{3-}\text{)}$	474	470,4
$\nu\text{ (H-O-H)}$	1640	1644,6
$\nu\text{ (CO}_3^{2-}\text{)}$	1450; 1420	1461; 1385,5
P-OH	870	880,8



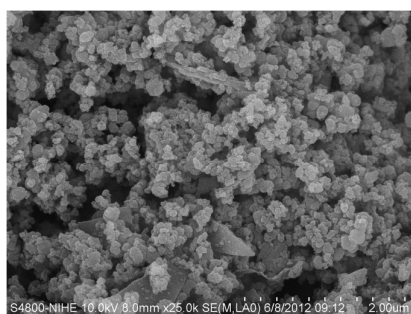
Hình 3.1. Phổ FT-IR của bột Mg-HAp với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$ hay tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Mg^{2+} + Ca^{2+}] = 2/10$

Giải đồ nhiễu xạ tia X của các mẫu bột Mg-HAp với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$ hay tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Mg^{2+} + Ca^{2+}] = 2/10$ được thể hiện trên hình 3.2. Kết quả cho thấy, bột Mg-HAp thu được có cấu trúc tinh thể, đơn pha của HAp với những pic đặc trưng ở các góc nhiễu xạ 2θ bằng $25,9^\circ$ và $31,9^\circ$. Pic nhiễu xạ đặc trưng với cường độ lớn nhất ở vị trí góc nhiễu xạ $2\theta = 31,9^\circ$ tương ứng với mặt phẳng tinh thể có chỉ số Miller (211), pic nhiễu xạ ở vị trí $2\theta = 25,9^\circ$ tương ứng với mặt phẳng tinh thể có chỉ số Miller (002). Ngoài ra, còn một số các pic đặc trưng khác của HAp với cường độ nhỏ hơn.



Hình 3.2. *Giản đồ nhiễu xạ tia X của bột Mg-HAp*

Hình 3.3. giới thiệu hình ảnh SEM của bột Mg-HAp với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$. Quan sát ảnh SEM cho thấy, các tinh thể Mg-HAp có dạng hình trụ nhỏ, kích thước khá đồng đều và có bề mặt tương đối xốp, vì vậy vật liệu này có khả năng hấp phụ với dung lượng cao.



Hình 3.3. *Hình ảnh SEM của mẫu Mg-HAp với tỉ lệ $[Mg^{2+}]/[Ca^{2+}] = 2/8$*

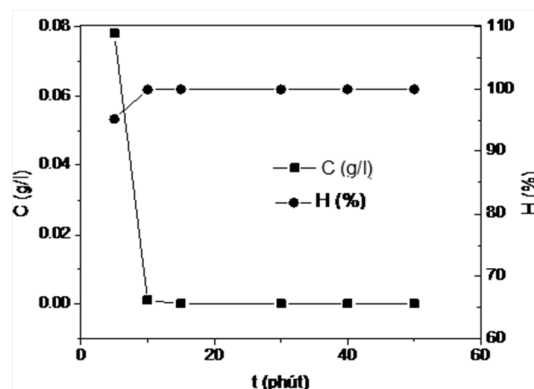
3.2. Xử lý ion Pb^{2+}

3.2.1. Ảnh hưởng của thời gian tiếp xúc

Sự biến đổi hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} của các loại bột HAp, Zn-HAp và Mg-HAp theo thời gian tiếp xúc với ion Pb^{2+} trong 50ml dung dịch có nồng độ Pb^{2+} 1,656 g/l, pH5 ở 25°C theo thời gian được thể hiện trên bảng 3.3 và hình 3.4. Kết quả cho thấy, chỉ trong 5 phút tiếp xúc, nồng độ ion Pb^{2+} đã suy giảm nhanh chóng (từ 1,656 g/l xuống còn 0,078 g/l), đạt hiệu suất 95%. Sau 10 phút, hiệu suất hấp phụ tăng lên 99,9% và đạt giá trị ổn định 100% khi thời gian tăng lên 15, 30, 40 phút. Vì vậy, thời gian 15 phút được lựa chọn cho các xử lý ion Pb^{2+} trong các khảo sát tiếp theo.

Bảng 3.3. Nồng độ ion Pb^{2+} còn lại và hiệu suất hấp phụ theo thời gian tiếp xúc

TT	t (phút)	C (g/l)	H (%)
1	5	0.078	95.3
2	10	0.001	99.94
3	15	0	100
4	30	0	100
5	40	0	100

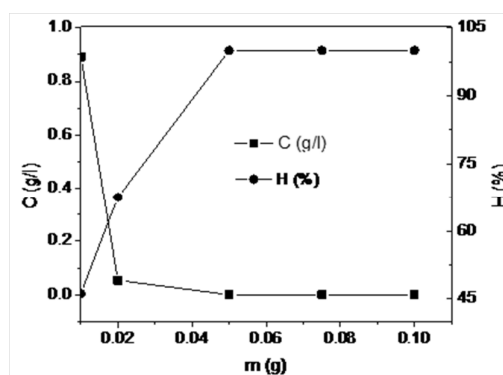
**Hình 3.4.** Sự biến đổi nồng độ và hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} theo thời gian tiếp xúc

3.2.2. Ảnh hưởng của khối lượng bột Mg-HAp

Kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của khối lượng bột Mg-HAp đến hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} 1,656 g/l, ở 25°C, pH3, trong thời gian 15 phút được biểu diễn trên bảng 3.4 và hình 3.5. Khi khối lượng bột Mg-HAp tăng, nồng độ ion Pb^{2+} còn lại trong dung dịch giảm và hiệu suất hấp phụ tăng. Hiệu suất hấp phụ đạt 46,2% khi sử dụng 0,01g bột Mg-HAp. Sau đó tăng lên 67,5% khi khối lượng bột Ba-HAp tăng lên 0,02g. Khi khối lượng tăng lên từ 0,05g đến 0,1g, hiệu suất đạt giá trị ổn định 99,98%. Điều này chứng tỏ rằng, khối lượng Mg-HAp 0,05g đủ làm suy giảm hoàn toàn ion Pb^{2+} trong dung dịch. Với kết quả này, khối lượng bột Mg-HAp 0,05g được lựa chọn cho các xử lý tiếp theo.

Bảng 3.4. Nồng độ ion Pb^{2+} còn lại và hiệu suất hấp phụ theo khối lượng bột Mg-HAp

TT	m (g)	C (g/l)	(%)
1	0.01	0.891	46.19
2	0.02	0.0538	67.51
3	0.05	0.0002	99.98
4	0.075	0.00018	99.98
5	0.1	0.00012	99.99

**Hình 3.5.** Sự biến đổi nồng độ và hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} theo khối lượng bột Mg-HAp

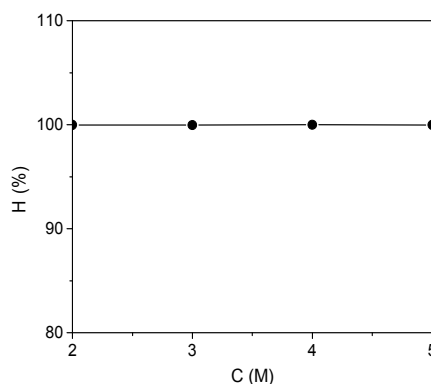
3.2.3. Ảnh hưởng của pH dung dịch

Bảng 3.5 và hình 3.6 biểu diễn ảnh hưởng của pH đến hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} . Kết quả cho thấy, khi pH dung dịch tăng từ 2-5, hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} đều đạt giá trị rất

cao, xấp xỉ 100%. Để chuẩn pH = 6 và 7, hiện tượng kết tủa xuất hiện ngay khi nhỏ dung dịch NaOH vào dung dịch chứa ion Pb^{2+} , chứng tỏ, ion Pb^{2+} đã tạo kết tủa với ion OH^- . Như vậy, bột Mg-HAp có khả năng hấp phụ ion Pb^{2+} với hiệu suất rất cao, trong khoảng pH của dung dịch từ 2-5.

Bảng 3.5. Nồng độ ion Pb^{2+} còn lại và hiệu suất hấp phụ theo pH

TT	pH	C g/l	H (%)
1	2	16.10^{-4}	99,99
2	3	52.10^{-5}	99,97
3	4	0	100
4	5	18.10^{-5}	99,98



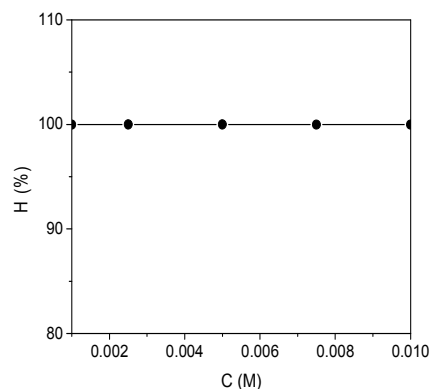
Hình 3.6. Sự biến đổi nồng độ và hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} theo pH

3.2.4. Ảnh hưởng của nồng độ ion Pb^{2+}

Kết quả xử lý ion Pb^{2+} ở các nồng độ khác nhau được biểu diễn trong bảng 3.6 và hình 3.7. Trong điều kiện xử lý, chỉ với 0,05g bột Mg-HAp đã làm suy giảm hoàn toàn ion Pb^{2+} với nồng độ lên tới 3,31 g/l trong thời gian 15 phút tiếp xúc, một lần nữa khẳng định, bột Mg-HAp có khả năng hấp phụ ion Pb^{2+} trong dung dịch với hiệu suất rất cao. Điều này mở ra triển vọng ứng dụng bột Mg-HAp làm vật liệu xử lý các nguồn nước có chứa các ion kim loại nặng đạt hiệu quả kinh tế cao và thân thiện với môi trường.

Bảng 3.6. Nồng độ ion Pb^{2+} còn lại và hiệu suất hấp phụ ở pH5, trong 15 phút, khối lượng bột Mg-HAp 0,05g, nhiệt độ $25^{\circ}C$

TT	CPb(M)	C (g/l)	H (%)
1	0.001	8.10^{-5}	99.98
2	0.0025	4.10^{-5}	100
3	0.005	8.10^{-5}	100
4	0.0075	28.10^{-5}	99.99
5	0.01	56.10^{-5}	99.98



Hình 3.7. Sự biến đổi nồng độ và hiệu suất hấp phụ ion Pb^{2+} ở pH5, trong 15 phút, khối lượng bột Mg-HAp 0,05g, nhiệt độ $25^{\circ}C$

4. KẾT LUẬN

Tổng hợp được bột Mg-HAp đi từ muối nitrat của Mg và Ca tương ứng, với hiệu suất tổng hợp đạt 89,3%. Bột Mg-HAp thu được có cấu trúc tinh thể, đơn pha của HAp, dạng hình cầu.

Các kết quả nghiên cứu đã khẳng định được khả năng loại bỏ hoàn toàn ion kim loại nặng Pb^{2+} trong dung dịch nước. Chỉ với một hàm lượng bột rất nhỏ Mg-HAp 0,05g đã loại bỏ hoàn toàn ion Pb^{2+} có trong dung dịch nồng độ $10^{-2}M$, pH5 trong vòng 15 phút, với tốc độ khuấy 600 vòng/phút.

Kết quả nghiên cứu ban đầu đã mở ra triển vọng ứng dụng bột Mg-HAp trong xử lý ion kim loại nặng trong nước, giảm thiểu ô nhiễm nguồn nước sử dụng cho sinh hoạt của cộng đồng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Phạm Thị Thu Trang, Nguyễn Thu Phương, Đinh Thị Mai Thanh (2013), "Nghiên cứu tổng hợp và đặc trưng hóa lý của nano hydroxyapatit pha tạp magie", *Tạp chí Hóa học*, T,51(2C), Tr, 876-881.
2. Akemi Yasukawa, Takashi Yokoyama, Kazuhiko Kandori, Tatsuo Ishikawa, "Ion-exchange of magnesium–calcium hydroxyapatite solid solution particles with Cd^{2+} ion", *Physicochem. Eng. Aspects* 317(2008)123–128.
3. Akemi Yasukawa, 1 Manami Nakajima, Kazuhiko Kandori, and Tatsuo Ishikawa (1999), "Preparation and Characterization of Carbonated Barium Hydroxyapatites", *Journal of Colloid and Interface Science* 212, Pages 220–227.
4. Akemi Yasukawa, Miki Kidokoro, Kazuhiko Kandori, and Tatsuo Ishikawa (1997), "Preparation and Characterization of Barium–Strontium Hydroxyapatites", *Journal of Colloid and Interface Science* 191, p, 407-415.
5. S.Meski, S.Ziani, H.Khireddine (2011), "Factorial design analysis for sorption of zinc on hydroxyapatite", *Journal of Hazardous Materials* (136).

Pb²⁺ HEAVY METAL ION TREATMENT BY Mg²⁺ ION DOPEP HYDROXYAPATITE POWDER (MG-HAP)

Abstract: *Magnesium ion doped hydroxyapatite powder (Mg-HAp) was synthesized from nitrate salts: Ca(NO₃)₂·4H₂O, Mg(NO₃)₂ and (NH₄)₂HPO₄ by chemical precipitation method, with performance at 89.3%. Synthesized Mg-HAp powder had applied to treat heavy metal ions Pb²⁺ in aqueous. The effects of factors: time, weight of Mg-HAp powder, pH index and Pb²⁺ ion concentration in solution were studied. The results showed that, Mg-HAp powder have the ability to completely remove Pb²⁺ ion. At pH from 2 to 5, with weight of Mg-HAp powder 0,05g, over a period contact minutes 15, Mg-HAp powder removed completely (performance up to 100%) Pb²⁺ ion in solution with content of Pb²⁺ ion up to 3,31g/l (more than dozens times the content of Pb²⁺ ion in wastewater that be contaminated). This opened up the prospect of application Mg-HAp powder such as a material to remove heavy metal ions in wastewater aiming to achieve high economic efficiency and environmental friendliness.*

Keywords: *heavy metal, magnesium ion doped hydroxyapatite powder, treatment, economic efficiency*

NGHIÊN CỨU VỀ HỌC CHUYỂN ĐỔI TRONG GP (GENETIC PROGRAMMING)

Ngô Thúy Ngân¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Trong báo cáo này, chúng tôi đề xuất mô hình cài đặt học chuyển đổi trong GP. Mô hình học chuyển đổi trong GP được xây dựng bằng cách sao chép các giải pháp tốt từ bài toán nguồn (source) sang dân số của bài toán đích (target). Mô hình này được kiểm thử trên một số lớp các bài toán Hồi quy ký hiệu có cấu trúc và các kết quả thực nghiệm chỉ ra rằng sử dụng Học chuyển đổi giúp GP thực thi tốt hơn trên một lớp các bài toán liên quan. Tuy nhiên, chuyển đổi quá nhiều tri thức cũng có thể làm giảm mức độ thực thi của GP do chuyển đổi các tri thức không cần thiết sẽ ảnh hưởng xấu đến chất lượng của giải pháp tìm được, hiện tượng này còn được gọi là negative transfer. Do đó, nghiên cứu trả lời câu hỏi "bao nhiêu tri thức cần chuyển từ bài toán nguồn sang bài toán đích" đóng vai trò quan trọng. Trong báo cáo này, chúng tôi cố gắng cung cấp kết quả trả lời ban đầu cho câu hỏi này.

Từ khóa: Lập trình di truyền, học chuyển đổi.

1. MỞ ĐẦU

Bài báo này đề xuất mô hình cài đặt học chuyển đổi trong GP. Mô hình học chuyển đổi trong GP được xây dựng bằng cách sao chép các lời giải tốt từ bài toán nguồn sang quần thể của bài toán đích. Mô hình này được kiểm thử trên một số lớp các bài toán và các kết quả thực nghiệm chỉ ra rằng sử dụng Học chuyển đổi giúp GP thực thi tốt hơn trên một lớp các bài toán liên quan. Tuy nhiên, chuyển đổi quá nhiều tri thức cũng có thể làm giảm mức độ thực thi của GP do chuyển đổi các tri thức không cần thiết sẽ ảnh hưởng xấu đến chất lượng của giải pháp tìm được. Do đó, nghiên cứu trả lời câu hỏi "bao nhiêu tri thức cần chuyển từ bài toán nguồn sang bài toán đích" đóng vai trò quan trọng.

Học chuyển đổi là một trong những chủ đề nghiên cứu thu hút nhiều chú ý nhất trong lĩnh vực học máy trong thời gian gần đây. Học chuyển đổi cố gắng làm theo quá trình học của con người. Tuy nhiên, các kỹ thuật học máy phổ biến không được thiết kế để làm như

¹ Nhận bài ngày 11.2.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Ngô Thúy Ngân; Email: ntngan@daihocthudo.edu.vn

vậy. Nói cách khác, các thuật toán học máy thường được áp dụng riêng lẻ với các bài toán mới. Điều này càng đúng hơn khi học máy được áp dụng cho các môi trường động trong đó các mục tiêu và các tham số thay đổi trong quá trình học.

Kết quả từ nghiên cứu trước đây cho thấy các cách tiếp cận học chuyển đổi có thể cải thiện và mở rộng khả năng học máy trong việc giải quyết các bài toán thực tế. Trong lĩnh vực các thuật toán tiến hoá, Lập trình Di truyền là một thuật toán được đề xuất gần đây. GP là một cơ chế được thiết kế cho phép một quần thể các chương trình máy tính có thể tiến hoá. Từ khi xuất hiện, GP đã được áp dụng vào nhiều bài toán thực tế. Bài báo đề xuất một phương pháp cài đặt học chuyển đổi trong GP. Cụ thể, cố gắng trả lời ba câu hỏi quan trọng khi cài đặt một phương pháp học chuyển đổi. Các câu hỏi này gồm:

1. Chúng ta nên chuyển đổi gì từ bài toán nguồn sang bài toán đích?
2. Làm sao chúng ta có thể chuyển đổi kiến thức từ bài toán nguồn sang bài toán đích?
3. Nên chuyển đổi bao nhiêu kiến thức?

2. NỀN TẢNG

2.1. Học chuyển đổi

Học chuyển đổi là quá trình trong đó hệ thống có thể nhận dạng và áp dụng kiến thức, kỹ năng đã học trong các công việc trước vào các công việc mới. Các phương pháp học chuyển đổi dựa trên một số kỹ thuật học máy như là mạng nơron. Có nhiều ứng dụng lớn áp dụng thành công học chuyển đổi bao gồm phân loại văn bản, phân loại trang web, xác định vị trí wi-fi trong nhà. Học chuyển đổi thậm chí còn được dùng cho một vài lĩnh vực thị giác, xử lý ngôn ngữ tự nhiên, phân loại ảnh. Tuy nhiên, học chuyển đổi vẫn chưa được xây dựng cho Lập trình Di truyền.

2.2. Lập trình di truyền

Lập trình di truyền (GP) được phát triển bởi Koza vào năm 1992. Dựa trên quan sát hệ thống sinh học, nó sử dụng cơ chế lựa chọn tự nhiên của Darwin để tiến hoá quần thể lời giải bài toán. Nó cũng đã được xem là một phương pháp học máy để tối ưu một quần thể các chương trình máy tính để thực hiện một công việc tính toán nào đó. Để áp dụng GP giải một bài toán, các bước sau cần được xử lý.

1. Chọn cách biểu diễn, 1 tập các chức năng và kết thúc và 1 hàm thích nghi cho bài toán.
2. Khởi tạo một quần thể các cá thể.
3. Đánh giá thích nghi (tốt ở mức nào) các cá thể trong quần thể.
4. Nếu điều kiện dừng thoả mãn, kết thúc. Ngược lại chuyển sang bước 5.

5. Chọn một số cá thể (lời giải ứng viên) sử dụng phương pháp chọn nào đó.
6. Áp dụng một số toán tử di truyền trên các lời giải đã chọn để sinh 1 quần thể mới.
7. Lập lại bước 3 tới bước 6.

3. PHƯƠNG PHÁP

Phương pháp này nhằm trả lời ba câu hỏi sau về học chuyển đổi:

1. Chúng ta nên chuyển đổi gì từ bài toán nguồn sang bài toán đích?
2. Làm sao chúng ta có thể chuyển đổi kiến thức từ bài toán nguồn sang bài toán đích?
3. Nên chuyển đổi bao nhiêu kiến thức?

Câu hỏi thứ nhất và thứ hai đơn giản. Chúng ta chuyển đổi kiến thức từ bài toán nguồn vào bài toán đích bằng cách lựa chọn một số lời giải tốt từ quần thể ở thế hệ gần nhất trong bài toán nguồn và copy chúng sang quần thể thế hệ đầu tiên của bài toán đích. Câu hỏi thứ ba khó trả lời hơn. Nghiên cứu trước đây về tái sử dụng GP thường chuyển đổi toàn bộ kiến thức từ nguồn vào đích. Nói cách khác, toàn bộ quần thể trong thế hệ cuối cùng của bài toán nguồn được copy trực tiếp và trở thành thế hệ đầu tiên của bài toán đích. Tuy nhiên, chuyển đổi quá nhiều kiến thức có thể dẫn tới chuyển đổi tiêu cực và làm giảm hiệu quả của hệ thống học.

4. THỬ NGHIỆM

Để đánh giá hiệu quả của phương pháp được đề xuất, ta tiến hành thử nghiệm trên 4 nhóm bài toán. Các bài toán này khác nhau có dạng đơn giản tới dạng phức tạp. Với mỗi bài toán, GP được sử dụng để huấn luyện dạng đơn giản nhất (ví dụ như $F_{1.1}$) trong 20 thế hệ. Sau đó, $k\%$ cá thể tốt nhất trong thế hệ cuối cùng được copy sang thế hệ đầu tiên của bài toán thứ hai ($F_{1.2}$) và $(100-k)\%$ cá thể trong thế hệ đầu tiên của bài toán thứ hai được sinh ngẫu nhiên. Quá trình được lặp lại cho các bài toán khác cho tới khi bài toán cuối cùng được giải ($F_{1.5}$).

Bảng 1: Một số lớp bài toán

Lớp bài toán	Các bài toán
F₁	1. x^2+x (F _{1.1})
	2. x^3+x^2+x (F _{1.2})
	3. $x^4+x^3+x^2+x$ (F _{1.3})
	4. $x^5+x^4+x^3+x^2+x$ (F _{1.4})
	5. $x^6+x^5+x^4+x^3+x^2+x$ (F _{1.5})

Lớp bài toán	Các bài toán
F_2	1. $\cos(x)+\sin(x)$ ($F_{2.1}$) 2. $\cos(x)+\sin(x) + \sin^2(x)$ ($F_{2.2}$) 3. $\cos(x)+\sin(x) + \sin^2(x) + \sin^3(x)$ ($F_{2.3}$) 4. $\cos(x)+\sin(x) + \sin^2(x) + \sin^3(x) + \sin^4(x)$ ($F_{2.4}$) 5. $\cos(x)+\sin(x) + \sin^2(x) + \sin^3(x) + \sin^4(x) + \sin^5(x)$ ($F_{2.5}$)
F_3	1. $\cos(x)+\sin(x)$ ($F_{3.1}$) 2. $\cos(x)+\sin(x)+\sin(2x)$ ($F_{3.2}$) 3. $\cos(x)+\sin(x)+\sin(2x)+\sin(3x)$ ($F_{3.3}$) 4. $\cos(x)+\sin(x)+\sin(2x)+\sin(3x) + \sin(4x)$ ($F_{3.4}$) 5. $\cos(x)+\sin(x)+\sin(2x)+\sin(3x)+\sin(4x)+\sin(5x)$ ($F_{3.5}$)
F_4	1. $\sin(x)-x*\cos(x)$ ($F_{4.1}$) 2. $\sin(x)-x*\cos(x)+x^2*\cos(x^2)$ ($F_{4.2}$) 3. $\sin(x)-x*\cos(x)+x^2*\cos(x^2)-x^3*\cos(x^3)$ ($F_{4.3}$) 4. $\sin(x)-x*\cos(x)+x^2*\cos(x^2)-x^3*\cos(x^3)+x^4*\cos(x^4)$ ($F_{4.4}$) 5. $\sin(x)-x*\cos(x)+x^2*\cos(x^2)-x^3*\cos(x^3)+x^4*\cos(x^4)-x^5*\cos(x^5)$ ($F_{4.5}$)

Vì có 5 bài toán trong mỗi nhóm, nên hàm thích nghi thay đổi 5 lần và mỗi hàm thích nghi tiến hoá trong 20 thế hệ, số lượng thế hệ tối đa là 100. Chúng tôi cũng đánh giá khả năng tổng quát hoá của GP đối với học chuyển đổi thông qua lựa chọn cá thể tốt nhất ở mỗi thế hệ và thử nghiệm cá thể này trên tập số liệu độc lập.

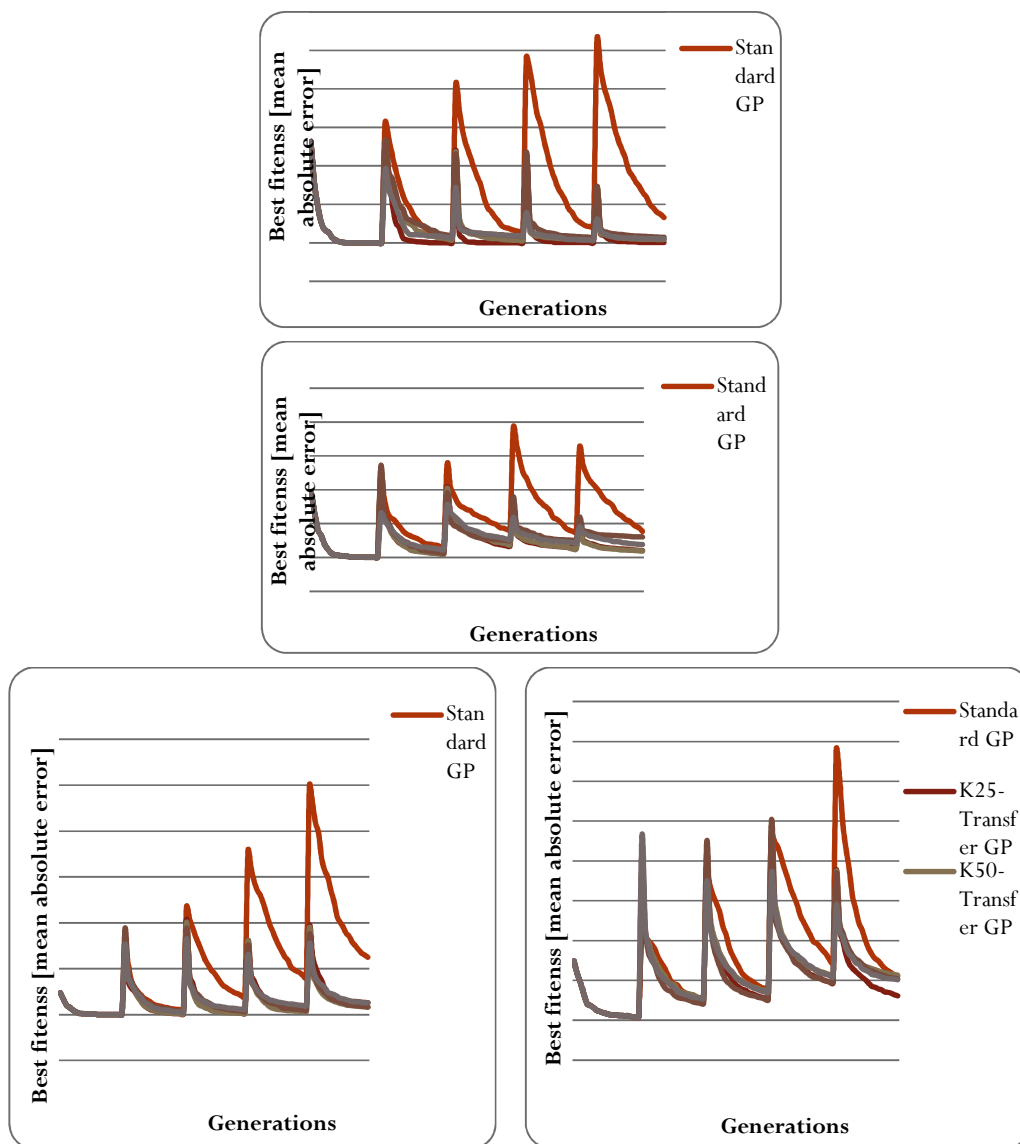
Bảng 2: Giá trị tham số tiến hoá và giá trị chạy

Tham số	Giá trị
Kích thước quần thể	500
Thế hệ	100
Lựa chọn	Tournament
Kích cỡ Tournament	2
Xác suất lai ghép	0.9
Xác suất đột biến	0.05
Độ sâu tối đa khởi tạo	6
Độ sâu tối đa	15
Độ sâu tối đa cây đột biến	15
Không kết thúc	+, -, *, / (protected one), sin, cos, exp, log (protected one)
Kết thúc	X
Tập huấn luyện	60 random points in [-1,1]
Tập thử nghiệm	60 random points in [-3,3]
Thích nghi thô	mean of absolute error on all fitness cases
Số lần thử cho mỗi xử lý	30 independent runs for each value

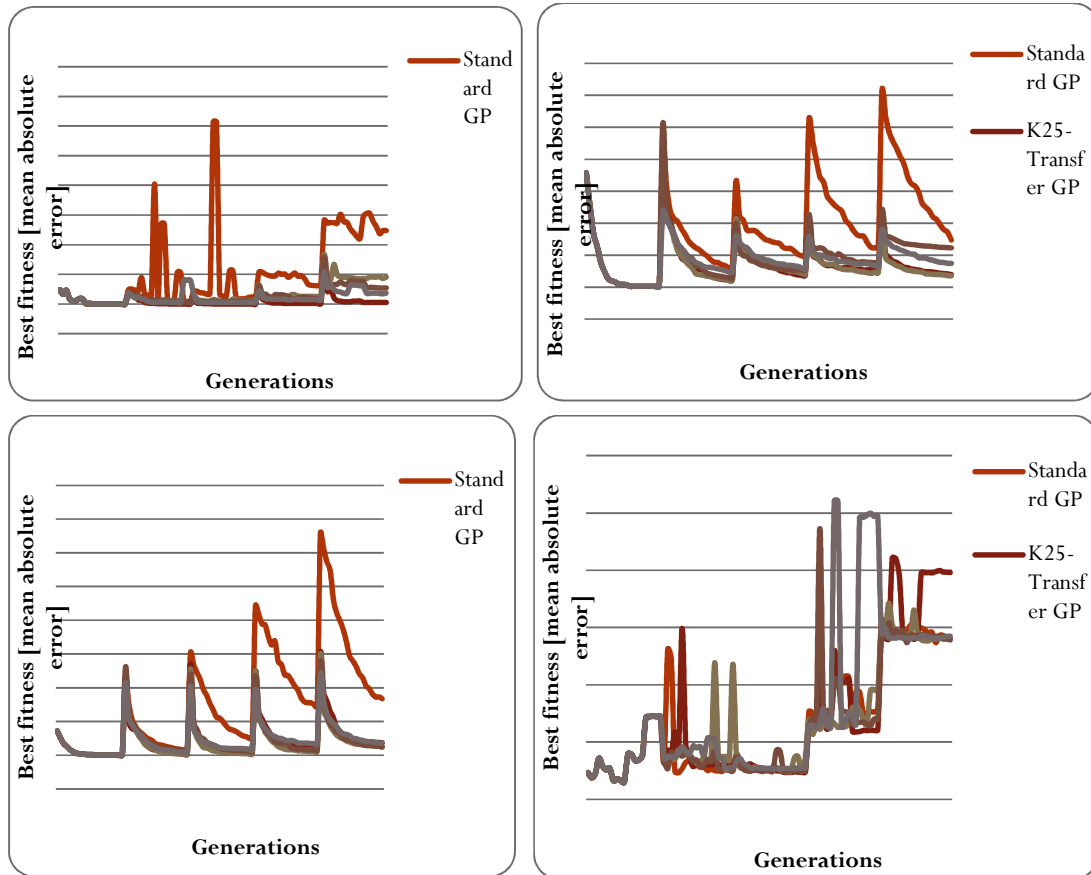
5. KẾT QUẢ

Với mỗi bài toán, có 5 biểu đồ khác nhau tương ứng với 5 lượng kiến thức được chuyển đổi khác nhau. Các lượng này bao gồm 0% (không chuyển đổi) tương tự như GP chuẩn; 25% (k25-Transferring nghĩa là 25% số cá thể của quần thể cuối cùng từ bài toán nguồn được chuyển sang bài toán đích)..., 100% (k100- chuyển đổi toàn bộ).

