



TRƯỜNG ĐẠI HỌC THỦ ĐÔ HÀ NỘI
HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

TẠP CHÍ KHOA HỌC

SCIENCE JOURNAL OF HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

ISSN 2354-1512

SỐ 8 – KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ

THÁNG 9 – 2016

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 Kỳ
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 ký 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 9/2016*

MỤC LỤC

Trang

1. CÁC MODE DAO ĐỘNG QUANG TRONG DÂY LƯỢNG TỬ TỰ DO 5
Optical modes in a free standing quantum wire
Đặng Trần Chiến, Nguyễn Anh, Nguyễn Sỹ Hải, Tạ Anh Tấn
2. THE INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THE MICROSTRUCTURE AND THE PHASE TRANSITION PROCESS OF THE SiO₂ BULK MODEL 15
Ảnh hưởng của nhiệt độ lên vi cấu trúc và quá trình chuyển pha của mô hình khối SiO₂
Nguyen Chinh Cuong, Nguyen Trong Dung
3. NGHIÊN CỨU MỘT SỐ CHỈ SỐ SINH LÝ HÌNH THÁI VÀ THỂ LỰC CỦA HỌC SINH TRUNG HỌC PHỔ THÔNG DÂN TỘC TÀY, NÙNG HUYỆN BÌNH GIA, TỈNH LẠNG SƠN 24
Researching on morphological and physical indexes of ethnic high school pupils in Binh Gia district, Lang Son province
Đỗ Hồng Cường, Bùi Xuân Linh
4. DỰA TRÊN ĐỒ THỊ CHƯƠNG TRÌNH PHÂN TÍCH TÍNH KHẢ ĐẠT CỦA CHƯƠNG TRÌNH 35
Basing on the graph of program to analyze the availability of the program
Nguyễn Đức Giang, Nguyễn Văn Trãi, Đinh Quang Đạt
5. DIFFUSION OF INTERSTITIAL ATOMS IN INTERSTITIAL ALLOYS FeSi AND FeH WITH BCC STRUCTURE UNDER PRESSURE 48
Nghiên cứu sự khuếch tán của nguyên tử xen kẽ trong các hợp kim xen kẽ Fe-Si và Fe-H với cấu trúc lập phương tâm khối dưới tác dụng của áp suất
Nguyen Quang Học, Bui Duc Tinh, Dinh Quang Vinh, Le Hong Viet
6. ĐỘ ĐO PHỤ THUỘC HÀM XẤP XỈ TRONG CƠ SỞ DỮ LIỆU MÔ HÌNH DẠNG KHỐI 57
Measuring the approximate Functional Dependency on database of cube model
Nguyễn Minh Huy, Nguyễn Năng Hưng, Nguyễn Năng Anh Đức
7. PHÁT HIỆN LUẬT KẾT HỢP LIÊN KẾT CHUỖI THỜI GIAN TỪ CƠ SỞ DỮ LIỆU ĐỊNH LƯỢNG CÓ YẾU TỐ THỜI GIAN 66
Optical modes in a free standing quantum wire
Trương Đức Phương
8. NGHIÊN CỨU TÁCH THUỐC BẢO VỆ THỰC VẬT KHÓ PHÂN HỦY (POP) TỒN DƯ TRONG ĐẤT BẰNG PHƯƠNG PHÁP CHIẾT NƯỚC VỚI PHỤ GIA QH5 82
Researching on separation of Persistent Organic Pollutants (POP) by extracting water and chemical additivies QH5
Nguyễn Quang Hợp, Nguyễn Văn Bằng
9. PHÂN TÍCH, ĐÁNH GIÁ HÀM LƯỢNG CHÌ VÀ MANGAN TRONG NƯỚC GIẾNG SINH HOẠT TRÊN ĐỊA BÀN XÃ PHÚC TRẠCH, HUYỆN BỐ TRẠCH, TỈNH QUẢNG BÌNH 89
Analysing and evaluating the content of lead and maganese in drinking-water in Phuc Trach commune, Bo Trach district, Quang Binh province
Nguyễn Mậu Thành

10. $\bar{f}f \rightarrow \phi\phi$ AND $\bar{f}f \rightarrow \phi h$ COLLISIONS IN THE RANDALL-SUNDRUM MODEL 97
Quá trình va chạm $\bar{f}f \rightarrow \phi\phi$ và $\bar{f}f \rightarrow \phi h$ trong mô hình Randall-Sundrum
Dao Thi Le Thuy, Le Nhu Thuc, Bui Thi Ha Giang, Nguyen Thi Hau, Nguyen Dinh Quang, Nguyen Van Minh
11. MỘT TIẾP CẬN ĐÁNH GIÁ ĐỘ TRÙNG LẶP VĂN BẢN SỬ DỤNG TRỌNG SỐ MỜ 105
An approach to assess duplication level of text using fuzzy weight
Đỗ Nam Tiến, Khiếu Văn Bằng, Nguyễn Tu Trung, Trần Thành Trung, Nguyễn Huy Đức
12. TÍNH DUY NHẤT NGHIỆM β – NHỚT CỦA PHƯƠNG TRÌNH HAMILTON-JACOBI TRONG KHÔNG GIAN BANACH 115
The uniqueness of β – viscosity solutions of hamilton-jacobi equations in banach spaces
Phan Trọng Tiến
13. SỰ MÃN CẢM CỦA CÂY LÚA SAU KHI XỬ LÝ LẶP LẠI LIÊN TIẾP QUA BA THẾ HỆ BẰNG TÁC NHÂN GÂY ĐỘT BIẾN - TIA γ (Nguồn Co^{60}) 125
The susceptibility of rice after tackled consecutive repeatedly pass three generations by evidence mutagenic agent - γ ray (Co^{60})
Nguyễn Như Toản, Hoàng Quang Minh
14. NGHIÊN CỨU MỘT SỐ VẬT LIỆU TỪ NANO DỰA TRÊN GRAPHENE 132
Study on nano Graphene-based magnetic materials
Nguyễn Anh Tuấn, Lưu Thị Hậu, Nguyễn Văn Thành
15. QUINTIC B-SPLINE COLLOCATION METHOD FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE GENERALIZED BENJAMIN-BONA-MAHONY-BURGERS EQUATION..... 144
Phương pháp Collocation với cơ sở B-Spline bậc 5 giải phương trình Generalized Benjamin-Bona-Mahony-Burgers
Nguyen Van Tuan, Nguyen Duc Thuyet
16. MẠNG QUAN HỆ KHOẢNG THỜI GIAN KHẢ NĂNG VÀ ỨNG DỤNG VÀO VẤN ĐỀ CHẨN ĐOÁN 152
The possibility temporal intervals network and it's application in diagnosis
Hà Đặng Cao Tùng
17. DECAYS OF HIGGS IN RANDALL - SUNDRUM MODEL..... 164
Quá trình phân rã Higgs trong mô hình Randall - Sundrum
Dang Van Soa, Dao Thi Le Thuy, Bui Thi Ha Giang

CÁC MODE DAO ĐỘNG QUANG TRONG DÂY LƯỢNG TỬ TỰ DO

Đặng Trần Chiến^{1(a)}, Nguyễn Anh¹, Nguyễn Sỹ Hải¹, Tạ Anh Tấn²

¹Trường Đại học Tài nguyên và Môi trường Hà Nội

²Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Chúng tôi áp dụng mô hình liên tục tại biên vật liệu để mô tả các phonon quang dọc (LO) trong dây lượng tử tự do. Sự giam giữ các mode dao động quang trong dây lượng tử chế tạo bằng vật liệu bán dẫn phân cực được mô phỏng bằng lý thuyết lai cặp ba giữa các mode quang dọc (LO), quang ngang (TO), và dao động bề mặt (IP). Trong công trình này chúng tôi tập trung miêu tả các mode LO, TO, IP một cách riêng lẻ có sử dụng hai điều kiện biên cơ và điện từ.

Từ khoá: LO, TO, IP, điều kiện biên cơ điện từ.

1. MỞ ĐẦU

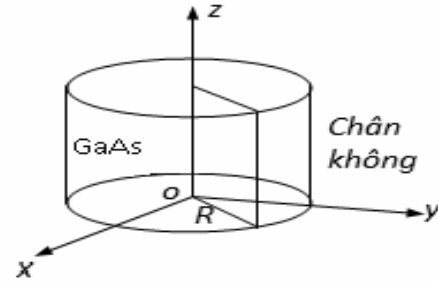
Một trong các lí do làm cho cấu trúc nanô được đặc biệt quan tâm là tính chất điện tử và dao động của chúng bị biến dạng do chúng trở thành thấp chiều và đối xứng thấp. Hệ chuẩn một chiều (quasi-one-dimesional) được chú ý vì chúng cho hàng loạt hiện tượng vật lí hấp dẫn. Khi áp dụng trong các thiết bị vi điện tử thì sự vận chuyển hạt tải của chúng được đặc biệt chú ý. Kể từ khi Sakaki [3] tiên đoán về sự tăng cao của độ linh động do sự tán xạ không tinh khiết ở xa gây nên, tương tác của electron với phonon quang dọc (LO) đã được nhiều tác giả nghiên cứu và cho rằng các phonon là phonon khối và những hiệu ứng giam giữ của phonon được bỏ qua. Điều này làm cho vấn đề trở nên đơn giản. Trong hệ hai chiều tương ứng (ví dụ giếng lượng tử GaAs/Al_xGa_{1-x}As), hàng loạt các nghiên cứu chỉ ra rằng hiệu ứng giam giữ phonon tạo ra sự thay đổi quan trọng trong việc vận chuyển các hạt tải [6, 7].

Trong bài báo này, chúng tôi quan tâm đến sự giam nhốt của các mode quang trong dây lượng tử. Vấn đề này cũng đã được nhiều nhà vật lí lí thuyết quan tâm nghiên cứu như: công trình [4] nghiên cứu các mode quang dọc và chỉ rõ được tán sắc của chúng và tính tốc

^(a) Nhận bài ngày 05.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Đặng Trần Chiến; Email: dtchien@hunre.edu.vn

độ chuyển mức của electron đối với dây free-standing cũng như dây có môi trường ngoài bao quanh. Tuy nhiên cho đến nay trong hệ chuẩn một chiều, hầu như các nghiên cứu vẫn tập trung nhiều vào tác động của các phonon quang bị giam giữ lên tính chất vận chuyển của electron trong dây mà bỏ qua tác dụng do sự giam giữ của các mode dao động quang ngang (TO) cũng như ảnh hưởng của lượng tử ánh sáng khi liên kết với các mode TO.

Mô hình nghiên cứu là một sợi GaAs được đặt tự do (môi trường vật liệu thứ 2 là chân không, (hình 1).



Hình 1. Mô hình nghiên cứu

2. CÁC MODE DAO ĐỘNG QUANG TRONG DÂY LƯỢNG TỬ

Áp dụng lí thuyết liên tục cho bán dẫn khối và các điều kiện liên tục tại biên để giải bài toán cho một sợi dây tự do (free standing wires) có bán kính R_0 và chiều dài L . Như vậy điều kiện biên áp dụng ở đây là sự tiến tới $\mathbf{0}$ của mọi dịch chuyển tại biên. Bài toán sợi dây hình trụ có chiều dài L và bán kính R_0 được sử dụng hệ tọa độ trụ do tính chất đối xứng của dây (hình 1). Chọn trục z hướng theo chiều dài của dây. Các biểu thức div, rot và toán tử laplaxien được viết như sau:

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \mathbf{u} \right) + r \frac{\partial^2}{\partial z^2} \mathbf{u} \right] \quad (1)$$

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{u}] = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_z^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial z} \left(r \mathbf{u}_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z) \right) \right] \cdot \vec{e}_r + \left[\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}_r^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{u}_z^{(L)}(r, \varphi, z) \right] \cdot \vec{e}_\varphi \\ + \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r \mathbf{u}_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z) \right) - \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_r^{(L)}(r, \varphi, z) \right] \cdot \vec{e}_z = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}^{(p)}) = \frac{1}{r} \mathbf{u}_r(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{u}_r(r, \varphi, z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_\varphi(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}_z(r, \varphi, z) \quad (3)$$

► Các mode quang dọc (LO mode)

Để tìm phương trình cho độ dịch chuyển của mode LO trong dây thì sử dụng (1) ta được:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mathbf{k}_L^2 \right) \mathbf{u}^L = 0 \quad (4)$$

Nghiệm của (4) được tìm dưới dạng:

$$\mathbf{u}^{(L)}(r, \varphi, z) = \mathbf{A} \mathbf{u}^{(L)}(r) \cdot e^{is\varphi} \cdot e^{iq_z z} \quad (5)$$

Thay (5) vào phương trình (4) được:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) \mathbf{A} \mathbf{u}^{(L)}(r) \cdot e^{is\varphi} \cdot e^{iq_z z} = 0 \quad (6)$$

Có thể viết lại:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{u}^{(L)}(r) - \frac{m^2}{r^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) - q_z^2 \mathbf{u}^{(L)}(r) + \mathbf{k}_L^2 \mathbf{u}^{(L)}(r) = 0 \quad (6a)$$

Phương trình (6a) là phương trình vi phân chỉ với một biến r cho nên ta có thể viết lại chúng như sau:

$$\frac{d^2}{dr^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \left(-\frac{m^2}{r^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) - \mathbf{q}_z^2 \mathbf{u}^{(L)}(r) + \mathbf{k}_L^2 \right) \mathbf{u}^{(L)}(r) = 0 \quad (7)$$

Đặt:

$$\left(\mathbf{q}_{sp}^L \right)^2 = \mathbf{k}_L^2 - \mathbf{q}_z^2 = (\omega_L^2 - \omega^2) \beta^{-2} - \mathbf{q}_z^2 \quad (8)$$

Ta được:

$$\frac{d^2}{dr^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \left(\left(\mathbf{q}_{sp}^L \right)^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) \mathbf{u}^{(L)}(r) = 0 \quad (9)$$

Đưa vào biến số mới $\chi_{s,p}^L = \mathbf{q}_{s,p}^L r$ sau đó đặt chúng vào phương trình (9) sau khi biến đổi, thu được phương trình sau:

$$\frac{d^2}{d\chi_{s,p}^2} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \frac{1}{\chi_{s,p}} \frac{d}{d\chi_{s,p}} \mathbf{u}^{(L)}(r) + \left(1 - \frac{m^2}{\chi_{s,p}^2} \right) \mathbf{u}^{(L)}(r) = 0 \quad (10)$$

Đây là phương trình Bessel, theo điều kiện của bài toán ($r \leq R_0$) nên (2.10) có nghiệm là dạng thứ nhất của hàm Bessel đó là hàm $\mathbf{J}_s(\chi_{s,p})$. Ta tìm được nghiệm của phương trình (1) như sau:

$$\mathbf{u}^{(L)}(r, \varphi, z) = \mathbf{A} \mathbf{J}_s(\chi_{s,p}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \quad (11)$$

Sử dụng điều kiện thứ 2 của mode quang dọc: $[\nabla \times \mathbf{u}] = 0$, viết trong tọa độ trụ:

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{u}] &= \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} u_z^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial z} (r u_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z)) \right] \mathbf{e}_r + \left[\frac{\partial}{\partial z} u_r^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial r} u_z^{(L)}(r, \varphi, z) \right] \mathbf{e}_\varphi \\ &+ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r u_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z)) - \frac{\partial}{\partial \varphi} u_r^{(L)}(r, \varphi, z) \right] \mathbf{e}_z = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Thay (11) vào (12) lấy đạo hàm và chú ý rằng các véc tơ đơn vị độc lập tuyến tính nên ta tìm được phương trình cho độ dịch chuyển ion của mode LO trong dây là:

$$\begin{cases} u_r^L = A_z \frac{-i\mathbf{q}_{s,p}^L}{\mathbf{q}_z} \mathbf{J}'_m(\mathbf{q}_{s,p}^L r) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \\ u_\varphi^L = A_z \frac{m}{r\mathbf{q}_z} \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{s,p}^L r) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \\ u_z^L = A_z \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{s,p}^L r) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \end{cases} \quad (13)$$

Hay có thể viết:

$$\mathbf{u}^L = A_{sp} \left\{ \frac{-i\mathbf{q}_{s,p}^L}{k_z} \mathbf{J}'_m(\mathbf{q}_{s,p}^L r); \frac{m}{r\mathbf{q}_z} \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{s,p}^L r); \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{s,p}^L r) \right\} e^{is\varphi} e^{iq_z z} \quad (14)$$

Trong đó: A_z ta đã thay bằng A_{sp} là hệ số của mode, $\mathbf{q}_{s,p}^L$ là véc tơ sóng được xác định bởi $\chi_{s,p} = \mathbf{q}_{s,p}^L r$ với $\chi_{s,p}$ là nghiệm của hàm Bessel $J_{s,p}(\chi_{s,p})$ và p là chỉ số nghiệm của hàm Bessel.

► Các mode dao động interface polariton (IP)

Các mode quang ngang TO thỏa mãn điều kiện $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ with $\mathbf{O}\mathbf{u} \neq 0$ và có phương trình cho độ dịch chuyển là:

$$\left\{ \frac{\omega^2}{\mathbf{c}^2} [\varepsilon_0 \omega_T^2 - \varepsilon_\infty \omega^2] + \left(\frac{\omega^2}{\mathbf{c}^2} \varepsilon_\infty \beta_b^2 + \omega_T^2 - \omega^2 \right) \nabla^2 + \beta_b^2 \nabla^2 \nabla^2 \right\} \mathbf{u} = 0 \quad (15)$$

Theo [9] mode TO có hướng vuông góc với các bề mặt phân cách của các môi trường vật liệu bán dẫn sẽ tương tác với photon và trở thành polariton. Tại bề mặt vật liệu, khi bỏ qua hiệu ứng trễ tức là coi vận tốc c của ánh sáng là lớn vô cùng thì ta thu được mode interface polariton (IP). Mode này giảm rất nhanh khi tiến ra xa mặt phân cách hai môi trường như một sóng điện từ. Khi xét đến các mode ngang, chọn trục z theo chiều dài của dây, nên các mode TO có hướng truyền tiến về bề mặt dây và sẽ tương tác mạnh với ánh sáng tạo ra polariton. Theo [5] thì độ dịch chuyển của mode polariton thỏa mãn phương trình:

$$\left\{ \frac{\omega^2}{\mathbf{c}^2} [\varepsilon_0 \omega_T^2 - \varepsilon_\infty \omega^2] + (\omega_T^2 - \omega^2) \nabla^2 \right\} \mathbf{u} = 0 \quad (16)$$

Giải phương trình này tương tự như mode LO, ta thay biểu thức của vi phân cấp 2 theo tọa độ trụ vào trong phương trình trên đồng thời đặt:

$$\mathbf{k}_p^2 = \frac{\omega^2}{\mathbf{c}^2} \left[\varepsilon_0 \omega_L^2 - \varepsilon_\infty \omega^2 \right] \quad (17)$$

Chúng ta sẽ tìm được phương trình chuyển động cho mode IP là:

$$\{\nabla^2 + \mathbf{k}_p^2\} \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (18)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} u^p(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} u^p(r) + \left(\mathbf{q}_p^2 - \frac{s^2}{r^2} \right) u^p(r) = 0 \quad (19)$$

Ở đây ta đã đặt: $\mathbf{q}_p^2 = \mathbf{k}_p^2 - \mathbf{q}_z^2$

Phương trình (19) là phương trình Bessel. Để ý đến biểu thức:

$$\mathbf{q}_p^2 = k_p^2 - \mathbf{q}_z^2 = \frac{\omega^2}{\mathbf{c}^2} \left[\varepsilon_0 \omega_T^2 - \varepsilon_\infty \omega^2 \right] - \mathbf{q}_z^2$$

Đồng thời, mode IP được xét trong giới hạn bỏ qua mọi hiệu ứng trễ tức là $1/c^2 = 0$, nên

$$\mathbf{q}_p^2 = -\mathbf{q}_z^2 \quad (20)$$

Từ (20) ta thấy rằng véc tơ sóng của mode IP bắt buộc phải là phần ảo, cho nên ta phải có:

$$\mathbf{q}_p = -i\mathbf{q}_z \quad (21)$$

Vậy phương trình (19) trở thành:

$$\frac{d^2}{dr^2} u^p(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} u^p(r) - \left(\mathbf{q}_z^2 + \frac{s^2}{r^2} \right) u^p(r) = 0 \quad (22)$$

Phương trình (22) nghiệm của mode IP được tìm có dạng sau:

$$\mathbf{u}^p(r, \varphi, z) = C \mathbf{I}_s(r) e^{is\varphi} e^{i\mathbf{q}_z z} \quad (23)$$

Biểu thức của $(\nabla \cdot \mathbf{u}^{(p)})$ được viết trong toạ độ trụ như sau:

$$(\nabla \cdot \mathbf{u}^{(p)}) = \frac{1}{r} \mathbf{u}_r^{(p)}(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{u}_r^{(p)}(r, \varphi, z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_\varphi^{(p)}(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}_z^{(p)}(r, \varphi, z) = 0 \quad (24)$$

Thay (23) vào (24) và lấy đạo hàm chúng ta có

$$C_r \frac{1}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) + C_r k_z \mathbf{I}'_s(\mathbf{q}_z r) + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) + i C_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) = 0 \quad (25)$$

Sử dụng (25) ta tìm được 2 mode IP như sau:

► Mode IP thứ nhất

Từ nhận xét về tính chất của các Mode IP trong dây ta thấy ngoài thoả mãn (25) thì mode IP còn trực giao với mode LO ở đây ta có thể chọn mode IP1 trực giao với trục z và tìm được phương trình của mode IP1 như sau:

$$\mathbf{u}^{(1p)} = C_{sp} \left\{ 1; \frac{i}{s} \frac{\eta}{\mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)}; 0 \right\} e^{is\varphi} e^{i\mathbf{q}_z z} \mathbf{I}_m(\mathbf{q}_z r) \quad (26)$$

Trong đó ta đã đặt:

$$\eta = [(s+1)\mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) - R_0 \mathbf{q}_z \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z R_0)] \quad (27)$$

C_r đã được thay bằng C_{sp} là hệ số của mode, \mathbf{q}_z là véc tơ sóng dọc theo trục dây.

► Mode IP thứ hai

Mode IP2 thoả mãn tính chất như mode IP1 nhưng đồng thời nó lại trực giao với chính mode IP1 vì vậy ta tìm được phương trình của mode IP2 là:

$$\mathbf{u}^{(2p)} = B_{sp} \left\{ 1; \frac{is\mathbf{q}_s(\mathbf{q}_z R_0)}{\eta}; \frac{i}{\mathbf{q}_z R_0} \frac{[\eta^2 - s^2 \mathbf{I}_s^2(\mathbf{q}_z R_0)]}{\eta \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} \right\} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) e^{is\varphi} e^{i\mathbf{q}_z z} \quad (28)$$

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã xây dựng tường minh mode dao động LO và IP1, IP2 là các mode tương tác của phonon quang ngang TO với photon tạo thành polariton. Trong nghiên cứu tới đây chúng tôi sẽ sử dụng điều kiện biên liên tục của một sợi dây tự do tìm phương trình chuyển động của các mode hybrid LO, IP1, IP2 trong dây lượng tử bán dẫn phân cực. Lượng tử hoá lần thứ 2 tìm các hạt lai hybridons và các hệ thức tán sắc của chúng. Sử dụng phương pháp hàm bao để giải bài toán cho electron trong dây lượng tử. Sau đó dùng lý thuyết nhiễu loạn Dirac để thành lập biểu thức xác định tốc độ tán xạ và thời gian hồi phục cho electron trong dây lượng tử cấu trúc như trên.

Phụ lục

XÁC ĐỊNH MODE QUANG DẠC (LO)

Xét phương trình (12), các véc tơ đơn vị theo các trục là độc lập tuyến tính đối với nhau cho nên thu được hệ phương trình sau:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_z^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial z} (r \mathbf{u}_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z)) \\ \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}_r^{(L)}(r, \varphi, z) - \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{u}_z^{(L)}(r, \varphi, z) \\ \frac{\partial}{\partial r} (r \mathbf{u}_\varphi^{(L)}(r, \varphi, z)) - \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_r^{(L)}(r, \varphi, z) \end{cases} \quad (\text{P.1})$$

Ta đi tìm nghiệm thành phần theo các trục của tọa độ trụ dưới dạng như sau:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_r^L(r, \varphi, z) = \mathbf{A}_r \mathbf{J}_s(\chi_{SP}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \\ \mathbf{u}_\varphi^L(r, \varphi, z) = \mathbf{A}_\varphi \mathbf{J}_s(\chi_{SP}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \\ \mathbf{u}_z^L(r, \varphi, z) = \mathbf{A}_z \mathbf{J}_s(\chi_{SP}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \end{cases} \quad (\text{P.2})$$

Trong đó: $\mathbf{A}_r, \mathbf{A}_\varphi, \mathbf{A}_z$ là các hệ số. Thay (A.2) vào (A.1) và lấy đạo hàm ta tìm được:

$$\begin{cases} isA_z \mathbf{J}_s(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} - riq_z A_\varphi \mathbf{J}_m(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} = 0 \\ iq_z A_r \mathbf{J}_s(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} - \mathbf{q}_{sp}^L A_z \mathbf{J}_m(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} = 0 \\ A_\varphi \mathbf{J}_s(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} + \mathbf{q}_{sp}^L r A_\varphi \mathbf{J}_s(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} - isA_r \mathbf{J}_s(\chi_{sp}) e^{is\varphi} e^{iq_z z} = 0 \end{cases} \quad (\text{P.3})$$

Giải hệ phương trình (A.3) ta biểu diễn được các hệ số $\mathbf{A}_r, \mathbf{A}_\varphi$ qua \mathbf{A}_z

$$\begin{cases} A_\varphi = A_z \frac{S}{r\mathbf{q}_z} \\ A_r = A_z \frac{-i\mathbf{q}_{sp}^L \mathbf{J}'_s(\mathbf{q}_{sp}^L r)}{\mathbf{q}_z \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{sp}^L r)} \end{cases} \quad (\text{P.4})$$