Các kết quả thử nghiệm cho thấy chuyển đổi kiến thức giúp ích cho việc áp dụng GP cho nhóm bài toán Động có cấu trúc phức tạp tăng lên.



Hình 1: Đồ thị của tập huấn luyện



Hình 2: Đồ thị của tập thử nghiệm

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Angeline, P. J. Pollack (1993), "Evolutionary Module Acquisition", Proceedings of the 2nd Annual Conference on Evolutionary Programming, pp. 154-163, MIT Press.
2. G.P.C. Fung, J.X. Yu, H. Lu, and P.S. Yu (2006), "Text Classification without Negative Examples Revisit", IEEE Trans. Knowledge and Data Eng., vol. 18, no. 1, pp. 6-20, Jan.
3. G.-R. Xue, W. Dai, Q. Yang, and Y. Yu (2008), "Topic-Bridged PLSA for Cross-Domain Text Classification", Proc. 31st Ann. Int'l ACM SIGIR Conf. Research and Development in Information Retrieval, pp. 627-634, July.
4. H. Al Mubaid and S.A. Umair (2006), "A New Text Categorization Technique Using Distributional Clustering and Learning Logic", IEEE Trans. Knowledge and Data Eng., vol. 18, no. 9, pp. 1156-1165, Sept.
5. H. Daume' III and D. Marcu (2006), "Domain Adaptation for Statistical Classifiers", J. Artificial Intelligence Research, vol. 26, pp. 101-126.
6. J. Blitzer, M. Dredze, and F. Pereira (2007), "Biographies, Bollywood, Boom-Boxes and Blenders: Domain Adaptation for Sentiment Classification", Proc. 45th Ann. Meeting of the Assoc. Computational Linguistics, pp. 432-439.

A STUDY ON TRANSFER LEARNING IN GENETIC PROGRAMMING

Abstract: *In this paper, we propose a model for implementing transfer learning in Genetic Programming (GP). The model on transfer learning in Genetic Programming is constructed by copying some good solutions from the source problem to the population of the target problem. The method is then tested on some families of structured symbolic regression problems and the experimental results show that the using of transfer learning helps Genetic Programming to perform better on families of related problems. However, transferring too much knowledge may also degrade its performance leading to negative transfer. Therefore, it is important to study how much knowledge we should transfer from the source to the target problem when implementing GP transfer learning system. In this paper, we also attempt to give initial answer to this question.*

Keywords: *Genetic Programming, transfer learning.*

THE DEPENDENCE OF MAGNETORESISTANCE IN DOPING SUPERLATTICE ON THE FREQUENCY OF ELECTROMAGNETIC WAVE

Nguyen Vu Nhan¹⁽¹⁾, Nguyen Dinh Nam², Nguyen Quyet Thang²

¹Hanoi Metropolitan University

²Hanoi University of Science, Vietnam National University

Abstract: By using quantum kinetic equation method the analytic expression of the magnetoresistance in doped superlattice under the influence of Electromagnetic wave is obtained. The magnetoresistance depends on some parameters, including the frequency of the Electromagnetic wave. Estimating numerical values for a GaAs:Si/GaAs:Be doped superlattice, this dependence is nonlinear and the magnetoresistance gets negative value. There are some differences from the case of magnetoresistance in the bulk semiconductor.

Keywords: Doping semiconductors, low-dimensional semiconductors, quantum wells, superlattices semiconductors.

1. INTRODUCTION

In the past few years, the properties of low-dimensional systems were studied more increasingly [1-5]. Doped superlattices belong to two-dimensional semiconductor structures. The influence of electromagnetic wave on the magnetoresistance has been studied in the quantum well with parabolic potential and in the bulk semiconductor [6-8]. However, it still opens for studying in doped superlattice. In this report, we use the quantum kinetic equation for electrons to theoretically study the influence of electromagnetic wave on the magnetoresistance in doped superlattice. Numerical calculations are carried out with a specific GaAs:Si/GaAs:Be doped superlattice.

2. THE QUANTUM KINETIC EQUATION AND THE ANALYTICAL EXPRESSION FOR THE MAGNETORESISTANCE IN DOPING SUPERLATTICE

It is well known that in the doped superlattice, the motion of electrons is restricted in one dimension, so that they can flow freely in two dimensions [9-10]. We consider a

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 11.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Vũ Nhân; Email: nvnhan@daihocthudo.edu.vn

doped superlattice to a cross electric field and magnetic field $\vec{E}_1=(0,0,E_1), \vec{B}=(0,B,0)$, the Hamiltonian for electron-phonon system in doped superlattice :

$$H = \sum_{N, \vec{k}_x} \varepsilon_N \left(\vec{k}_x - \frac{e}{\hbar c} \vec{A}(t) \right) a_{N, \vec{k}_x}^+ a_{N, \vec{k}_x} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + \sum_{N, N', \vec{k}_x, \vec{q}} C_{N, N'}(\vec{q}) a_{N, \vec{k}_x + \vec{q}}^+ a_{N, \vec{k}_x} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^+) + \sum_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) a_{N, \vec{k}_x + \vec{q}}^+ a_{N, \vec{k}_x} \quad (1)$$

where, $a_{N, \vec{k}_x}^+$ and $a_{N, \vec{k}_x}$, ($b_{\vec{q}}^+$ and $b_{\vec{q}}$) are the creation and the annihilation operators of the electron (phonon), N is the Landau level index, $|N, \vec{k}_x\rangle$ and $|N', \vec{k}_x + \vec{q}_x\rangle$ are electron states before and after scattering, $\hbar \omega_{\vec{q}}$ is the energy of an acoustic phonon, $C_{N, N'}(\vec{q}) = C_q I_{N, N'}(q_z)$, where C_q is the electron-phonon interaction constant and $I_{N, N'}(q_z)$ is the electron form factor [1], $\varphi(\vec{q})$ is the scalar potential of a crossed electric field $\vec{E}_1$, $\vec{A}(t)$ is the vector potential of an external electromagnetic wave $\vec{A}(t) = e \vec{E}_0 \sin(\Omega t) / \Omega$, Ω is the frequency of electromagnetic wave. The electron energy takes the simple form :

$$\varepsilon_N(\vec{k}_x) = \hbar \omega_p \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2m} \left[\hbar^2 \vec{k}_x^2 - \left(\frac{\hbar \vec{k}_x \omega_c + e \vec{E}_1}{\omega_p} \right)^2 \right] \quad (2)$$

here, m is the effective mass and charge of conduction electron, $k_{\perp} = (k_x, k_y)$ is its wave vector in the (x,y) plan, ω_p is the frequency plasma caused by donor doping concentration.

Starting from the Hamiltonian in Eq. (1) and using the commutative relations of the creation and the annihilation operators, we obtain the quantum kinetic equation in doped superlattice :

$$\frac{\partial n_{N, \vec{k}_x}(t)}{\partial t} + \left(\frac{e \vec{E}_1}{\hbar} + \omega_c [\vec{k}_x, \vec{h}] \right) \frac{\partial n_{N, \vec{k}_x}(t)}{\partial \vec{k}_x} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{N', q} |C_{N_1, N_2}(q)|^2 (2N_q + 1) \times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} J_l^2(\alpha q_x) (n_{N', \vec{k}_x + q_x} - n_{N, \vec{k}_x}) \delta(\varepsilon_{N'}(k_x + q_x) - \varepsilon_N(k_x) - l\hbar\Omega) . \quad (3)$$

For simplicity, we limit the problem to case of $l = -1, 0, 1$. If we multiply both sides of the Eq.3 by $(e/m^*) \vec{k}_x \delta(\varepsilon - \varepsilon_N(k_x))$, carry out the summation over N and k_x , use $J_0^2(\alpha q_x) \approx 1 - (\alpha q_x)^2 / 2$ and the current density expression, we obtain the function of conductivity tensor :

$$\begin{aligned}
\sigma_{im} = \sum_{N,N'} & \left\{ a_0 \delta_{ik} + b_0 b_1 \frac{\tau(\varepsilon_F)}{1 + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F)} \left[\delta_{ik} - \omega_c \tau(\varepsilon_F) \varepsilon_{ikl} h_l + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F) h_i h_k \right] \right. \\
& + b_0 b_2 \frac{\tau(\varepsilon_F - \hbar\Omega)}{1 + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F - \hbar\Omega)} \left[\delta_{ik} - \omega_c \tau(\varepsilon_F - \hbar\Omega) \varepsilon_{ikl} h_l + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F - \hbar\Omega) h_i h_k \right] \\
& \left. + b_0 b_3 \frac{\tau(\varepsilon_F + \hbar\Omega)}{1 + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F + \hbar\Omega)} \left[\delta_{ik} - \omega_c \tau(\varepsilon_F + \hbar\Omega) \varepsilon_{ikl} h_l + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F + \hbar\Omega) h_i h_k \right] \right\} \\
& \times \frac{e}{m} \frac{\tau(\varepsilon_F)}{1 + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F)} \left[\delta_{km} - \omega_c \tau(\varepsilon_F) \varepsilon_{kmn} h_n + \omega_c^2 \tau^2(\varepsilon_F) h_k h_m \right]
\end{aligned} \quad (4)$$

where, $a_0 = \frac{eL_x \sqrt{\Delta_0}}{\pi \hbar}$, $b_0 = \frac{eL_x}{\pi^2 \hbar m} \frac{\xi^2 k_B T}{n_0 v^2} \frac{e^2 E_0^2}{\hbar^4 \Omega^4} \frac{e E_1 \omega_c}{\hbar \omega_0^2} I_{N,N'}(q_z)$

$$b_1 = -4 \sqrt{\frac{\Delta_0}{\Delta_1}} (\Delta_0 + 3\Delta_1) + 2 \sqrt{\frac{\Delta_0}{\Delta_2}} (\Delta_0 + 3\Delta_2) - 2 \frac{\Delta_0^2 - \Delta_1^2}{\sqrt{\Delta_0 \Delta_1}}$$

$$b_2 = \frac{\Delta_1^2 - \Delta_4^2}{\sqrt{\Delta_4 \Delta_1}} \theta(\Delta_4) \theta(\Delta_1), \quad b_3 = \frac{\Delta_1^2 - \Delta_5^2}{\sqrt{\Delta_5 \Delta_1}} \theta(\Delta_5) \theta(\Delta_1)$$

with $\Delta_0 = \Delta_4 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F - \hbar\omega_p \left(N + \frac{1}{2} \right) \right]$, $\Delta_1 = \Delta_7 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F - \hbar\omega_p \left(N' + \frac{1}{2} \right) \right]$

$$\Delta_2 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F + \hbar\Omega - \hbar\omega_p \left(N' + \frac{1}{2} \right) \right], \quad \Delta_3 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F - \hbar\Omega - \hbar\omega_p \left(N' + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\Delta_5 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F - \hbar\Omega - \hbar\omega_p \left(N + \frac{1}{2} \right) \right], \quad \Delta_6 \approx \frac{2m\omega_p^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \left[\varepsilon_F + \hbar\Omega - \hbar\omega_p \left(N + \frac{1}{2} \right) \right].$$

And we obtain the expression of the magnetoresistance in doped superlattice as follows:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho_{zz}(H) - \rho_{zz}(0)}{\rho_{zz}(0)} = \frac{\sigma_{zz}(H)\sigma_{zz}(0)}{\sigma_{zz}^2(H) + \sigma_{xz}^2(H)} - 1 \quad (5)$$

in which σ_{zz} , σ_{xz} is the conductivity tensor defined by Eq.4

The Eq.5 is the analytical expression of the magnetoresistance in the doped superlattice and easy to come back to the case of the magnetoresistance in the bulk semiconductor when $\omega_p \rightarrow 0$. The expression shows the dependence of the magnetoresistance on the frequency of electromagnetic wave and some other quantities.

3. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSIONS

In this section, we numerically evaluate, plot and discuss for a GaAs:Si/GaAs:Be doped superlattice in order to clarify the mechanism for the magnetoresistance in the doped superlattice. The parameters used in the numerical calculations are as follows [9-10]: $\tau=10^{-12}\text{s}$, $\varepsilon_F=50\text{meV}$, $k_B=1.3807\times 10^{-23}\text{JK}^{-1}$, $m=0.0067m_0$ with m_0 is the mass of a free electron.

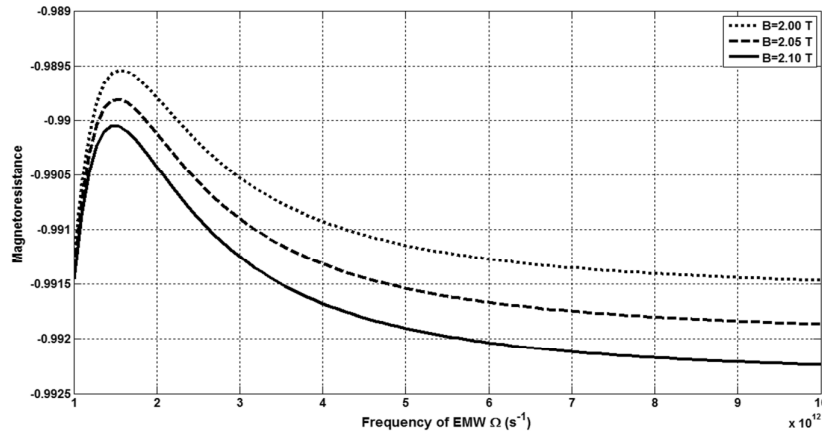


Figure 1. The dependence of magnetoresistance on the frequency of the electromagnetic wave

The Figure shows that the dependence of magnetoresistance on frequency of the electromagnetic wave is nonlinear.

The magnetoresistance gets negative value. The value of the magnetoresistance increases sharply when the frequency is low, after that it decreases steadily. With the different values of the magnetic field B , we get the resonant peaks at the same point of frequency. In the bulk semiconductor, there is no the resonant peak, this is one point different between the doped superlattice and the bulk semiconductor. It can be explained by the quantum confinement of electrons.

4. CONCLUSIONS

In this paper, we obtain the analytic expressions for the components of the tensor conductivity and the magnetoresistance in doped superlattice under the influence of electromagnetic wave from Hamiltonian of electron-phonon system. The magnetoresistance in this case depends on the frequency of electromagnetic wave. This dependence is nonlinear. We see that the magnetoresistance gets negative values and the resonant peaks. The quantum confinement of electron in the doped superlattice causes some differences from the case in the bulk semiconductor.

Acknowledgments: This research is completed with financial support from NAFOSTED 2016.

REFERENCES

1. Bau N Q, Hung D M and Hung L T (2010), "*The Influences of Confined Phonons on the Nonlinear Absorption Coefficient of a Strong Electromagnetic Wave by Confined Electrons in Doping Superlattices*", Progress In Electromagnetics Research Letters volume 15, pp. 175-185.
2. Bau N Q and Trien H D (2010), "The Nonlinear Absorption Coefficient of Strong Electromagnetic Waves Caused by Electrons Confined in Quantum Wires", Journal of the Korean Physical Society volume: 56 Issue: 1, pp.120-127.
3. Phong T C and Bau N Q (2003), "*Parametric resonance of acoustic and optical phonons in a quantum well*", Journal of the Korean Physical Society volume: 42 Issue: 5 pp. 647-651.
4. Bau N Q, Hung L T and Nam N D (2011), "*The Nonlinear Absorption Coefficient of a Strong Electromagnetic Wave by Confined Electrons in Quantum Wells under the Influences of Confined Phonons*", Journal of Electromagn. Waves and Applications volume 24 Issue 13, pp. 1751-1761.
5. Borisenko S I (2004), "*The effect of acoustic phonon confinement on electron scattering in GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices*", Journal of Semiconductors volume: 38 Issue: 7, pp. 824-829.
6. Nam N D, Long D T and Nhan N V (2014), "*The Dependence of the Magnetoresistance in Quantum Wells with Parabolic Potential on Some Quantities under the Influence of Electromagnetic Wave*", Journal of Integrated Ferroelectrics volume: 155, pp. 45-51.
7. Manlevich V L and Epshtein E M (1976), "*Photostimulated odd magnetoresistance of semiconductors*", J. Sov. Phys. Semicond. Volume: 18, pp. 739-741.
8. Manlevich V L and Epshtein E M (1976), "*Photostimulated kinetic effects in semiconductors*", J. Sov. Phys. Semicond. Volume:19, pp. 230-237.
9. Ruden P and Dohler G H (1983), "*Electronic structure of semiconductors with doping superlattices*", Phys. Rev. B. volume: 27 Issue: 6, pp. 3538-3547.
10. Margulis A D and Margulis A VI (1994), "*The quantum acoustomagnetolectric effect due to Rayleigh sound waves*", Journal of Physics: Condensed Matter volume 6 number 31, pp. 6139-6147.

SỰ PHỤ THUỘC CỦA TỪ TRỞ TRONG SIÊU MẠNG PHA TẠP VÀO TẦN SỐ SÓNG ĐIỆN TỪ

Tóm tắt: Trên cơ sở phương pháp phương trình động lượng từ, nhận được biểu thức giải tích của từ trở trong siêu mạng pha tạp khi có mặt sóng điện từ ngoài. Từ trở nhận được phụ thuộc vào các tham số đặc trưng cho siêu mạng pha tạp cũng như vào sóng điện từ. Kết quả từ trở được tính số cho siêu mạng pha tạp GaAs:Si/GaAs cho thấy có sự phụ thuộc phi tuyến và có thể nhận giá trị âm. Các kết quả phân tích cho thấy sự khác biệt khi so sánh với kết quả từ trở trong bán dẫn khối.

Từ khóa: Siêu mạng pha tạp, bán dẫn thấp chiều, hồ lượng tử, siêu mạng bán dẫn.

DÒNG ÂM - ĐIỆN PHI TUYẾN TRONG DÂY LƯỢNG TỬ HÌNH CHỮ NHẬT VỚI HỔ THỂ CAO VÔ HẠN

Nguyễn Quyết Thắng¹, Nguyễn Vũ Nhân²⁽¹⁾

¹Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - Đại học Quốc gia Hà Nội

²Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Hiệu ứng âm - điện lượng tử phi tuyến và dòng âm-điện phi tuyến trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn được nghiên cứu trên cơ sở phương trình động lượng tử cho hàm phân bố điện tử tương tác với sóng âm trong và sóng âm ngoài của dây lượng tử. Nhận được biểu thức giải tích cho dòng âm - điện phi tuyến trong dây lượng tử. Dòng âm - điện phụ thuộc phi tuyến vào nhiệt độ T , số sóng q , tần số sóng âm ngoài và các tham số cấu trúc của dây lượng tử. Kết quả được tính số, vẽ đồ thị và bàn luận cho dây lượng tử hình chữ nhật GaAs/GaAsAl. Các kết quả tính số cũng được so sánh với các kết quả tương tự trong bán dẫn thông thường và trong hố lượng tử cho sự khác biệt.

Từ khóa: Bán dẫn, bán dẫn thấp chiều, dây lượng tử, hố lượng tử, siêu mạng bán dẫn.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hiện nay, cùng với sự phát triển mạnh mẽ của khoa học công nghệ, ngành Vật lý bán dẫn cũng đã đạt được nhiều thành công. Sự tiến bộ của Vật lý bán dẫn được đặc trưng bởi sự chuyển hướng nghiên cứu từ các bán dẫn khối sang các màng mỏng và các cấu trúc thấp chiều có kích thước nano mét như các hố lượng tử (Quantum wells) và siêu mạng (superlattices) thuộc hệ hai chiều, các dây lượng tử (Quantum wires - hệ một chiều) và các chấm lượng tử (Quantum dots - hệ không chiều). Trong các hệ thấp chiều này, chuyển động của điện tử bị giới hạn nghiêm ngặt (còn gọi là bị giam cầm) theo một, hai, hay cả ba hướng tọa độ và chỉ chuyển động tự do theo những hướng tọa độ còn lại hoặc không chuyển động.

Sự giam cầm điện tử trong các hệ bán dẫn thấp chiều dẫn đến sự thay đổi đáng kể các tính chất vật lý của điện tử như tính chất quang, tính chất điện đồng thời làm xuất hiện một số tính chất mới so với bán dẫn thông thường (bán dẫn khối) gọi là các hiệu ứng kích thước

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 3.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Vũ Nhân; Email: nvnnhan@daihocthuodo.edu.vn

lượng tử [1-3]. Ở đây, các quy luật của cơ học lượng tử bắt đầu có hiệu lực, khi đó đặc trưng cơ bản nhất là phổ năng lượng của điện tử bị lượng tử dọc theo hướng tọa độ bị giam cầm. Do vậy, các đặc trưng của vật liệu như: hàm phân bố, mật độ trạng thái, mật độ dòng... cũng thay đổi theo. Sự thay đổi các tính chất quang, tính chất điện của điện tử trong hệ thấp chiều đã mở ra nhiều khả năng ứng dụng, chế tạo các linh kiện điện tử thế hệ mới và cho ra đời nhiều công nghệ hiện đại có tính chất cách mạng trong các lĩnh vực khoa học kỹ thuật.

Gần đây các nhà khoa học đã chú ý tới sự ảnh hưởng của sóng âm đến các tính chất của vật liệu, hay còn gọi là sự tương tác của sóng âm với các bán dẫn thấp chiều. Đặc biệt là hiệu ứng âm - điện trong bán dẫn thấp chiều. Các công trình lý thuyết về hiệu ứng âm - điện trong bán dẫn khối đã được nghiên cứu trong [4], trong hố lượng tử [5], trong dây lượng tử hình trụ [6]. Tiếp nối các bài toán trên, bài báo này quan tâm nghiên cứu hiệu ứng âm - điện và dòng âm-điện trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn với các cơ chế tương tác điện tử - phonon âm trong và tán xạ điện tử - phonon âm ngoài. Kết quả cho dòng âm - điện được tính số và vẽ đồ thị với dây lượng tử hình chữ nhật GaAs/GaAsAl. Các kết quả được so sánh với kết quả tương tự trong bán dẫn khối và hố lượng tử để làm rõ sự khác biệt.

2. PHƯƠNG TRÌNH ĐỘNG LƯỢNG TỬ CỦA ĐIỆN TỬ TRONG DÂY LƯỢNG TỬ

Dây lượng tử hình chữ nhật với giả thiết rằng z là phương không bị lượng tử hóa (điện tử có thể chuyển động tự do theo phương này) và theo hai phương còn lại (phương x và y) điện tử bị giam cầm. Hàm sóng (1) và phổ năng lượng (2) của điện tử trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn nhận được nhờ việc giải phương trình Schrodinger cho một điện tử chuyển động trong dây lượng tử được viết dưới dạng sau:

$$\psi_{n,l,\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{l\pi}{L_y} y\right) \exp(ik_z z), \quad (1)$$

$$\varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) = \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2} \right), \quad (2)$$

trong đó, m^* là khối lượng hiệu dụng của điện tử; n, l là các số lượng tử của hai phương bị lượng tử hóa x và y (với $n, l = 1, 2, 3, \dots$); p_z là xung lượng của điện tử theo phương z ; $\vec{k} = (0, 0, k_z)$ là véc tơ sóng của điện tử; L là chiều dài của dây lượng tử; L_x và L_y là các kích thước của dây lượng tử theo phương x và y .

Giả thiết rằng sóng âm ngoài có tần số ω_q được truyền dọc theo dây lượng tử (phương Oz). Xét các trường hợp thực tế, từ số liệu thực nghiệm ở nhiệt độ thấp [5], khi đó $\omega_q/\eta = v_s|q|/\eta \ll 1$ và $ql \gg 1$ với η là tần số dao động của điện tử, v_s là vận tốc sóng âm, q là số sóng âm ngoài và l là quãng đường tự do trung bình của điện tử. Có thể coi các sóng âm ngoài là một bó sóng phonon. Hamiltonian mô tả sự tương tác của hệ điện tử - phonon trong và phonon ngoài trong dây lượng tử hình chữ nhật được viết dưới dạng (3):

$$H = \sum_{n,l,\vec{p}_z} \varepsilon_{n,l}(\vec{k}) a_{n,l,\vec{p}_z}^+ a_{n,l,\vec{p}_z} + \sum_{n,l,n',l',\vec{k}} I_{n,l}^{n',l'} C_{\vec{k}} a_{n',l',\vec{p}_z+\vec{k}}^+ a_{n,l,\vec{p}_z} (b_{\vec{k}} + b_{-\vec{k}}^+) + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \sum_{n,l,n',l',\vec{q}} C_{\vec{q}} U_{n,l}^{n',l'} a_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}}^+ a_{n,l,\vec{p}_z} b_{\vec{q}} \exp(i\omega_{\vec{q}}t) \quad (3)$$

ở đây, $C_{\vec{k}} = \Lambda \sqrt{k/(2\rho v_s SL)}$ là thừa số tương tác điện tử - phonon trong; ρ là mật độ khối lượng của dây lượng tử; Λ là hằng số thế; $C_{\vec{q}} = i\Lambda v_l^2 \sqrt{\hbar \omega_{\vec{q}}^3/(2\rho FS)}$ là thừa số tương tác giữa điện tử - phonon ngoài; $F = q[1 + \sigma_l^2]/2\sigma_l + (\sigma_l/\sigma_l - 2)[1 + \sigma_l^2]/2\sigma_l$, $\sigma_l = (1 - v_s^2/v_l^2)^{1/2}$, $\sigma_t = (1 - v_s^2/v_t^2)^{1/2}$; $S = L_x L_y$ là thiết diện của dây lượng tử hình chữ nhật; v_l (v_t) là vận tốc dọc (ngang) của sóng âm; $a_{n,N,\vec{p}_z}^+$ ($a_{n,N,\vec{p}_z}$) là toán tử sinh (hủy) của điện tử; $b_{\vec{k}}^+$ ($b_{\vec{k}}$) là toán tử sinh (hủy) của phonon âm trong; $b_{\vec{q}}$ là toán tử hủy của phonon âm ngoài; $\vec{q}$ là vectơ sóng phonon ngoài. $|n,\vec{k}\rangle$ ($|n',\vec{k} + \vec{q}\rangle$) là trạng thái tương tác trước (sau) của điện tử; $U_{n,l}^{n',l'}$ là yếu tố ma trận của toán tử $U = \exp(iqy - k_l z)$, $k_l = (q^2 - (\omega_q/v_l)^2)^{1/2}$ (thừa số tắt dần theo không gian của vùng thế năng điện trường thay đổi); $I_{n,l}^{n',l'}$ là thừa số dạng của điện tử [8].

Để thiết lập phương trình động lượng tử cho điện tử trong sự có mặt của sóng âm, chúng ta sử dụng phương trình chuyển động cho giá trị trung bình thống kê đối với các điện tử $i\hbar \frac{\partial f_{n,l,\vec{p}_z}(t)}{\partial t} = \langle f_{n,l,\vec{p}_z}(t), H \rangle_t$ (ở đây, kí hiệu $\langle X \rangle_t$ có nghĩa là trung bình nhiệt động lực học của toán tử X ; $f_{n,l,\vec{p}_z}(t) = \langle a_{n,l,\vec{p}_z}^+ a_{n,l,\vec{p}_z} \rangle_t$ là toán tử số hạt hay hàm phân bố điện tử).

Sử dụng Hamiltonian trong phương trình (3) và thực hiện các phép tính, phương trình động lượng tử cho điện tử nhận được có dạng:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{n,l,\vec{p}_z}(t)}{\partial t} = & -\frac{1}{\hbar} \sum_{n',l',\vec{q}} |C_{\vec{q}}|^2 \int_{-\infty}^t dt' \left\{ [f_{n,l,\vec{p}_z} N_q - f_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}} N_q] \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z + \vec{q}) - \varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z) - \hbar\omega_q + \hbar\omega_{\vec{q}})(t-t')\right] + \right. \\ & + [f_{n,l,\vec{p}_z} N_q - f_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}} N_q] \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z + \vec{q}) - \varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) + \hbar\omega_q + i\delta)(t-t')\right] - [f_{n',l',\vec{p}_z-\vec{q}} N_q - f_{n,l,\vec{p}_z} N_q] \times \\ & \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) - \varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z - \vec{q}) - \hbar\omega_q + i\delta)(t-t')\right] - [f_{n',l',\vec{p}_z-\vec{q}} N_q - f_{n,l,\vec{p}_z} N_q] \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) - \varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z - \vec{q}) + \hbar\omega_q + i\delta)(t-t')\right] \Big\} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{n',l',\vec{k}} |C_k|^2 |U_{n,l}^{n',l'}|^2 \int_{-\infty}^t dt' \left\{ \left[f_{n,l,\vec{p}_z} N_{\vec{k}} - f_{n',l',\vec{p}_z+\vec{k}} N_{\vec{k}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z + \vec{k}) - \varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) + \hbar\omega_q - \hbar\omega_k + i\delta)(t-t') \right] - \right. \\
& \left. - \left[f_{n',l',\vec{p}_z-\vec{k}} N_{\vec{k}} - f_{n,l,\vec{p}_z} N_{\vec{k}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n,l}(\vec{p}_z) - \varepsilon_{n',l'}(\vec{p}_z - \vec{k}) + \hbar\omega_q - \hbar\omega_k + i\delta)(t-t') \right] \right\} \quad (4)
\end{aligned}$$

ở đây, N_q (N_k) là số hạt phonon ngoài (phonon trong); δ là hàm Delta Kronecker và τ là thời gian hồi phục xung lượng của điện tử.

3. DÒNG ÂM - ĐIỆN TRONG DÂY LƯỢNG TỬ HÌNH CHỮ NHẬT

Để giải phương trình (4), chúng ta thay thế $f_{n,l,p}$ bởi $f_F + f(t)$, với f_F là hàm Fermi cân bằng và $f(t)$ là hàm chứa các số hạng còn lại. Mật độ dòng âm - điện có dạng:

$$j = \frac{2e}{2\pi\hbar} \sum_{n,l} \int v_{p_z} f_{n,l,\vec{p}_z}(t) dp_z \quad (5)$$

với v_{p_z} là vận tốc dịch chuyển trung bình của các điện tử.