Thay (A.5) vào (A.2) ta tìm được phương trình độ dịch chuyển cho mode LO

$$\mathbf{u}_{(r, \varphi, z)}^L = A_z \left\{ \frac{-i\mathbf{q}_{sp}^L}{\mathbf{q}_z} \mathbf{J}'_s(\mathbf{q}_{sp}^L r); \frac{S}{r\mathbf{q}_z} \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{sp}^L r); \mathbf{J}_s(\mathbf{q}_{sp}^L r) \right\} e^{is\varphi} e^{iq_z z}$$

XÁC ĐỊNH CÁC MODE INTERFACE POLARITON (IP)

Sử dụng phương trình:

$$\frac{1}{r}u_r^{(P)}(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial r}u_r^{(P)}(r, \varphi, z) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}u_\varphi^{(P)}(r, \varphi, z) + \frac{\partial}{\partial z}u_z^{(P)}(r, \varphi, z) = 0$$

Thay (22) vào (24) và lấy đạo hàm ta được:

$$C_r \frac{1}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) + C_r \mathbf{q}_z \mathbf{I}'_s(\mathbf{q}_z r) + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) + iC_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) = 0 \quad (\text{P.5})$$

Sử dụng tính chất đạo hàm của hàm Bessel:

$$\mathbf{I}'_s(\mathbf{q}_z r) = \frac{s}{\mathbf{q}_z r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) - \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z r) \quad (\text{P.6})$$

Chúng ta được:

$$C_r \frac{1}{r} [(s+1) \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) - C_r r \mathbf{q}_z \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z r)] + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) + iC_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) = 0 \quad (\text{P.7})$$

Với chú ý rằng phương trình này của mode phải đúng cho toàn bộ vật liệu vì vậy nó cũng phải đúng cho một điểm bất kì nào đó nằm trên biên, ta có hệ thức sau

$$C_r \frac{1}{R} [(s+1) \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) - R_0 \mathbf{q}_z \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z R_0)] + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) + iC_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.8})$$

Đặt:

$$\boldsymbol{\eta} = [(s+1) \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) - R_0 \mathbf{q}_z \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z R_0)] \quad (\text{P.9})$$

Ta viết lại (P.8)

$$C_r \frac{1}{R_0} \boldsymbol{\eta} + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) + iC_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.10})$$

Như trên ta đã nói trong vật liệu luôn tồn tại hai mode dao động ngang trực giao nhau cho nên mode IP cũng sẽ tồn tại hai mode trực giao nhau.

Mode IP thứ nhất

Để tìm mode IP thứ nhất chúng ta chú ý rằng mode IP trực giao với mode LO và do tính chất đối xứng của vật liệu theo toạ độ trụ cho nên ta có thể xoay hệ toạ độ sao cho mode IP thứ nhất trực giao với trục z ta có:

$$\mathbf{u}^{(P)} \mathbf{e}_z = 0 \quad (\text{P.11})$$

Hay:

$$\mathbf{u}^{(P)} \mathbf{e}_z = u_z = C_z e^{is\varphi} e^{i\mathbf{q}_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) = 0 \quad (\text{P.12})$$

Và như vậy thì thành phần theo trục z của mode IP thứ nhất sẽ bằng 0. Từ điều kiện của mode IP $\text{div}\mathbf{u} = \mathbf{0}$ có:

$$C_r \frac{1}{R_0} \left[(s+1) \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) - R_0 \mathbf{q}_z \mathbf{I}_{s+1}(\mathbf{q}_z R_0) \right] + C_\varphi \frac{is}{r} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) + i C_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.13})$$

Ta tìm được:

$$C_\varphi = C_r \frac{i}{s} \frac{\boldsymbol{\eta}}{\mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} \quad (\text{P.14})$$

Thay (P.14) vào (22) được phương trình độ dịch chuyển cho mode IP thứ nhất:

$$\mathbf{u}^{(1p)} = C \left\{ 1; \frac{i\boldsymbol{\eta}}{s \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)}; 0 \right\} e^{is\varphi} e^{iq_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r)$$

Mode IP thứ 2

Như đã nói ở trên mode IP thứ hai trục giao với mode thứ nhất cho nên ta sẽ có phương trình sau:

$$B_r C e^{is\varphi} e^{iq_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) + B_\varphi C \frac{i}{s} \frac{\boldsymbol{\eta}}{\mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} e^{is\varphi} e^{iq_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) e^{is\varphi} e^{iq_z z} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.15})$$

$$B_r + B_\varphi \frac{i}{s} \frac{\boldsymbol{\eta}}{\mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} = 0 \Rightarrow B_\varphi = B_r \frac{is \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)}{\boldsymbol{\eta}} \quad (\text{P.16})$$

Hoàn toàn tương tự thì mode IP thứ hai này cũng phải thoả mãn điều kiện của mode IP đó là $\text{div}\mathbf{u}=\mathbf{0}$ cho nên ta có:

$$B_r \frac{1}{R_0} \boldsymbol{\eta} + B_\varphi \frac{is}{R_0} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) + i B_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.17})$$

$$B_r \frac{1}{R_0} \boldsymbol{\eta} - B_r \frac{s^2 \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)}{R_0 \boldsymbol{\eta}} + i B_z \mathbf{q}_z \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0) = 0 \quad (\text{P.18})$$

$$\Rightarrow B_z = B_r \frac{i}{\mathbf{q}_z R_0} \frac{[\boldsymbol{\eta}^2 - s^2 \mathbf{I}_s^2(\mathbf{q}_z R_0)]}{\boldsymbol{\eta} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} \quad (\text{P.19})$$

Như vậy, phương trình cho độ dịch chuyển của mode IP thứ 2 là:

$$\mathbf{u}^{(2p)} = B \left\{ 1; \frac{is \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)}{\boldsymbol{\eta}}; \frac{i}{\mathbf{q}_z R_0} \frac{[\boldsymbol{\eta}^2 - s^2 \mathbf{I}_s^2(\mathbf{q}_z R_0)]}{\boldsymbol{\eta} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z R_0)} \right\} \mathbf{I}_s(\mathbf{q}_z r) e^{is\varphi} e^{iq_z z}$$

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Quang Bá (2001), *Lí thuyết bán dẫn*, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - Đại học Quốc gia Hà Nội.
2. Nguyễn Văn Hùng (2000), *Lí thuyết chất rắn*, Đại học Quốc gia Hà Nội.
3. Constantinou N. C. (1993), "Interface optical phonons near perfectly conducting boundaries and their coupling to electrons", *Physical Review B* 48, pp.11931-11935.
4. Constantinou N. C., Ridley B. K. (1990), "Interaction of electrons with the confined LO phonons of a free-standing GaAs quantum wire", *Physical Review B* 41, pp.10622-10626.
5. M. Babiker (1996), " Longitudinal polar optical modes in semiconductor quantum wells ", *J. Phys.C: Solid State Phys* 19, pp.683-697.
6. M. Babiker, M. P. Chamberlain, B. K. Ridley (1987), "Resonance effect in inter-sub-band transitions of single quantum wells", *Semiconductor Science and Technology* 2, p582.
7. M.Babiker, B.K. Ridley (1986), " Effective mass eigenfunctions in superlattices and their role in well-capture ", *Superlatt. and Microstruct* 2, p287
8. Melnikov D. V., Fowler W. B. (2001), "Electron-phonon interaction in a spherical quantum dot with finite potential barriers: The Fröhlich Hamiltonian", *Physical Review B* 64, p245320.
9. Redley B. K. (1991), "Electron –hybridon interaction interaction a quantum well", *Department of physics, University of Essex, Wivenhoe Park, Colchester, Essex CO4 3SQ, England. Rev*, p4592.
10. Redley B. K. (1993), " Optical-phonon tunneling ", *Phys. Rev. B* 49 p17253.
11. Silin A. P. (1995), "Semiconductors superlattice ", *Sov. Phys. Usp* 28, p972.

OPTICAL MODES IN A FREE STANDING QUANTUM WIRE

Abstract: *A continuum model is employed to describe the allowed longitudinal-optical (LO) phonons of a cylindrical free-standing GaAs wire. The confinement of optical modes in a quantum wire of polar material is described by a theory involving the triple hybridization of LO, transverse optical (TO) phonon, and IP (interface polariton) modes. In this work, we tried to calculate the LO, TO, and IP modes in a quantum wire using conditions of both mechanical and electromagnetic boundary.*

Keywords: *LO, TO, IP, mechanical and electromagnetic boundary.*

THE INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THE MICROSTRUCTURE AND THE PHASE TRANSITION PROCESS OF THE SiO_2 BULK MODEL

Nguyen Chinh Cuong¹, Nguyen Trong Dung
Hanoi University of Education

Abstract: This paper studies the influence of temperature on the microstructure and the phase transition process of the SiO_2 bulk model. This bulk model is constructed with 3000 atoms (1000 Si atoms and 2000 O atoms) at temperatures 300K, 500K, 1000K, 1500K, 2000K, 2500K, 3000K and 3500K and at the pressure 0GPa by the Molecular Dynamics Simulation method with the van Beest-Kramer-van Santen (BKS) pair interaction potential and periodic boundary conditions. Research results showed that almost the samples had the coordination number 4. When the temperature was increased, the number of samples with the coordination number 4 decreased while number of samples with the coordination number 5 and 6 increased.

Keywords: Temperature, microstructure, phase transition process, SiO_2 bulk model, Molecular Dynamics

1. INTRODUCTION

In recent years, the oxide materials Al_2O_3 , SiO_2 , Fe_2O_3 , GeO_2 ... are widely used in many industries, of which SiO_2 is used to manufacture the semiconductor materials. Some methods have been developed to study SiO_2 such as the experiment method, the theory method and the simulation method. The obtained results have shown the polymorphism of the material and the influence of temperature and pressure on the microstructure and the phase transition process of the material [1-8]. The experiment method using X-ray diffraction has identified the average angle of the couplings Si-O-Si is 151° [9] and 144° [10]; Zachariassen predicted the microstructure of SiO_2 with the amorphous state and the liquid state is mainly SiO_4 structure unit [11] which has been determined through the X-ray diffraction technique of Mozzi and Warren [12]. The simulation method using the

¹ Nhận bài ngày 19.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Chinh Cường; Email: nccuong@hnue.edu.vn

molecular dynamics model has determined the average angle of the couplings Si-O-Si is 145° [13], while the average angle of the couplings O-Si-O is 109.5° [14], 109.47° [13, 14] and the average length of the couplings Si-Si, Si-O, O-O at the pressure 0GPa is 3.07 Å, 1.59 Å, 2.61 Å [8], 3.08 Å, 1.6 Å, 2.6 Å [5], 3.11 Å, 1.56 Å, 2.50 Å [14], 3.12 Å, 1.62 Å and 2.65 Å [13, 14] and transition temperature 2973K (from solid to liquid state) [16]. The results showed that there were differences between the experiment method and the simulation method both in terms of the coupling length and the coupling angle. In order to clarify this issue, we studied the microstructure, the phase transition process of the SiO₂ bulk model under the influence of the temperature, the pressure and determining the phase transition temperature of the model. The obtained results will support the experimental measurements in order to increase the applicability of the material in practice.

2. RESEARCH METHOD

To study the microstructure and the phase transition process of SiO₂ by the Molecular Dynamics (MD) Simulation method, pair interaction potential and the van Beest-Kramer-van Santen (BKS) pair interaction potential were used [17], in which we mainly used the BKS pair interaction potential. In this paper, we used the Molecular Dynamics Simulation method with BKS pair interaction potential in the form (1) and periodic boundary conditions.

$$U_{ij}(r) = \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}} + A_{ij} e^{-B_{ij} r_{ij}} - B_{ij} r_{ij} - C_{ij} r_{ij}^{-6} \quad (1)$$

Including: A_{ij} , B_{ij} and C_{ij} are the potential coefficients of the model; q_i , q_j are the charges of the two atoms i and j ; r_{ij} is the distance between the i^{th} atom and the j^{th} atom; $U_{ij}(r)$ is the interaction energy between the i^{th} atom and the j^{th} atom which is shown in Table 1

Table 1. The parameters in the SiO₂ bulk model.

Factor	A_{ij} (eV)	B_{ij} (Å ⁻¹)	C_{ij} (eVÅ ⁵)	q_{ij} (e)
Si-Si	0.0	0.0	0.0	
Si-O	18003.5773	4.87318	133.5381	$q_{\text{Si}}=+2.4$
O-O	1388.773	2.76	175.0	$q_{\text{O}}=-1.2$

The SiO₂ bulk model with 3000 atoms (1000 Si atoms and 2000 O atoms) was initially put randomly in a cubic box. It was run with the statistical recovery of $2 \cdot 10^4$ steps by the BKS pair interaction potential and periodic boundary conditions so that the atoms

(molecules) were not stuck together. After that, the temperature was increased to 300K, 500K, 1000K, 1500K, 2000K, 2500K, 3000K and 3500K at the pressure 0GPa to reach the expected value. All samples were run simultaneously with $5 \cdot 10^5$ NVE steps until the model reaching to the stable state. The obtained samples were analyzed through the shape, the size, the energy, the radial distribution functions, the coordination number, the distribution angle, the length of the coupling and the phase transition temperature through the relationship between the energy and the temperature of the samples.

3. SIMULATION RESULTS

The SiO_2 bulk model (3000 atoms) was simulated by the Molecular Dynamics (MD) method with the BKS pair interaction potential and periodic boundary conditions. The result on the shape of the sample at the temperature 300K is shown in Figure 1.

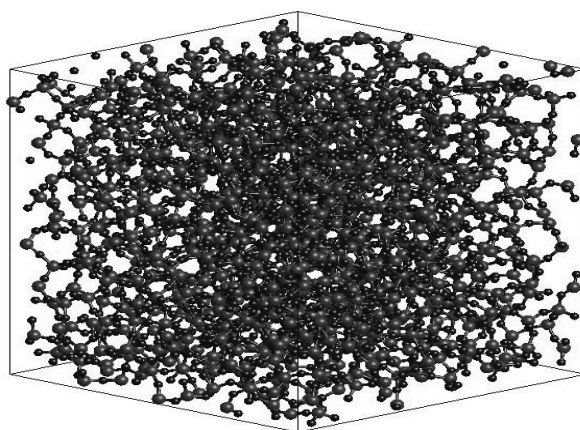


Fig. 1. The shape of the SiO_2 bulk sample (3000 atoms) at the temperature 300K.

The result in Figure 1 shows that the SiO_2 bulk model at the temperature 300 K had the cubic shape and nano scale with the existence of the two atoms: Si and O. Si atoms are red and the O atoms are blue. When the temperature was increased from 300 K to 500 K, 1000 K, 1500 K, 2000 K, 2500 K, 3000 K and 3500 K, the size of the samples are shown in Table 2.

Table 2. The size of the samples at the different temperatures

Temperature (K)	300	500	1000	1500	2000	2500	3000	3500
The size (nm)	3.4399	3.4430	3.4502	3.4538	3.4584	3.4436	3.4315	3.4246

Table 2 shows that when the temperature was increased from 300K to 2000K, the size of the model increased from 3.4399 nm to 3.4584 nm; in the temperature range from

2000K to 3500K, the size of the model reduced from 3.4584 nm to 3.4246nm. This indicates that the temperature range from 2000K to 3000K are the phase transition range of the model from the amorphous state to the liquid state.

The microstructure of the SiO_2 bulk model continues to be studied at different temperatures, the results are shown in Figure 2 and Table 3.

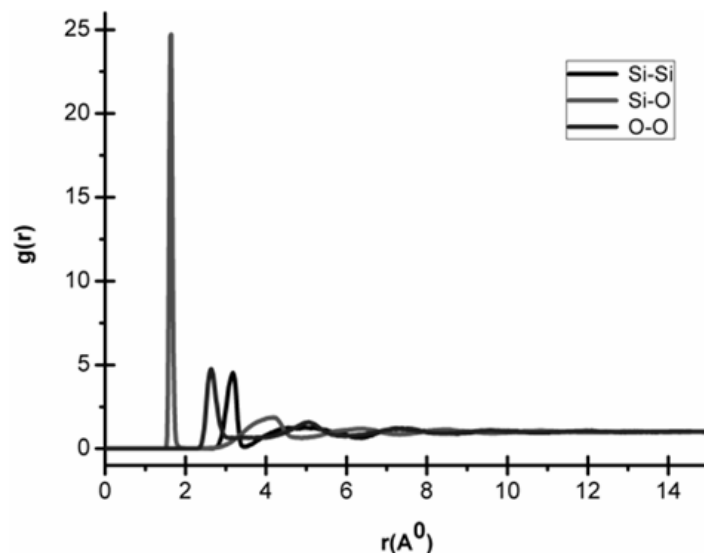


Figure 2. The radial distribution function (RDF) of the SiO_2 bulk samples at the temperature 300 K

Table 3. The position, the height and the average coordination number of the radial distribution function at different temperatures

Temperature (K)	r_{ij} (Å)			g_{ij}			Z_{ij}			
	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Si	Si-O	O-O	Si-Si	Si-O	O-Si	O-O
300 K	3.18	1.64	2.64	4.53	24.72	4.75	4.16	4.02	2.01	7.51
500 K	3.18	1.62	2.64	4.43	20.54	4.50	4.17	4.02	2.01	7.50
1000 K	3.16	1.62	2.64	4.01	15.55	3.87	4.18	4.02	2.01	7.46
1500 K	3.16	1.62	2.64	3.63	12.60	3.50	4.18	4.02	2.01	7.46
2000 K	3.14	1.62	2.66	3.31	11.00	3.20	4.15	4.01	2.01	7.45
2500 K	3.18	1.62	2.66	3.07	9.64	2.94	4.15	4.02	2.01	7.50
3000 K	3.16	1.62	2.68	2.85	8.52	2.71	4.2	4.02	2.01	7.59
3500 K	3.18	1.62	2.66	2.59	7.46	2.47	4.2	4.03	2.01	7.68

From Figure 2 and Table 3 we can see the SiO_2 bulk model at temperatures 300K, 500K, 1000K, 1500K, 2000K, 2500K, 3000K and 3500K with the height of the first peak of the radial distribution function predominates. When the temperature was increased, the first peak position of radial distribution function of the coupling Si-Si changed around 1.2 %, increased insignificantly in the coupling O-O and changed slightly in value with the coupling Si-O. This result is consistent with previous simulation results (at the normal pressure, the couplings Si-Si, Si-O, O-O have the length of 3.07 Å; 1.59 Å; 2.61 Å [8], 3.08 Å; 1.6 Å; 2.6 Å [5], 3.11 Å; 1.56 Å; 2.50 Å [12], 3.12Å; 1.62Å; 2.65Å) [13, 14] respectively. This indicates that the distance of coupling Si-O did not depend on the temperature and there always existed a close order in the coupling Si-O. The first peak height of radial distribution function of the coupling Si-O at temperatures 300K had the greatest value. When temperature was increased, the first peak height of the radial distribution function decreased gradually. Similarly, the first peak position and height of the radial distribution function decreased in the couplings of Si-Si and O-O. This indicates that there were influences of the temperature on the length of the couplings Si-Si, Si-O, O-O which led to the heterogeneity of the microstructure of the SiO_2 bulk model. In addition, in the temperature range from 2000K to 3000K, the first peak height of the radial distribution function of the coupling Si-O tended to slow down the decrease. It shows that in this temperature range, the SiO_2 bulk model had the phase transition process from an amorphous state to a liquid state.

To study this in detail, we analyzed the coordination number of the samples at different temperatures. The results can be seen in Figure 3 and Table 4

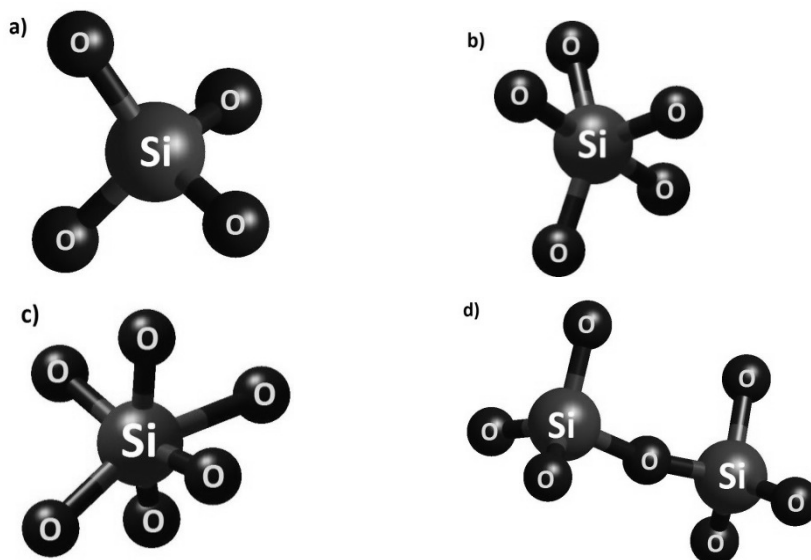


Figure 3. The coordination number in the SiO_2 bulk model

Table 4. The coordination numbers 4, 5 and 6 of the samples at different temperatures

Temperature (K)		300	500	1000	1500	2000	2500	3000	3500
Coordination number	4	1973	1972	1968	1963	1965	1960	1897	1786
	5	75	67	78	121	94	104	253	436
	6	0	1	0	7	3	1	17	29

The results in Figure 3 and Table 4 shows that, the coordination number 4 (Figure 3a), the coordination number 5 (Figure 3b), the coordination number 6 (Figure 3c) and the couplings Si-O-Si (Figure 3d) existed in the SiO₂ model. When the temperature was increased, the coordination number 5 and 6 increased while coordination number 4 decreased (Table 4). In the temperature range from 2000K to 3000K, the coordination number 4 decreased quickly while the coordination number 5 and 6 increased quickly. It indicates that in this temperature range, the sample tended to gradually change from the crystalline state to the liquid state. The results shown in Table 5 which illustrates the distribution of the angle between the two atoms Si and O.

Table 5. The distribution of angle of the couplings O-Si-O in SiO₂ model

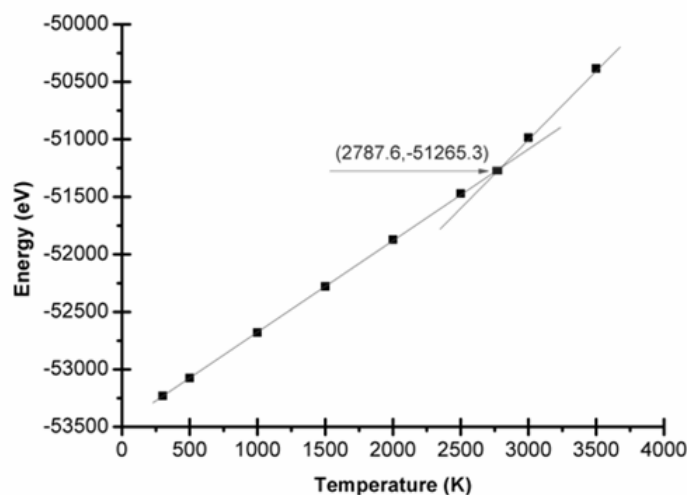
Temperature (K)	300	500	1000	1500	2000	2500	3000	3500
O-Si-O (degree)	105	105	105	105	105	105	105	105
Si-O-Si (degree)	140	140	145	145	145	145	145	145

Table 5 showed that when the temperature was increased, the distribution of the angle of the couplings Si-O-Si changed slightly from 140⁰ to 145⁰, the angle of the couplings O-Si-O between the Si atoms and the O atoms was 105⁰. These results are completely consistent with the previous research results: the distribution of angle of Si-O-Si measured in experiment is 151⁰ [1], 144⁰ [2], 144⁰ [3]; the distribution of angle of Si-O-Si in simulation is 152⁰ [6], 145⁰ [7] and the distribution of angle of O-Si-O in simulation is 109.5⁰ [12], 109.47⁰ [13, 14]. In other words, the distribution of the angle between the atoms Si, O depends strongly on the temperature.

In addition, we can determine the phase transition temperature of the SiO₂ bulk model. Research results are shown in Table 6 and Figure 4.

Table 6. The energy of the model at different temperatures

Temperature (K)	300	500	1000	1500	2000	2500	3000	3500
Energy (eV)	-53230.411	-53074.651	-52680.729	-52279.583	-51872.542	-51472.907	-50985.287	-50383.735

*Figure 4. The phase transition temperature of the SiO₂ model*

Results in Table 6 and Figure 4 show that when the temperature was increased, the energy of the samples decreased gradually. Particularly, at temperature range from 2000K to 3000K the energy of the SiO₂ bulk model decreased strongly. The phase transition temperature of the model was 2787.6K corresponding to the energy level of - 51265.3. This result is entirely consistent with the simulation results 2973K [16]. Basing on the above mentioned research and analysis results, we can determine that the influence of temperature on the microstructure and the phase transition process of the model is significant.

4. CONCLUSION

By using the Molecular Dynamics method, the influence of temperature on the microstructure, the diffusion and the phase transition temperature of the SiO₂ sample with 3000 atoms at temperatures 300K, 500K, 1000K, 1500K, 2000K, 2500K, 3000K and 3500K was studied and analyzed. The obtained results are following:

- The selection of the van Beest-Kramer-van Santen (BKS) pair interaction potential with parameters to simulate the SiO₂ sample (3000 atoms) have given the consistent results with the previous experiment and simulation results.

– When the temperature is increased, the size of the model increases then decreases, the energy of the model increases and the phase transition temperature of the model is determined as 2787.6K.

– In the temperature range from 300K to 2787.6K, the model exists in the amorphous state with the structure of the bulk materials and this has been shown in the previous works.

– There is the influence of temperature on the microstructure and the phase transition process of the model.

– There are differences on the microstructure of the couplings Si-Si, Si-O, O-O in the models.