Thay phương trình (4) vào phương trình (5) và xét cơ chế tán xạ điện tử - phonon âm trong, sau tính toán chúng ta nhận được biểu thức cho mật độ dòng âm - điện trong dây lượng tử hình chữ nhật với hỏ thể cao vô hạn được viết dưới dạng (6):

$$j = \frac{4e\tau|\Lambda|^2 m^2 k_B T}{(2\pi)^2 \hbar^6 \rho_s \omega_q} \sum_{n,l,n',l'} |I_{n,l}^{n',l'}|^2 D_1 \exp(\beta(\varepsilon_F - B)) + \frac{32e\tau|\Lambda|^2 v_l^4 \omega_q^2 W \pi \left(\frac{m}{\beta}\right)^{3/2}}{\hbar^6 \rho F a b \hbar v_s} \sum_{n,l,n',l'} D_2 \exp\left(\beta(\varepsilon_F - B) - 2L\sqrt{q^2 - \frac{\omega_q^2}{v_l^2}}\right), \quad (6)$$

$$\text{với: } D_1 = e^{-\xi_1} \left[\xi_1 K_0(\xi_1) + 3 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^2 \xi_1^3 K_1(\xi_1) + 3 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^2 \xi_1^3 K_2(\xi_1) + 8 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^5 \xi_1^6 K_3(\xi_1) \right]$$

$$+ e^{-\xi_2} \left[\xi_2 K_0(\xi_2) + 3 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^2 \xi_2^3 K_1(\xi_2) + 3 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^2 \xi_2^3 K_2(\xi_2) + 8 \left(\frac{2}{\hbar\beta} \right)^5 \xi_2^6 K_3(\xi_2) \right]$$

$$D_2 = e^{-\chi_1} \chi_1^{5/2} \left[K_{\frac{5}{2}}(\chi_1) + 3K_{\frac{3}{2}}(\chi_1) + 3K_{\frac{1}{2}}(\chi_1) + K_{\frac{1}{2}}(\chi_1) \right] - e^{-\chi_2} \chi_2^{5/2} \left[K_{\frac{5}{2}}(\chi_2) + 3K_{\frac{3}{2}}(\chi_2) + 3K_{\frac{1}{2}}(\chi_2) + K_{\frac{1}{2}}(\chi_2) \right]$$

$$\text{trong đó, } \xi_1 = \frac{\beta}{2} (\Delta_{n',l',n,l} - \hbar\omega_q); \quad \xi_2 = \frac{\beta}{2} (\Delta_{n',l',n,l} + \hbar\omega_q); \quad \chi_1 = \xi_1 + \frac{\beta\hbar\omega_k}{2}; \quad \chi_2 = \xi_2 - \frac{\beta\hbar\omega_k}{2}; \quad \beta = (k_B T)^{-1}$$

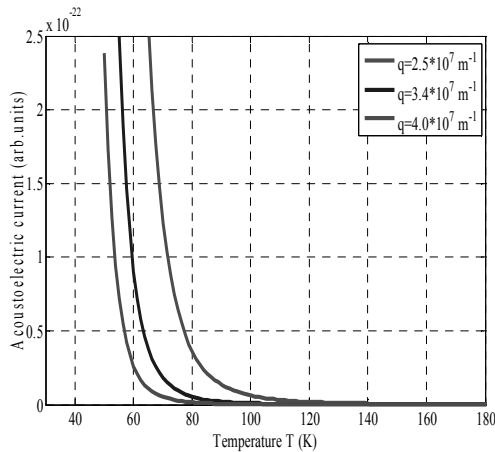
$$; \quad \Delta_{n',l',n,l} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} (n'^2 - n^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} (l'^2 - l^2); \quad B = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2} \right); \quad k_B \text{ là hằng số Boltzmann; } T \text{ là nhiệt}$$

độ tuyệt đối của hệ; ε_F là năng lượng Fermi và $K_n(x)$ là hàm Bessel loại hai.

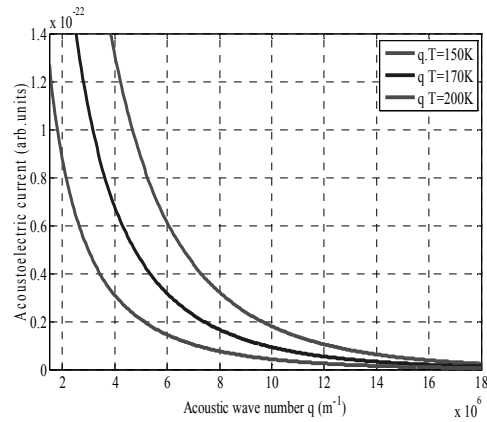
Biểu thức (6) chính là biểu thức giải tích của mật độ dòng âm - điện trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn. Biểu thức này cho thấy sự phụ thuộc phi tuyến của mật độ dòng âm - điện vào nhiệt độ T , số sóng, tần số sóng âm ngoài, chiều dài và kích thước của dây lượng tử (L_x, L_y). Điều này là khác biệt so với những kết quả thu được cho mật độ dòng âm - điện trong bán dẫn khối [4] và trong hố lượng tử [5, 6].

4. KẾT QUẢ KHẢO SÁT SỐ VÀ BÀN LUẬN

Phần này trình bày kết quả tính số, vẽ đồ thị cho mật độ dòng âm-điện với dây lượng tử hình chữ nhật GaAs/GaAsAl. Các tham số sử dụng trong tính số là: $\tau = 10^{-12}\text{s}$, $W = 10^4\text{Wm}^{-2}$, $\rho = 5320\text{kgm}^{-3}$, $v_l = 2 \times 10^3\text{ms}^{-1}$, $v_t = 18 \times 10^2\text{ms}^{-1}$, $v_s = 5370\text{ms}^{-1}$, $A = 13,5\text{eV}$, $\omega_q = 10^9\text{s}^{-1}$, $L = 90 \times 10^{-9}\text{m}$, $e = 2,07e_0$, $m^* = 0,067m_e$ (m_e là khối lượng điện tử tự do).



Hình 1. Sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện (tung độ) vào nhiệt độ T của hệ (hoành độ) (với $n=0, \pm 1$, $n'=0, \pm 1$, $l=1$, $l'=1$).

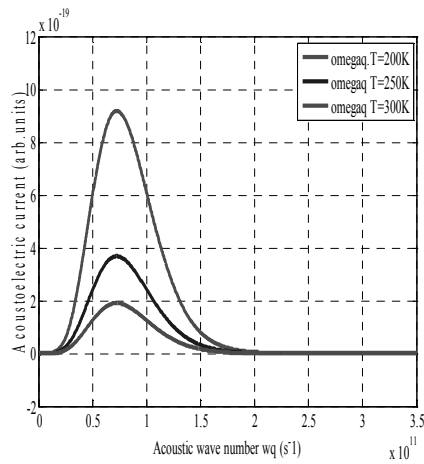


Hình 2. Sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện (tung độ) vào số sóng q (với $n=0, \pm 1$, $n'=0, \pm 1$, $l=1$, $l'=1$).

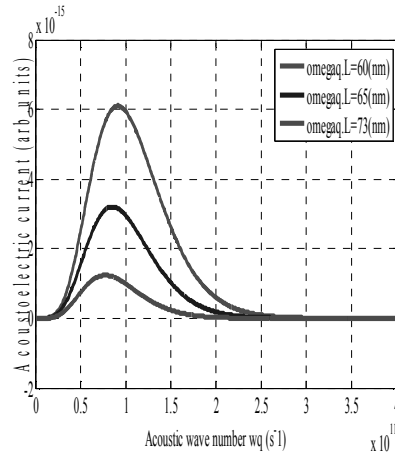
Đồ thị trong hình 1 biểu diễn sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện vào nhiệt độ T với các số sóng: $q = 2,5 \cdot 10^{-7} \text{ (m}^{-1}\text{)}$; $q = 3,4 \cdot 10^{-7} \text{ (m}^{-1}\text{)}$; $q = 4,0 \cdot 10^{-7} \text{ (m}^{-1}\text{)}$. Kết quả thu được cho thấy sự phụ thuộc của mật độ dòng âm điện là phi tuyến, điều này tương đồng với kết quả trong hố lượng tử [5] nhưng có sự khác biệt thể hiện ở độ tăng, giảm của mật độ dòng âm - điện trong dây lượng tử là rất chậm.

Trên hình 2, đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện vào số sóng q ở các nhiệt độ khác nhau ($T = 150 \text{ K}$, $T = 170 \text{ K}$ và $T = 200 \text{ K}$). Đường biểu diễn cho thấy mật độ dòng âm - điện phụ thuộc phức tạp vào số sóng q và giảm nhanh khi số sóng âm nhỏ.

Đồ thị biểu diễn trên hình 3 mô tả sự phụ thuộc mật độ dòng âm - điện vào tần số sóng âm với nhiệt độ T khác nhau. Nhận thấy, sự phụ thuộc của dòng âm - điện vào tần số sóng là phi tuyến và có một đỉnh cực đại, tương ứng mật độ dòng âm - điện cực đại khi tần số sóng âm ngoài thỏa mãn điều kiện $\omega_q = \omega_k + \Delta_{n,l,n',l'}$ hoặc $\omega_q = \omega_k - \Delta_{n,l,n',l'}$. Kết quả này là khác biệt so với các kết quả thu được trong bán dẫn khối [6] là dòng âm - điện luôn phụ thuộc tuyến tính. Kết quả này cũng khác so với kết quả trong hố lượng tử [5, 6], trong đó mật độ dòng âm - điện có hai đỉnh cực đại ứng với hai giá trị khác nhau của tần số sóng âm là $\omega_q = \omega_k \pm \Delta_{n,l,n',l'}$.



Hình 3. Sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện (tung độ) vào tần số sóng âm hoành độ) khi nhiệt độ của hệ thay đổi (với $n=0, \pm 1$, $n'=0, \pm 1$, $l=1$, $l'=1$).



Hình 4. Sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện (tung độ) vào tần số sóng âm hoành độ) khi chiều dài dây lượng tử thay đổi (với $n=0, \pm 1$, $n'=0, \pm 1$, $l=1$, $l'=1$).

Đồ thị trên hình 4 biểu diễn sự phụ thuộc của mật độ dòng âm - điện vào tần số sóng âm khi chiều dài dây lượng tử L thay đổi. Sự phụ thuộc này là phi tuyến và xuất hiện một đỉnh cực đại, tương ứng với mật độ dòng âm - điện cực đại khi tần số sóng âm thỏa mãn $\omega_q = \omega_k + \Delta_{n,l,n',l'}$ hoặc $\omega_q = \omega_k - \Delta_{n,l,n',l'}$. Kết quả khảo sát cho thấy, đỉnh cực đại này dịch chuyển về phía tần số sóng âm nhỏ khi chiều dài dây lượng tử L tăng. Sự dịch chuyển này chứng tỏ rằng kích thước dây lượng tử ảnh hưởng mạnh tới độ lớn của mật độ dòng âm-điện.

5. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng âm - điện và tính mật độ dòng âm điện trong dây lượng tử bán dẫn hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn. Các kết quả chính nhận được là:

– Nhận được phương trình động lượng tử của điện tử trong dây lượng tử khi có mặt sóng âm ngoài và biểu thức giải tích của hàm phân bố điện tử.

– Thu được biểu thức giải tích của mật độ dòng âm - điện trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn. Từ đó, chỉ ra nguyên nhân xuất hiện dòng âm - điện trong dây lượng tử hình chữ nhật chính là sự tồn tại của các dòng thành phần được sinh ra bởi các nhóm hạt tải (điện tử) mang năng lượng khác nhau và sự phụ thuộc năng lượng của điện tử vào thời gian hồi phục xung lượng.

– Mật độ dòng âm - điện trong dây lượng tử hình chữ nhật được tính số, vẽ đồ thị cho dây lượng tử GaAs/GaAsAl. Kết quả cho thấy mật độ dòng âm - điện phụ thuộc mạnh và không tuyến tính vào nhiệt độ T , số sóng q , tần số sóng âm và kích thước của dây lượng tử. Các kết quả nhận được là mới và khác biệt hoàn toàn so với kết quả thu được trong hố lượng tử [5, 6]. Mật độ dòng âm - điện đạt giá trị cực đại khi tần số sóng âm thỏa mãn điều kiện cộng hưởng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. H. Rucker, E. Molinary and P. Lugli (1992), "*Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum wells*", Physical Review B volume:45, Issue: 12, pp. 6747-6756.
2. P. Vasilopoulos, M. Charbonneau and C. M. Van Vliet (1987), "*Linear and nonlinear electrical conduction in quasi-two-dimensional quantum well*", Physical Review B volume: 35 Issue: 3, pp.1334-1344.
3. Peiji Zhao (1994), "*Phonon amplification by absorption of an intense laser field in quantum well of polar material*", Physical Review B volume: 49 Issue: 19, pp. 13589-13599.
4. R. H. Parmenter (1953), "*The Acousto-Electric Effect*", Physical Review B volume:89, Issue: 5, pp. 990-998.
5. M. R. Astley, M. Kataoka, C. J. B. Ford, J. Appl (2008), "*Search Results Quantized acoustoelectric current in an InGaAs quantum well*", Journal of Applied Physics volume: 103 Issue: 9, pp. 096102-096105.
6. N. Q. Bau, N. V. Hieu, and N. V. Nhan (2012), "*The quantum acoustomagnetolectric field in a quantum well with a parabolic potential*", Superlattices and Microstructures volume: 52, Issue: 5, pp. 921-930.
7. S. Y. Mensah et al., J Phys. Superlatt. Micros (2005), "*The influence of external electric field on acoustoelectric effect in a superlattice*", Superlattices and Microstructures volume: 37 Issue: 2, pp. 87-97.
8. JM Shilton, DR Mace, VI Talyanskii, Yu Galperin, MY Simmons, M Pepper, DA Ritchie (1996), "*On the acoustoelectric current in a one-dimensional channel*", Journal of Physics: Condensed Matter volume: 8 Issue:24, pp. 337-346.

A NONLINEAR ACOUSTOELECTRIC CURRENT IN A RECTANGULAR QUANTUM WIRE WITH INFINITY HIGH POTENTIAL

Abstract: Based on a quantum kinetic equation for distribution function of electrons in interactions of inside phonons-electrons and external phonons-electrons, a nonlinear acoustoelectric effect and a nonlinear acoustoelectric current in a rectangular quantum wire with a infinity high potential are studied. An analytic expression for the nonlinear acoustoelectric current in a quantum wire is obtained. The nonlinear dependence of the acoustoelectric current on the temperature T , the number of q waves, the external acoustic wave frequency and the structure parameters of a the quantum wire is obtained. The results are numerical calculated, plotted and discussion for the quantum wire GaAs/GaAsAl. All these results are compared with those for normal semiconductors and quantum wells to show the differences.

Keywords: Semiconductors, low-dimensional semiconductos, quantum wires, quantum wells, superlattices semiconductors.

ĐÁNH GIÁ HIỆN TRẠNG QUẢN LÝ MÔI TRƯỜNG VÀ ĐỀ XUẤT CÁC GIẢI PHÁP CHO QUÁ TRÌNH HOÀN NGUYÊN TẠI MỎ THAN HỒNG THÁI, TỈNH QUẢNG NINH

Ngô Thanh Sơn¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Trong thời gian gần đây, với việc khai thác tận thu và trữ lượng than tại một số mỏ gần như đã cạn kiệt, công tác hoàn nguyên tại các mỏ than đang đặt ra những khó khăn và thách thức về hiệu quả hoàn nguyên đối với môi trường. Nghiên cứu này thông qua đánh giá hiện trạng sẽ đề xuất các giải pháp trong công tác hoàn nguyên đối với mỏ than Hồng Thái, mỏ than lâu đời và đã bước vào công đoạn hoàn nguyên, nhằm nâng cao hiệu quả và giảm thiểu các rủi ro về môi trường tại khu mỏ cũng như khu vực lân cận

Từ khóa: Môi trường, hoàn nguyên, mỏ than, ô nhiễm, rủi ro.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Sản xuất than trước đây là một ngành kinh tế quan trọng ở Việt Nam. Với sản lượng khai thác 40 triệu tấn than/năm như hiện nay (trong đó có đến 70% sản lượng than được khai thác tại vùng mỏ Quảng Ninh) và cùng với những bước tiến vượt bậc cả về quy mô khai thác lẫn chất lượng sản phẩm đã đáp ứng ngày càng cao nhu cầu sử dụng than trong và ngoài nước, đáp ứng nhu cầu việc làm cho hàng vạn người lao động, góp phần tích cực vào sự phát triển kinh tế xã hội của khu vực và vùng miền. Tuy nhiên, việc khai thác than lại phát sinh nhiều vấn đề tác động tiêu cực tới môi trường như gây lún đất, suy thoái nhanh tài nguyên rừng, bồi lắng lòng hồ, ô nhiễm nguồn nước, làm phát sinh nhiều khói bụi và chất thải rắn... ảnh hưởng không nhỏ đến sức khỏe và đời sống của người dân và các sinh vật ở các khu vực lân cận. Hiện trữ lượng than tại nhiều mỏ đã gần cạn kiệt, vì vậy, việc hoàn nguyên tại các mỏ than đang được xem là vấn đề trọng tâm, cần thiết phải đưa ra những giải pháp về quản lý và công nghệ để giảm thiểu ô nhiễm môi trường và trả lại môi trường đảm bảo cho khu vực. Trên cơ sở đó, nghiên cứu đi vào đánh giá hiện trạng môi trường trong giai đoạn cuối khai thác tại mỏ than điển hình là mỏ Hồng Thái, từ đó đề

¹ Nhận bài ngày 14.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Ngô Thanh Sơn; Email: ntson@daihocthudo.edu.vn

xuất các giải pháp môi trường cho quá trình hoàn nguyên tại đây, và xa hơn là các mô đang bước tới giai đoạn hoàn nguyên.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Đối tượng của nghiên cứu là hiện trạng công tác Quản lý môi trường (QLMT) tại mỏ than Hồng Thái. Mỏ than Hồng Thái thuộc khoáng sàng Trảng Bạch thuộc huyện Đông Triều, tỉnh Quảng Ninh, được khai thác từ thời Pháp thuộc tới nay, có trữ lượng công nghiệp theo giấy phép hoạt động khai thác khoáng sản là 4.890.000 tấn, điều kiện khai thác thuận lợi, than có chất lượng tốt là nguồn nguyên liệu quan trọng của nhiều ngành kinh tế, cho nhiệt điện... và xuất khẩu. Khu vực mỏ than Hồng Thái hiện đã và đang khai thác tập trung tại vỉa V47, V46, V45, V43 và V42... với các tầng lò bằng + 475, +410, +325, +248, +251, +125, +30 với một dây chuyền công nghệ khai thác tương đối hoàn chỉnh từ khâu khai thác, đào lò đến vận tải, sàng tuyển và các công trình phục vụ sản xuất.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

– *Phương pháp tổng hợp và phân tích hệ thống tài liệu, số liệu.*

Cho đến nay, có khá nhiều tài liệu, số liệu môi trường về khu vực khai thác. Do các tài liệu, số liệu từ nhiều nguồn khác nhau, từ những nghiên cứu sơ bộ đến chi tiết của các cá nhân hoặc tập thể vào những thời điểm khác nhau do đó có sự khác nhau khá lớn về mức độ phân tích, đánh giá hiện trạng tài nguyên, môi trường khu vực nghiên cứu. Mục đích của phương pháp này là:

+ Hệ thống hóa các tài liệu, số liệu rời rạc sẵn có theo định hướng nghiên cứu.

+ Phân tích, đánh giá những tài liệu, số liệu sẵn có, chọn lọc những số liệu, những nhận xét phù hợp nhất về điều kiện tài nguyên môi trường, điều kiện khai thác tại khu vực nghiên cứu.

Khi tổng hợp và phân tích các tài liệu, số liệu sẵn có, việc xử lý số liệu là cần thiết. Trong xử lý số liệu ngoài việc đánh giá đơn thuần còn áp dụng việc bổ sung thông qua khảo sát thực địa với số liệu cập nhật. Hệ thống hóa các tài liệu bằng bảng.

– *Phương pháp khảo sát thực địa*

Mục đích của phương pháp khảo sát thực địa:

+ Thu thập tài liệu, số liệu liên quan đến khu vực nghiên cứu, bao gồm điều kiện tự nhiên, kinh tế, tài nguyên môi trường khu vực. Số liệu về khai thác, kết quả quan trắc môi trường, đánh giá tác động môi trường, số liệu về hoàn nguyên môi trường mỏ.

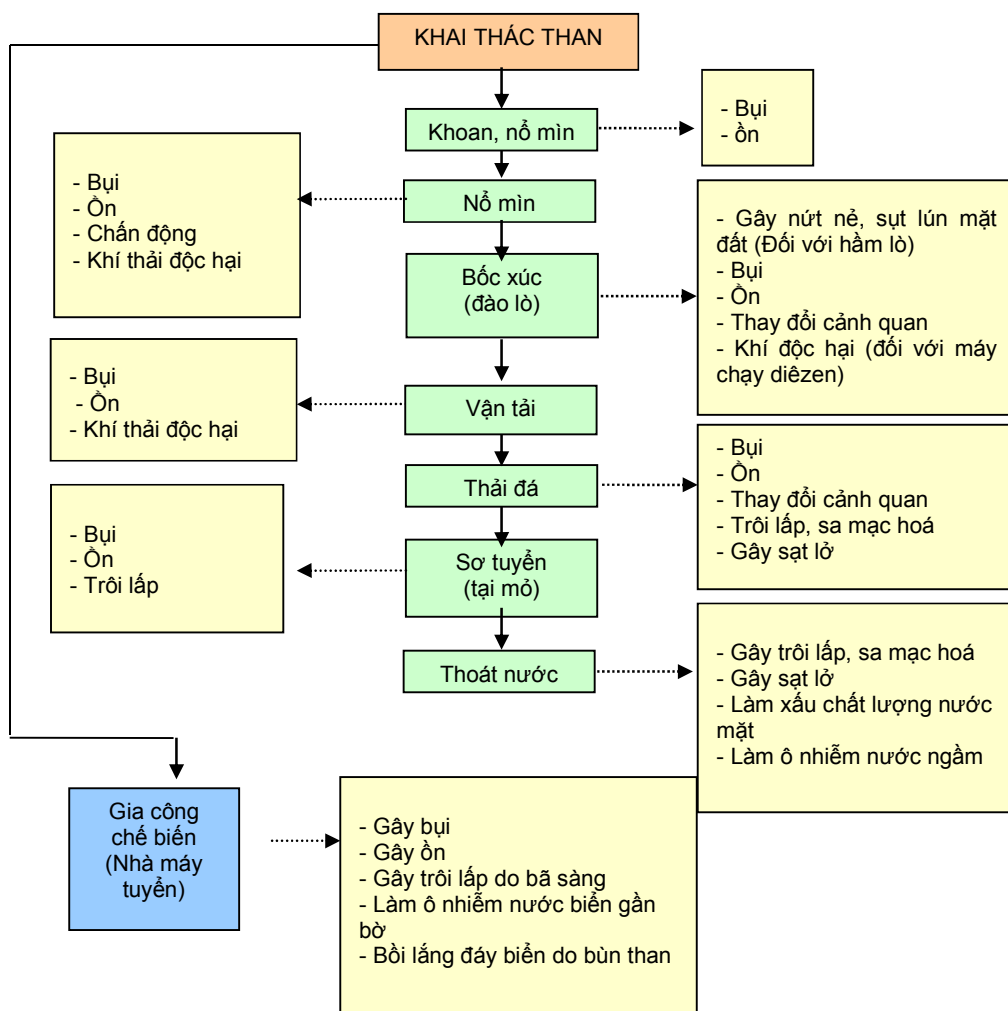
+ Phỏng vấn: việc điều tra, phỏng vấn, lấy ý kiến cộng đồng (với nhà quản lý môi trường, người lao động trực tiếp khai thác mỏ và người dân khu vực lân cận khu khai thác) có ý nghĩa rất lớn để bổ sung cho những nhận định, đánh giá về môi trường.

+ Quan sát và ghi chép: quan sát các hoạt động khai thác, sang tuyển và vận chuyển than.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Hiện trạng công tác QLMT

Công tác QLMT của mỏ được xây dựng dựa trên việc giảm thiểu ô nhiễm do hoạt động khai thác và vận chuyển than, bảo vệ môi trường cho khu vực khai trường và lân cận. Để đi đến thực tiễn công tác QLMT, ta cần tìm hiểu tác nhân và các quá trình gây ô nhiễm môi trường trong các hoạt động tại khai trường mỏ.



Hình 1. Sơ đồ quá trình và tác nhân tác động tới môi trường

Dựa trên các tác nhân và cơ chế gây ô nhiễm đó, đã có những biện pháp nhất định để quản lý ô nhiễm tại đây:

– *Quản lý chất thải và kiểm soát ô nhiễm:*

Rác thải sinh hoạt trong mỏ bao gồm rác thải từ quá trình sinh hoạt của các hộ dân trong khu vực và của các đơn vị trong Công ty với khối lượng 700kg/ngày được thu gom hàng ngày vào các thùng chứa và phân loại thành chất hữu cơ và vô cơ. Khi rác đầy sẽ tiến hành lấp hố bằng đất và trồng cây lên trên đồng thời tạo một hố khác để tiếp tục chứa rác. Chất vô cơ tập trung vào thùng lớn và hợp đồng với đơn vị có chức năng thu gom, vận chuyển đổ vào bãi rác thải theo quy hoạch của Ủy ban Nhân dân Thành phố.

Để nâng công suất mỏ hầm lò lên 500.000 tấn than nguyên khai/năm, quá trình khai thác than sẽ thải ra môi trường khoảng 40.996,5 m³ đất đá và khoảng 100.000m³ đất đá từ quá trình khai thác lộ vĩa. Đá từ hầm lò, đất đá lộ vĩa, thải sàng được vận chuyển đổ trên các bãi thải đã được quy hoạch theo quy định. Hiện nay tại khu vực khai thác có 3 bãi thải, tại các bãi thải hiện nay đã dừng việc đổ bãi thải cao và triển khai công tác cải tạo, phục hồi môi trường, tiến hành san gạt cắt tầng hạ độ cao để đảm bảo sự ổn định của bãi thải và trồng cây xanh tại các sườn tầng để hạn chế việc rửa trôi đất đá và mức độ ảnh hưởng của bãi thải

Nước thải sinh hoạt ăn uống, tắm rửa, giặt quần áo cho xả trực tiếp vào rãnh chung sau khi đã qua các hố ga lắng giữ lại bùn cát.

Nước thải xí tiêu được qua các bể tự hoại để xử lý trước khi xả ra ngoài.

Ngoài các hệ thống mương thoát nước và hệ thống hố lắng cạn, để giảm thiểu tác động của nước thải trong quá trình khai thác, chế biến khi thải ra môi trường, mỏ than Mạo Khê đã đưa các hệ thống xử lý nước thải vào hoạt động tại 2 vị trí là khu vực Hồng Thái đông và khu vực bể lắng tại ranh giới giữa Hồng Thái và Trảng Khê. Nước thải của các vĩa khai thác lộ thiên còn lại được dẫn về hệ thống xử lý nước thải hầm lò và được xử lý trước khi thải ra môi trường. Đối với nước thải sinh hoạt mỏ áp dụng hệ thống xử lý theo sơ đồ:

Nước thải sinh hoạt khu vực nhà khách và nhà ăn cơ quan → song chắn rác → hố ga (lắng cạn) → bể xử lý yếm khí 03 ngăn → chảy ra hồ.

Công tác xử lý khí, bụi tại mỏ Hồng Thái được thực hiện tương đối hiệu quả. Ngoài các biện pháp phòng chống khí, bụi trong hầm lò và nhà sàng, các tuyến đường vận chuyển than trong nội bộ mỏ thường xuyên được kiểm tra và cho nạo vét bùn trên mặt đường để hạn chế bụi phát sinh trong quá trình vận chuyển than, phun nước tưới đường thường xuyên tùy theo độ ẩm của mặt đường.

+ Tiến hành nạo vét các hệ thống xử lý nước thải, sông, hồ hàng năm.

+ Nâng cấp, cải tạo và nạo vét các hệ thống mương thoát nước, xây kè chân bãi thải

Các thủ tục về kiểm soát ô nhiễm, quản lý chất thải đã được xây dựng trong "Quy chế bảo vệ môi trường" của Công ty. Dựa trên các chương trình và hệ thống QTMT, mỏ xây dựng hệ thống dữ liệu làm cơ sở cho việc xác định hiện trạng và xu thế diễn biến môi trường trong quá trình sản xuất, kinh doanh của đơn vị để có các giải pháp ứng phó kịp thời khi có các diễn biến bất thường về môi trường.

– *Ứng phó sự cố môi trường*

Đại đa phần cán bộ công nhân viên của mỏ đều làm việc dưới hầm lò, trong môi trường độc hại, do đó việc thực hiện công tác an toàn trong lao động luôn được mỏ xác định là nhiệm vụ trọng tâm, hàng đầu.

Giải pháp công nghệ khai thác an toàn của mỏ than Hồng Thái tương đối hiện đại. Gần như tất cả cá lò chợ đều mỏ thực hiện chống giá thủy lực XDY-1T2/LY. Với các via thoát mỏ áp dụng công nghệ vì chống thủy lực đơn, giá khung ZH-1600 đã nâng cao hệ số an toàn và năng suất lao động. Việc sử dụng máy khoan TAMROC, máy xúc lật hông kết hợp với khoan nổ mìn đã góp phần đáng kể làm tốt công tác an toàn. Các thiết bị đặc thù được thường xuyên kiểm tra sửa chữa định kỳ. Bên cạnh đó, việc quản lý các quy trình, quy định đi đôi với đào tạo, huấn luyện kiến thức chuyên môn cho các đối tượng làm công tác liên quan đến vật liệu nổ một cách nghiêm ngặt nên từ nhiều năm nay, mỏ không để xảy ra sự cố, tai nạn nghiêm trọng trong lĩnh vực này.

Thực hiện vệ sinh công nghiệp, mỏ tổ chức xúc dọn đất đá, khai mương tách nước, chống xén kịp thời cho các đường lò, để điều chỉnh lượng gió sạch cung cấp đến các gương lò đảm bảo cho công nhân sản xuất. Mỏ còn duy trì khoan ép nước và phun nước tưới, chống bụi cho các đường lò chợ

Mỏ luôn đề cao tuyên truyền, phòng tránh tai nạn lao động cho công nhân viên khu mỏ, xây dựng trạm xá, sơ cứu, cấp cứu cho các trường hợp tai nạn. Trung bình mỗi năm chỉ có 1-2 vụ tai nạn lao động

Với mục đích giảm thiểu tác động do trôi lấp bãi thải và bồi lấp các dòng chảy bề mặt, mỏ áp dụng các phương pháp như: xây tường kè chân bãi thải bằng đá hộc, tạo đê chắn đất đá trôi tại mép mỗi tầng thải, nạo vét các dòng chảy theo định kỳ, trồng cây xanh trên bãi thải và các khu vực xung quanh.

3.2. Các giải pháp cho quá trình hoàn nguyên tại mỏ than Hồng Thái

Dựa trên các vấn đề, hiện trạng môi trường tại mỏ, nền tảng công nghệ, khoa học kỹ thuật và mục đích cải tạo môi trường, nghiên cứu đề xuất các phương án hoàn nguyên mỏ

sau đây nhằm hạn chế tối đa tác động đến môi trường tại khu mô và khu vực lân cận như sau:

- *Đánh toi nền công trình*

Do nền những khu vực mặt bằng nhà cửa, sân bãi sau khi tháo dỡ các công trình là tương đối bằng phẳng và là nền đất do đó chỉ cần tiến hành cày xới, đánh toi đất với bề dày 0,2m nhằm tạo độ tơi xốp cho đất trước khi trồng cây.