REFERENCES

1. Zeidler, A., Salmon, P. S. & Skinner, L. B (2014), "Packing and the structural transformations in liquid and amorphous oxides from ambient to extreme conditions". *Proc. Natl. Acad. Sci* 111, pp.10045-10048.
2. Huang, L. & Kieffer, J. (2003), "Molecular dynamics study of cristobalite silica using a charge transfer three-body potential: Phase transformation and structural disorder", *J. Chem. Phys.* 118, pp.1487-1498.
3. Huang, L. & Kieffer, J. (2004), "Amorphous-amorphous transitions in silica glass. II. Irreversible transitions and densification limit", *Phys. Rev. B* 69, 224204.
4. Huang, L. P., Duffrene, L. & Kieffer, J. (2004), "Structural transitions in silica glass: thermo-mechanical anomalies and polyamorphism", *J. Non-Cryst. Solids* 349, pp.1-9.
5. Inamura Y, Katayama Y, Utsumi W, Funakoshi K (2004), "Transformations in the intermediate-range structure of SiO₂ glass under high pressure and temperature", *Phys Rev Lett* 93: 015501.
6. Lacks DJ (2000), "First-order amorphous-amorphous transformation in silica". *Phys Rev Lett* 84: pp.4629-4632.
7. Meade C, Hemley RJ, Mao HK (1992), "High-pressure X-ray diffraction of SiO₂ glass", *Phys Rev Lett* 69: pp.1387-1390.
8. Benmore CJ, et al. (2010), "Structural and topological changes in silica glass at pressure", *Phys Rev B* 81: 054105.
9. Poe BT, McMillan PF, Angell CA, Sato RK (1992), "Al and Si coordination in SiO₂ Al₂O₃ glasses and liquids: a study by NMR and IR spectroscopy and MD simulations", *Chem Geol* 96: pp.333-349.
10. P.G.Coombs,, J. F. De Natale, P. J. Hood, D. K. McElfresh, R. S. Wortman, J. F. Shackelford (1985), "The nature of the Si-O-Si bond angle distribution in vitreous silica", *Philosophical Magazine B*, Vol 51, Issue 4, pp.39-42.

11. W. Zachariassen (1932), "The atomic arrangement in glass", *J. Am. Chem. Soc.*, 54 (10), pp. 3841-3851.
12. R. L. Mozzi and B. E. Warren (1969), "The structure of vitreous silica", *J. Appl. Cryst.* vol 2, pp.164-172.
13. L.T. Vinh, P.K. Hung, N.V. Hong, T.T. Tu (2009), "Local microstructure of silica glass", *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol 355, Issues 22-23, pp.1215-1220.
14. V.V. Hoang, D. K. Belashchenko, V. T. M. Thuan (2004), "Computer simulation of the structural and thermodynamics properties of liquid and amorphous SiO₂", *Phys. Rev. B*, 348, pp.249-255.
15. Michael Guerette, Michael R. Ackerson, Jay Thomas, Fenglin Yuan, E. Bruce Watson, David Walker & Liping Huang (2015), "Structure and Properties of Silica Glass Densified in Cold Compression and Hot Compression", *Sci. Rep.* 5, 15343.
16. S. Tsuneyuki, M. Tsukada, H. Aoki, and Matsui (1988), "First-Principles Interatomic Potential of Silica Applied to Molecular Dynamics", *Phys. Rev. Lett.*, 61: 869.
17. G.J. Kramer, N.P. Farragher, B.W.H. van Beest, R.A. van Santen (1991), "Interatomic force fields for silicas, aluminophosphates, and zeolites: Derivation based on ab initio calculations", *Phys. Rev. B* 43, 5068.

ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ LÊN VI CẤU TRÚC VÀ QUÁ TRÌNH CHUYỂN PHA CỦA MÔ HÌNH KHỐI SiO₂

Tóm tắt: Bài báo này nghiên cứu sự ảnh hưởng của nhiệt độ lên vi cấu trúc và quá trình chuyển pha của mô hình khối SiO₂. Mô hình khối này được xây dựng với 3000 nguyên tử (1000 nguyên tử Si và 2000 nguyên tử O) ở nhiệt độ (300 K, 500 K, 1000 K, 1500 K, 2000 K, 2500 K, 3000 K và 3500 K) và ở áp suất 0Gpa bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử, với thế tương tác cặp van Beest-Kramer-van Santen (BKS) và điều kiện biên tuần hoàn. Các kết quả nghiên cứu cho thấy các mẫu có số phối vị 4 là chủ yếu, khi tăng nhiệt độ thì mẫu có số phối vị 4 giảm dần, số phối vị 5 và 6 tăng dần.

Từ khóa: Nhiệt độ, vi cấu trúc, quá trình chuyển pha, mô hình khối SiO₂, động lực học phân tử.

NGHIÊN CỨU MỘT SỐ CHỈ SỐ SINH LÝ HÌNH THÁI VÀ THỂ LỰC CỦA HỌC SINH TRUNG HỌC PHỔ THÔNG DÂN TỘC TÀY, NÙNG HUYỆN BÌNH GIA, TỈNH LẠNG SƠN

Đỗ Hồng Cường¹⁽¹⁾, Bùi Xuân Linh²

¹Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

²Trường THPT Pác Khuông, Lạng Sơn

Tóm tắt: Nghiên cứu các chỉ số hình thái và thể lực được tiến hành trên 491 học sinh nam và nữ lứa tuổi THPT (từ 16 đến 18 tuổi) dân tộc Tày (42,77%), Nùng (57,23%) thuộc huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn. Mục tiêu nghiên cứu của công trình này là xác định một số chỉ số hình thái và thể lực của nam, nữ học sinh lứa tuổi 16-18, góp phần xây dựng các giá trị sinh học người Việt Nam trong giai đoạn hiện nay. Kết quả nghiên cứu cho thấy có sự khác biệt về các chỉ số hình thái: chiều cao đứng, cân nặng, vòng ngực trung bình theo các yếu tố tuổi và giới tính. Thể lực của các đối tượng nghiên cứu trong nhóm bình thường theo chỉ số BMI và nhóm yếu theo chỉ số Pignet.

Từ khóa: chiều cao đứng, cân nặng, chỉ số thể lực, dân tộc thiểu số, trung học phổ thông

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Chiều cao trung bình của thanh niên Việt Nam phải đạt trên 1,65m; tỉ lệ suy dinh dưỡng trẻ em dưới 5 tuổi nhỏ hơn 5% và tuổi thọ trung bình là 75. Đó là những chỉ tiêu chỉ số cơ bản đặt ra trong chiến lược phát triển nhân lực Việt Nam đến năm 2020 được Thủ tướng Chính phủ phê duyệt ngày 19 tháng 4 năm 2011 [16].

Nghiên cứu các chỉ số sinh học người bình thường, trong đó nghiên cứu các chỉ số hình thái, thể lực là công tác nghiên cứu cơ bản, nhằm cung cấp thông tin khoa học cần thiết không chỉ cho các nghiên cứu y sinh học phục vụ công tác bảo vệ và chăm sóc sức khỏe nhân dân mà còn sử dụng trong các lĩnh vực kinh tế, xã hội, an ninh và quốc phòng. Năm 1975, cuốn sách "Hàng số sinh học người Việt Nam" do Nguyễn Tấn Gi Trọng, nguyên chủ nhiệm bộ môn Sinh lý trường Đại học Y Hà Nội làm chủ biên, được xuất bản lần đầu tiên ở nước ta [15]. Cuốn sách đã được các nhà khoa học đón nhận và hoan nghênh

¹ Nhận bài ngày 20.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Đỗ Hồng Cường; Email: dhcuong@daihocthudo.edu.vn

vì đã đề cập đến hầu hết các giá trị sinh học cơ bản của con người. Năm 2003, cuốn "Các giá trị sinh học người Việt Nam bình thường thập kỉ 90 - thế kỉ XX" được xuất bản do Lê Ngọc Trọng làm chủ biên [1]. Số liệu thống kê của cuốn sách chứa đựng nhiều thông tin khoa học chính xác, trình bày ngắn gọn, logic và dễ tra cứu.

Nhằm góp phần xây dựng các giá trị sinh học của người Việt Nam trong những năm đầu của thế kỉ XXI, chúng tôi tiến hành nghiên cứu một số chỉ số hình thái, thể lực trên đối tượng học sinh người dân tộc Tày, Nùng với mục tiêu cụ thể là: Xác định một số chỉ số hình thái, thể lực của học sinh trung học phổ thông (THPT) dân tộc Tày, Nùng huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn. Các kết quả thu được trong đề tài nghiên cứu này có thể sử dụng cho việc nâng cao thể chất của học sinh

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Bảng 1. Phân bố các đối tượng nghiên cứu theo giới tính và lứa tuổi

TT	Tuổi	Tày		Nùng		Tổng
		Nam	Nữ	Nam	Nữ	
1	16	36	35	40	45	156
2	17	32	35	48	43	158
3	18	34	38	50	55	177
Tổng		102	108	138	143	491

– Học sinh THPT lứa tuổi từ 16 đến 18 thuộc các dân tộc Tày, Nùng đang học tập tại hai trường THPT của huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn (bảng 1).

– Đối tượng nghiên cứu có sức khỏe tốt, không có dị tật bẩm sinh, không có bệnh mạn tính, trạng thái tâm - sinh lí bình thường.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

– *Nghiên cứu các chỉ số hình thái*: Chiều cao đứng; Cân nặng; Vòng ngực trung bình [2].

– *Nghiên cứu các chỉ số thể lực*: Chỉ số pignet [12]; Chỉ số khối cơ thể (BMI) (theo [6]).

– *Tỉ lệ % mỡ* [3].

– Các số liệu nghiên cứu được xử lí theo các thuật toán xác suất thống kê trong y, sinh học.

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ BÀN LUẬN

3.1. Các chỉ số hình thái

3.1.1. Chiều cao đứng của học sinh THPT các dân tộc huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn

Bảng 2. Chiều cao đứng (cm) của học sinh THPT theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						$X_1 - X_2$	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng	n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng		
Tày	16	36	159,11±4,25	-	35	149,06±3,99	-	10,05	<0,05
	17	32	161,03±4,81	1,92	35	151,20±3,59	2,14	9,83	<0,05
	18	34	163,24±4,59	2,21	38	152,92±5,38	1,72	10,32	<0,05
	Tăng trung bình/năm			2,07	Tăng trung bình/năm		1,93		
Nùng	16	40	159,78±4,38	-	45	151,49±4,60	-	8,29	<0,05
	17	48	162,31±4,50	2,53	43	152,21±3,84	0,72	10,10	<0,05
	18	50	164,14±4,53	1,83	55	154,25±5,04	2,04	9,89	<0,05
	Tăng trung bình/năm			2,18	Tăng trung bình/năm		1,38		

Các số liệu ở bảng 2 cho thấy:

– Từ 16 đến 18 tuổi chiều cao đứng của học sinh liên tục tăng ở cả nam và nữ. Theo dân tộc tốc độ tăng trưởng chiều cao đứng có sự khác biệt. Đối với học sinh nam dân tộc Tày (2,07 cm/năm) thấp hơn dân tộc Nùng (2,18 cm/năm), ở nữ học sinh dân tộc Tày (1,93 cm/năm) cao hơn học sinh dân tộc Nùng (1,38 cm/năm).

– Theo giới tính tốc độ tăng trưởng chiều cao đứng ở học sinh nam (2,07 ÷ 2,18 cm/năm) cao hơn học sinh nữ (1,38 ÷ 1,93 cm/năm). Theo lứa tuổi cũng có sự khác nhau. Ở tuổi 16 chênh lệch chiều cao đứng của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 10,05 cm ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 8,29 cm ($p < 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 9,83 cm ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 10,10 cm ($p < 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 10,32 cm ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 9,89 cm ($p < 0,05$).

Nguyên nhân sự khác biệt này là giai đoạn dậy thì của nam kết thúc muộn hơn ở nữ. Các kết quả nghiên cứu của Thẩm Hoàng Điệp [4], Trần Đình Long [10] Trịnh Văn Minh [11], trên học sinh ở các lứa tuổi này cho kết quả tương tự. Như vậy, sự phát triển chiều cao đứng của học sinh lứa tuổi THPT dân tộc Tày, Nùng ở huyện Bình Gia cũng tương tự như học sinh cùng lứa tuổi ở các địa phương khác và phù hợp quy luật phát triển cơ thể.

3.1.2. Cân nặng của học sinh THPT các dân tộc huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn

Bảng 3. Cân nặng (kg) của học sinh THPT theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						$X_1 - X_2$	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng	N	$\bar{X} \pm SD$	Tăng		
Tày	16	36	47,91±2,59	-	35	45,02±2,92	-	2,89	<0,05
	17	32	49,53±2,73	1,62	35	46,41±2,85	1,39	3,12	<0,05
	18	34	53,32±3,29	3,79	38	47,62±3,22	1,21	5,70	<0,05
	Tăng trung bình/năm			2,71	Tăng trung bình/năm		1,30		
Nùng	16	40	47,21±3,25	-	45	43,94±2,95	-	3,27	<0,05
	17	48	49,24±3,47	2,03	43	44,84±3,48	0,90	4,40	<0,05
	18	50	51,09±3,91	1,85	55	46,57±3,59	1,73	4,52	<0,05
	Tăng trung bình/năm			1,94	Tăng trung bình/năm		1,32		

Các số liệu ở bảng 3 cho thấy:

– Từ 16 đến 18 tuổi cân nặng của học sinh tăng liên tục. Cân nặng của học sinh nam tăng từ 47,21 ÷ 47,91 kg lên 51,09 ÷ 53,32 kg, mỗi năm tăng trung bình 1,94 ÷ 2,71 kg. Cân nặng của học sinh nữ tăng từ 43,94 ÷ 45,02 kg lên 46,57 ÷ 47,62cm, mỗi năm tăng trung bình 1,30 ÷ 1,32 cm.

– Theo dân tộc tốc độ tăng trưởng cân nặng có sự khác biệt. Đối với học sinh nam dân tộc Tày (2,71 kg/năm) cao hơn dân tộc Nùng (1,94 kg/năm), ở nữ học sinh dân tộc Tày (1,30 kg/năm) thấp hơn học sinh dân tộc Nùng (1,32 kg/năm).

– Theo lứa tuổi cũng có sự chênh lệch. Ở tuổi 16 chênh lệch cân nặng của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 2,89 kg ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 3,27 kg ($p < 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 3,12 kg ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 4,40 kg ($p < 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 5,70 kg ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 4,52 kg ($p < 0,05$). Cân nặng là chỉ số dùng để đánh giá về sinh dưỡng – thể lực của con người sớm nhất và phổ biến nhất. Chỉ số cân nặng được sử dụng như một yếu tố cấu thành dinh dưỡng [6] và được xem là tiêu chuẩn để đánh giá suy dinh dưỡng của cơ thể. Cũng như chiều cao đứng, cân nặng có liên quan chặt chẽ với điều kiện kinh tế - xã hội và chịu ảnh hưởng của chế độ dinh dưỡng cũng như tình trạng sức khỏe của cơ thể. Các chương trình phát triển kinh tế đối với các xã vùng cao, các xã thuộc diện đặc biệt khó khăn góp phần cải thiện mức sống, nâng cao dân trí, chế độ dinh dưỡng và phương pháp chăm sóc trẻ em tốt hơn. Tất cả điều đó tác động lớn đến sự phát triển cân nặng cũng như các chỉ số khác của học sinh THPT.

3.1.3. Vòng ngực TB của học sinh THPT các dân tộc huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn

Bảng 4. Vòng ngực TB (cm) của học sinh theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						X ₁ - X ₂	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng	n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng		
Tày	16	36	76,11±3,34	-	35	73,83±5,13	-	2,27	<0,05
	17	32	77,06±3,54	0,96	35	75,83±4,63	2,00	1,23	>0,05
	18	34	78,85±4,87	1,79	38	77,50±4,42	1,67	1,35	>0,05
	Tăng trung bình/năm			1,38	Tăng trung bình/năm		1,84		
Nùng	16	40	76,31±3,63	-	45	73,39±4,18	-	2,92	<0,05
	17	48	77,87±2,74	1,56	43	74,20±4,73	0,81	3,67	<0,05
	18	50	78,30±3,64	0,43	55	75,85±5,18	1,65	2,45	<0,05
	Tăng trung bình/năm			0,99	Tăng trung bình/năm		1,23		

Số liệu bảng 4 cho thấy:

– Từ 16 đến 18 tuổi vòng ngực trung bình của học sinh tăng đều. Ở nam tăng từ 76,11 ÷ 76,31 cm lên 78,30 ÷ 78,85 cm, mỗi năm tăng trung bình 0,99 ÷ 1,38 cm. Vòng ngực trung bình của học sinh nữ tăng từ 73,39 ÷ 73,83 cm lên 75,85 ÷ 77,50cm, mỗi năm tăng trung bình 1,23 ÷ 1,84 cm.

– Theo dân tộc tốc độ tăng trưởng vòng ngực trung bình không giống nhau. Ở cả học sinh nam và nữ, tốc độ tăng trung bình của học sinh dân tộc Tày đều cao hơn dân tộc Nùng. Đối với nam học sinh dân tộc Tày (1,38 cm/năm), dân tộc Nùng (0,99 cm/năm). Đối với nữ học sinh dân tộc Tày (1,84 cm/năm), dân tộc Nùng (1,23 cm/năm).

– Theo giới tính tốc độ tăng trưởng vòng ngực trung bình ở học sinh nam (0,99 ÷ 1,38 kg/năm) thấp hơn học sinh nữ (1,23 ÷ 1,38 kg/năm).

– Theo lứa tuổi cũng không đều. Ở tuổi 16 chênh lệch vòng ngực trung bình của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 2,27 cm ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 2,92 cm ($p < 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 1,23 cm ($p > 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 3,67 cm ($p < 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 1,35 cm ($p > 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 2,45 cm ($p < 0,05$).

Kết quả nghiên cứu cho thấy qua mỗi năm vòng ngực trung bình của học sinh nam, nữ đều tăng. Điều này phù hợp với kết quả nghiên cứu của nhiều tác giả [1], [10], [11], [13] và phù hợp với quy luật phát triển.

3.2. Các chỉ số thể lực

3.2.1. Chỉ số Pignet

Bảng 5. Chỉ số Pignet của học sinh theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						$X_1 - X_2$	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Giảm	n	$\bar{X} \pm SD$	Giảm		
Tày	16	36	35,10±6,22	-	35	30,21±8,40	-	4,89	<0,05
	17	32	34,46±5,80	0,64	35	28,95±7,30	1,26	5,51	<0,05
	18	34	32,07±5,49	2,39	38	27,80±4,43	1,15	4,27	<0,05
	Giảm trung bình/năm			1,52	Giảm trung bình/năm		1,21		
Nùng	16	40	36,26±5,35	-	45	34,17±5,96	-	2,09	>0,05
	17	48	35,20±4,77	1,06	43	33,17±5,83	1,00	2,03	>0,05
	18	50	34,76±6,40	0,44	55	31,84±7,63	1,33	2,92	<0,05
	Giảm trung bình/năm			0,75	Giảm trung bình/năm		1,17		

Số liệu bảng 5 cho thấy:

– Chỉ số Pignet của học sinh ở cả nam và nữ giảm liên tục. Chỉ số Pignet của học sinh nam giảm từ 35,10 ÷ 36,26 xuống 32,07÷34,76, mỗi năm giảm trung bình 0,75 ÷ 1,52. Chỉ số Pignet của học sinh nữ giảm từ 30,21 ÷ 34,17 xuống 27,80 ÷ 31,84, mỗi năm giảm trung bình 1,17 ÷ 1,21.

– Theo dân tộc tốc độ giảm chỉ số Pignet ở nam và nữ của học sinh dân tộc Tày cao hơn học sinh dân tộc Nùng. Đối với học sinh nam dân tộc Tày (1,52/năm), dân tộc Nùng (0,75/năm), ở nữ học sinh dân tộc Tày (1,21/năm), dân tộc Nùng (1,17/năm).

– Theo giới tính tốc độ giảm chỉ số Pignet ở học sinh nam (0,75 ÷ 1,52/năm) và nữ (1,17 ÷ 1,21 cm/năm) tương tự nhau.

– Theo lứa tuổi chỉ số Pignet của học sinh nam luôn cao hơn nữ ở cả hai dân tộc. Ở tuổi 16 chênh lệch chỉ số Pignet của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 4,89 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 2,09 ($p > 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 5,51 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 2,03 ($p > 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 4,27 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 2,92 ($p < 0,05$).

Chỉ số Pignet được xác định từ ba kích thước là chiều cao đứng, cân nặng và vòng ngực trung bình. Do tiến hành so sánh tổng cân nặng và vòng ngực trung bình với chiều cao đứng dưới dạng số hiệu nên chỉ số này càng nhỏ thì sự phát triển cơ thể càng tốt. Chỉ

số này có lợi cho người béo và thiệt cho người cao vì người cao chỉ số sẽ lớn. Chỉ số Pignet được dùng thường xuyên ở Việt Nam để đánh giá thể lực của cơ thể con người.

Đánh giá thể lực dựa vào chỉ số Pignet theo Nguyễn Quang Quyền [12] thì thể lực của học sinh nam dân tộc Tày, Nùng ở mức yếu, học sinh nữ Tày, Nùng ở mức trung bình và yếu. Điều này là hợp lí, bởi lẽ trong các lớp tuổi này sự tăng trưởng về chiều cao đã gần đến mức tối đa và đi đến ổn định còn cân nặng và vòng ngực trung bình vẫn còn tiếp tục tăng mạnh ở những lứa tuổi sau.

3.2.2. Chỉ số khối cơ thể (BMI)

Bảng 6. BMI của học sinh theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						$X_1 - X_2$	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng	n	$\bar{X} \pm SD$	Tăng		
Tày	16	36	18,94±1,11		35	20,29±1,57		-1,35	<0,05
	17	32	19,12±1,12	0,18	35	20,32±1,41	0,03	-1,20	<0,05
	18	34	19,64±1,06	0,52	38	20,38±1,25	0,06	-0,74	<0,05
	Tăng trung bình/năm			0,35	Tăng trung bình/năm			0,04	
Nùng	16	40	18,49±1,00		45	19,16±1,31		-0,67	<0,05
	17	48	18,69±1,09	0,20	43	19,36±1,50	0,20	-0,67	<0,05
	18	50	18,97±1,26	0,28	55	19,59±1,42	0,23	-0,62	<0,05
	Tăng trung bình/năm			0,24	Tăng trung bình/năm			0,22	

Số liệu bảng 6 cho thấy:

– BMI của học sinh tăng liên tục theo lứa tuổi 16 đến 18. BMI của học sinh nam tăng từ 18,49 ÷ 18,94 lên 18,97 ÷ 19,64, mỗi năm tăng trung bình 0,24 ÷ 0,35. BMI của học sinh nữ tăng từ 19,16 ÷ 20,29 lên 19,59 ÷ 20,38, mỗi năm tăng trung bình 0,04 ÷ 0,22.

– Theo dân tộc tốc độ tăng BMI của học sinh không giống nhau. Đối với học sinh nam dân tộc Tày (0,35/năm) cao hơn dân tộc Nùng (0,24/năm), ở nữ học sinh dân tộc Tày (0,04/năm) thấp hơn dân tộc Nùng (0,22/năm).

– Theo giới tính tốc độ tăng BMI ở học sinh nam (0,24 ÷ 0,35/năm) cao hơn ở học sinh nữ (0,04 ÷ 0,22/năm).

– Theo lứa tuổi BMI của học sinh nam luôn thấp hơn nữ ở cả dân tộc Tày và Nùng. Ở tuổi 16 chênh lệch BMI của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 1,35 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 0,67 ($p > 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 1,20 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 0,67 ($p > 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 0,74 ($p < 0,05$), đối với dân tộc Nùng là 0,62 ($p < 0,05$).

BMI còn gọi là chỉ số khối cơ thể cho phép so sánh sức nặng tương đối của người có chiều cao khác nhau. Chỉ số này tương đối thuận lợi khi nghiên cứu, đặc biệt trên số lượng đối tượng lớn. BMI được xác định thông qua mối quan hệ giữa cân nặng và chiều cao đúng. Người càng nặng cân thì BMI càng lớn. Căn cứ vào BMI người ta có thể đánh giá tình trạng dinh dưỡng của cơ thể [14].

Căn cứ đánh giá BMI của FAO (theo [5]) thì thể lực của học sinh THPT dân tộc Tày và Nùng ở mức bình thường. Đây là dấu hiệu tốt cho sự phát triển thể lực của học sinh THPT dân tộc Tày, Nùng nói chung và của trẻ em trên địa bàn huyện Bình Gia nói riêng, dù điều kiện kinh tế - xã hội của nhân dân còn nhiều khó khăn.

3.3. Tỷ lệ phần trăm mỡ

Số liệu bảng 7 (trang sau) cho thấy:

– Tỷ lệ phần trăm mỡ giảm liên tục từ 16 đến 18 tuổi, tuy không nhiều. Tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh nam giảm từ 12,02 ÷ 12,19 % xuống 11,69 ÷ 12,01 %, mỗi năm giảm trung bình 0,09 ÷ 0,17 %. Tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh nữ giảm từ 21,05 ÷ 22,35 % xuống 21,00 ÷ 21,68 %, mỗi năm tăng trung bình 0,03 ÷ 0,34 %.

– Theo dân tộc tốc độ giảm tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh không giống nhau. Đối với học sinh nam dân tộc Tày (0,17 %/năm) cao hơn dân tộc Nùng (0,09 %/năm), ở nữ học sinh dân tộc Tày (0,03 %/năm) thấp hơn dân tộc Nùng (0,34 %/năm).

– Theo lứa tuổi tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh có sự chênh lệch đáng kể, tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh nam luôn thấp hơn nữ ở cả dân tộc Tày và Nùng. Ở tuổi 16 chênh lệch khối của học sinh nam và nữ đối với học sinh dân tộc Tày là 9,03 % ($p < 0,05$), dân tộc Nùng là 10,16 % ($p < 0,05$). Ở tuổi 17 mức chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 9,16 % ($p < 0,05$), dân tộc Nùng là 10,10% ($p < 0,05$). Ở tuổi 18 chênh lệch đối với học sinh dân tộc Tày là 9,31 % ($p < 0,05$), dân tộc Nùng là 9,67 % ($p < 0,05$).