Khối lượng công tác đánh toi nền đất: $108300 \text{ m}^2 \times 0,2\text{m} = 21660\text{m}^3$.

- *Trồng cây*

Chọn loại cây trồng: Cây keo lá tràm hoặc loại cây thích hợp khác.

Mật độ trồng cây: 1.250 cây/ha.

- *Giải pháp trồng và chăm sóc cây:*

- * *Giải pháp trồng cây đối với từng khu vực cụ thể*

Quy trình gồm các bước:

- Đào hố trồng: Đào hố trồng bằng thủ công với kích thước 0,3 x 0,3 x 0,3 m, đất đổ xung quanh miệng hố. Khoảng cách giữa hai hàng lỗ là 2,0m, cự ly cây là 2m, bố trí so le nhau.

- Làm đất: Trộn phân vi sinh vào đất màu tỉ lệ 1/40, đổ lót đáy hố với chiều dày 0,2m

- Trồng cây: Đặt cây vào hố trồng và lấp đất, lèn chặt gốc cây. Tiến hành trồng lần lượt từ mức cao xuống mức thấp, xa trước gần sau.

- * *Giải pháp trồng, bảo vệ và chăm sóc cây trồng*

- Phương thức trồng: Trồng rừng thuần loại.

- Loại cây trồng: Keo tai tượng, keo lá tràm.

- Mật độ: 1.250 cây/ha.

- Phương pháp trồng: Trồng bằng cây con có bầu.

- Thời vụ trồng: Trồng vào vụ xuân hè.

- Tiêu chuẩn cây con mang trồng: Tuổi cây 3 tháng, đường kính cổ rễ $3 \div 5\text{mm}$; chiều cao $25\text{cm} \div 30\text{cm}$. Cây xanh tốt, đã rụng hết lá me (ra lá to 100%), đã đào bầu và tuyển chọn phân loại cây, không sâu bệnh, cụt ngọn, cong queo, không 2 thân.

- Phương pháp trồng: Chọn ngày âm mát để trồng, khi trồng phải xé vỏ bầu và vun đất mặt vào hố nén chặt cao quá cổ rễ 2cm.

** Chăm sóc cây trồng*

Theo dõi, chăm sóc tưới cây định kỳ trong 03 năm đầu đến khi cây phát triển ổn định.

Hàng năm tiến hành trồng dặm thay thế những cây chết hoặc không có khả năng sinh trưởng.

Công tác chăm sóc đối với từng năm như sau:

– Chăm sóc năm thứ nhất: Tiến hành chăm sóc sau khi trồng được 3 tháng. Phát một lần, xới vun gốc một lần và trồng dặm những cây bị chết.

– Chăm sóc năm thứ hai: Phát và xới vun gốc hai lần, bón phân và trồng dặm những cây bị chết.

– Chăm sóc năm thứ ba: Phát hai lần, xới vun gốc một lần và trồng dặm những cây bị chết.

• Tổng hợp các tác động và các biện pháp giảm thiểu trong quá trình hoàn nguyên

TT	Các hoạt động	Các tác động và sự cố môi trường	Các giải pháp giảm thiểu
	- Vận chuyển nguyên vật liệu thi công xây dựng; - Nạo vét lòng suối Trảng Khê; - Vận chuyển đất đá thải nạo vét đi đổ thải; - Thi công xây dựng các hạng mục công trình; - Trồng cây trên mặt bằng đã cải tạo.	- Ô nhiễm bụi, khí thải (CO, SO₂, NO₂, các hydrocacbon) do quá trình san gạt bằng máy ủi và vận chuyển đất đá thải, vật liệu xây dựng... - Ô nhiễm tiếng ồn, độ rung do hoạt động của các thiết bị trong quá trình thi công san gạt và phương tiện vận chuyển đất đá thải. - Nước mưa chảy tràn sẽ được dẫn dòng thu gom vào hồ lắng tạm trước khi chảy ra suối. - Sự cố tai nạn giao thông, lao động.	<i>Quản lý chất thải:</i> - Che phủ nguyên vật liệu vận chuyển. - Thường xuyên tưới nước ẩm đường vận chuyển, tưới nước trong khu vực đánh toi, san gạt. - Thường xuyên bảo dưỡng xe, máy móc để các thiết bị có thể làm việc ở điều kiện tốt nhất; - Các phương tiện vận chuyển đất đá, vật liệu không được chở quá tải trọng, thùng xe có bạt che kín. - Quản lý ngăn chặn rò rỉ xăng dầu và vật liệu độc hại do xe vận chuyển và các thiết bị thi công gây ra; - Bố trí lịch thi công hợp lý. - Công nhân làm việc trên công trường được trang bị bảo hộ lao động để hạn chế ảnh hưởng của bụi và tiếng ồn. - Chất thải trong quá trình tháo dỡ sẽ được tái sử dụng triệt để, phần thải bỏ sẽ được xử lý theo quy định tại Nghị định số 59/2007/NĐ-CP của Chính Phủ ngày 09 tháng 04 năm 2007 V/v quản lý chất thải rắn. - Lập ban an toàn lao động và bảo vệ môi trường tại công trường.

4. KẾT LUẬN

Kết quả nghiên cứu cho thấy mỏ than Hồng Thái đang bước vào giai đoạn cuối khai thác, các hoạt động khai mỏ vẫn diễn nên các tác động về môi trường là tương đối lớn. Dù vậy công tác quản lý và ứng phó với các sự cố môi trường tại đây khá hiệu quả, giảm thiểu nhiều các tác động tiêu cực tới môi trường tại khu mỏ và khu vực lân cận. Nghiên cứu đã đề xuất một số giải pháp cho công tác hoàn nguyên cho mỏ than Hồng Thái và có thể áp dụng cho các mỏ đang bước vào công đoạn hoàn nguyên, đảm bảo trả lại môi trường theo quy định của nhà nước.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Công ty TNHH MTV than Hồng Thái (2011), *Dự án cải tạo và phục hồi môi trường*, Hà Nội
2. Lưu Đức Hải (2006), *Cẩm nang quản lý môi trường*, Nxb Giáo dục Hà Nội
3. Lưu Đức Hải, Nguyễn Ngọc Sinh (2002), *Quản lý môi trường cho sự phát triển bền vững*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.
4. Viện Khoa học và Công nghệ mỏ - Vinacomin (2011), *Báo cáo kết quả quan trắc môi trường công ty TNHH MTV than Hồng Thái quý II, quý III – 2011*, Hà Nội
5. Trần Yên (2001), *Những vấn đề tài nguyên và môi trường liên quan đến khai thác than ở tỉnh Quảng Ninh (lấy vùng Hòn Gai – Cẩm Phả và lân cận làm ví dụ)*, Hà Nội.
6. [Http://www.vinacomin.vn/vi/news/Kinh-te/To-hop-dan-chong-2ANSH-o-Thanh-Hong-Thai-Du-nang-suat-chua-dat-nhu-mong-muon-2196.html](http://www.vinacomin.vn/vi/news/Kinh-te/To-hop-dan-chong-2ANSH-o-Thanh-Hong-Thai-Du-nang-suat-chua-dat-nhu-mong-muon-2196.html)

ENVIRONMENTAL STATUS ASSESSMENT AND PROPOSING SOLUTIONS FOR RECOVERY PROCESS IN THE HONG THAI COAL MINING, QUANG NINH PROVINCE

Abstract: *Recently in Vietnam, coal reserves are increasingly exhausted due to overexploitation. Besides, the recovery process in coal mines is facing difficulties and challenges in terms of environmental recovery efficiency. This study, through a review of the current situation, will propose a recovery plan for the Hong Thai coal mine, aiming to improve efficiency and minimize environmental risks at the mine and its vicinity.*

Keywords: *environment, recovery, coal mine, pollution, risk*

XÁC ĐỊNH HÀM LƯỢNG MANGAN VÀ KẼM TRONG CÁ ĐIỀU HỒNG (*Oreochromis sp.*) NUÔI Ở KHU VỰC PHƯỜNG BẮC NGHĨA, THÀNH PHỐ ĐỒNG HỚI, TỈNH QUẢNG BÌNH

Nguyễn Mậu Thành¹

Trường Đại học Quảng Bình

Tóm tắt: Phương pháp quang phổ hấp thụ nguyên tử ngọn lửa (F-AAS) được áp dụng để xác định hàm lượng mangan và kẽm trong cá diêu hồng nuôi ở khu vực phường Bắc Nghĩa thành phố Đồng Hới tỉnh Quảng Bình. Phương pháp này cho độ lặp lại cao với $RSD < 4,16\%$, độ thu hồi $94,52 \div 103,37\%$, giới hạn phát hiện thấp. Kết quả cho thấy hàm lượng trung bình mangan và kẽm trong cá diêu hồng là: $(0,798 \div 2,056 \text{ mg/kg tươi}$ và $2,603 \div 13,025 \text{ mg/kg tươi})$, nằm trong giới hạn cho phép theo quy định 46/BYT 2007.

Từ khóa: cá Diêu hồng, mangan, kẽm, phương pháp AAS

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Cá diêu hồng (*Oreochromis sp.*) hay còn gọi là cá rô phi đỏ đã không còn xa lạ gì với chúng ta. Đây là loại cá có màu sắc đỏ hồng đẹp, thịt cá diêu hồng vị ngọt, tính bình, không độc, có tác dụng bổ khí huyết, ích tỳ vị, lợi ngũ tạng... Dùng bổ dưỡng cho nhiều bệnh chứng hư nhược, nhất là người già suy nhược, trẻ em còi cọc chậm lớn.... Mặt khác cá diêu hồng nhiều chất khoáng, vitamin và nhiều nguyên tố vi lượng như kẽm, đồng, canxi,... Là loại cá cho năng suất cao, sản phẩm giàu dinh dưỡng, nên cá diêu hồng là loại cá được mọi người ưa chuộng. Chính vì vậy, trong những năm qua ngành nuôi trồng thủy sản nước ta, trong đó có nuôi cá diêu hồng phát triển mạnh mẽ và trở thành một ngành kinh tế quan trọng, có động lực lớn trong việc thúc đẩy và phát triển kinh tế [3].

Trong cơ thể người, mangan (Mn) duy trì một số men quan trọng và tăng cường quá trình tạo xương, cần cho quá trình tổng hợp protein, làm giảm lượng đường trong máu tránh khỏi tiểu đường. Ngoài ra, mangan còn kích thích chuyển hóa chất béo, giảm

¹ Nhận bài ngày 14.01.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Mậu Thành; Email: Thanhhk18@gmail.com

cholesterol góp phần ngăn ngừa xơ vữa động mạch. Tuy nhiên, nếu hàm lượng mangan vượt mức cho phép sẽ dẫn đến hiện tượng ngộ độc, gây rối loạn thần kinh với biểu hiện rung giật kiểu Parkinson [7]. Bên cạnh đó, kẽm (Zn) là nguyên tố vi lượng đóng một vai trò quan trọng trong quá trình tổng hợp, cấu trúc, bài tiết nhiều hormon và đặc biệt rất quan trọng đối với tuyến tiền liệt. Trong tuyến tiền liệt mạnh khỏe và trong dịch của tuyến tiền liệt tiết ra đều chứa rất nhiều kẽm. Hàm lượng kẽm ở tuyến tiền liệt là nhiều nhất so với các tuyến khác. Việc thiếu kẽm có thể gây phì đại tuyến tiền liệt và viêm tuyến tiền liệt, cùng những thay đổi khác ở tuyến sinh dục quan trọng này [6].

Những năm trở lại đây, tình trạng suy giảm nguồn lợi thủy hải sản trở nên đáng báo động, trong khi đó nhu cầu tiêu dùng của người dân ngày càng lớn. Chính vì thế, ở Quảng Bình đã xuất hiện những vùng chuyên nuôi và cung cấp thủy sản ra thị trường, trong đó có phường Bắc Nghĩa. Bắc Nghĩa là một phường thuộc thành phố Đồng Hới, theo thống kê của phường thì tính đến năm 2016, trên toàn phường có đến 66,8% diện tích đất nông nghiệp. Các hộ dân chủ yếu tập trung nuôi cá diêu hồng, nhưng kiểm soát về chất lượng thì chưa đáng được quan tâm.

Phương pháp phân tích quang phổ hấp thụ nguyên tử là một phương pháp phân tích hiện đại đã và đang được ứng dụng rộng rãi để xác định hàm lượng các nguyên tố vi lượng trong các đối tượng mẫu như: mẫu quặng, mẫu nước, thực phẩm, dược phẩm,...[2]. Vì vậy việc xác định, đánh giá hàm lượng mangan và kẽm trong cá diêu hồng nuôi ở khu vực phường Bắc Nghĩa, thành phố Đồng Hới, tỉnh Quảng Bình là việc làm rất cần thiết và có ý nghĩa.

2. THỰC NGHIỆM

2.1. Thiết bị và hóa chất

Các ống nghiệm, cốc thủy tinh chịu nhiệt, bình định mức; Cân phân tích, bếp điện, máy xay, bộ dao mổ y tế; Các micropipette Eppendorf và đầu hút. Máy quang phổ hấp thụ nguyên tử Zeenit 700P của hãng Analytik Jena (Đức).

Các hóa chất sử dụng có độ tinh khiết PA hãng Merck của Đức: Dung dịch chuẩn gốc mangan (1001 ± 2 ppm) và kẽm (1000 ± 2 ppm) chuyên dùng cho phép đo AAS; axit HNO_3 và MgNO_2 đặc, nước cất hai lần.

2.2. Chuẩn bị mẫu

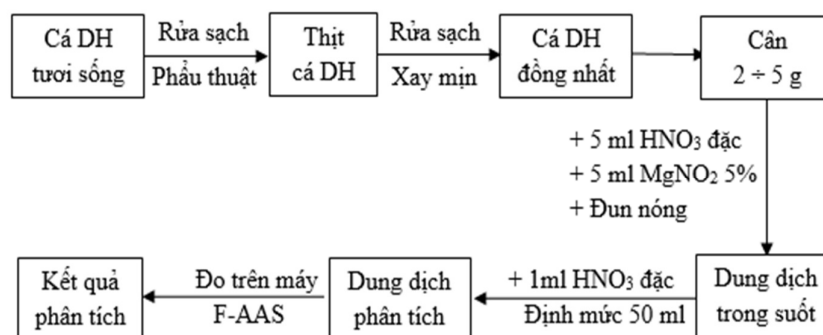
Mẫu cá diêu hồng (DH) được lấy ở 8 ao nuôi của 8 hộ dân trong 4 tổ dân phố tại phường Bắc Nghĩa, thành phố Đồng Hới. Các ao được lựa chọn để lấy mẫu là những ao

đang được dùng thường xuyên cho việc nuôi cá điêu hồng và đạt hiệu quả cao. Mẫu cá được ký hiệu là DH_{ij} , trong đó: $i = 1 \div n$ (thứ tự đợt lấy mẫu), $j = 1 \div m$ (vị trí lấy mẫu).

Các mẫu cá được lấy vào 2 đợt (đợt 1: 05/12/2016 và cá đã nuôi trung bình được 5 tháng tuổi, đợt 2: 02/1/2017). Mỗi đợt gồm 8 mẫu được phân loại theo kích cỡ từ nhỏ đến lớn theo chiều dài, cân nặng của cá, mỗi mẫu gồm $2 \div 7$ cá thể, lấy theo phương pháp tổ hợp. Cá điêu hồng được lấy ở trạng thái sống rồi chuyển ngay về phòng thí nghiệm và được xử lý sơ bộ trước khi tiến hành phân tích các chỉ tiêu: Rửa sạch và tráng bằng nước cất, sau đó dùng dao inox tách lấy phần thịt. Mẫu được xay nhuyễn, cất trong tủ lạnh sâu ở nhiệt độ -20°C nếu chưa tiến hành phân tích ngay [6], [8].

2.3. Phương pháp phân tích

Nghiên cứu tập trung vào sử dụng phương pháp phân tích mangan và kẽm trên thiết bị quang phổ hấp thụ nguyên tử. Với dung dịch phân tích được xử lý bằng kỹ thuật xử lý mẫu ướt (phá mẫu bằng hỗn hợp HNO_3 và MgNO_2). Quy trình xử lý mẫu, phân tích mangan và kẽm trong thịt cá điêu hồng được thực hiện theo các bước như Hình 1:



Hình 1. Quy trình xử lý mẫu, phân tích Mn và Zn trong thịt cá bằng phương pháp F-AAS

Áp dụng kỹ thuật phân tích quang phổ hấp thụ nguyên tử với dung dịch phân tích thu được từ kỹ thuật phá mẫu ướt và chấp nhận những điều kiện hoạt động của thiết bị đã được công bố [2], như nêu ở Bảng 1.

Bảng 1. Điều kiện đo F-AAS xác định mangan và kẽm

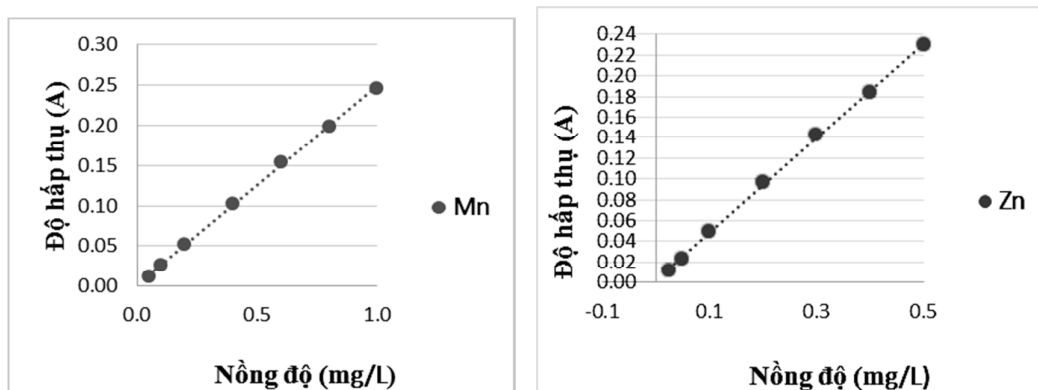
Thông số	Mn	Zn
Bước sóng (nm)	279,5	213,9
Khe đo (nm)	0,2	0,5
Cường độ đèn (mA)	7	4
Chiều cao burner (mm)	5	6
Hỗn hợp khí đốt	KK-C ₂ H ₂	KK-C ₂ H ₂

Để xác định hàm lượng của một nguyên tố trong mẫu phân tích theo phép đo F-AAS chúng tôi thực hiện theo phương pháp đường chuẩn. Lấy một thể tích xác định ở dung dịch mẫu pha loãng theo các hệ số pha loãng phù hợp với mangan và kẽm như khi khảo sát sơ bộ hàm lượng của chúng trong mẫu cá điêu hồng, rồi tiến hành đo độ hấp thụ quang của dung dịch đó.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Xây dựng đường chuẩn, khảo sát giới hạn phát hiện, giới hạn định lượng

Đường chuẩn xác định hàm lượng mangan và kẽm được thể hiện trên Hình 2. Đối với mangan phương trình có dạng: $A_{Mn} = 0,2467 C + 0,0018$, với kẽm phương trình có dạng: $A_{Zn} = 0,459 C + 0,0021$, trong đó C là nồng độ (mg/L).



Hình 2. Đường chuẩn xác định hàm lượng mangan và kẽm

Để xác định giới hạn phát hiện (LOD) và độ nhạy của phương pháp, chúng tôi áp dụng theo quy tắc "3 σ " [5]. Theo quy tắc này, giới hạn phát hiện được tính như sau: $y = y_b + 3\sigma$ hay $y = y_b + 3S_b$.

Trong đó, y là giới hạn phát hiện hoặc tín hiệu ứng với giới hạn phát hiện. Biết tín hiệu y sẽ tính được giới hạn phát hiện từ phương trình đường chuẩn $y = a + bC$ do đó $LOD = (y - a)/b$. Trong đó, y_b là nồng độ hoặc tín hiệu mẫu trắng; σ_b (hoặc S_b) là độ lệch chuẩn của nồng độ hoặc tín hiệu mẫu trắng. Có thể xác định y_b và S_b như sau: tiến hành thí nghiệm để thiết lập phương trình đường chuẩn $y = a + bC$. Từ đó xác định y_b và S_b bằng cách chấp nhận y_b là giá trị của y khi $C = 0$ thì $y = a$ và $S_b = S_y$ theo công thức sau [5]:

$$S_b = S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2}{n - 2}}$$

Ở đây, y_i là giá trị thực nghiệm của y và Y_i là các giá trị tính từ phương trình đường chuẩn của y . Từ phương trình đường chuẩn, biến đổi ta sẽ tính được LOD theo công thức sau: $LOD = 3S_y/b$.

Ở đây, b là độ dốc của đường chuẩn hồi quy tuyến tính và b cũng là độ nhạy của phương pháp: $b = \Delta A / \Delta C$.

Để tính được giới hạn định lượng (LOQ) của phép đo, chúng tôi sử dụng công thức sau: $LOQ = 10S_y/b \approx 3,3 LOD$. Kết quả tính toán LOD và LOQ của phương pháp được trình bày ở Bảng 2.

Bảng 2. Các giá trị a , b , S_y , LOD, LOQ tính từ phương trình đường chuẩn $A = bC + a$

Các giá trị Kim loại	a	b	$S_{y/x}$	R	LOD (mg/L)	LOQ (mg/L)
Mn	0,0018	0,2467	0,002	0,9997	0,029	0,097
Zn	0,0021	0,459	0,003	0,9996	0,017	0,057

Từ Bảng 2 ta thấy, giới hạn phát hiện, giới hạn định lượng của phép đo F-AAS định lượng hàm lượng mangan và kẽm đã được xác định. LOD xác định Mn là 0,029 mg/L và Zn là 0,017 mg/L; LOQ xác định Mn và Zn lần lượt là 0,097 mg/L và 0,057 mg/L.

3.2. Đánh giá độ lặp lại và độ đúng của phép đo

Độ lặp lại được xác định qua độ lệch chuẩn (S) hay độ lệch chuẩn tương đối (RSD). Tiến hành phân tích 4 mẫu cá thu được ở 4 tổ dân phố, rồi lần lượt thêm chuẩn mangan và kẽm vào 4 mẫu đó. Kết quả cho thấy, phương pháp F-AAS khi phân tích mẫu cá đạt độ lặp lại tương đối tốt $RSD < 4,16\%$ đối với mangan và $RSD < 2,19\%$ đối với kẽm. Như vậy phương pháp F-AAS đạt được độ lặp lại tốt khi xác định mangan và kẽm trong thịt cá diêu hồng.

Độ đúng của phương pháp phân tích mangan và kẽm bất kỳ được xác định thông qua độ thu hồi (Recovery) theo công thức [5]: $Re v(\%) = \frac{C_2 - C_1}{C_0} \times 100$. Trong đó, C_0 là nồng

độ chất phân tích được thêm vào trong mẫu thật; C_1 là nồng độ chất phân tích trong mẫu thật; C_2 là nồng độ chất phân tích trong mẫu thật đã được thêm chuẩn. Kết quả phương pháp xác định hàm lượng mangan và kẽm có độ thu hồi giao động từ 94,52% đến 103,37% là hoàn toàn chấp nhận được. Vậy, phương pháp F-AAS có thể sử dụng xác định mangan và kẽm trong các mẫu thịt cá diêu hồng.

3.3. Xác định hàm lượng mangan và kẽm trong cá diêu hồng

Từ những kết quả nghiên cứu phân tích ở trên, chúng tôi áp dụng theo công thức:

$$C = \frac{(a-b)d_f \times 50}{m} \text{ để tính và biểu thị kết quả của mangan và kẽm trong các mẫu thực.}$$

Trong đó: a là nồng độ trong dung dịch phân tích; b là nồng độ trung bình trong dung dịch trắng; d_f là hệ số pha loãng; m là khối lượng của mẫu phân tích.

Kết quả xác định hàm lượng của mangan và kẽm trong 16 mẫu cá diêu hồng nuôi ở các hộ dân thuộc khu vực phường Bắc Nghĩa thành phố Đồng Hới tỉnh Quảng Bình được thể hiện ở Bảng 3.

Bảng 3. Kết quả xác định hàm lượng Mn và Zn trong thịt cá diêu hồng

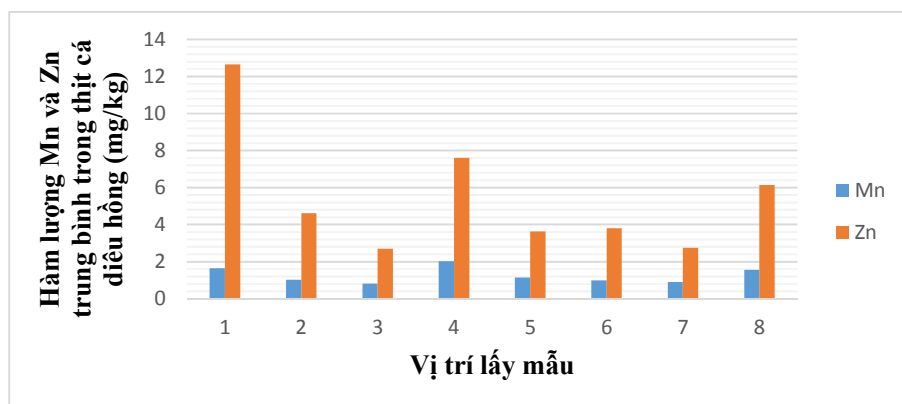
Vị trí lấy mẫu	Hàm lượng kim loại (mg/kg)			
	Mn		Zn	
	Đợt 1	Đợt 2	Đợt 1	Đợt 2
DH-VT ₁	1,820	1,501	12,263	13,025
DH -VT ₂	0,953	1,085	4,016	5,225
DH -VT ₃	0,806	0,798	2,821	2,603
DH -VT ₄	2,056	1,983	7,634	7,583
DH -VT ₅	0,940	1,372	3,171	4,093
DH -VT ₆	1,017	0,960	3,902	3,714
DH -VT ₇	0,882	0,928	2,626	2,883
DH -VT ₈	1,532	1,573	6,210	6,058
Trung bình	1,263		5,489	

Từ kết quả ở Bảng 3 cho thấy hàm lượng mangan và kẽm trung bình trong cá diêu hồng là: 1,263 mg/kg tươi đối với Mn; 5,489 mg/kg tươi đối với Zn và nằm trong phạm vi các tiêu chuẩn cho phép an toàn thực phẩm của Bộ Y Tế - 46/BYT 2007 [1]. Kết quả này là một trong những cơ sở khoa học cho thấy, cá diêu hồng nuôi ở khu vực phường Bắc Nghĩa có khả năng bổ sung các nguyên tố vi lượng mangan và kẽm.

3.4. Đánh giá hàm lượng Mn và Zn trung bình trong cá diêu hồng theo thời gian và không gian

Để đánh giá hàm lượng trung bình của mangan và kẽm theo vị trí với thời gian lấy mẫu (tức theo không gian và thời gian) chúng tôi áp dụng phương pháp Anova 1 chiều [4].

Từ kết quả thu được, chúng tôi biểu diễn hàm lượng trung bình của mangan và kẽm qua Hình 3. Dùng chức năng Data Analysis trong Microsoft Excel 2010 để đánh giá sự khác nhau về hàm lượng các kim loại giữa hai đợt lấy mẫu, thu được các kết quả ở Bảng 4.



Hình 3. Kết quả hàm lượng trung bình của Mn và Zn trong 16 mẫu cá ở 8 vị trí

Bảng 4. Các giá trị thống kê so sánh $F_{tính}$ và $F_{bảng}$

Kim loại	Min	Max	Độ lệch chuẩn (S)	$F_{tính}$	P	$F_{bảng}$ (F_{crit})
Mn	0,798	2,056	0,429	0,012	0,915	4,600
Zn	2,603	13,025	3,247	0,036	0,853	4,600

Từ Bảng 4 ta thấy, với $P > 0,05$ và $F_{tính} < F_{bảng}$ thì không có sự sai khác và không có ý nghĩa về sai khác. Hay nói cách khác, hàm lượng mangan và kẽm trong mẫu cá điều hồng ở hai đợt lấy mẫu không khác nhau về mặt thống kê.

Nguyên nhân của sự không khác nhau ở trên có thể giải thích do thời gian lấy mẫu gần nhau nên kích thước và khối lượng cá điều hồng thay đổi không đáng kể. Mặt khác địa tầng, cách nuôi và các chỉ tiêu nước trong hồ ở đây khá ổn định.

4. KẾT LUẬN

Phương pháp F-AAS là phương pháp thích hợp để xác định hàm lượng mangan và kẽm trong các mẫu thịt cá điều hồng. Kết quả cho thấy, phép xác định có giá trị giới hạn phát hiện thấp, độ đúng và độ lặp lại tốt.

Kết quả phân tích các mẫu cá điều hồng nuôi ở khu vực phường Bắc Nghĩa thành phố Đồng Hới tỉnh Quảng Bình cho thấy hàm lượng mangan và kẽm lần lượt trong khoảng: $0,798 \div 2,056$ mg/kg tươi và $2,603 \div 13,025$ mg/kg tươi.

Đã tiến hành đánh giá sự biến động hàm lượng mangan và kẽm trong thịt cá diêu hồng theo thời gian và vị trí lấy mẫu. Kết quả cho thấy hàm lượng mangan và kẽm ở hai đợt lấy mẫu không khác nhau về mặt thống kê.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bộ Y tế (2007), *Quy định giới hạn tối đa ô nhiễm sinh học và hoá học trong thực phẩm*, Ban hành kèm theo quyết định số 46/2007/QĐ-BYT, ngày 19/12/2007 của Bộ trưởng Bộ Y tế.
2. Phạm Luận (2006), *Phương pháp phân tích phổ nguyên tử*, Nxb Đại học Quốc gia, Hà Nội.
3. Ngô Trọng Lư, Thái Bá Hồ (2003), *Kỹ thuật nuôi thủy đặc sản nước ngọt*, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội.
4. Miller J. C., Miller J. N. (1998), *Statistics for Analytical Chemistry*, 2th, Ellis Howood Limited, Great Britain.
5. Miller J. C., Miller J. N. (2010), *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*, Ed. 6th, Pearson Education Limited, England.
6. Nguyen Mau Thanh, Nguyen Duc Vuong, Nguyen Dinh Luyen (2015), "Using AAS method to determine and evaluate the iron and zinc content in oysters in Nhat Le river in Quan Hau town Quang Binh province", *Journal of Science*, An Giang University, Part D: Natural Sciences, Technology and Environment, Special Issue, Vol. 4 (4), 113 – 120.
7. Nguyễn Mậu Thành, Võ Thị Kim Dung, Nguyễn Đức Vượng (2016), "Phân tích, đánh giá hàm lượng đồng và mangan trong tôm thẻ chân trắng nuôi ở khu vực xã Trung Trạch huyện Bố Trạch tỉnh Quảng Bình", *Tạp chí Khoa học và Giáo dục*, Trường Đại học Sư phạm Huế, Đại học Huế, số 03(39), tr.93-100.
8. Ngô Văn Tứ, Nguyễn Kim Quốc Việt (2009), "Phương pháp von-ampe hoà tan anot xác định Pb^{II}, Cd^{II}, Zn^{II} trong Vẹm Xanh ở đầm Lăng Cô - Thừa Thiên Huế", *Tạp chí Khoa học*, Đại học Huế, số 50, tr.155-163.

DETERMINATION THE MANGANESE AND ZINC CONTENT IN RED TILAPIA (*OREOCHROMIS SP.*) AT BAC NGHIA WARD, DONG HOI CITY, QUANG BINH PROVINCE

Abstract: The flame atomic absorption spectrometry (F-AAS) is applied to determine the maganese and zinc content in Red Tilapia (*Oreochromis sp.*) at Bac Nghia ward, Dong Hoi city, Quang Binh province. This method has high repeatability with RSD < 4.16%, the recovery from 94.52 % to 103.37%, low limit of detection. This result shows that the average maganese and zinc content in Red Tilapia is $(0.798 \div 2.056 \text{ mg/kg fresh and } 2.603 \div 13.025 \text{ mg/kg fresh})$ and within the allowed limits according to the regulation No. 46/BYT 2007.

Keywords: Red Tilapia, maganese, zinc, AAS method

NGHIÊN CỨU XÂY DỰNG BẢN ĐỒ BUGHE KHU VỰC THÊM LỤC ĐỊA VIỆT NAM

Dương Thị Hoài Thu¹

Trường Đại học Tài nguyên và Môi trường Hà Nội

Tóm tắt: Trong bài báo này, chúng tôi xây dựng bản đồ Bughe khu vực thêm lục địa Việt Nam với tỉ lệ 1:200.000 trên cơ sở việc giải bài toán thuận theo phương pháp giải tích tính hiệu ứng trọng lực gây ra bởi các lăng trụ thẳng đứng. Kết quả thu được có ý nghĩa trong việc xác định phông khu vực rồi từ đó xác định phần trường dư gây ra bởi một số bề trầm tích thuộc thêm lục địa Việt nam. Chương trình tính toán được viết bằng các ngôn ngữ Fortran và Matlab.

Từ khóa: Bản đồ Bughe, hiệu ứng trọng lực, trường dư, bề trầm tích.

1. MỞ ĐẦU

Địa Vật lý thăm dò là lĩnh vực khoa học nghiên cứu về Trái đất. Có rất nhiều phương pháp địa vật lý được sử dụng rộng rãi trong thăm dò như: phương pháp thăm dò trọng lực, phương pháp thăm dò điện, phương pháp phóng xạ.... Dựa vào việc nghiên cứu trường trọng lực và trường từ của trái đất thông qua các phép đo được tiến hành trên mặt đất, trên biển, trên không... giúp việc nghiên cứu trái đất được rõ ràng hơn, giúp ta khám phá được hình dạng và cấu trúc vỏ trái đất, tìm kiếm các mỏ khoáng sản phục vụ cho sự tồn tại và phát triển của nhân loại.

Trong những năm gần đây, với sự phát hiện ra dầu trong đá móng tại các bề trầm tích thuộc phần Biển Đông, ngoài việc xác định độ sâu tới móng kết tinh, việc nghiên cứu cấu trúc của nó mà trước hết là nghiên cứu sự phân bố dị thường Bughe đặc biệt trở nên quan trọng và thu hút sự quan tâm của nhiều nhà Địa vật lý trong nước.

Để góp phần giải quyết vấn đề này, chúng tôi đã tiến hành xây dựng bản đồ Bughe tỉ lệ 1:200.000 trên cơ sở việc giải bài toán thuận theo phương pháp giải tích tính hiệu ứng trọng lực gây ra bởi các lăng trụ thẳng đứng. Chương trình tính toán được viết bằng các ngôn ngữ Fortran và Matlab.

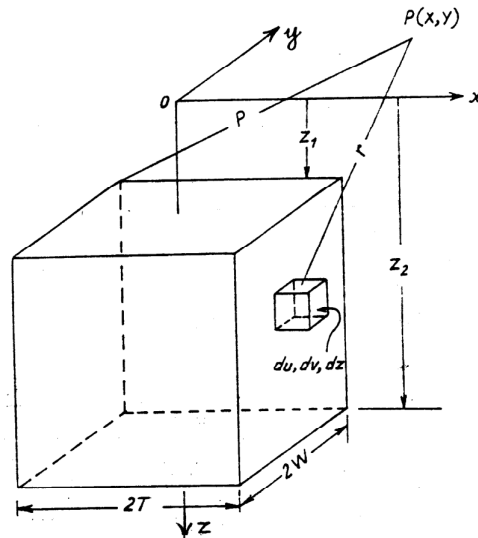
¹ Nhận bài ngày 11.01.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Dương Thị Hoài Thu; Email: dththu@hunre.edu.vn

2. XÁC ĐỊNH DỊ THƯỜNG TRỌNG LỰC CỦA VẬT THỂ 3D CÓ DẠNG HÌNH LĂNG TRỤ ĐỨNG

Sự thay đổi của mật độ dư theo độ sâu có thể xấp xỉ bằng một hàm bậc hai [1] :

$$\sigma(z) = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 \quad (1)$$

Trong đó z là độ sâu; a_1, a_2 là các hệ số suy giảm; a_0 là mật độ dư của lớp trầm tích bề mặt. Để xác định dị thường trọng lực, bề trầm tích được chia thành các lăng trụ đặt cách nhau ở phía dưới mỗi điểm quan sát, có độ rộng bằng khoảng cách giữa các điểm quan sát và có chiều cao bằng độ sâu của bề trầm tích tại điểm đó.



Hình 1: Mô hình lăng trụ 3 chiều.

Dị thường trọng lực của mỗi lăng trụ được xác định theo công thức sau [2]:

$$dg(x, y) = f \int_{z=Z_1}^{Z_2} \int_{y=-W}^W \int_{x=-T}^T \frac{\sigma(z) \cdot Z dx dy dz}{r^3} \quad (2)$$

ở đây f là hằng số hấp dẫn; Z_1, Z_2 tương ứng là độ sâu đến đỉnh và đáy của lăng trụ. T và W tương ứng là nửa bề rộng của lăng trụ theo các trục x và y . Kết quả của việc tính tích phân này sau khi thay $\sigma(z)$ từ công thức (1) là:

$$dg(x, y) = fa_0 \left| \left| \left| z \cdot \arctg \frac{XY}{zR} + \frac{X}{2} \ln \frac{R-Y}{R+y} + \frac{Y}{2} \ln \frac{R-X}{R+X} \right| \right|_{x=X_1}^{X_2} \right|_{y=Y_1}^{Y_2} \left| \right|_{z=Z_1}^{Z_2} + fa_1 \left| \left| \left| \frac{z^2}{2} \arctg \frac{XY}{zR} - \frac{X^2}{2} \arctg \frac{Y \cdot z}{XR} \right| \right|_{x=X_1}^{X_2} \right|_{y=Y_1}^{Y_2} \left| \right|_{z=Z_1}^{Z_2} \quad (3)$$

3. XÁC ĐỊNH DỊ THƯỜNG TRỌNG LỰC CỦA BỂ TRẦM TÍCH

Để xác định dị thường trọng lực, bể trầm tích được chia thành các lăng trụ đặt cách nhau ở phía dưới mỗi điểm quan sát, có độ rộng bằng khoảng cách giữa các điểm quan sát và có chiều cao bằng độ sâu của bể trầm tích tại điểm đó. Dị thường trọng lực gây ra bởi bể trầm tích được tính bằng cách lấy tổng dị thường trọng lực của tất cả các lăng trụ này.

Ta nhận thấy rằng công thức (3) rất phức tạp. Khi tính dị thường trọng lực của bể trầm tích nếu dị thường của tất cả các lăng trụ đều được tính theo công thức này thì sẽ tốn rất nhiều thời gian tính trên máy. Để khắc phục khó khăn này, V.D.Braskara Rao đề nghị sử dụng công thức gần đúng sau đây để tính dị thường của các lăng trụ nằm xa điểm quan sát. Công thức này đạt được khi xấp xỉ hiệu ứng của lăng trụ bằng một thanh vật chất thẳng đứng đặt tại tâm của lăng trụ.

$$dg(x,y)=fa_0\Delta x\Delta y+fa_2\Delta x\Delta y\left|\frac{(2x^2+2y^2+z^2)}{R}\right|_{z=Z_1}^{Z_2} \quad (4)$$

a_0 là mật độ dư của lớp trầm tích bề mặt; a_1 là hệ số suy giảm. $R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ còn Δx , Δy tương ứng là khoảng cách giữa các điểm quan sát theo các trục x và y . Cuối cùng, dị thường trọng lực của bể trầm tích được xác định theo công thức sau:

$$g(x,y)=\sum_{i=1}^M\sum_{j=1}^N dg(x,y) \quad (5)$$

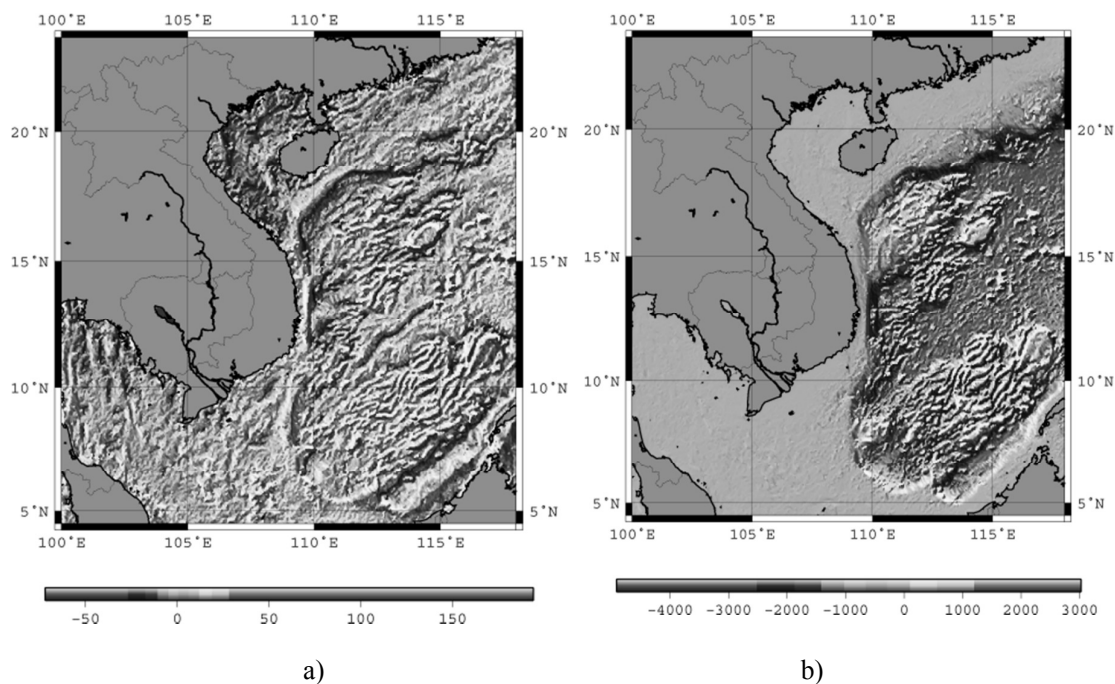
Với M là số lăng trụ được chia theo trục x ; N là số lăng trụ được chia theo trục y .

4. XÂY DỰNG BẢN ĐỒ BUGHE KHU VỰC THỀM LỤC ĐỊA VIỆT NAM

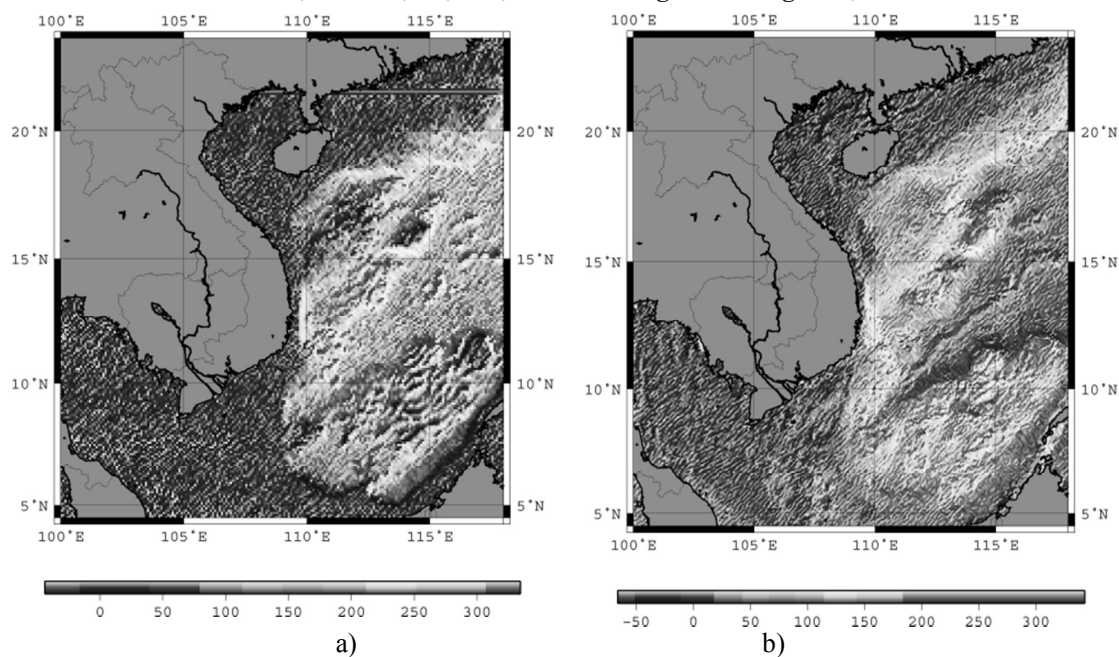
Bản đồ Bughe khu vực thềm lục địa Việt Nam và vùng Biển Đông kề cận trong phạm vi vĩ độ từ 4.5° đến 23.5° ; kinh độ từ 100° đến 118° đã được xây dựng dựa phương pháp xác định dị thường trọng lực trình bày ở trên và dựa trên cơ sở bản đồ dị thường Fye tỉ lệ 1:200.000 của vùng này (Hình 2.a).

Thứ tự các bước tính toán để xây dựng bản đồ được thực hiện như sau: Tính hiệu chỉnh trọng lực của lớp nước biển dựa vào bản đồ độ sâu đáy biển (hình 2.b). Tính hiệu chỉnh trọng lực gây ra bởi các khối đất đá nằm cao hơn mực nước biển dựa vào bản đồ độ cao địa hình (hình 2.b).

Xây dựng bản đồ Bughe bằng cách cộng dị thường Fye thu được tại mỗi điểm với các hiệu chỉnh kể trên thu được tại chính điểm quan sát đó. Khu vực nghiên cứu được chia thành mạng lưới ô vuông có kích cỡ $\Delta x = \Delta y = 2km$; Cả khu vực nghiên cứu được chia thành 990×1045 lăng trụ. Hiệu ứng trọng lực tại mỗi điểm được tính bằng cách lấy tổng hiệu ứng trọng lực của tất cả các lăng trụ trên. Hiệu ứng trọng lực của mỗi lăng trụ được tính theo công thức (5). Kết quả tính toán được trình bày lần lượt trên các hình 3a, b.



Hình 2: a) Bản đồ địa hình đáy biển tỉ lệ 1: 200.000 khu vực thềm lục địa Việt Nam và vùng Biển Đông kề cận; b) Bản đồ địa hình đáy biển tỉ lệ 1: 200.000 khu vực thềm lục địa Việt Nam và vùng Biển Đông kề cận.



Hình 3: a) Bản đồ hiệu chỉnh địa hình đáy biển tỉ lệ 1: 200.000 khu vực thềm lục địa Việt Nam và vùng Biển Đông kề cận; b) Bản đồ địa hình đáy biển tỉ lệ 1: 200.000 khu vực thềm lục địa Việt Nam và vùng Biển Đông kề cận.

So với kết quả tính trường dị thường trọng lực Bughe Biển Đông của chương trình điều tra nghiên cứu biển cấp nhà nước KC-09-02 (hình 4) ta thấy bản đồ trường trọng lực Bughe thu được theo phương pháp tính hiệu chỉnh của từng lăng trụ kể trên (hình 3.b) có kết quả khá phù hợp. Trường trọng lực trên Biển Đông nhìn chung có cấu trúc rất phức tạp và phân dị, nó có hướng cấu trúc áp đảo là Đông Bắc-Tây Nam và kinh tuyến, đặc biệt rõ là một loạt dải bất thường bậc thang với biên độ hàng trăm mgal kéo dài hàng nghìn km theo hướng Bắc và Đông Bắc.

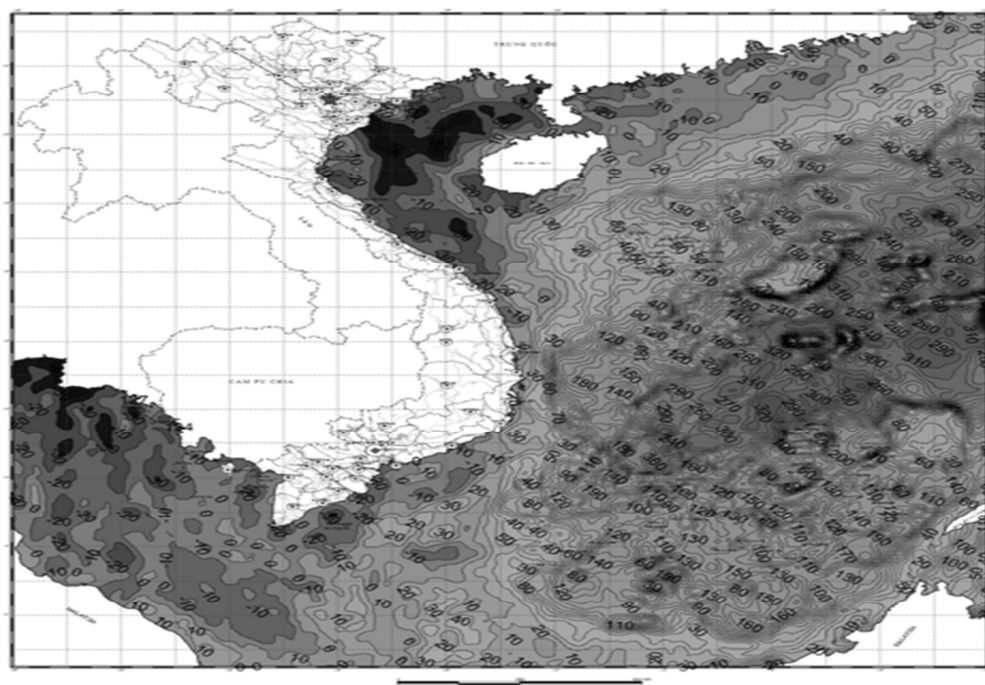
Các dải bất thường bậc thang lớn chạy song song và tạo thành từng nhóm quan sát thấy ở các khu vực sau: Hướng Đông Bắc gồm có dải chạy qua phía Tây Bắc quần đảo Hoàng Sa lên đến gần Đài Loan. Dải chạy ven bờ biển các đảo Kalimantan và Palawan. Ba dải chạy dọc theo vùng trung tâm Biển Đông. Một dải chạy men theo phía Tây Bắc quần đảo Trường Sa. Hướng kinh tuyến nổi bật lên 2 dải bất thường bậc thang chạy dọc theo ven biển Trung Bộ Việt Nam và một dải chạy song song ven biển phía Tây Philippin.

Các nhóm bất thường bậc thang (gradient) hướng Tây Bắc – Đông Nam (cắt ngang trục Biển Đông) và hướng vĩ tuyến đều thấy thể hiện rõ nhưng biên độ không lớn và độ dài hạn chế, bị đứt đoạn do sự đan chéo với những dải gradien hướng chủ đạo Đông Bắc-Tây Nam. Nổi bật trong nhóm này là những dải gradien hướng vĩ tuyến ở phần Đông Bắc của Biển Đông, dải bất thường bậc thang hướng vĩ tuyến chạy từ phía Nam đảo Hải Nam qua khu vực trung tâm Biển Đông sát trên vĩ độ 16°N . Dải bất thường bậc thang nằm ở phía Nam quần đảo Trường Sa trải theo vĩ độ 6°N và một số dải bất thường hướng vĩ tuyến ở phần phía Đông của Biển Đông cắt vuông góc với dải gradien hướng kinh tuyến ở ven biển Philippin. Các bất thường bậc thang hướng Tây Bắc – Đông Nam biên độ không lớn, thường bị gián đoạn và biến dạng khi cắt qua những dải lớn có hướng Đông Bắc ở sườn và trung tâm của Biển Đông.

Những vùng có cấu trúc của trường bình ổn tương đối so với các vùng rìa và trung tâm của Biển Đông là các khu vực trên thềm lục địa Đông Nam Trung Quốc. Phần Đông Bắc từ vĩ độ 2°N trở lên, toàn bộ vùng vịnh Thái Lan và thềm lục địa Đông Nam của Việt Nam và Bắc Indonexia ở về phía Tây của dải Gradien kinh tuyến $109^{\circ} - 110^{\circ}\text{E}$. Ở các vùng nói trên giá trị bất thường Bughe biến đổi trong giới hạn từ ± 10 , ± 20 đến $+50$, $+60$ mgal, một số vùng trường vẫn có giá trị âm cỡ vài ba chục mgal. Bức tranh các bất thường biến động từ từ, không có những dải gradien mạnh kéo dài, hướng cấu trúc thể hiện tương đối rõ như ở các vùng vịnh Thái Lan, thềm lục địa Đông Nam Việt Nam và thềm lục địa phía Bắc Indonexia.

Ở vùng quần đảo Hoàng Sa trường trọng lực có cấu trúc tương đối phức tạp, phân dị thành các bất thường dạng hẹp kéo dài. Hướng cấu trúc ở Hoàng Sa áp đảo là hướng vĩ tuyến. Ở quần đảo Hoàng Sa giá trị trọng lực Bughe biến đổi từ $+30$ đến $+120$ mgal. Các

vùng rìa phía Tây Bắc, Nam và phía Đông đều có các dải bất thường gradien lớn bao bọc. Vùng trung tâm Biển Đông kéo dài theo phương Đông Bắc có đặc điểm cấu trúc của trường trọng lực khác hẳn và khá đặc trưng, giá trị bất thường Bughe rất lớn, biến đổi trong giới hạn từ +200 đến +300, +320 mgal. Toàn bộ vùng này giới hạn bởi các dải bất thường bậc thang biên độ rất lớn gồm các đường đẳng mức chạy sát nhau. Bên trong của vùng cấu trúc trường tương đối bình ổn tạo nên một số bất thường nhỏ và có dạng khối đều đặn. Ở phía Đông Bắc hình thành một dải bất thường bậc thang cắt theo hướng vĩ tuyến và Tây Bắc - Đông Nam.



Hình 4: Trường dị thường trọng lực Bughe Biển Đông tỉ lệ 1:1.000.000
(Nguồn Viện Địa chất và Địa Vật lý biển).

Các vùng phía đông thềm lục địa miền Trung Việt Nam và phía Đông Bắc quần đảo Hoàng Sa trường trọng lực có cấu trúc phức tạp nhất do hiện tượng đan chéo của các dải gradien mạnh theo nhiều hướng khác nhau. Ở đây các đường đẳng trị trọng lực biến đổi đột ngột, phức tạp tạo nên bức tranh phân dị không thể hiện rõ hướng cấu trúc chủ đạo. Vùng thềm phía Tây Bắc đảo Palawan cũng là nơi đan chéo của các dải bất thường gradien theo 3 hướng khác nhau: Đông Bắc, kinh tuyến và vĩ tuyến, tạo nên một bức tranh bất thường phức tạp. Giá trị bất thường Bughe ở các vùng này biến đổi từ +50 mgal đến +180, +200 mgal. Cùng với các vùng quần đảo Trường Sa và Hoàng Sa các vùng bất thường trên đây tạo nên một đai chuyển tiếp bao quanh vùng trung tâm, có đặc điểm cấu trúc phức tạp và giá trị bất thường tương đối lớn, biến đổi trong giới hạn khá rộng.

5. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã xây dựng thành công bản đồ Bughe khu vực thềm lục địa Việt Nam tỉ lệ 1:200.000. So với các bản đồ Bughe đã có, bản đồ Bughe do chúng tôi xây dựng dựa theo việc tính hiệu ứng trọng lực của từng lăng trụ có tỉ lệ lớn hơn và có độ chính xác cao hơn. Đây là cơ sở quan trọng trong việc xác định phông khu vực rồi từ đó xác định phần trường dư gây ra bởi một số bể trầm tích thuộc thềm lục địa Việt Nam.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bhaskara Rao, Geophys.J, Roy.Astr.Soc (1986), *D. Modelling of sedimentary basins from gravity anomalies with variable density contrast*, Vol.84, pp. 207- 212.
2. Bhaskara Rao, D., Prakash, M.I., and Ramesh Babu (1990), *3 and 2½ D modelling of gravity anomalies with variable density contrast*, Geophys. Prosp, Vol.38, pp. 411-422.

STUDY ON DESIGNING BUGHE MAP OF VIET NAM'S CONTINENTAL SHELF

Abstract: *In this study, we built the Bughe map of Vietnam continental shelf with scale of 1: 200.000 basing on the solution of the analytic problem on the effects of gravity which caused by the vertical cylinder. The results are significant in determining the regional background and thereby determining the residual gravity caused by a number of sedimentary basins of the continental shelf of Vietnam. Calculation program is written in Fortran and Matlab languages.*

Keywords: *Bughe map, effects of gravity, residual gravity, sedimentary basins.*

NHỮNG BIẾN ĐỔI HÌNH THÁI CỦA CÂY LÚA XUẤT HIỆN TRONG HAI THỂ HỆ ĐẦU DƯỚI TÁC ĐỘNG CỦA CÁC TÁC NHÂN GÂY ĐỘT BIẾN

Nguyễn Như Toàn¹⁽¹⁾, Hoàng Quang Minh²

¹Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

²Viện Di truyền Nông nghiệp

Tóm tắt: Chọn giống đột biến là một trong những phương pháp hữu hiệu đối với cây lúa nói riêng và cây nông nghiệp nói chung. Thông qua việc chiếu xạ tia γ (nguồn Co^{60}) và xử lý hoá chất hoá chất nitrozoethyle urea (NEU) lên 3 giống lúa khác nhau về nguồn gốc (IR-64, A-20 và Nếp lý) cho thấy: tần số và phổ xuất hiện các biến dị hình thái phụ thuộc rất nhiều vào tính đặc hiệu của chất gây đột biến, liều lượng sử dụng; cũng như thuộc tính di truyền của từng loại giống được xử lý.

Một vài biến dị hình thái đã thấy xuất hiện ngay ở thế hệ M_1 sau khi xử lý đột biến (như: hạt có râu; vỏ trấu biến từ màu vàng rom sang màu nâu sẫm, hoặc làm thay đổi thời gian sinh trưởng của cây lúa). Còn lại, phần lớn những biến đổi về hình thái và thể chất cây lúa, thu nhận được tại thế hệ m_2 (tần suất xuất hiện đạt tới $31,5 \pm 3,09\%$ với trên 20 chủng loại khác nhau). đây là nguồn vật liệu khởi đầu đa dạng và phong phú, rất hữu ích cho công tác chọn tạo giống mới tiếp theo.

Từ khoá: đột biến, hình thái, xử lý, giống lúa

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Tuy là một nước đứng thứ ba trên thế giới về xuất khẩu lúa gạo, song năng suất lúa ở Việt Nam so với các nước khác còn quá thấp. Chất lượng gạo thương phẩm chưa đáp ứng được nhu cầu mới của thị trường trong nước, cũng như xuất khẩu.

Tại các tỉnh phía Bắc, cho đến thời điểm hiện nay vẫn chưa có được bộ giống lúa phục vụ cho chương trình sản xuất "lúa hàng hóa và lúa xuất khẩu". Mặc dù trong sản xuất đang tồn tại nhiều giống lúa đặc sản, giống lúa chất lượng cao, gạo ngon, có khả năng thích ứng rộng, nhưng thời gian sinh trưởng còn dài và cho năng suất quá thấp (khoảng 2 tấn/ha/vụ).

⁽¹⁾ Nhận bài 3.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Như Toàn; Email: nntoan@daihocthudo.edu.vn

Một số giống lúa nhập nội có tiềm năng năng suất cao, nhưng chưa được chọn lọc, hoàn thiện, nên thường nhiễm sâu bệnh, chưa thích ứng rộng với điều kiện canh tác và môi trường sinh thái, thường cho năng suất không ổn định.

Trên nền tảng của di truyền học hiện đại, kết hợp với các phương pháp chọn giống truyền thống, chúng tôi đang từng bước tiến hành chọn tạo, phục tráng các giống lúa đặc sản, giống lúa chất lượng cao để góp phần cải thiện việc sản xuất lúa gạo ở nước ta trong thời gian tới, đáp ứng nhu cầu bức bách của thực tế sản xuất, nhất là ở các tỉnh vùng châu thổ sông Hồng.

2. VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu

+ Sử dụng 3 giống lúa có giá trị thương phẩm cao (*IR-64*, *A-20* và *Nếp lý*) làm vật liệu thí nghiệm. trong đó, giống *IR-64* là giống nhập nội, giống *A-20* được chọn tạo trong nước và *Nếp lý* là giống lúa đặc sản cổ truyền.

+ Tác nhân gây đột biến: tia γ (nguồn Co^{60}) và *n-nitrozoethyle urea* (NEU).

2.2. Phương pháp nghiên cứu

Từ 3 giống lúa trên chọn 18 mẫu, mỗi mẫu 500 hạt (3 lần nhắc lại), đem ngâm vào nước ấm (khoảng 40⁰c) trong 20 giờ rồi vớt ra rửa sạch để đưa xử lý.

+ Chiếu xạ hạt lúa (ở trạng thái hạt ướt): quá trình chiếu xạ tia γ (nguồn Co^{60}) lên hạt lúa được tiến hành tại trung tâm chiếu xạ quốc gia cầu diễn.

+ Xử lý hoá chất (ở trạng thái hạt ướt): các hoá chất được hoà tan vào nước cất (PH=7) ở nhiệt độ 25⁰c thành 3 nồng độ 0,02; 0,04; 0,06%. chọn 9 mẫu từ 3 giống đã được ngâm nước để ngâm tiếp vào các dung dịch hoá chất đã chuẩn bị sẵn. thời gian xử lý là 18 giờ, sau đó đem ra rửa sạch ở vòi nước trong một giờ, rồi đưa vào tủ ẩm với nhiệt độ 28⁰c để ủ.

+ Trong phòng thí nghiệm:

– Đánh giá mức độ tác động của tác nhân gây đột biến lên quá trình sinh trưởng và phát triển của hạt lúa sau khi xử lý.

– Nghiên cứu, phân lập những biến đổi về sinh lý, hình thái..., cây lúa qua hai thế hệ sau khi xử lý.

+ Ngoài đồng ruộng:

- Theo dõi quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa ở các công thức thí nghiệm, xác định các dạng biến dị phát sinh theo các chỉ tiêu nông-sinh học.
- Chọn lọc các cá thể đột biến theo các tính trạng cần thiết.
- + Áp dụng toán thống kê để xử lý các số liệu thu được.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Tác động của tác nhân gây đột biến lên hạt lúa sau khi xử lý.