Bảng 7. Tỷ lệ phần trăm mỡ (%) của học sinh theo lứa tuổi, giới tính, dân tộc

Dân tộc	Tuổi	Giới tính						$X_1 - X_2$	P(1-2)
		Nam (1)			Nữ (2)				
		n	$\bar{X} \pm SD$	Giảm	n	$\bar{X} \pm SD$	Giảm		
Tày	16	36	12,02±0,59	-	35	21,05±0,88	-	-9,03	<0,05
	17	32	11,86±0,75	0,16	35	21,02±1,08	0,03	-9,16	<0,05
	18	34	11,69±0,92	0,17	38	21,00±1,23	0,02	-9,31	<0,05
	Giảm trung bình/năm			0,17	Giảm trung bình/năm		0,03		
Nùng	16	40	12,19±0,64	-	45	22,35±1,69	-	-10,16	<0,05
	17	48	12,14±0,75	0,05	43	22,24±1,79	0,11	-10,10	<0,05
	18	50	12,01±0,86	0,13	55	21,68±1,24	0,56	-9,67	<0,05
	Giảm trung bình/năm			0,09	Giảm trung bình/năm		0,34		

Tỉ lệ phần trăm mỡ được xác định qua cân nặng và khối mỡ. Kết quả nghiên cứu cho thấy từ 16-18 tuổi khối mỡ tăng mạnh ở học sinh nữ, do đó theo lứa tuổi tỉ lệ phần trăm mỡ ở nữ cao hơn nam đáng kể (gần gấp đôi). Vì đây là giai đoạn cuối của tuổi dậy thì ở nữ, nên có hiện tượng tích mỡ.

Cũng như chỉ số khối mỡ và khối nạc, tỉ lệ phần trăm mỡ chúng tôi sử dụng công thức tính của Nguyễn Quang Quyền và Lê Gia Vinh [3], nghiên cứu của chúng tôi cho kết quả phù hợp với một số nghiên cứu khác như nghiên cứu của Lê Hữu Hưng [7], Đào Huy Khuê [8].

Từ các kết quả nghiên cứu về hình thái - thể lực của học sinh THPT dân tộc Tày, Nùng của huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn nêu trên có thể nhận định rằng, giai đoạn 16-18 tuổi là giai đoạn các chỉ số hình thái - thể lực vẫn có sự tăng trưởng đặc biệt là ở học sinh nam còn ở học sinh nữ thì đã chậm lại nhưng vẫn tiếp tục tăng. Điều này có thể lí giải vì tuổi dậy thì của học sinh nữ bắt đầu sớm và cũng kết thúc sớm hơn so với học sinh nam. Khi đến tuổi 16-18 thì hầu hết các em nữ đã qua tuổi dậy thì còn đối với các em nam nhiều em vẫn trong giai đoạn dậy thì nên có sự tăng trưởng nhanh về các chỉ số hình thái – thể lực.

So sánh với các nghiên cứu của các tác giả trước đó, kết quả nghiên cứu hình thái - thể lực của chúng tôi cao hơn. Theo chúng tôi sự khác biệt này chủ yếu do sự phát triển về điều kiện kinh tế - xã hội trong những năm gần đây dù vẫn còn gặp nhiều khó khăn, nhờ vậy mà chế độ dinh dưỡng, sự chăm sóc cả về vật chất và tinh thần, việc rèn luyện thể lực, tập thể dục, thể thao ở gia đình và nhà trường được cải thiện tốt hơn, sự vận động khi tham gia vào sản xuất nông nghiệp phụ giúp gia đình, di chuyển chủ yếu vẫn là đi bộ trên địa hình đồi, núi dốc có lẽ cũng ảnh hưởng tới các chỉ số hình thái – thể lực.

Mặt khác, có sự trao đổi nguồn gen giữa bộ phận dân cư mới và người bản địa. Từ những năm 90 của thế kỉ 20, một bộ phận dân cư từ các tỉnh Đồng bằng sông Hồng (Nam Định, Thái Bình, Hà Nội,...) di phát triển kinh tế mới, đã đến và định cư lâu dài ở nhiều vùng của các tỉnh miền núi phía Bắc, trong đó huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn. Có thể vì thế mà một phần yếu tố di truyền đã được cải thiện, ảnh hưởng tới các chỉ số sinh học của trẻ em nói chung và học sinh THPT nói riêng.

4. KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

4.1. Kết luận

Qua kết quả nghiên cứu một số chỉ số sinh học của học sinh THPT dân tộc Tày, Nùng huyện Bình Gia, tỉnh Lạng Sơn, chúng tôi rút ra một số kết luận sau:

1. Chiều cao đứng và mức tăng trung bình chiều cao đứng của học sinh nam cao hơn nữ theo lứa tuổi.
2. Cân nặng và mức tăng trung bình cân nặng của học sinh nam cao hơn nữ theo lứa tuổi.

3. Vòng ngực trung bình của học sinh nam cao hơn nữ, mức tăng trung bình vòng ngực trung bình của học sinh nam thấp hơn nữ theo lứa tuổi.

4. Chỉ số Pignet của học sinh nam cao hơn nữ, mức giảm trung bình chỉ số Pignet của học sinh nam và nữ chênh lệch nhau không đáng kể theo lứa tuổi. Đánh giá thể lực học sinh dựa vào Pignet thì học sinh nam ở mức yếu, nữ ở mức trung bình và yếu.

5. Chỉ số khối cơ thể và mức tăng trung bình chỉ số khối cơ thể của học sinh nam và nữ chênh lệch nhau không đáng kể theo lứa tuổi. Căn cứ vào BMI đánh giá thể lực thì học sinh nam và nữ đều ở mức bình thường.

6. Tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh nam thấp hơn nữ, mức giảm trung bình tỷ lệ phần trăm mỡ của học sinh nữ cao hơn nam theo lứa tuổi.

4.2. Kiến nghị

1. Các chỉ số về hình thái - thể lực và chức năng sinh lí của học sinh thường xuyên thay đổi và phụ thuộc vào yếu tố di truyền, điều kiện sống, giới tính, lứa tuổi. Vì vậy việc nghiên cứu các chỉ số này cần được tiến hành thường xuyên và có phân tích tổng hợp lại để có các dữ liệu làm cơ sở cho việc đề xuất các biện pháp nâng cao chất lượng con người, đề xuất các biện pháp giáo dục và đào tạo sao cho phù hợp. Cần có nhiều hơn nữa các công trình nghiên cứu về chỉ số sinh học trên đối tượng học sinh THPT trong cả nước, đặc biệt là đối tượng học sinh dân tộc ít người ở vùng có điều kiện kinh tế - xã hội gặp nhiều khó khăn.

2. Bên cạnh việc giáo dục tri thức cần quan tâm hơn đến việc rèn luyện thể lực để nâng cao sức khỏe, tăng cường khả năng thích nghi của học sinh với môi trường sống.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bộ Y tế (2003), *Các giá trị sinh học người Việt Nam bình thường thập kỉ 90 - thế kỉ XX*, Nxb Y học, Hà Nội.
2. Phan Văn Duyệt, Lê Nam Trà (1996), "Một số vấn đề chung về phương pháp luận trong nghiên cứu các chỉ tiêu sinh học", *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ số sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.13-16.
3. Trịnh Bình Dy, Đỗ Đình Hồ, Phạm Khuê, Nguyễn Quang Quyền, Lê Thành Uyên (1982), *Về những thông số sinh lí học người Việt Nam*, Nxb Khoa học Kỹ thuật, Hà Nội.
4. Thắm Thị Hoàng Điệp, Nguyễn Quang Quyền, Vũ Huy Khôi và cs (1996), "Một số nhận xét về chiều cao, vòng đầu, vòng ngực của người Việt Nam từ 1 đến 55 tuổi", *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ tiêu sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.68-71.
5. Mai Văn Hưng (2003), *Nghiên cứu một số chỉ số sinh học và năng lực trí tuệ của sinh viên ở một số trường đại học phía bắc Việt Nam*, Luận án Tiến sĩ Sinh học, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội.

6. Mai Văn Hưng và cs (2012), "Nghiên cứu một số chỉ số sinh học tuổi dậy thì của học sinh trung học cơ sở Hà Nội và những định hướng giáo dục giới tính trong nhà trường", *Báo cáo khoa học tổng kết đề tài, Trường Đại học Giáo dục – Đại học Quốc gia Hà Nội*, tr.6-16.
7. Lê Hữu Hưng, Vũ Duy San và cs (1996), "Hình thái thể lực, khối mỡ khối nạc và bề dày lớp mỡ dưới da của công nhân liên hiệp xí nghiệp Mộc Châu", *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ số sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.72-74.
8. Đào Huy Khuê, Nguyễn Hữu Cường và Nguyễn Yên (1996), "Các chỉ số dinh dưỡng của người lớn một xã thuộc tỉnh Hà Tây", *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ số sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.74-75.
9. Trần Thị Loan (2002), *Nghiên cứu một số chỉ số thể lực và trí tuệ của học sinh từ 6 đến 17 tuổi tại quận Cầu Giấy – Hà Nội*, Luận án Tiến sĩ Sinh học Trường Đại học Sư phạm Hà Nội.
10. Trần Đình Long và cs (1996), "Nghiên cứu sự phát triển cơ thể lứa tuổi đến trường phổ thông (6-18 tuổi)", *Đề tài thuộc nhánh dự án "Nghiên cứu các chỉ số sinh học người Việt Nam thập kỷ 90"*.
11. Trịnh Văn Minh, Trần Sinh Vương và cs (1996), "Kết quả điều tra cơ bản một số chỉ tiêu nhân trắc của cư dân trường thành phường Thượng Đình và xã Định Công Hà Nội", *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ tiêu sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.49-63.
12. Nguyễn Quang Quyền (1984), *Nhân trắc học và sự ứng dụng nghiên cứu trên người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội.
13. Trần Trọng Thủy (2006), *Các chỉ số cơ bản về sinh lí và tâm lí học sinh phổ thông hiện nay*, Trung tâm Tâm lí học và Sinh lí lứa tuổi, Viện Chiến lược và Chương trình Giáo dục, Nxb Giáo dục, Hà Nội.
14. Lê Nam Trà và cs (1996), *Kết quả bước đầu nghiên cứu một số chỉ tiêu sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội.
15. Nguyễn Tấn Gi Trọng và cs (1975), *Hàng số sinh học người Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, tr.86-92.
16. Quyết định số 579/QĐ-TTg, ngày 19 tháng 04 năm 2011 của Thủ tướng Chính phủ về phê duyệt chiến lược phát triển nhân lực Việt Nam thời kì 2011-2020.

RESEARCHING ON MORPHOLOGICAL AND PHYSICAL INDEXES OF ETHNIC HIGH SCHOOL PUPILS IN BINH GIA DISTRICT, LANG SON PROVINCE

Abstract: *The study was conducted among 491 high school pupils of age 16 to 18 years old, including ethnic minorities: Tay (42,77%), Nung (57,23%) in Binh Gia District, Lang Son Province. The research aims to identify biological indicators of male and female students, which provided Vietnamese biological values in the current period. The result showed the difference of morphological indexes: Height (standing), Weight, Chest size (average) basing on age and gender factors and two physical indexes including Pignet and BMI.*

Keywords: *height, weight, physical index, ethnic group, high school.*

DỰA TRÊN ĐỒ THỊ CHƯƠNG TRÌNH PHÂN TÍCH TÍNH KHẢ ĐẠT CỦA CHƯƠNG TRÌNH

Nguyễn Đức Giang¹, Nguyễn Văn Trãi, Đinh Quang Đạt

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

Tóm tắt: Ứng dụng kỹ thuật trừu tượng hoá trong phân tích chương trình (program analysis) giúp mở rộng phạm vi xử lý tới các hệ thống có không gian trạng thái lớn. Các kỹ thuật trừu tượng đang được sử dụng ngày càng nhiều trong phân tích phát hiện lỗi chương trình. Quá trình phân tích phát hiện lỗi một chương trình thường gắn chặt với việc xác định tính khả đạt (reachability) của chương trình đó. Nếu tính khả đạt được chứng minh là đúng trên mô hình trừu tượng, là xấp xỉ của chương trình, thì nó cũng đúng trong chương trình thực do tính bảo toàn của phép trừu tượng hoá. Tuy nhiên, sử dụng các kỹ thuật trừu tượng đôi khi làm mất đi tính chính xác trong phân tích tính khả đạt do một số trạng thái đã bị bỏ qua, đặc biệt khi có sự xuất hiện của các vòng lặp. Một số giải pháp hiện thời giải quyết vấn đề này bằng cách sử dụng các tập bị chặn dưới và các hàm xếp hạng (ranking function). Giải pháp của chúng tôi giải quyết vấn đề theo một cách tiếp cận khác, không sử dụng các tập bị chặn dưới và hàm xếp hạng. Thay vào đó, chúng tôi dựa trên việc kiểm tra các điều kiện trên đồ thị chương trình (program graph) ứng với hệ thống thực, các điều kiện này được kiểm tra tự động đối với mô hình trừu tượng.

Từ khoá: Đồ thị chương trình, tính khả đạt, hàm xếp hạng, kiểm chứng mô hình

1. GIỚI THIỆU

Hiện nay, trong bối cảnh phát triển nhanh chóng của lĩnh vực công nghệ thông tin (CNTT), các hệ thống phần mềm trở lên phổ biến và có tầm ảnh hưởng quan trọng tới nhiều hoạt động kinh tế - xã hội. Mặc dù được sử dụng phổ biến, có một thực tế là các hệ thống phần mềm thường xuyên mắc các lỗi nghiêm trọng trong cả thiết kế và cài đặt. Những lỗi này trở thành mục tiêu của các cuộc tấn công phá hoại, đặt sinh mạng và tài sản của người dân và xã hội dưới nhiều hiểm họa.