Các tác nhân gây đột biến, hầu hết đều tác động có hại cho quá trình sinh trưởng và phát triển của cây trồng ngay sau khi xử lý, trong đột biến cảm ứng. Đây chính là một trong những biểu hiện đặc trưng, đánh giá hiệu quả của phương pháp đột biến thực nghiệm. do đó, việc theo dõi, nghiên cứu những biến động của cây lúa trong suốt quá trình này là rất cần thiết. trong số các chỉ tiêu nông - sinh học chính, chúng tôi đã chú ý trước hết đến 3 chỉ tiêu quan trọng như: 1) tỷ lệ nảy mầm và khả năng sống sót của hạt lúa trong các công thức thí nghiệm.; 2) mức độ hữu thụ (*khả năng kết hạt*) và; 3) chiều cao cây lúa tại thể hệ M_1 .

Bằng những kết quả qua quan sát và đo đếm được trong phòng thí nghiệm cho thấy (*bảng 1*), tỷ lệ nảy mầm của hạt lúa trong các công thức đều biến động và phụ thuộc rất nhiều vào tính đặc thù của tác nhân gây đột biến; liều lượng chiếu xạ hoặc nồng độ hóa chất đã sử dụng, cũng như bản chất di truyền của từng loại giống lúa trong các công thức xử lý.

Đối với cả 3 giống lúa mà chúng tôi sử dụng làm vật liệu thí nghiệm đều cho một kết quả chung về mức độ suy giảm rất nhanh tỷ lệ nảy mầm theo chiều tăng của nồng độ hoá chất hay cường độ chiếu xạ. cụ thể: khi chiếu xạ tia γ (*nguồn Co^{60}*) lên hạt lúa giống ir-64 với liều lượng 15 krad có tới $92,5 \pm 1,77\%$ số hạt nảy mầm; ở công thức 20 krad là $84,5 \pm 1,69\%$; còn nếu tăng liều lượng đến 25 krad thì chỉ còn $72,5 \pm 1,81\%$ số hạt sinh trưởng được thành mầm lúa. chỉ số này của các công thức xử lý hoá chất (*đối với giống ir-64*) tương ứng là: $89,5 \pm 1,58\%$ (*0,02% neu*); $85,1 \pm 1,56\%$ (*0,04% neu*); $74,5 \pm 1,73\%$ (*0,06% neu*). Điều đó chứng tỏ liều lượng của tác nhân gây đột biến càng tăng thì khả năng sống sót của cây lúa sau khi xử lý càng giảm.

Trong số 18 công thức thí nghiệm chúng tôi nhận thấy có 2 trường hợp (*công thức: IR-64-tia γ -15 krad và A.20-NEU-0,02%*), khi sử dụng tác nhân gây đột biến ở liều lượng thấp, không những không thể hiện tính độc hại làm mất sức nảy mầm của hạt lúa, mà ngược lại đã kích thích quá trình này. tỷ lệ nảy mầm của giống IR-64 khi sử dụng liều

lượng chiếu xạ 15 krad đã tăng lên 100,8% so với đối chứng, còn đối với giống A.20 khi xử lý hoá chất NEU = 0,02% đã vượt đối chứng là: 101,2%.

Kết quả trên đây đã chứng tỏ rằng cả hai phương pháp (*chiếu xạ tia γ và xử lý hoá chất neu đã sử dụng*) đều gây ảnh hưởng sâu sắc lên quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa ở thể hệ M₁, song mức độ mạnh - yếu còn phụ thuộc vào liều lượng và thuộc tính di truyền của từng loại giống.

Ở thể hệ M₁, hầu hết các biến dị diệp lục đã xuất hiện, nhưng còn ít, chưa mang tính quy luật. Động thái ra lá, khả năng đẻ nhánh và thời gian sinh trưởng của các cá thể cũng rất khác nhau. một số cá thể đẻ nhánh rất khoẻ (*trên 30 nhánh*) trong khi đối chứng chỉ có từ 5-7 nhánh. Về hình thái, cây lúa trong các công thức thí nghiệm có biến động, song chưa đặc biệt, chủ yếu chỉ thấy xuất hiện dạng hạt có râu và một số cá thể có thời gian sinh trưởng hoặc bị rút ngắn hoặc bị kéo dài so với đối chứng.

Trong số các chỉ tiêu cấu thành năng suất, thì tác nhân gây đột biến đã làm thay đổi nhiều đến giá trị trung bình các chỉ số về: chiều cao cây lúa, số nhánh hữu hiệu và tỷ lệ bất thụ... ở hầu hết các công thức thí nghiệm. Tỷ lệ hữu thụ của cả 3 giống được thí nghiệm đều tăng dần theo mức tăng của cường độ chiếu xạ và nồng độ hoá chất, còn chỉ tiêu về chiều cao cây lúa thì ngược lại, giảm dần theo mức tăng của liều lượng chất gây đột biến đã sử dụng.

Bảng 1: Tác động của tác nhân đột biến lên quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa

Công thức thí nghiệm		Tỷ lệ nảy mầm		Khả năng kết hạt		Chiều cao cây lúa (cm)
		%	So với đối chứng	Tổng số	Tỷ lệ lếp %	
Giống lúa IR-64						
Đối chứng		91,7 ± 1,93	100,0	167 ± 2,37	12,25	91,5 ± 1,70
Tia γ	15 krad	92,5 ± 1,77	100,8	175 ± 2,71	13,53	92,4 ± 1,82
	20 krad	84,5 ± 1,69	93,13	162 ± 2,33	14,29	87,5 ± 1,75
	25 krad	72,5 ± 1,81	79,06	156 ± 2,57	13,82	84,1 ± 2,04
NEU	0,02%	89,5 ± 1,58	97,60	169 ± 2,82	12,65	91,1 ± 1,68
	0,04%	85,1 ± 1,56	92,80	155 ± 2,27	13,19	88,1 ± 1,87
	0,06%	74,5 ± 1,73	82,24	143 ± 2,61	13,73	82,8 ± 1,96

Công thức thí nghiệm		Tỷ lệ nảy mầm		Khả năng kết hạt		Chiều cao cây lúa (cm)
		%	So với đối chứng	Tổng số	Tỷ lệ lếp %	
Giống lúa A-20						
Đối chứng		86,3 ± 1,49	100,0	178 ± 2,73	13,05	89,6 ± 1,86
Tia γ	15 krad	85,5 ± 1,73	99,07	177 ± 2,91	13,93	86,1 ± 1,78
	20 krad	78,1 ± 1,56	90,49	183 ± 2,55	14,23	90,7 ± 2,03
	25 krad	70,7 ± 1,68	81,92	169 ± 2,78	13,38	83,5 ± 1,94
NEU	0,02%	87,3 ± 1,67	101,2	173 ± 2,29	12,89	87,3 ± 1,67
	0,04%	85,7 ± 1,62	99,30	168 ± 2,85	13,92	89,5 ± 2,10
	0,06%	69,8 ± 1,55	80,88	147 ± 2,67	13,78	82,2 ± 1,79
Giống lúa Nếp lý						
Đối chứng		93,1 ± 1,74	100,0	185 ± 3,15	11,84	109,6 ± 1,67
Tia γ	15 krad	91,5 ± 1,58	98,28	180 ± 2,79	12,02	110,6 ± 1,77
	20 krad	87,3 ± 1,47	93,77	175 ± 2,31	12,58	107,2 ± 2,54
	25 krad	81,5 ± 1,56	87,54	167 ± 2,25	12,11	104,5 ± 2,09
NEU	0,02%	89,2 ± 1,66	95,81	178 ± 2,65	12,27	108,8 ± 1,68
	0,04%	84,7 ± 1,42	90,98	177 ± 2,19	13,75	109,1 ± 2,02
	0,06%	79,2 ± 1,60	85,07	171 ± 2,66	14,10	102,5 ± 1,92

Bảng 2: Những biến dị hình thái ở thể hệ M_1 và M_2 do của chiếu xạ tia γ lên hạt lúa

Công thức thí nghiệm		Biến dị hình thái xuất hiện ở M_1		Biến dị hình thái thu nhận ở M_2	
		Tần số, %	Số loại	Tần số, %	Số loại
Giống lúa IR-64					
Đối chứng		0,0 ± 0,00	0	0,0 ± 0,00	0
Tia γ	15 krad	2,0 ± 1,35	1	22,7 ± 2,64	7
	20 krad	3,8 ± 2,14	2	25,1 ± 2,83	8
	25 krad	2,1 ± 1,63	1	19,4 ± 3,02	6
NEU	0,02 %	0,0 ± 0,00	0	15,8 ± 2,35	5
	0,04 %	2,2 ± 1,87	1	21,9 ± 3,03	7
	0,06 %	3,1 ± 1,48	2	19,5 ± 2,29	6

Công thức thí nghiệm		Biến dị hình thái xuất hiện ở M_1		Biến dị hình thái thu nhận ở M_2	
		Tần số, %	Số loại	Tần số, %	Số loại
Giống lúa A-20					
Đối chứng		$0,0 \pm 0,00$	0	$0,0 \pm 0,00$	0
Tia γ	15 krad	$0,0 \pm 0,00$	0	$17,3 \pm 2,44$	5
	20 krad	$2,1 \pm 1,72$	1	$24,7 \pm 3,14$	8
	25 krad	$3,2 \pm 1,54$	2	$18,8 \pm 2,94$	6
NEU	0,02 %	$3,4 \pm 2,07$	2	$14,8 \pm 2,92$	5
	0,04 %	$1,9 \pm 1,81$	1	$20,5 \pm 3,15$	7
	0,06 %	$3,3 \pm 1,65$	2	$31,5 \pm 3,09$	10
Giống nếp lý					
Đối chứng		$0,0 \pm 0,00$	0	$0,8 \pm 0,08$	1
Tia γ	15 krad	$1,8 \pm 1,26$	1	$18,7 \pm 2,52$	6
	20 krad	$2,1 \pm 1,45$	1	$15,5 \pm 2,06$	5
	25 krad	$1,3 \pm 1,42$	1	$23,8 \pm 2,79$	8
NEU	0,02 %	$3,7 \pm 1,93$	2	$16,1 \pm 3,25$	5
	0,04 %	$1,2 \pm 1,02$	1	$23,7 \pm 3,13$	8
	0,06 %	$1,5 \pm 1,17$	1	$29,3 \pm 2,91$	9

Như vậy, do tác động của các tác nhân gây đột biến kể cả chiếu xạ tia γ (nguồn co^{60}) và hoá chất nitrozoethyle urea đã làm thay đổi một số tính trạng trong quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa ngay ở thế hệ M_1 .

3.2. Hiệu ứng tạo biến dị hình thái do chiếu xạ γ (nguồn co^{60}) đối với cây lúa

Việc nghiên cứu tần số và phổ biến dị hình thái xuất hiện sau khi xử lý chiếu xạ đối với cây trồng là một trong những phương pháp định lượng quan trọng để so sánh hiệu quả gây đột biến gen trong thực nghiệm.

Những kết quả thu được từ các công thức thí nghiệm của chúng tôi ở bảng 2 cho thấy: những biến dị hình thái xuất hiện rất ít tại thế hệ m_1 (phổ biến là từ $1,2 \pm 1,02\%$ đến $3,8 \pm 2,14\%$), còn ở thế hệ m_2 những biến dị này thu nhận được nhiều hơn cả về số lượng và chủng loại (tần số xuất hiện từ $14,8 \pm 2,92\%$ đến $31,5 \pm 3,09\%$). Phổ biến dị hình thái

trong mỗi công thức ở thể hệ thứ nhất chỉ tồn tại từ 1 đến 2 loại, trong khi đó tại m_2 tăng lên đến 10 chủng loại trong cùng một công thức thí nghiệm.

Công hiệu chính của đột biến thực nghiệm là tạo ra được nhiều cá thể mang những biến đổi dị thường về hình thái và thể chất, hay nói cách khác việc tạo ra một quần thể đa dạng về hình thái và thể chất là mục đích, yêu cầu và hiệu quả của phương pháp chọn giống đột biến. với số lượng trên 25 loại biến dị thu được ở thể hệ M_1 và M_2 , ngoài sự xuất hiện các dạng cao cây, thấp cây, siêu lùn, chín muộn, chín sớm, lá đòng dài, hạt có râu..., thì các kiểu bông dài, bông ngắn, bông dạng đuôi chồn và mật độ hạt trên bông cao hoặc thấp, xếp xít hoặc xếp thưa, vỏ trấu bị dị dạng hoặc thay đổi màu sắc (*từ màu vàng rom biến đổi thành màu nâu sẫm*), xuất hiện lá trên cổ bông, hình thành lá đòng phụ... cũng thể hiện rất rõ nét.

Hai dạng biến dị thu được ở thể hệ m_1 là hạt thóc có râu và vỏ trấu có màu nâu thẫm đều di truyền lại ở thể hệ m_2 , nên khả năng đây sẽ là 2 đột biến trội. Những biến dị hình thái xuất hiện ở m_2 chúng tôi sẽ kiểm chứng tiếp ở những thể hệ kế tiếp, nếu chúng di truyền ổn định, thì theo các tài liệu công bố trước đây, chúng sẽ là những đột biến lặn.

Từ trên 25 dạng biến dị hình thái thu được, chúng tôi đã phân lập và đang chọn lọc các cá thể mang những đặc tính quý làm nguồn vật liệu khởi đầu cho công tác chọn tạo giống mới tiếp theo.

4. KẾT LUẬN VÀ ĐỀ NGHỊ

Từ kết quả nghiên cứu sự biến đổi những tính trạng hình thái cây lúa do tác động của đột biến cảm ứng, chúng tôi đưa ra mấy kết luận sau đây:

4.1. Cả hai phương pháp (*chiếu xạ tia γ và xử lý hoá chất neu*) đều gây ảnh hưởng sâu sắc lên quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa ở thể hệ m_1 , song mức độ mạnh - yếu còn phụ thuộc vào liều lượng và thuộc tính di truyền của từng loại giống. các biến dị hình thái đã xuất hiện, nhưng còn rất ít, chủ yếu là: dạng hạt có râu; vỏ trấu biến từ màu vàng rom sang màu nâu sẫm và một số cá thể có thời gian sinh trưởng hoặc bị rút ngắn hoặc bị kéo dài so với đối chứng.

4.2. Tần số và phổ xuất hiện các biến dị hình thái không những chỉ phụ thuộc vào chiếu xạ tia γ (*nguồn Co^{60}*) hay xử lý hoá chất neu và liều lượng của chất gây đột biến; mà còn phụ thuộc rất nhiều vào bản chất di truyền của các giống được xử lý. Các biến dị hình thái xuất hiện ngay ở thể hệ m_1 được di truyền lại trong các thể hệ tiếp theo là những đột biến trội, còn xuất hiện ở M_2 khả năng sẽ là những đột biến lặn.

4.3. Hiệu ứng của các tác nhân gây đột biến, kể cả chiếu xạ tia γ (nguồn Co^{60}) và hoá chất nitrozoethyle urea, đã làm thay đổi một số tính trạng hữu ích trong quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa. Các đột biến hình thái chủ yếu xuất hiện ở thế hệ m_2 , từ đó đã tạo ra nguồn vật liệu khởi đầu rất đa dạng và phong phú, phục vụ cho công tác chọn tạo giống mới tiếp theo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Amano e., (1983), Mutagenesis effects in M_1 plt. breeding and genet. section fao/iaea.
2. Amano e., 1995, Development of breeding for m_1 agriculture of rice, - Regional workshop on cereal crop mutation breeding, oct, 9-15, Philippines.
3. Hoàng Quang Minh và cs (1996), "Đột biến thực nghiệm với công tác chọn tạo giống lúa *Oryza sativa* L", *Tạp chí kết quả nghiên cứu khoa học 1986-1996 của Viện di truyền nông nghiệp*, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội.
4. Takeshi Nishio et al., (1995), "Seed mutants in rice. genetic analysis and utilization in rice breeding", *Regional workshop on cereal crop mutation breeding oct, 9-15, Philippines*.
5. Trần Duy Quý (1997), *Các phương pháp mới trong chọn lọc giống cây trồng*, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội.
6. Inger - Genetic resource center, Standart evaluation system for rice international rice reacearch institute 4-th edition july 1996.
7. Method of induction of mutation, iaea, Vienna, 1993.

THE MORPHOLOGICAL CHANGES OF RICE APPEAR IN THE TWO FIRST GENERATION UNDER THE EFFECT OF AGENTS CAUSING MUTATION

Abstract: Choosing mutative gender is one of the effective methods forward the rice in particular and agricultural crops in general. By the irradiation Gamma ray (source Co^{60}) and treating chemical Nitrozoethyle Urea (NEU) to three different genders about origin of rice (IR-64, A-20 and Nep ly) found: The frequency and Spectrum appeared the morphological variations which depend on the specifity of chemical causing mutation; use of dosage; as well as the genetical attribute of each treated gender.

Several morphological variations have appeared at the generation M_1 after treating mutation (as: grain has beard: chaff transform from yellow to deepbrown color, or changing the growing time of rice). Residually, the majority of transformation about morphology and constitution of rice were received at the generation M_2 (the frequency of appearance reached to $31,5 \pm 3,09\%$ with more 20 different types). That is the beginning matterial source which is diverse, abundant and very useful to choose and create the new following gender.

Keywords: Mutation, morphology, treat, rice gender

NGHIÊN CỨU THIẾT KẾ BỂ USAB XỬ LÝ NƯỚC THẢI CHO NHÀ MÁY CHẾ BIẾN MỦ CAO SU

Nguyễn Xuân Trinh¹, Nguyễn Văn Anh

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Công nghiệp chế biến cao su là ngành công nghiệp đã và đang đem lại nguồn thu lớn cho ngân sách quốc gia, tuy nhiên trong quá trình sản xuất tại các nhà máy, nó đã tạo ra nhiều chất thải độc hại (khí độc, nước thải, chất rắn...) tác động xấu đến môi trường và ảnh hưởng lớn tới sức khỏe, đời sống và sinh hoạt của người dân. Nghiên cứu của chúng tôi nhằm đưa ra phương án và quy trình xử lý sinh học góp phần làm giảm mức độ độc hại của chất thải, đồng thời tạo ra lượng chất thải không gây ô nhiễm môi trường theo tiêu chuẩn xả thải (QCVN 01: 2008) cho nước thải đạt loại B và TCVN 6584-2001

Từ khóa: Xử lý; sinh học, nước thải, cao su, chế biến

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ở nước ta ngành công nghiệp chế biến mủ cao su là một trong những ngành công nghiệp hàng đầu và có tiềm năng phát triển vô cùng lớn... Hiện nay, để chế biến hết lượng số mủ cao su thu hoạch được nâng cấp và xây dựng mới tại nhiều tỉnh trên cả nước, chủ yếu tập trung ở các tỉnh Đông Nam Bộ như Đồng Nai, Bình Dương, Bình Phước. Những năm gần đây, cao su trở thành một trong những mặt hàng xuất khẩu chiến lược mang lại hàng trăm triệu USD cho đất nước, giải quyết công ăn việc làm cho hàng ngàn công nhân làm việc trong nhà máy và hàng trăm ngàn công nhân làm việc trong các nông trường cao su. Tuy nhiên tăng trưởng kinh tế chỉ là điều kiện cần và sẽ không bền vững nếu không kết hợp yếu tố môi trường – xã hội. Ước tính hàng năm ngành chế biến mủ cao su thải ra khoảng 5 triệu m³ nước thải. Lượng nước thải này có nồng độ các chất hữu cơ dễ bị phân hủy rất cao như acetic, đường, protein, chất béo... Hàm lượng COD đạt đến 2.500 – 35.000 mg/l, BOD từ 1.500 – 12.000 mg/l được xả ra nguồn tiếp nhận mà chưa được xử lý hoàn toàn ảnh hưởng trầm trọng đến thủy sinh vật trong nước. Ngoài ra vấn đề mùi hôi phát sinh do chất hữu cơ bị phân hủy kỵ khí tạo thành mercaptan và H₂S đã tác động mạnh tới môi trường không khí khu vực xung quanh gây ô nhiễm môi trường nghiêm trọng, ảnh

¹ Nhận bài ngày 12.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Xuân Trinh; Email: nxtrinh@daihocthudo.edu.vn

hường không nhỏ tới sức khỏe, đời sống sinh hoạt của người dân. Xuất phát từ vấn đề cấp bách đó, chúng tôi tiến hành nghiên cứu đánh giá và đưa ra phương án khả thi cho việc xử lý lượng nước thải chế biến mủ cao su tại các nhà máy sản xuất đạt tiêu chuẩn xả thải (QCVN 01: 2008) cho nước thải đạt loại B và TCVN 6584-2001. Đây là vấn đề cấp bách đang được Đảng, Nhà nước và các cấp chính quyền địa phương quan tâm.

2. THỰC NGHIỆM VÀ PHƯƠNG ÁN NGHIÊN CỨU

2.1. Đánh giá về thành phần nước thải mủ cao su

2.1.1. Thành phần và tính chất của nước thải chế biến mủ cao su

Bảng 2.1: Thành phần hóa học của nước thải chế biến cao su (mg/l)

Chỉ tiêu	Khối từ mủ đông (mg/l)
N hữu cơ	8,1
NH ₃ – N	40,6
NO ₃ – N	Vết
NO ₂ – N	KPHN
PO ₄ – P	12,3
Al	Vết
SO ₄ ²⁻	10,3
Ca	4,1
Cu	Vết
Fe	2,3
K	48
Mg	8,8
Mn	Vết
Zn	KPHN

Nhận xét kết quả trên:

Hai thành phần quan trọng ảnh hưởng đến hiệu quả xử lý: hàm lượng muối SO₄²⁻ và Ca²⁺. Khi hàm lượng 2 thành phần trên cao giảm hiệu quả xử lý.

Nguyên nhân:

– Trong nước thải cao su, khi qua giai đoạn phân hủy kỵ khí:



– Trong giai đoạn hiếu khí, để oxy hóa một phân tử SO₃²⁻ thành SO₄²⁻ cần 2 phân tử oxy. Điều này giảm hiệu quả xử lý trong bể sinh học hiếu khí.

– Hàm lượng muối hòa tan Ca^{2+} cao, tạo thành lớp màng chắn không cho sự vận chuyển chất dinh dưỡng đến tế bào vi sinh vật.

2.1.2. Đánh giá mức độ ô nhiễm của nhà máy chế biến cao su

Hiện nay, hiện trạng ô nhiễm môi trường tại các nhà máy sơ chế cao su đang là vấn đề bức bách cần giải quyết kịp thời.

– Nước thải sơ chế cao su, sau thời gian tồn trữ vào khoảng 2 – 3 ngày, xảy ra hiện tượng phân hủy, oxy hoá ảnh hưởng xấu đến môi trường.

– Nước thải ra nguồn gây ô nhiễm trầm trọng đối với nguồn nước màu, nước đục, đen ngòm, nổi váng lợn cợn, bốc mùi hôi thối nồng đặc.

– Hàm lượng chất hữu cơ khá cao, tiêu huỷ đường khí cho quá trình tự huỷ, thêm vào đó cao su đông tụ nổi váng lên bề mặt ngăn cản oxy hoà tan dẫn đến hàm lượng DO rất bé, làm chết thủy sinh vật, hạn chế sự phát triển thực vật, nhất là ở những vị trí nước tù độ nhiễm bẩn còn biểu hiện rõ rệt.

– Tại nguồn tiếp nhận nước thải, do quá trình lên men yếm khí sinh ra các mùi hôi lan toả khắp vùng, gây khó thở, mệt mỏi cho dân cư, nước nguồn bị nhiễm bẩn không thể sử dụng cho sinh hoạt.

2.2. Phương pháp Sinh học xử lý nước thải

- Hoàn thiện thiết kế và vận hành bể USAB
- Tính toán và xử lý theo phương pháp sinh học

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN

3.1. Thành phần nước thải đầu vào

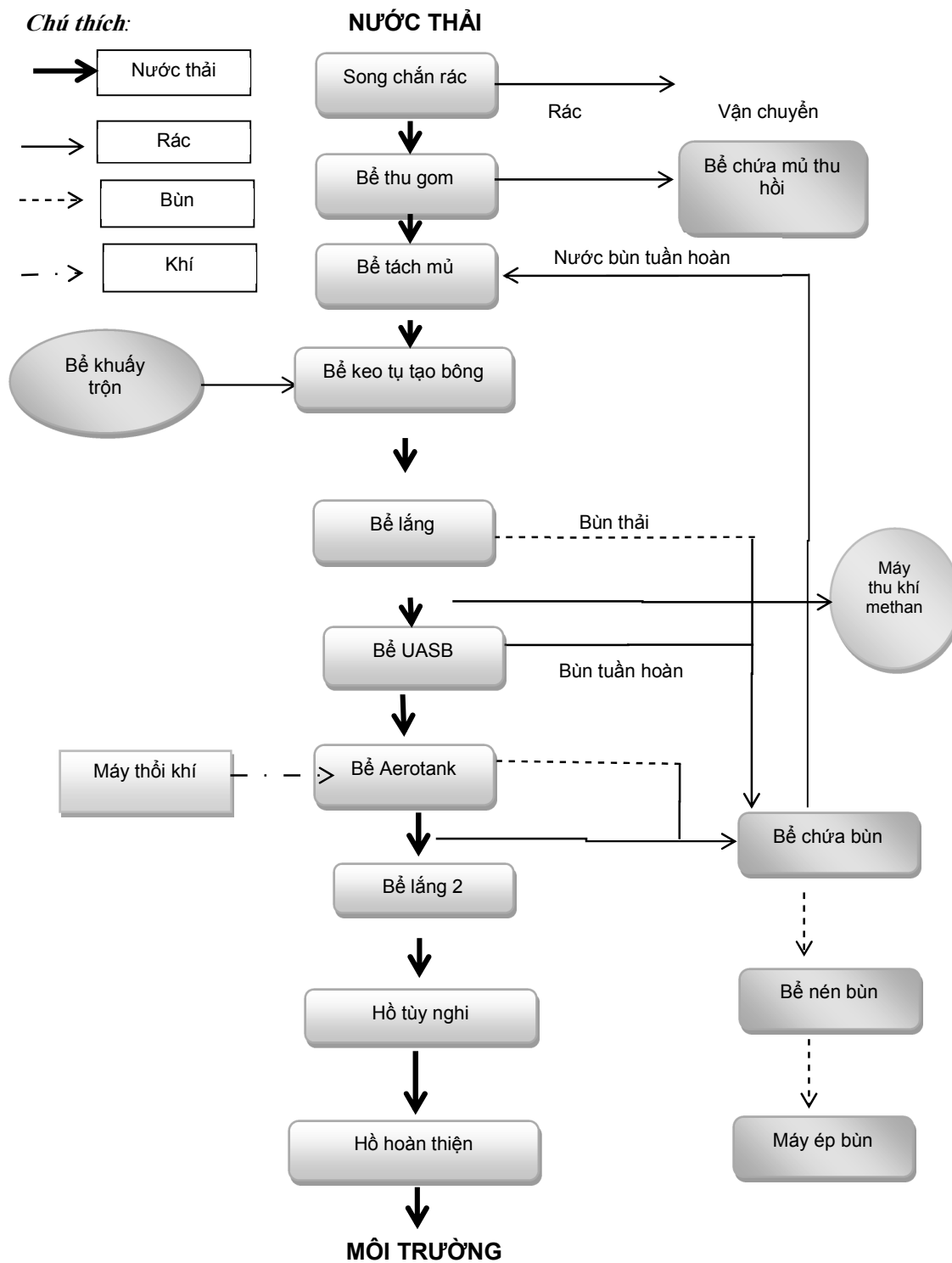
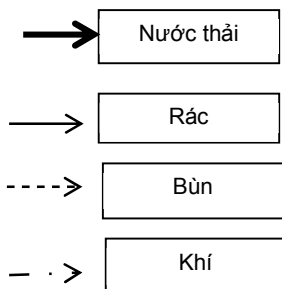
Lưu lượng nước thải cần xử lý là $1500\text{m}^3/\text{ngày đêm}$. Nước thải sau khi xử lý phải đạt theo QCVN 01:2008 đối với nước thải công nghiệp để thải ra môi trường.

Bảng 3.1: Thành phần nước thải đầu vào

Thông số	Đầu vào	Đơn vị	QCVN 01:2008
Lưu lượng trung bình (Q_{tb})	1500	$\text{m}^3/\text{ngày đêm}$	-
Tổng rắn lơ lửng (SS)	1600	mg/l	100
Nhu cầu oxy sinh hóa (BOD)	7000	mg/l	50
Nhu cầu oxy hóa học (COD)	10000	mg/l	80
Nồng độ Nitơ tổng ($N_{tổng}$)	160	mg/l	30
Nồng độ Photpho tổng ($P_{tổng}$)	90	mg/l	6
pH	5,6	-	6 – 9

3.2. Sơ đồ công nghệ

Chú thích:



3.3. Thuyết minh dây chuyền công nghệ

Nước thải trong quá trình sản xuất của nhà máy được thu gom qua hệ thống mương thu gom có đặt song chắn rác và được dẫn đến bể thu gom để tránh làm hư hại bơm ở công trình phía sau... Tại đây nước thải được bơm lên bể tách mỡ, nước thải nhà máy chế biến cao su có hàm lượng mỡ cao su lớn vì thế trước tiên cần cho qua bể gạn mỡ rồi mới đến bể gom để loại bỏ một phần mỡ cao su và các chất dạng lơ lửng. Do thời gian lưu nước thải trong bể tách mỡ rất dài nên có khả năng điều hòa nồng độ chất ô nhiễm có trong nước thải (thay cho bể điều hòa), tại bể nồng độ chất rắn lơ lửng giảm rất nhiều. Nước thải đưa qua bể keo tụ - tạo bông, mục tiêu của quá trình keo tụ là đưa các hoá chất vào trạng thái phân tán đều trong môi trường nước khi phản ứng xảy ra, đồng thời tạo điều kiện tiếp xúc tốt nhất giữa chúng với các phần tử tham gia phản ứng. Việc này được thực hiện bằng cách khuấy trộn để tạo ra các dòng chảy rối trong nước. Các cặn lơ lửng gắn kết với nhau, nước thải đưa qua bể lắng ngang bùn được đưa ra bể nén bùn. Tiếp sau đó nước thải tiếp tục được bơm qua bể kỵ khí (bể UASB). Tại bể UASB, quá trình phân huỷ chất hữu cơ xảy ra nhờ hệ vi sinh vật kỵ khí. Do đó, nồng độ BOD chứa trong nước thải giảm xuống, nhằm tạo điều kiện cho bể Aerotank tiếp theo hoạt động hiệu quả hơn. Ở bể sinh khí mê-tan được thu lại bằng máy thu khí. Nước thải từ bể UASB sẽ tự chảy vào bể xử lý sinh học hiếu khí (bể Aerotank). Tại đây nước thải được bổ sung thêm một lượng bùn vi sinh được tuần hoàn từ bể lắng 2, và trong nước thải xảy ra hiện tượng phân huỷ các chất hữu cơ bởi vi sinh vật hiếu khí. Đồng thời một lượng không khí được cấp vào bể thông qua hệ thống phân phối khí đặt dưới đáy bể, nhằm tăng hiệu quả xử lý.

3.4. Hoàn thiện thiết kế và vận hành bể USAB

3.4.1. Chức năng

Là công trình xử lý sinh học bước đầu của hệ thống xử lý nước thải, trong đó các tác nhân gây ô nhiễm được phân huỷ bởi vi sinh vật dưới điều kiện kỵ khí. Sự chuyển hóa sinh học xảy ra theo các hướng sau:

- Chuyển hóa các chất hữu cơ thành khí sinh học và các sản phẩm hữu cơ đơn giản khác.
- Giảm một phần N,P do vi sinh vật sử dụng để xây dựng tế bào.

3.4.2. Phễu thu khí cặn

Vách nghiêng 45° - 60° , chọn 60°

Chiều cao phễu thu khí 1,5 – 2 m, chọn 1,5 m

Đáy phễu thu khí có chiều dài bằng cạnh đơn nguyên là 5 m, chiều rộng chọn 2 m.

Vậy phần diện tích bề mặt khe hở giữa các phễu thu khí là:

$$\frac{A_{khi}}{A} = \frac{A - A_p}{A} = \frac{5 \times 5 - (2 \times 5 \times 2)}{5 \times 5} \times 100 = 20\%$$

Trong đó: A: diện tích bề mặt

A_{khi} : diện tích khe hở giữa các phễu thu khí

A_p : diện tích đáy phễu thu khí

A_{khi}/A : theo tiêu chuẩn từ 15 – 20%

Đoạn nhô ra của tấm hướng dòng có 4 tấm chắn dòng khí đặt theo hình chữ U, mỗi bên đặt 2 tấm, các tấm đặt song song và nghiêng một góc 60° .

Các tấm có khe hở bằng nhau chiếm 15 – 20% diện tích bề.

$$F_{khe} = 0,15 \times F = 0,15 \times 104,2 = 15,63 \text{ (m}^2\text{)}.$$

Trong ngăn có 4 khe:

$$F_{khe} = \frac{15,63}{4} = 3,9 \text{ (m}^2\text{)}.$$

Khoảng cách giữa các khe:

$$L = \frac{F_{khe}}{4} = \frac{3,9}{4} = 0,98 \text{ (m)}$$

Diện tích chụp thu khí:

$$F_{chup} = F - F_{khe} = 15,63 - 3,9 = 11,79 \text{ m}^2.$$

Chọn $F_{chup} = 12 \text{ m}^2$

Kích thước của chụp thu khí: $3,5 \times 3,5$

Chiều cao thiết bị thu khí:

$$H_G = \frac{F_{chup}}{2 \times \tan 60} = \frac{3,5}{2\sqrt{3}} = 1 \text{ m}$$

3.4.3. Lượng bùn nuôi cấy, bùn dư và sinh khối hình thành mỗi ngày

Tính lượng bùn nuôi cấy ban đầu cho vào bể:

$$M_b = \frac{C_{ss} \times v_r}{TSS} = \frac{C_{ss} \times v_r}{TSS}$$

Bùn nuôi cấy ban đầu lấy từ bùn của bể phân hủy kỵ khí từ quá trình xử lý nước thải sinh hoạt cho vào bể với hàm lượng 30 kgSS/m^3 .

Thể tích ngăn phản ứng của bể UASB là:

$$V_r = \frac{Q \times C_o}{L_{COD}} = \frac{1500 \times 3519,75}{8 \times 1000} = 660 m^3$$

Lượng bùn phân hủy kỵ khí cho vào ban đầu TS = 5%

Lượng bùn nuôi cấy

$$M_b = \frac{C_{ss} \times v_r}{TS} = \frac{30 \times 660}{0,05} = 396000 kg = 396 \text{ (tấn)}.$$

Trong đó: C_{ss} : hỗn hợp bùn trong bể

V_r : thể tích ngăn phản ứng

TS: hàm lượng chất rắn trong bùn nuôi cấy ban đầu

3.4.4. Hàm lượng BOD, COD sau xử lý kỵ khí

$$BOD_{ra} = (1 - E_{BOD}) \times BOD_v = (1 - 0,75) \times 2463,35 = 615,83 \text{ mg/l}$$

Lượng bùn sinh ra trong bể bằng 0,05 – 0,1 gVSS/COD loại bỏ. Vậy khối lượng bùn sinh khối hình thành mỗi ngày:

$$M_{bùn} = \frac{0,05 \times Q \times (COD_v - COD_r)}{1 + (0,015 \times 90) \times 1000} = \frac{0,05 \times 1500 \times (3519,75 - 600)}{1 + (0,015 \times 90) \times 1000} = 162,1 \text{ kgVS/ngày}$$

Khối lượng bùn sinh ra mỗi ngày là: $M_{bùn} = 162,1 \text{ kgVSS/ngày}$

$1 m^3$ bùn tương đương 260 kgSS. Vậy lưu lượng bùn sinh ra mỗi ngày

$$v_{bùn} = \frac{M_{bùn}}{\rho} = \frac{162,1}{260} = 0,623 m^3/ngày$$

Lượng bùn sinh ra trong 1 tháng: $0,623 \times 30 = 18,69 m^3/tháng$

Chiều cao của bùn trong 1 tháng:

$$H_{bùn} = \frac{v_{bùn}}{F} = \frac{18,69}{104,2} = 0,2 m$$

Chọn thời gian xả bùn là 1 tháng xả một lần. Vậy thể tích bùn cần xả là $18,69 m^3$.
Chọn thời gian xả bùn là 45 phút. Vậy lưu lượng xả ra là:

$$Q_{bùn} = \frac{18,69}{0,2} = 93,45 m^3/h = 0,026 m^3/s$$

Bố trí 3 ống thu bùn, vận tốc bùn trong ống 0,5m/s

$$\text{Diện tích ống xả cần: } F_{bùn} = \frac{Q_{bùn}}{3 \times v_{ong}} = \frac{0,026}{3 \times 0,5} = 0,017 m^2$$

Đường kính ống thu bùn:

$$D_{\text{bùn}} = \sqrt{\frac{4 \times F_{\text{bùn}}}{\pi \times v_{\text{ong}}}} = \sqrt{\frac{4 \times 0,017}{3,14 \times 0,5}} = 0,04m$$

Chọn ống PVC có đường kính 40 mm.

Lượng chất rắn từ bùn dư: $M_{\text{SS}} = V_{\text{bùn}} \times 30 = 0,623 \times 30 = 18,69 \text{ kgSS/ngày}$.

Hàm lượng SS qua UASB giảm 75% $\rightarrow SS_{\text{ra}} = 122,6 \times (1 - 0,25) = 91,95 \text{ mg/l}$.

3.4.5. Tính toán lượng khí

COD của 1 mol CH_4 : $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$

1mol $2 \times 32\text{gO}_2$ hay $64\text{gO}_2/\text{mol CH}_4$

Ở đktc (0°C , 1 atm) thể tích của 1 mol CH_4 là 22,4 lít.

$$\rightarrow 22,4 \text{ l}/64\text{gCOD} = 0,35 \text{ l/gCOD}$$

Ở điều kiện (30° , 1 atm) thể tích của 1 mol CH_4 là:

$$V = \frac{nRT}{p} = \frac{1 \times 0,082057 \times 303}{1} = 25\text{l}$$

Trong đó: $n = 1 \text{ mol}$

$$R = 0,082057 \text{ atm l.g/mol } ^\circ\text{K}$$

$$T = 273 + 30 = 303 ^\circ\text{K}$$

$$p = 1\text{atm}$$

$\rightarrow$ Vậy ở điều kiện (30° , 1atm) thể tích của 1 mol CH_4 là 0,3906 l/gCOD.

Vận tốc khí trong ống từ 10 – 15 m/s. Ta chọn 10 m/s. Vậy đường kính ống dẫn khí là:

$$D_{\text{khí}} = \sqrt{\frac{4 \times Q_{\text{khí}}}{24 \times 3600 \times \pi \times v_{\text{khí}}}} = \sqrt{\frac{4 \times 1460}{24 \times 3600 \times 3,14 \times 10}} = 0,046m$$

Đường kính của ống HDPE có đường kính 46 mm để thu khí thoát ra.

Lượng khí CH_4 sinh ra khoảng $0,35 \text{ m}^3/\text{kgCOD}$ loại bỏ.

$$\begin{aligned} V_{\text{CH}_4} &= 0,35 \times (\text{COD}_v - \text{COD}_r) \times 1000 \times 10^{-3} \\ &= 0,35 \times (3519,75 - 600) \times 1000 \times 10^{-3} = 1022 \text{ m}^3/\text{ngày} \end{aligned}$$

Lượng khí sinh ra loại bỏ 1 kg COD là 0.5 m^3

$$\begin{aligned} V_{\text{khí}} &= 0,5 \times (\text{COD}_v - \text{COD}_r) \times 10^{-3} \times 1000 \\ &= 0,5 \times (3519,75 - 600) \times 1000 \times 10^{-3} = 1460 \text{ m}^3/\text{ngày}. \end{aligned}$$

4. KẾT LUẬN

Nước thải chế biến mủ cao su là một trong những loại nước thải có nồng độ chất ô nhiễm cao thuộc loại bậc nhất của nước thải công nghiệp. Do đó yêu cầu về công nghệ có khả năng xử lý đến giới hạn cho phép nhưng phải đáp ứng yêu cầu về chi phí bình quân thấp, cộng với chi phí quản lý và vận hành không quá cao là điều không phải dễ dàng thực hiện. Hệ thống xử lý được đề xuất với quá trình cơ học (bể lắng cát, bể điều hòa thổi khí nén...), tiếp theo là quá trình sinh học kỵ khí (sử dụng bể UASB) và được xử lý triệt để tại hệ thống hồ tùy nghi, đã đáp ứng được yêu cầu đặt ra.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Báo cáo môi trường Quốc gia, (2009), *Môi trường Khu Công nghiệp Việt Nam*, Bộ Tài nguyên và Môi trường.
2. Trịnh Xuân Lai, Đồng Minh Thu (1998), *Xử lý nước cấp cho sinh hoạt và công nghiệp*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
3. Trịnh Xuân Lai (1988), *Cấp nước và xử lý nước*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
4. Trịnh Xuân Lai (2000), *Tính toán thiết kế các công trình xử lý nước thải*, Nxb Xây Dựng, Hà Nội.
5. Trần Hiếu Nhuệ (1988), *Thoát nước và xử lý nước thải các xí nghiệp công nghiệp*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
6. Nguyễn Xuân Nguyên (2003), *Nước thải và công nghệ xử lý nước thải*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
7. S.C. Bhatia. *Enviromental Polution and control in Chemical process Industries*.
8. Rodionov A.I., KLushin V.N., Sister V.G. (2007), *Quy trình công nghệ bảo vệ môi trường*, Nxb Kaluga.
9. Kolesnhikov V.A., Ilin V.I, (2004), *Xử lý nước thải công nghiệp bằng phương pháp sinh học và hóa*, Giáo trình giảng dạy, Đại học Công nghệ Hóa học Mendeleev, Moscow.

DESIGNING THE USAB WASTEWATER TREATMENT SYSTEM FOR RUBBER PROCESSING FACTORY

Abstract: *The rubber processing industry has been a major source of revenue to the national budget. However, it is considered that there are large amount of toxic waste (toxic gas, water solids, so on) which generated in the manufacturing process negative affect to the environment and strongly impact to people's health and ecosystem.*

This paper proposed the bio-treatment system method and process that contributes to the reduction of the toxic level of rubber processing wastewater and reached the standard (QCVN 01 for wastewater category B and TCVN 6584-2001).

Keywords: *Treatment, biology, wastewater, rubber, processing.*

ĐÁNH GIÁ MỘT SỐ CÁCH THỨC TÍNH XÁC SUẤT SPAM CỦA TOKEN ỨNG DỤNG TRONG PHÂN LOẠI THƯ RÁC

Nguyễn Tu Trung¹⁽¹⁾, Nguyễn Ngọc Hưng¹, Phạm Thanh Giang¹, Trần Thành Trung²

¹Viện Công nghệ Thông tin, Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam

²Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

Tóm tắt: Phân loại thư rác là bài toán được quan tâm nghiên cứu từ rất lâu trên thế giới với nhiều hướng tiếp cận khác nhau. Tính năng phân loại thư rác được tích hợp vào module phân loại thư rác của Mail Server hay Mail Client. Hiện nay, khi mà các phương pháp truyền thống vẫn có những điểm yếu nhất định thì phương pháp phân loại dựa trên nội dung tỏ ra hiệu quả với việc sử dụng các kỹ thuật trong học máy thống kê. Trong đó, phân loại thư rác dựa trên Bayes với ưu điểm đơn giản, dễ sử dụng và tốc độ nhanh nên được cài đặt phổ biến trong các hệ thống Mail Server hay Mail Client. Bài báo này trình bày đánh giá về một số cách thức tính xác suất là Spam của các Token thông qua ứng dụng phân loại thư rác.

Từ khóa: Thư rác, phân loại thư rác, Bayes, học máy thống kê, Token, Spam, Ham.

1. MỞ ĐẦU

Một trong những dịch vụ mà Internet mang lại đó là dịch vụ thư điện tử, đó là phương tiện giao tiếp rất đơn giản, tiện lợi, rẻ và hiệu quả giữa mọi người trong cộng đồng sử dụng dịch vụ Internet. Tuy nhiên chính vì những lợi ích của dịch vụ thư điện tử mang lại mà số lượng thư trao đổi trên Internet ngày càng tăng, và đa số trong số hũng thư đó là thư rác (spam). Thư rác (spam mail) là những bức thư điện tử không yêu cầu, không mong muốn và được gửi hàng loạt tới người nhận [1][2]. Thư rác thường được gửi với số lượng rất lớn, không được người dùng mong đợi, thường với mục đích quảng cáo, đính kèm virus, gây phiền toái cho người dùng, làm giảm tốc độ truyền internet và tốc độ xử lý của email server, gây thiệt hại rất lớn về kinh tế. Theo thống kê thư rác hiện chiếm hơn một nửa số e-mail truyền trên Internet và chính thư rác là nguồn lây lan virus nhanh nhất. Năm 2005, thống kê toàn cầu của Ferris Research ở San Francisco [1], thư rác gây thiệt hại 50 tỷ USD. Thư rác chiếm khoảng 80% lưu lượng thư điện tử thế giới trong quý 1/2006 [1].

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 14.02.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Nguyễn Tu Trung; Email: trungnt.sremis@gmail.com

Microsoft và AOL cho biết trung bình mỗi ngày chặn gần 5 tỷ thư rác. Công ty Điện toán và Truyền số liệu (VDC) cho biết, thư rác hiện nay chiếm phần lớn lưu lượng email qua hệ thống máy chủ thư của ISP này. Khách hàng của nhiều ISP ở Việt Nam thường xuyên bị tê liệt do bị liệt vào danh sách đen. Mỗi lần thoát ra khỏi danh sách này ISP phải mất khoảng 40 USD. Thư rác còn làm giảm hiệu quả làm việc, gây stress, tiêu tốn thời gian của nhân viên... dẫn đến năng suất lao động giảm, ảnh hưởng tới tình hình kinh doanh và doanh thu của công ty. Do đó, việc lọc thư rác là rất cần thiết.

Tỉ lệ chặn thư rác của bộ lọc sử dụng phương pháp này rất cao, khoảng 99%. Chương trình SpamProbe có thể đạt tới tỉ lệ lọc thư rác tới 99.9%. Theo thống kê của kaspersky năm 2014 [12], Tỷ lệ thư rác trong lưu lượng truy cập email trong tháng Hai tăng 4.2% so với tháng trước, đạt trung bình 69.9%. Tuy nhiên, tỷ lệ này thấp hơn 1.2% so với tháng Hai năm 2013. Ba nguồn phát tán thư rác hàng đầu gồm có Trung Quốc (23%), Mỹ (19.1%) và Hàn Quốc (12.8%). Việt Nam đứng vị trí thứ 7 với 2.95%, giảm so với tháng Một chiếm 3.1%. Những kẻ lừa đảo thường nhắm mục tiêu đến các trang mạng xã hội (27.3%), dịch vụ thư điện tử (19.34%) và các tổ chức thanh toán trực tuyến (16.73%). Theo [13], về tình hình thư rác quý III 2015, tỷ lệ thư rác trong lưu lượng email đã giảm so với Quý II, nhưng các kỹ thuật lừa đảo người dùng và vượt qua bộ lọc email ngày càng trở nên tinh vi hơn. Trong Quý III 2015, tỷ lệ thư rác chiếm 54.2% toàn lưu lượng email, giảm 0,8% so với quý II. Đã có những thay đổi lớn trong top 3 các quốc gia là mục tiêu tấn công bằng email trong Quý III 2015. Đứng vị trí đầu là Đức chiếm 18.47 (giảm 1.12% so với quý II). Đứng vị trí thứ 2 là Brazil và thứ 3 là Nga với tỷ lệ 7.56% (tăng 2.82% so với quý II). Về nguồn gốc phát tán thư rác, Mỹ vẫn là quốc gia có nguồn thư rác lớn nhất chiếm 15.34%. Việt Nam đứng thứ hai với 8.42% (tăng 5.04% so với quý II). Xếp vị trí thứ 3 là Trung Quốc chiếm tỷ lệ 7.15%, không thay đổi so với quý II. Tiếp sau đó là các nước Nga (5.79%), Đức (4.39%), Pháp (3.32%).

Có nhiều phương pháp lọc thư rác như: Lọc thư rác thông qua việc đưa ra luật lệ, dựa trên địa chỉ IP, dựa trên chuỗi hỏi/đáp (Challenge/Response filters), dựa trên mạng xã hội, định danh người gửi hay dựa trên nội dung [1]. Mỗi phương pháp đều có những ưu nhược điểm riêng.

Phương pháp lọc nội dung để phân loại thư rác đã và đang được quan tâm, nghiên cứu và ứng dụng nhiều nhất. Phương pháp này dựa vào nội dung và chủ đề bức thư để phân biệt thư rác và thư hợp lệ [1][2]. Phương pháp này có ưu điểm đó là chúng ta có thể dễ dàng thay đổi bộ lọc để nó có thể lọc các loại thư rác cho phù hợp. Trong phương pháp học dựa trên nội dung, lọc thư rác sử dụng các kỹ thuật học máy thống kê là một phương pháp có triển vọng với nhiều ứng dụng thương mại như Hotmail, Google, Yahoo. Các phương

pháp học máy và xác suất thống kê cho phép phân loại cả những thư rác chưa từng xuất hiện trước đó. Trong [3], Konstantin đã trình bày báo cáo tổng quan về một số phương pháp học máy phổ biến nhất (Bayesian classification, k-NN, ANNs, SVMs) và ứng dụng của chúng trong vấn đề lọc thư rác. Trong [4], các tác giả đã so sánh hiệu quả của các bộ lọc thư rác khác nhau sử dụng Naïve Bayes, SVM, và KNN. Các kết quả thử nghiệm cho thấy các bộ lọc sử dụng các kỹ thuật này đều cho độ chính xác rất cao.

Trong các kỹ thuật lọc thư rác dựa trên học máy thống kê, kỹ thuật Bayes tỏ ra đơn giản, hiệu quả, tốc độ thực thi rất nhanh. Thuật toán Bayes đã được áp dụng vào chương trình lọc thư rác spambayes, và cho kết quả lọc khá hiệu quả. Có lẽ, đây là lý do mà bộ lọc sử dụng kỹ thuật này được cài đặt phổ biến trong các hệ thống Mail Server (Zimbra), Mail Client. Các phần mềm Mail Client như Outlook, Outlook Express, Thunderbird/Mozilla Mail & Newsgroups, Eudora, hay Opera Mail. Các thuật toán Naïve Bayes là những thuật toán kinh điển trong kỹ thuật Bayes. Naïve Bayes rất phổ biến trong các bộ lọc thư điện tử chống Spam nguồn mở [6]. Có nhiều phiên bản của Naïve Bayes. Trong [6], các tác giả đã thảo luận, thử nghiệm và đánh giá về hiệu quả lọc Spam của các phiên bản này. Trong [10], các tác giả thảo luận về quy trình lọc thư rác thống kê sử dụng kỹ thuật phân loại Naïve Bayes. Trong đó, một cách thuận tiện, đơn giản để cài đặt thuật toán Bayes trong việc lọc thư rác là thuật toán của Paul Graham [9][10] và biến thể khác của Tim Peter. Các thuật toán này đều phân tích, đánh giá và đưa ra đề xuất về các cách tính xác suất là spam của các token.

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung nghiên cứu về việc sử dụng kỹ thuật Bayes ứng dụng trong vấn đề lọc thư rác thông qua việc đánh giá một số cách thức tính xác suất là Spam của các token. Các phần tiếp theo được trình bày như sau. Phần 2 trình bày về vấn đề lọc thư rác dựa trên Bayes. Phần 3 trình bày một số cách thức tính xác suất là Spam khác nhau của các token. Các thử nghiệm được trình bày trong phần 4. Kết luận được trình bày trong phần 5.

2. PHÂN LOẠI THƯ RÁC DỰA TRÊN BAYES

2.1. Lọc thư rác dựa trên Bayes

Kỹ thuật phân loại thư rác dựa trên Bayes được trình bày trong [7][8].

Coi mỗi email được biểu diễn bởi một vectơ thuộc tính đặc trưng $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ với $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ là các giá trị thuộc tính $X_1, X_2, \dots, X_n$ tương ứng trong không gian đặc trưng (space model). Ta sử dụng giá trị nhị phân 0 và 1 để mô tả email đó có đặc điểm X_i hay không, giả sử nếu email đó có đặc điểm X_i thì ta đặt thuộc tính $X_i = 1$, còn nếu email đó không có đặc điểm X_i thì ta có thuộc tính $X_i = 0$.

Từ thuyết xác suất của Bayes và xác suất đầy đủ, chúng ta có công thức tính xác suất mail với vectơ $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ thuộc vào lớp c như sau:

$$P(C = c | \vec{X} = \vec{x}) = \frac{P(C=c)P(\vec{X}=\vec{x}|C=c)}{\sum_{k \in \{Spam, Ham\}} P(C=k)P(\vec{X}=\vec{x}|C=k)} \quad (1)$$

Để đơn giản khi tính $P(\vec{X}|C)$ ta phải giả sử $X_1, X_2, \dots, X_n$ là độc lập. Khi đó biểu thức (1) tương đương với biểu thức sau:

$$P(C = c | \vec{X} = \vec{x}) = \frac{P(C=c) \prod_{i=1}^n P(X_i=x_i|C=c)}{\sum_{k \in \{Spam, Ham\}} P(C=k) \prod_{i=1}^n P(X_i=x_i|C=k)} \quad (2)$$

Giá trị được sử dụng rất rộng rãi để đánh hạng cho thuộc tính là giá trị tương hỗ MI (mutual information), ta lấy những thuộc tính có giá trị MI lớn nhất. Ta có thể tính giá trị tương hỗ MI mà mỗi đại diện của X thuộc về loại C như sau:

$$MI = \sum_{x \in \{0,1\}, c \in \{Spam, Ham\}} P(X = x | C = c) \log \frac{P(X=x|C=c)}{P(X=x)P(C=c)} \quad (3)$$

Một email được coi là spam nếu:

$$\frac{P(C=Spam | \vec{X}=\vec{x})}{P(C=Ham | \vec{X}=\vec{x})} > \lambda \quad (4)$$

Với λ là ngưỡng cho trước để xem xét so sánh với tỉ lệ giữa xác suất là *Spam* hay *Ham* của một thư. Trong đó, *Spam*: thư rác, *Ham*: thư hợp lệ.

Giả sử các thuộc tính X_i là độc lập khi đó ta có:

$$P(C = Spam | \vec{X} = \vec{x}) = 1 - P(C = Ham | \vec{X} = \vec{x}) \quad (5)$$

Khi đó (4) tương đương với:

$$P(C = Spam | \vec{X} = \vec{x}) > t \text{ với } t = \frac{\lambda}{1+\lambda} \quad (6)$$

2.2. Công thức của Paul Graham

Theo [9][10], Paul Graham đề xuất một cách tính xác suất làm Spam của các token rất đơn giản, thuận tiện cho việc cài đặt nhưng cho độ chính xác phân loại thư rác rất cao.

Công thức tính xác suất Spam của token w như sau:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STM}}{\frac{SA(w)}{STM} + 2 \frac{HA(w)}{HTM}} \quad (7)$$

Trong đó: $SA(w)$: số lần xuất hiện của token w trong kho thư rác.

$HA(w)$: số lần xuất hiện của token w trong kho thư hợp lệ.

STM : tổng số thư trong kho thư rác.

HTM : tổng số thư trong kho thư hợp lệ.

Hệ số "2" để tăng khả năng nhận được thư hợp lệ.

Bảng 1. Bảng dữ liệu huấn luyện trong [10].

Token	Số lần xuất hiện		$P(S w)$
	trong Spam	trong Ham	
A	165	1235	0.2512473
Advised	12	42	0.4177898
As	2	579	0.0086009
Chance	45	35	0.7635468
Clarins	1	6	0.2950775
Exercise	6	39	0.2787054
For	378	1829	0.3417015
Free	253	137	0.8226372
Fun	59	9	0.9427419
Girlfriend	26	8	0.8908609
Have	291	2008	0.2668504
Her	38	118	0.4471509
I	9	1435	0.0155078
Just	207	253	0.6726596
Much	126	270	0.5396092
Now	221	337	0.6222218
Paying	26	10	0.8671995
Receive	171	98	0.8142107
Regularly	9	87	0.2062346
Take	142	287	0.5541010
Tell	76	89	0.6820062
The	185	930	0.3331618
Time	212	446	0.5441787
To	389	1948	0.3340176
Too	56	141	0.4993754

Token	Số lần xuất hiện		$P(S w)$
	trong Spam	trong Ham	
Trial	26	13	0.8339739
Vehicle	21	58	0.4762651
Viagra	39	19	0.8375393
You	391	786	0.5554363
Your	332	450	0.6494897

Tập dữ liệu huấn luyện trong [10] gồm có 432 thư rác và 2170 thư hợp lệ [10].

Khi này, xác suất là Spam của một thư E được tính theo công thức:

$$P(S|E) = \frac{\prod_{i=1}^n P(S|w_i)}{\prod_{i=1}^n P(S|w_i) + \prod_{i=1}^n P(H|w_i)} \quad (8)$$

Trong đó:

$$P(H|w_i) = 1 - P(S|w_i) \quad (9)$$

3. MỘT SỐ CẢI TIẾN TRONG CÁCH TÍNH XÁC SUẤT SPAM CỦA TOKEN

Từ công thức (7), chúng ta có một số nhận xét sau:

1) Việc tính xác suất là Spam của mỗi token

– Chỉ phụ thuộc vào số lần xuất hiện của token w và tổng số thư trong mỗi kho thư rác và thư hợp lệ.

– Chưa xem xét tổng số tần suất của tất cả token,

– Chưa xem xét số thư chứa token trong mỗi kho thư rác và thư hợp lệ. Khi này, không biết được token xuất hiện trong chỉ một thư hay nhiều thư.

– Hệ số "2" tăng khả năng nhận nhầm thư rác thành thư hợp lệ.

– Trong trường hợp số lần xuất hiện của một token nào đó xấp xỉ hoặc bằng tổng số thư trong kho thư rác và xuất hiện rất ít trong kho hợp lệ. Khi này, tỉ lệ " $SA(w)/STM$ " sẽ gần tới hoặc bằng 1 trong khi tỉ lệ " $HA(w)/HTM$ " dần tới 0. Ta có xác suất là Spam của token w theo đó sẽ gần tới hoặc bằng 1 (theo công thức 7). Từ đây, theo công thức (8), xác suất là Spam của bức thư chứa token này sẽ rất cao hoặc bằng 1. Nói cách khác, xác suất là Spam của bức thư chứa token này gần như chỉ bị ảnh hưởng bởi token này. Ví dụ, nếu một thư chỉ xuất hiện token này 1 lần, các token khác trong thư này có xác suất là spam rất không cao nhưng thư này bị cho là Spam rất cao. Điều này là bất hợp lý.

Dựa theo phân tích trên, chúng tôi nhận thấy như sau: Xác suất là Spam của mỗi token có thể phụ thuộc các yếu tố sau:

- a) Số lần xuất hiện của token w trong mỗi kho thư rác và thư hợp lệ.
- b) Tổng số thư trong mỗi kho thư rác và thư hợp lệ.
- d) Tổng số tần suất của tất cả token.
- d) Số thư chứa token trong mỗi kho thư rác và thư hợp lệ.

Ngoài ra, việc thay đổi hệ số "2" trong trường hợp khác nhau để tăng cường khả năng nhận biết thư rác hay thư hợp lệ.

Từ đây, chúng tôi đưa ra một số công thức tính xác suất là Spam của mỗi token như sau.

– Phụ thuộc vào các yếu tố a-c, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STA}}{\frac{SA(w)}{STA} + \frac{HA(w)}{HTA}} \quad (10)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STA}}{\frac{SA(w)}{STA} + 2 \frac{HA(w)}{HTA}} \quad (10.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2 \frac{SA(w)}{STA}}{2 \frac{SA(w)}{STA} + \frac{HA(w)}{HTA}} \quad (10.2)$$

– Phụ thuộc vào các yếu tố a-b, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STA}}{\frac{SA(w)}{STM} + \frac{HA(w)}{HTM}} \quad (11)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STM}}{\frac{SA(w)}{STM} + 2 \frac{HA(w)}{HTM}} \quad (\text{Paul Graham}) \quad (11.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2 \frac{SA(w)}{STM}}{2 \frac{SA(w)}{STM} + \frac{HA(w)}{HTM}} \quad (11.2)$$

– Phụ thuộc vào các yếu tố b-d, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{STM(w)}{STM}}{\frac{STM(w)}{STM} + \frac{HTM(w)}{HTM}} \quad (12)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{STM(w)}{STM}}{\frac{STM(w)}{STM} + 2 \frac{HTM(w)}{HTM}} \quad (12.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2 \frac{STM(w)}{STM}}{2 \frac{STM(w)}{STM} + \frac{HTM(w)}{HTM}} \quad (12.2)$$

– Phụ thuộc vào các yếu tố c-d, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STM(w)}}{\frac{SA(w)}{STM(w)} + \frac{HA(w)}{HTM(w)}} \quad (13)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)}{STM(w)}}{\frac{SA(w)}{STM(w)} + 2\frac{HA(w)}{HTM(w)}} \quad (13.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2\frac{SA(w)}{STM(w)}}{2\frac{SA(w)}{STM(w)} + \frac{HA(w)}{HTM(w)}} \quad (13.2)$$

– Phụ thuộc vào các yếu tố a-b-d, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM}}{\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM} + \frac{HA(w)HTM(w)}{HTM \quad HTM}} \quad (14)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM}}{\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM} + 2\frac{HA(w)HTM(w)}{HTM \quad HTM}} \quad (14.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM}}{2\frac{SA(w)STM(w)}{STM \quad STM} + \frac{HA(w)HTM(w)}{HTM \quad HTM}} \quad (14.2)$$

– Phụ thuộc vào các yếu tố a-b-c-d, ta được các công thức:

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM}}{\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM} + \frac{HA(w)HTM(w)}{HTA \quad HTM}} \quad (15)$$

$$P(S|w) = \frac{\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM}}{\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM} + 2\frac{HA(w)HTM(w)}{HTA \quad HTM}} \quad (15.1)$$

$$P(S|w) = \frac{2\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM}}{2\frac{SA(w)STM(w)}{STA \quad STM} + \frac{HA(w)HTM(w)}{HTA \quad HTM}} \quad (15.2)$$

Nếu sử dụng nhóm các công thức 10-12-13-14-15 thì vấn đề trong nhận xét (2) có thể được khắc phục.

4. THỬ NGHIỆM

Tập dữ liệu mẫu CSDMC2010_SPAM [11]. Tập dữ liệu huấn luyện bao gồm SpamTrain và HamTrain.

4.1. Thử nghiệm 1

HamTrain có 2808 thư hợp lệ, SpamTrain có 1238 thư rác. Tập dữ liệu test bao gồm HamTest (141 thư hợp lệ) SpamTest (140 thư rác). Các bảng 2, 3 và 4 thống kê độ chính

xác phân loại Spam thông qua thống kê chỉ số Precision trong các trường hợp: không có hệ số "2", hệ số "2" để tăng cường nhận thư hợp lệ, hệ số "2" để tăng cường nhận thư rác.

Bảng 2. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp không có hệ số 2*

Công thức	SPAM	HAM
10.1	62.857	96.454
11.1	98.571	92.908
12.1	98.571	90.780
13.1	90.714	94.326
14.1	98.571	85.816
15.1	94.286	92.199

Từ bảng 2, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 11.1, 12.1 và 14.1 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.1 là cao nhất.

Bảng 3. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư hợp lệ*

Công thức	SPAM	HAM
10.2	83.571	96.454
11.2	89.286	96.454
12.2	87.143	95.035
13.2	82.143	95.745
14.2	93.571	92.908
15.2	80.714	93.617

Từ bảng 3, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 14.2 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.2 và 11.2 là cao nhất.

Bảng 4. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư rác*

Công thức	SPAM	HAM
10.3	97.857	92.908
11.3	99.286	82.270
12.3	99.286	80.142
13.3	98.571	85.816
14.3	99.286	79.433
15.3	98.571	86.525

Từ bảng 4, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 11.3, 12.3 và 14.3 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.3 là cao nhất.

4.2. Thử nghiệm 2

HamTrain có 2535 thư hợp lệ, SpamTrain có 1014 thư rác. Tập dữ liệu test bao gồm HamTest (414 thư hợp lệ) SpamTest (364 thư rác). Các bảng 5, 6 và 7 thống kê độ chính xác phân loại Spam thông qua thống kê chỉ số Precision trong các trường hợp: không có hệ số "2", hệ số "2" để tăng cường nhận thư hợp lệ, hệ số "2" để tăng cường nhận thư rác.

Bảng 5. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp không có hệ số 2*

Công thức	SPAM	HAM
10.1	59.066	98.068
11.1	98.077	95.652
12.1	98.626	93.720
13.1	89.835	96.135
14.1	98.901	87.923
15.1	93.132	93.237

Từ bảng 5, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 14.1 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.1 là cao nhất.

Bảng 6. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư hợp lệ*

Công thức	SPAM	HAM
10.2	78.571	97.826
11.2	86.813	98.068
12.2	88.736	96.618
13.2	77.747	97.826
14.2	90.659	93.720
15.2	77.473	94.686

Từ bảng 6, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 14.2 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 11.2 là cao nhất.

Bảng 7. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư rác*

Công thức	SPAM	HAM
10.3	95.879	94.686
11.3	99.725	84.541
12.3	99.725	82.126
13.3	98.626	87.923
14.3	99.725	81.159
15.3	98.077	89.855

Từ bảng 7, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 11.3, 12.3 và 14.3 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.3 là cao nhất.

4.3. Thử nghiệm 3

HamTrain có 2448 thư hợp lệ, SpamTrain có 986 thư rác. Tập dữ liệu test bao gồm HamTest (501 thư hợp lệ) SpamTest (392 thư rác). Các bảng 8, 9 và 10 thống kê độ chính xác phân loại Spam thông qua thống kê chỉ số Precision trong các trường hợp: không có hệ số "2", hệ số "2" để tăng cường nhận thư hợp lệ, hệ số "2" để tăng cường nhận thư rác.

Bảng 8. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp không có hệ số 2*

Công thức	SPAM	HAM
10.1	58.929	98.204
11.1	98.469	95.808
12.1	98.469	93.613
13.1	90.051	96.407
14.1	98.980	88.224
15.1	91.837	92.814

Từ bảng 8, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 14.1 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.1 là cao nhất.

Bảng 9. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư hợp lệ*

Công thức	SPAM	HAM
10.2	78.571	98.004
11.2	85.459	98.204
12.2	87.500	96.607
13.2	76.786	98.004
14.2	90.051	93.413
15.2	75.765	94.810

Từ bảng 9, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 14.2 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 11.2 là cao nhất.

Bảng 10. *Thống kê độ chính xác phân loại tập thư rác và thư hợp lệ trong trường hợp hệ số 2 để tăng nhận thư rác*

Công thức	SPAM	HAM
10.3	95.918	94.611
11.3	99.745	85.030
12.3	99.745	82.236
13.3	98.724	87.625
14.3	99.745	82.036
15.3	97.959	89.820

Từ bảng 10, chúng ta thấy độ chính xác nhận SPAM của các công thức 11.3, 12.3 và 14.3 là cao nhất. Trong khi đó, độ chính xác nhận HAM của các công thức 10.3 là cao nhất.

5. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã thảo luận, phân tích về kĩ thuật lọc Spam sử dụng Bayes. Từ đó, đưa ra một số cách tính xác suất là Spam của token. Thử nghiệm cho thấy đó

là những phương án thay tốt cho bộ lọc Spam dựa trên Bayes trong những trường hợp khác nhau.

Thông qua nhận xét trong các thử nghiệm, chúng tôi thấy rằng:

– Trong trường hợp không có hệ số "2", các công thức 11.1, 12.1 và 14.1 cho độ chính xác nhận SPAM cao nhất; công thức 10.1 cho độ chính xác nhận HAM cao nhất.

– Trong trường hợp hệ số "2" để tăng cường nhận hợp lệ, các công thức 14.2 cho độ chính xác nhận SPAM cao nhất; công thức 11.2 cho độ chính xác nhận HAM cao nhất.

– Trong trường hợp hệ số "2" để tăng cường nhận rác, các công thức 11.3, 12.3 và 14.3 cho độ chính xác nhận SPAM cao nhất; công thức 10.3 cho độ chính xác nhận HAM cao nhất.

Trong nghiên cứu tiếp theo, chúng tôi dự kiến đề xuất công thức tính xác suất là Spam mới cho mỗi token sử dụng logic mờ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bùi Ngọc Lan (2006), *Lọc thư rác dựa trên tính chất của mạng xã hội*, Khóa luận Tốt nghiệp Đại học, Trường Đại học Công nghệ, Đại học Quốc gia Hà Nội.
2. Từ Minh Phương, Phạm Văn Cường, Nguyễn Duy Phương, Hoàng Trọng Huy (2006), Báo cáo đề tài "*Nghiên cứu xây dựng hệ thống lọc thư rác có khả năng lọc thư rác tiếng Anh và tiếng Việt*", Học viện Bưu chính Viễn thông.
3. Konstantin Tretyakov, "Machine Learning Techniques in Spam Filtering, Data Mining Problem-oriented Seminar", *MTAT.03.177, May 2004, pp.60-79*.
4. Yun-Nung Chen, Che-An Lu, Chao-Yu Huang, "Anti-Spam Filter Based on Naïve Bayes, SVM, and KNN model", *AI TERM PROJECT GROUP 14*.
5. Shahar Yifrah và Guy Lev, "Machine Learning Final Project Spam Email Filtering", *ML Project, 2013*.
6. Vangelis Metsis, IonAndroutsopoulos và GeorgiosPaliouras, "Spam Filtering with Naïve Bayes–Which Naïve Bayes?", *CEAS2006-ThirdConferenceonEmailandAnti-Spam, July27-28,2006, MountainView,CaliforniaUSA*.
7. Johan Hovol, "Naïve Bayes Spam filtering using Word-Position-Based attributes", *Department of Computer Science Lund University*.
8. O'Reilly.SpamAssassin.Jul.2004.eBook-DDU. Published by O'Reilly Media, Inc., 1005 Gravenstein Highway North, Sebastopol, CA 95472.
9. Tianhao Sun, *Spam Filtering based on Naïve Bayes Classification, May 2009*.
10. <http://www.paulgraham.com/spam.html>
11. <http://csmine.org/index.php/spam-email-datasets-.html>
12. <http://kaspersky.nts.com.vn/>
13. <http://antoanthongtin.vn/>

ASSESSING SOME METHODS OF CALCULATING SPAM PROBABILITY OF TOKENS APPLIED IN SPAM EMAIL CLASSIFICATION

Abstract: Spam email classification is interested in researching for long time in the world with many different approaches. Spam classification functions are intergrated in Mail Server or Mail Client. Currently, the traditional methods still have certain weaknesses, so statistical machine learning classification method based on the content has been proven more effective. Wherein, Bayes-based spam classification has some advantages such as simplicity, ease of use and short execution time, so it is implemented widely in Mail Server or Mail Client systems. This paper evaluates some methods of calculating spam probability of Tokens by using application of spam email classification.

Keywords: Spam, spam email classification Bayes, statistical machine learning, Tokens, Spam, Ham.

SỬ DỤNG TÍNH NGUYÊN TỐ ĐỂ GIẢI BÀI TOÁN CỰC TRỊ TRÊN TẬP ĐỐI SỐ NGUYÊN

Hoàng Ngọc Tuyền¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Bài viết đề cập đến một số bài toán cực trị (Tìm giá trị lớn nhất hay giá trị nhỏ nhất của hàm số trên tập hợp các đối số nguyên). Các bài toán minh họa mang màu sắc số học bởi nó xuất phát từ các vấn đề của số học như tính chia hết, tính chẵn lẻ, tính nguyên tố,...

Lớp bài toán cực trị này, vì lý do trên nó mang những nét đặc thù riêng với cách giải bằng cách vận dụng các kiến thức số học, trên cơ sở tuân thủ những nguyên lý cơ bản của Lý thuyết cực trị.

Từ khóa: Nguyên lý phân rã, Giá trị lớn nhất, Giá trị nhỏ nhất.

1. MỞ ĐẦU

Thông thường, để giải bài toán cực trị ta thường sử dụng công cụ của giải tích Toán học như đạo hàm, tích phân. Tuy nhiên các đối tượng đề cập nhận các giá trị rời rạc, do vậy nói chung các phương pháp giải truyền thống không áp dụng được.

Vì lẽ đó, đứng về góc độ của bài toán cực trị dĩ nhiên trong khi giải ngoài việc tuân thủ các nguyên lý cơ bản của Lý thuyết cực trị, ta sử dụng công cụ chính là phương pháp đặc trưng của số học như: lý thuyết đồng dư, tính nguyên tố,... cũng như áp dụng các định lý quan trọng của Lý thuyết số như: định lý Euler, định lý Fecma,...

2. MỘT SỐ KIẾN THỨC CHUẨN BỊ

2.1. Tính chia hết trong tập hợp số nguyên

2.1.1. Định nghĩa

Với hai số nguyên a và b , ta nói a chia hết cho b (hay a là bội của b , hay b là ước của a), nếu tồn tại số nguyên c sao cho $a = b.c$

¹ Nhận bài ngày 10.3.2017; chỉnh sửa, gửi phản biện và duyệt đăng ngày 20.3.2017
Liên hệ tác giả: Hoàng Ngọc Tuyền; Email: hntuyen@daihocthudo.edu.vn

Khi đó, ta ký hiệu là $a : b$

Ngược lại, ta nói a không chia hết cho b

2.1.2. Một số tính chất cơ bản của tính chia hết

(i) Nếu a, b nguyên dương mà $a : b$ thì $a \geq b$

(ii) Nếu $a_i : b, \forall i = \overline{1, n}$ thì $(a_1 + a_2 + \dots + a_n) : b$

(iii) Với hai số nguyên không âm bất kỳ a và b , trong đó $b \neq 0$, luôn tồn tại cặp số nguyên duy nhất q và r sao cho: $a = bq + r$. Trong đó $0 \leq r < b$ (Hay r nhận một trong các giá trị $0; 1; 2; \dots; b-1$)

2.2. Số nguyên tố

2.2.1. Định lý cơ bản về số nguyên tố

Định lý: Cho n là số nguyên dương lớn hơn 1. Khi đó n luôn biểu diễn một cách duy nhất (hiểu theo nghĩa không tính đến việc sắp xếp các nhân tử):

$$n = p_1^{\alpha_1} p_2^{\alpha_2} \dots p_k^{\alpha_k}$$

Trong đó $\alpha_i (i = \overline{1, k})$ là các số tự nhiên và p_i là các số nguyên tố thỏa mãn:

$$1 < p_1 < \dots < p_k \text{ (Dạng khai triển chính tắc của số nguyên dương } n)$$

2.2.2. Định lý nhỏ Fermat

Định lý: Nếu p nguyên tố và a là số nguyên tùy ý, thì $(a^p - a) : p$

Nói riêng: khi $(a, p) = 1$ thì $(a^{p-1} - 1) : p$

2.2.3. Định lý (Mối liên hệ giữa tính chia hết và số nguyên tố)

Định lý: Giả sử a và b là số nguyên dương, p là số nguyên tố.

Nếu $ab : p$ thì hoặc $a : p$ hoặc $b : p$

2.3. Đồng dư

2.3.1. Một số tính chất cơ bản của đồng dư

(i) Nếu $a \equiv b \pmod{n}$ và $c \equiv d \pmod{n}$ thì $a + c \equiv b + d \pmod{n}$ và $ac \equiv bd \pmod{n}$

(ii) Nếu p nguyên tố và $ab \equiv 0 \pmod{p}$ thì $a \equiv 0 \pmod{p}$ hay $b \equiv 0 \pmod{p}$

2.3.2. Định lý Euler

Định lý: Nếu m là số nguyên dương và $(a, m) = 1$ thì $a^{\phi(m)} \equiv 1 \pmod{m}$

Trong đó $\phi(m)$ là số các số nguyên dương nhỏ hơn m nguyên tố cùng nhau với m .

($\phi(m)$ được gọi là Phi-hàm σ-le)

2.4. Hàm phần nguyên

2.4.1. Định nghĩa

Với số thực x , ta gọi phần nguyên của x , ký hiệu $[x]$ là số nguyên lớn nhất không vượt quá x .

2.4.2. Các tính chất quan trọng

(i) $[x] = a \Leftrightarrow x = a + d$ trong đó a nguyên và $0 \leq d < 1$

(ii) $[x + y] = x$ thì x nguyên và $0 \leq y < 1$

(iii) $\forall n \in \mathbb{Z} \Rightarrow [n + x] = n + [x]$

(iv) $[x + y] \geq [x] + [y]$

(v) $\forall n \in \mathbb{N}^* \Rightarrow n[x] \leq [nx]$

(vi) $\forall n, q \in \mathbb{N}, q \neq 0 \Rightarrow q \left[\frac{n}{q} \right] \leq n$

(vii) $\left[x + \frac{1}{2} \right] = [2x] - [x]$

2.5. Giá trị lớn nhất và nhỏ nhất của hàm số

2.5.1. Định nghĩa

Cho hàm số $f(x)$ xác định trên miền D ($x \in D$)

Ta nói M là giá trị lớn nhất của hàm số $f(x)$ trên miền D , và ký hiệu:

$$M = \max_{x \in D} f(x) \text{ nếu } \begin{cases} f(x) \leq M; \forall x \in D \\ \exists x_0 \in D; f(x_0) = M \end{cases}$$

Ta cũng nói m là giá trị nhỏ nhất của hàm số $f(x)$ trên miền D , và ký hiệu:

$$m = \min_{x \in D} f(x) \text{ nếu } \begin{cases} f(x) \geq m; \forall x \in D \\ \exists x_0 \in D; f(x_0) = m \end{cases}$$

2.5.2 Nguyên lý phân rã

Giả sử hàm số $f(x)$ xác định trên miền D và $D = D_1 \cup D_2$. Giả thiết tồn tại:

$$\max_{x \in D_1} f(x), \max_{x \in D_2} f(x), \min_{x \in D_1} f(x), \min_{x \in D_2} f(x).$$

Khi đó, ta có:

$$\max_{x \in D} f(x) = \max \{ \max_{x \in D_1} f(x), \max_{x \in D_2} f(x) \}$$

$$\min_{x \in D} f(x) = \min \{ \min_{x \in D_1} f(x), \min_{x \in D_2} f(x) \}$$

3. MỘT SỐ BÀI TOÁN MINH HỌA

Như đã trình bày, bài viết đề cập đến một lớp các bài toán cực trị của hàm số trên tập các đối số nguyên có các tính chất số học nào đó. Cũng xin nhắc lại, các bài toán này, nhìn chung không thể sử dụng phương pháp truyền thống của giải tích vì hai lý do sau:

- Một là bài toán xét trên tập rời rạc của biến số (vì lẽ đó, không sử dụng được các tính chất đẹp đẽ của tính liên tục, tính khả vi của hàm số để giải quyết bài toán)
- Hai là trừ một số trường hợp, đôi khi hàm mục tiêu (tức là hàm cần lấy giá trị lớn nhất hay nhỏ nhất) không cho dưới dạng tường minh thông thường, nó được diễn đạt dựa vào một tính chất nào đó của số học.

Cho nên, công cụ chính để giải các bài toán cực trị này là dựa vào các kết quả quen thuộc của số học như lý thuyết đồng dư, lý thuyết về số nguyên tố cũng như sử dụng các định lý kinh điển của số học như định lý Fecma, định lý Euler,...

Bài toán 1: Cho n là số nguyên dương, ký hiệu $\pi(n)$ là số các số nguyên tố không vượt quá n . Tìm giá trị lớn nhất của hàm số $\varphi(n) = \pi(n) - \frac{n}{2}$.

Phân tích và cách giải:

Từ định nghĩa hàm $\varphi(n)$, bằng cách tính trực tiếp, ta có:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$\varphi(n)$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	-1	$-\frac{1}{2}$	-1	$-\frac{1}{2}$

$$\Rightarrow \max_{1 \leq n \leq 13} \varphi(n) = \frac{1}{2} \quad (1)$$

Xét với $n \geq 15$: Trong dãy số $\{1, 2, \dots, n-1, n\}$ các số chẵn $\{2, 4, \dots, 2\left[\frac{n}{2}\right]\}$ là hợp số và số các số đó là $\left[\frac{n}{2}\right] - 1$. (Ký hiệu $[x]$ là phần nguyên của số x)

Ngoài ra, cũng trong dãy số trên, ba số lẻ $\{1, 9, 15\}$ không nguyên tố

Như vậy, khi $n \geq 15$ theo định nghĩa $\pi(n)$ và lập luận trên ta có:

$$\pi(n) \leq n - \left(\left[\frac{n}{2}\right] - 1 + 3\right)$$

Từ đó suy ra:

$$\pi(n) \leq n - \left[\frac{n}{2}\right] - 2 \quad (2)$$

Vì $\left[\frac{n}{2}\right] > \frac{n}{2} - 1$ nên ta có

$$n - \left[\frac{n}{2}\right] - 2 < n - \frac{n}{2} + 1 - 2 = \frac{n}{2} - 1 \quad (3)$$

Từ (2) và (3) suy ra:

$$\forall n \geq 15: \varphi(n) = \pi(n) - \frac{n}{2} < -1 \quad (4)$$

Mặt khác:

$$\varphi(14) = \pi(14) - 7 = -1 \Rightarrow \max_{n \geq 14} \varphi(n) = -1 \quad (5)$$

Theo nguyên lý phân rã và từ (1), (4) và (5), ta có:

$$\max \varphi(n) = \max \left\{ \max_{1 \leq n \leq 13} \varphi(n), \max_{n \geq 14} \varphi(n) \right\} = \max \left\{ \frac{1}{2}, -1 \right\} = \frac{1}{2}$$

Bài toán 2: Cho 3 số nguyên tố khác nhau a, b, c , sao cho $a + b + c, a + b - c, a - b + c, b + c - a$ cũng là các số nguyên tố. Biết rằng, hai trong ba số a, b, c có tổng bằng 800. Gọi d là khoảng cách giữa số lớn nhất và số nhỏ nhất trong 7 số đã cho. Tìm giá trị lớn nhất của d .

Phân tích và cách giải:

Không mất tính tổng quát có thể giả sử:

$$a + b = 800 \text{ và } a < b \text{ (do vai trò bình đẳng giữa } a, b, c)$$

Nếu $c \geq 800$ thì $a + b - c \leq 0$. Điều này mâu thuẫn vì $a + b - c$ là số nguyên tố

Vậy $a + b - c \geq 2$ và $c < 800$

Hiển nhiên số lớn nhất trong 7 số trên là $a + b + c$

Số nguyên tố lớn nhất và nhỏ hơn 800 là 797

Với giả sử như trên: $a + b + c = 800 + c \leq 800 + 797$ (Do $c < 800$ và c nguyên tố)

Vậy nên $a + b + c \leq 1597$

Ngoài ra, a, b, c là các số lẻ. Thật vậy, nếu một trong 3 số là số chẵn thì số đó là 2.

Theo đầu bài thì 2 trong 3 số a, b, c có tổng bằng 800 nên sẽ có nhiều hơn 1 số chẵn (Điều này là không thể vì số nguyên tố chẵn duy nhất là 2).

Vậy a, b, c lẻ và do đó $a + b + c, a + b - c, a - b + c, b + c - a$ cũng lẻ. Do đó số bé nhất lớn hơn hoặc bằng 3. Và $d \leq 1597 - 3 = 1594$

Mặt khác, khi $a, b, c, a + b + c, a + b - c, a - b + c, b + c - a$ nhận các giá trị trong dãy: 13, 787, 797, 1597, 3, 23, 1571 thì $d = 1597 - 3 = 1594$

Vậy $d_{\max} = 1594$

Bài toán 3: Tìm giá trị nhỏ nhất của số nguyên dương n sao cho $n^2 + n + 1$ phân tích được thành tích của 4 số nguyên tố.

Phân tích và cách giải:

Giả sử $n^2 + n + 1 = p_1 \cdot p_2 \cdot p_3 \cdot p_4$; p_i nguyên tố và $p_1 \leq p_2 \leq p_3 \leq p_4$

Do $n^2 + n + 1 = n(n+1) + 1$ ta suy ra $n^2 + n + 1$ là số lẻ (do $n(n+1)$ chẵn) và các số p_1, p_2, p_3, p_4 cũng lẻ. Vậy $p_i \geq 3$.

$n(n+1)$ có thể tận cùng là 0, 2, 6 nên $n^2 + n + 1$ có thể tận cùng là 1, 3, 7

Như vậy $n^2 + n + 1$ không chia hết cho 5 suy ra p_i không chia hết cho 5

+ Nếu $p_1 = 3 \Rightarrow n^2 + n + 1 = 3p_2p_3p_4 \Rightarrow (n^2 + n + 1):3 \Rightarrow n = 3k + 1 (k \in \mathbb{N})$

Thật vậy, nếu $n = 3k \Rightarrow n^2 + n + 1 = 9k^2 + 3k + 1$ không chia hết cho 3

Nếu $n = 3k + 2 \Rightarrow n^2 + n + 1 = 9k^2 + 15k + 7$ không chia hết cho 3

Vậy $n = 3k + 1$ và $n^2 + n + 1 = (3k + 1)^2 + (3k + 1) + 1$

$$\Rightarrow (3k + 1)^2 + (3k + 1) + 1 = 3p_2p_3p_4$$

$$\Rightarrow 3k^2 + 3k + 1 = p_2p_3p_4 \Rightarrow p_2p_3p_4 \text{ không chia hết cho } 3$$

$$\Rightarrow p_2 \text{ không chia hết cho } 3$$

Mặt khác, p_2 không chia hết cho 5 $\Rightarrow p_2 > 5$

+ Nếu $p_2 = 7$ thì: $3k^2 + 3k + 1 = 7p_3p_4 \Rightarrow (3k^2 + 3k + 1):7$

$$\Rightarrow \begin{cases} k = 7t + 1 \\ k = 7t + 5 \end{cases}$$

Do ta tìm n bé nhất nên chọn $k = 7t + 1$. Khi đó ta có $21t^2 + 9t + 1 = p_3p_4$

Chọn $p_3 = 7$ ta có

$$21t^2 + 9t + 1 = 7p_4$$

$$\Rightarrow (21t^2 + 9t + 1):7 \Rightarrow t = 7m + 3, m \in \mathbb{N}$$

Từ đó, ta được

$$n = 3k + 1 = 3(7t + 1) + 1 = 3[7(7m + 3)] + 4 = 147m + 67$$

Để n nhỏ nhất, ta chọn $m = 0$. Khi đó $n = 67$ và $n^2 + n + 1 = 67^2 + 67 + 1 = 3.7.7.31$

Vậy $n = 67$ là số nguyên dương nhỏ nhất thỏa mãn đầu bài.

Bài toán 4: Tìm giá trị nhỏ nhất của số nguyên dương n thỏa mãn:

$$\sum_{i=1}^n p_i^{2000} : 120, \text{ với } p_1, p_2, \dots, p_n \text{ nguyên tố lớn hơn } 10$$

Phân tích và cách giải:

Do 3 nguyên tố nên theo Định lý Fermat ta có:

$$\forall i = \overline{1, n} \text{ mà } (p_i^3 - p_i) \equiv 0 \pmod{3} \text{ thì } p_i(p_i^2 - 1) : 3$$

Vì p_i nguyên tố lớn hơn 10 nên

$$(p_i, 3) = 1 \Rightarrow (p_i^2 - 1) : 3 \Rightarrow p_i^2 \equiv 1 \pmod{3}; \forall i = \overline{1, n} \quad (1)$$

Do 5 nguyên tố và lập luận tương tự, ta cũng có:

$$p_i^2 \equiv 1 \pmod{5}; \forall i = \overline{1, n} \quad (2)$$

Vì p_i nguyên tố lớn hơn 10 nên p_i lẻ. Do đó $p_i \equiv \pm 1 \pmod{8}$ hoặc $p_i \equiv \pm 3 \pmod{8}$

$$\Rightarrow p_i^2 \equiv 1 \pmod{8}; \forall i = \overline{1, n} \quad (3)$$

Từ (1), (2), (3) suy ra:

$$p_i^{2000} \equiv 1 \pmod{3}; p_i^{2000} \equiv 1 \pmod{5}; p_i^{2000} \equiv 1 \pmod{8}, \forall i = \overline{1, n}$$

Mặt khác, các số 3, 5, 8 đôi một nguyên tố cùng nhau nên:

$$p_i^{2000} \equiv 1 \pmod{3.5.8}, \forall i = \overline{1, n} \Rightarrow \sum_{i=1}^n p_i^{2000} \equiv n \pmod{120} \quad (4)$$

Theo giả thiết:

$$\sum_{i=1}^n p_i^{2000} : 120 \quad (5)$$

Từ (4) và (5) ta kết luận $n : 120$. Lại do $n > 0$ nên $n \geq 120$

Vậy giá trị nhỏ nhất cần tìm là 120.

4. KẾT LUẬN

Bài viết khai thác tính nguyên tố của số nguyên dương để áp dụng vào giải một số bài toán cực trị mang đặc trưng số học (khi đối số của nó hoặc là số nguyên tố, hoặc là số nguyên nhưng có một số tính chất nào đó liên quan chặt chẽ với số nguyên tố).

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Hoàng Tụy (2004), *Quy hoạch toán học*, giáo trình cao học (Tài liệu nội bộ Viện Toán học), Hà Nội.
2. Hà Huy Khoái, Phạm Huy Điển (2004), *Số học thuật toán*, Nxb Đại Học Quốc Gia Hà Nội.
3. Hà Huy Khoái (2004), *Số học*, Nxb Giáo dục.

FINDING THE EXTREMA OF A FUNCTION ON INTEGERS BY USING PRIME PROPERTIES

Abstract: *In this paper, we try to find the maxima and minima of functions with integer arguments. Our illustrative examples derived from arithmetic problems involving divisibility rules, parity and properties of primes. Therefore, this class of extremum problems has its own characteristic. Besides the traditional approaches in calculus, these problems can be solved by applying fundamental principles, methods and concepts of calculus and arithmetic knowledge.*

Keywords: *Decomposition principle, extrema, maxima, minima*

THẺ LỆ GỬI BÀI

1. *Tạp chí Khoa học* là ấn phẩm của Trường ĐH Thủ đô Hà Nội, công bố các công trình nghiên cứu và bài viết tổng quan trong nhiều lĩnh vực khoa học. Tạp chí được xuất bản định kì, mỗi số về một lĩnh vực cụ thể: Khoa học Xã hội và Giáo dục; Khoa học Tự nhiên và Công nghệ.
2. Tác giả có thể gửi toàn văn bản thảo bài báo cho Tổng biên tập, Phó Tổng biên tập hoặc biên tập viên theo địa chỉ email ghi ở dưới. Tất cả bản thảo bài báo gửi công bố đều được thẩm định về nội dung khoa học bởi các nhà khoa học chuyên ngành có uy tín. Tạp chí không nhận đăng các bài đã công bố trên các ấn phẩm khác và không trả lại bài nếu không được duyệt đăng. Tác giả bài báo chịu hoàn toàn trách nhiệm về pháp lí đối với nội dung kết quả nghiên cứu được đăng tải.
3. Bố cục bài báo cần được viết theo trình tự sau: *tóm tắt* (nêu ý tưởng và nội dung tóm tắt của bài báo); *mở đầu* (tổng quan tình hình nghiên cứu, tính thời sự của vấn đề, đặt vấn đề); *nội dung* (phương pháp, phương tiện, nội dung nghiên cứu đã thực hiện); *kết luận* (kết quả nghiên cứu, hướng nghiên cứu tiếp theo) và *tài liệu tham khảo*.

Bài báo toàn văn không dài quá 10 trang đánh máy trên khổ giấy A4, phông chữ Times New Roman (Unicode), cỡ chữ (Size) 12 thống nhất cho toàn bài, lề trái 3 cm, lề phải 2 cm, cách trên, cách dưới 2.5 cm, giãn dòng (Multiple) 1.25. Các thuật ngữ khoa học và đơn vị đo lường viết theo quy định hiện hành của Nhà nước; các công thức, hình vẽ cần được viết theo các ký hiệu thông dụng; tên hình vẽ đặt dưới hình, tên bảng, biểu đồ đặt trên bảng. Khuyến khích các bài sử dụng chương trình LaTeX với khoa học tự nhiên, công thức hóa học có thể dùng ACD/Chem Sketch hoặc Science Helper for Word. Bài báo phải có tóm tắt bằng tiếng Việt và tiếng Anh. *Tóm tắt* viết không quá 10 dòng. *Tóm tắt tiếng Việt* đặt sau tiêu đề bài báo và tên tác giả, *tóm tắt tiếng Anh* gồm cả tiêu đề bài báo đặt sau *tài liệu tham khảo*. Các tên nước ngoài được ghi bằng kí tự Latinh. Cuối bài có ghi rõ cơ quan công tác, số điện thoại, địa chỉ email của tác giả.

4. Phần *Tài liệu tham khảo* xếp theo thứ tự xuất hiện trong bài báo và sắp xếp theo mẫu dưới đây:
 1. John Steinbeck (1994), *Chùm nho phẫn nộ* (Phạm Thủy Ba dịch, tập 2), Nxb Hội nhà văn, H., tr.181.
 2. Bloom, Harold (2005), *Bloom's guides: John Steinbeck's The Grapes of Wrath*, New York: Chelsea House, pp.80-81.
 3. W.A Farag, V.H Quintana, G Lambert-Torres (1998), "A Genetic-Based Neuro-Fuzzy Approach to modelling and Control of Dynamical Systems", *IEEE Transactions on neural Networks Volume: 9 Issue: 5*, pp.756-767.

Trung tâm Khoa học Công nghệ - Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Số 98, Dương Quảng Hàm, Cầu Giấy, Hà Nội

Tel: 04.3.767.1409; Fax: 04.3. 833.5426

Email: tapchikhoahoc@daihocthudo.edu.vn