Thống kê cho thấy hầu hết các hệ thống phần mềm hiện nay đều không được kiểm tra, hoặc được kiểm tra không đầy đủ trước khi đưa vào sử dụng. Lí do chính là do việc sử dụng các kỹ thuật kiểm tra không hình thức (informal methods) như kiểm thử (testing) hoặc tái duyệt mã (code review). Các kỹ thuật này chỉ kiểm tra một số hạn chế các trường hợp

¹ Nhận bài ngày 23.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Đức Giang; Email: ndgiang@ioit.ac.vn

thực thi, và do đó không thể khẳng định được tính đúng của chương trình. Tuy nhiên, do tính dễ ứng dụng, miền ứng dụng rộng và chi phí hợp lí mà các kĩ thuật này đang được sử dụng rộng rãi cho đa số các hệ thống không đòi hỏi tính an toàn quá cao. Ngược lại, các phương pháp hình thức (formal methods) như kiểm chứng mô hình (model checking) [3], diễn giải trừu tượng (abstract interpretation) [1], chứng minh định lí (theorem prover) [11]... lại tập trung vào các hệ thống quan trọng, cần đảm bảo hoạt động đúng đắn, an toàn và chấp nhận chi phí phát triển lớn. Các phương pháp hình thức thường tiến hành phân tích hệ thống dưới các lập luận chặt chẽ của toán học, và kiểm tra toàn bộ các khả năng thực thi có thể để khẳng định được tính đúng của chương trình.

Nhìn chung, các phương pháp hình thức thường được thực thi bằng cách xây dựng một mô hình toán học của hệ thống, sau đó các tính chất cần kiểm tra được xác minh trên mô hình toán học này. Một trong những mô hình toán học phổ biến là hệ dịch chuyển trạng thái, hệ dịch chuyển trạng thái là đồ thị mô tả dịch chuyển giữa các trạng thái của chương trình dọc theo tất cả các thực thi có thể [3]. Thêm nữa, đa số các phân tích trên chương trình thường liên quan chặt chẽ tới việc xác định tính khả đạt của chương trình đó. Xác định tính khả đạt trên mô hình dịch chuyển của các hệ thống có không gian trạng thái lớn thường tốn nhiều chi phí, do đó người ta phải sử dụng thêm các kĩ thuật trừu tượng. Tính khả đạt khi được chứng minh trên mô hình trừu tượng đồng nghĩa với việc nó cũng được thoả mãn trên mô hình cụ thể, do tính bảo toàn của phép trừu tượng hoá [5]. Tuy nhiên, phép trừu tượng đôi khi làm mất đi tính chính xác khi có sự xuất hiện của vòng lặp, điều này ảnh hưởng trực tiếp tới kết quả xác định tính khả đạt, quá trình phân tích tính khả đạt trên mô hình trừu tượng đã bỏ qua các trạng thái chi tiết mà chương trình tới được thông qua vòng lặp.

Trong nhiều trường hợp, hệ thống là lớn, tuy nhiên không gian trạng thái vẫn hữu hạn. Mục tiêu của bài báo nhằm đưa ra giải pháp để giải quyết vấn đề phân tích tính khả đạt trong điều kiện như vậy, thông qua việc sử dụng một mô hình trừu tượng hoá vị từ để giảm bớt chi phí tính toán nhưng không làm mất đi tính chính xác khi có sự xuất hiện của vòng lặp, hoặc lời gọi đệ quy.

2. NỀN TẢNG

2.1. Tính khả đạt

2.1.1. Hệ dịch chuyển trạng thái

a. Khái niệm

Trong khoa học máy tính hệ dịch chuyển trạng thái thường được sử dụng như một mô hình mô tả hành vi của hệ thống. Về cơ bản hệ dịch chuyển trạng thái là một đồ thị có

hướng, các nút biểu diễn trạng thái của hệ thống, các cạnh mô hình sự dịch chuyển trạng thái. Một trạng thái miêu tả các thông tin về hệ thống tại một thời điểm nhất định trong chuỗi các hành vi của hệ thống đó. Thông thường, trạng thái trong chương trình máy tính tuần tự thể hiện qua giá trị hiện thời của tất cả các biến trong chương trình và con đếm chương trình trở tới lệnh tiếp theo sẽ được thực hiện. Các dịch chuyển quy định làm thế nào để hệ thống có thể chuyển từ một trạng thái này sang một trạng thái khác. Trong các chương trình tuần tự, một dịch chuyển thường xảy ra khi thực thi một đoạn mã làm thay đổi giá trị các biến và con đếm chương trình.

Hệ dịch chuyển trạng thái 3 (Transition System - TS) là một bộ (S, \rightarrow, I) trong đó:

- S là tập các trạng thái;
- $\rightarrow \subseteq S \times S$ là tập quan hệ dịch chuyển;
- $I \subseteq S$ là tập trạng thái khởi đầu.

Hoạt động của hệ dịch chuyển có thể mô tả như sau. Hệ dịch chuyển bắt đầu với một trong các trạng thái $s_0 \in I$ và biến đổi theo các quan hệ dịch chuyển \rightarrow . Nghĩa là, nếu s là trạng thái hiện thời, thì một dịch chuyển $(s \rightarrow s')$ bắt đầu từ trạng thái s được lựa chọn không đơn định và thực hiện. Hệ thống chuyển từ trạng thái s tới trạng thái s' . Quá trình này tiếp tục lặp lại với trạng thái s' và kết thúc khi gặp một trạng thái mong đợi hoặc không tồn tại dịch chuyển nào tiếp theo. Trong trường hợp tại một trạng thái có nhiều dịch chuyển có thể lựa chọn hoặc có nhiều trạng thái khởi đầu thì việc lựa chọn dịch chuyển và một trong các trạng thái khởi đầu là không đơn định.

Cho một trạng thái $c \in S$. Kí hiệu

- *successor* - $s(c)$ là tập các trạng thái kế tiếp của c : $s(c) = \{c' \in S \mid c \rightarrow c'\}$;
- *predecessor* - $p(c)$ là tập các trạng thái liền kề trước của c : $p(c) = \{c' \in S \mid c' \rightarrow c\}$;
- $c \rightarrow^* c'$: trạng thái c' là tới được (khả đạt) từ c thông qua tập dịch chuyển \rightarrow

Một hệ dịch chuyển trạng thái TS được gọi là đơn định (deterministic) nếu mọi trạng thái chỉ có một trạng thái kế tiếp duy nhất. Một TS là đơn định nghịch (reverse-deterministic) nếu mỗi trạng thái chỉ có một phần tử liền kề trước duy nhất.

Ví dụ: Xét ví dụ 1 về phương thức *Increment* như sau:

```
void increment (int n)
```

```
{
```

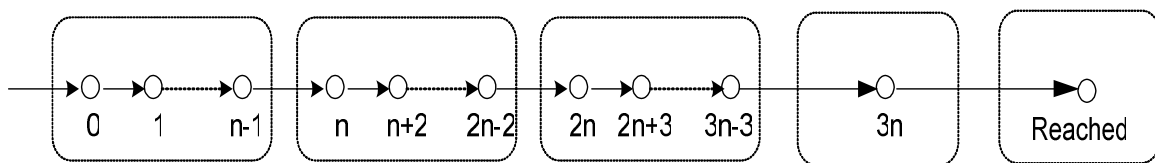
```
    int x:=0;
```

```

while (x < n)
do x:=x+1;
while (x < 2n)
do x:=x+2;
while (x < 3n)
do x:=x+3;
printf("reached");
}

```

Giả sử trạng thái của chương trình được xây dựng dựa trên tập giá trị có thể của biến x thì hệ dịch chuyển trạng thái của phương thức *Increment* trên được xây dựng như hình 1.



Hình 1. Hệ dịch chuyển của thủ tục *Increment*

Hệ dịch chuyển trạng thái trong hình 1 mô tả quá trình thay đổi trạng thái chương trình thông qua giá trị của biến x . Lúc đầu khi khởi tạo chương trình x được gán giá trị bằng 0. Sau vòng lặp thứ nhất x đạt tới giá trị n , thoát khỏi vòng lặp thứ nhất, giá trị n của biến x được coi là giá trị khởi tạo với vòng lặp thứ 2. Tương tự như thế, x đạt đến giá trị $3n$ và thoát khỏi vòng lặp cuối cùng và chương trình thực thi lệnh *printf ("reached")* để in ra chuỗi "reached".

2.1.2. Tính khả đạt (Reachability)

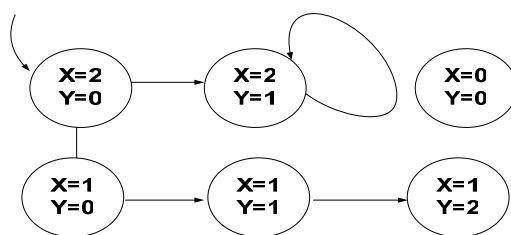
Cho hệ dịch chuyển $TS = (S, \rightarrow, I)$. Một trạng thái $s \in S$ được gọi là khả đạt trong TS nếu tồn tại một dãy dịch chuyển trạng thái xuất phát từ một trạng thái khởi tạo $s_0 \in I$, có độ dài hữu hạn như sau:

$$s_0 \rightarrow s_1 \rightarrow s_2 \cdots \rightarrow s_{n-1} \rightarrow s_n = s$$

Trong ví dụ 1 về phương thức *Increment* trên, một minh họa về tính khả đạt là xác định xem liệu chương trình có thực sự đạt tới trạng thái chuỗi "reached" được in ra hay không, đồng nghĩa với việc chương trình đạt tới trạng thái lệnh *printf ("reached")* được thực thi. Trên hệ dịch chuyển trạng thái để thấy điều này đồng nghĩa với tính khả đạt của trạng thái " $x = 3n$ ", nếu trạng thái này đạt đến, chắc chắn lệnh *printf ("reached")* sẽ được thực thi.

2.2. Trừu tượng hoá vị từ

Các kiểm tra dựa trên hệ dịch chuyển của hệ thống thường xuyên gặp phải vấn đề bùng nổ không gian trạng thái do thực tế phức tạp của chương trình và miền giá trị của biến lớn. Trừu tượng hoá vị từ (predicate abstraction) trong khoảng thời gian gần đây nổi lên là một kỹ thuật đầy hứa hẹn giúp giải quyết bài toán không gian trạng thái lớn. Phương pháp trừu tượng hoá này làm giảm kích cỡ của mô hình bằng cách xoá bỏ những chi tiết dư thừa, chỉ tập trung theo các dữ liệu cần thiết. Ý tưởng của phương pháp trừu tượng hoá vị từ là sử dụng các vị từ để đại diện cho các khoảng, các bộ dữ liệu, hoặc một số các trạng thái cụ thể cùng thoả mãn một vị từ. Một ví dụ minh họa sử dụng trừu tượng hoá vị từ cho mô hình của chương trình có các trạng thái được biểu diễn thông qua giá trị của hai biến x, y như hình 2 và hình 3.

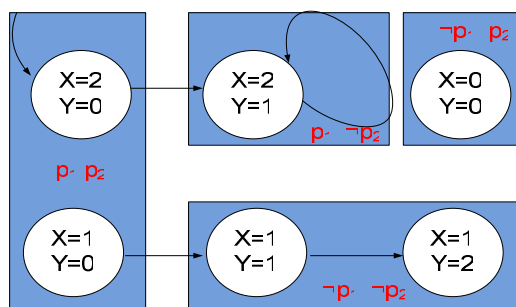


Hình 2. Mô hình chi tiết (ví dụ 1)

Sử dụng hai vị từ p_1 và p_2 như sau để tiến hành trừu tượng hoá:

- $p_1 \Leftrightarrow x > y$
- $p_2 \Leftrightarrow y = 0$

Mô hình chi tiết trong hình 2 được trừu tượng hoá thành mô hình như trong hình 3.



Hình 3. Mô hình sau khi trừu tượng hoá theo vị từ p_1, p_2 (ví dụ 1)

Cặp trạng thái $(x=2; y=0)$ và $(x=1; y=0)$ thoả mãn hai thuộc tính $x > y$ và $y=0$ do đó cặp hai trạng thái này thoả mãn p_1 và p_2 . Trạng thái $(x=2; y=1)$ thoả mãn thuộc tính $x > y$ nhưng không thoả mãn trạng thái $y=0$ nên trạng thái này thoả mãn p_1 và không thoả mãn

p_2 ($\neg p_2$). Tương tự như vậy với các trạng thái còn lại. Dễ thấy số lượng trạng thái trên mô hình trừu tượng được giảm thiểu so với số trạng thái trên mô hình chi tiết, đồng thời thông tin cũng được lược bỏ bớt tính chi tiết sau khi các trạng thái được đại diện bởi các giá trị của các vị từ trừu tượng.

Một cách hình thức, có thể định nghĩa trừu tượng hoá vị từ như sau [5]: Đặt $\Phi = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$ là tập các vị từ trên tập X các biến của chương trình, c là một trạng thái của chương trình, φ là một công thức logic, kí hiệu $c \models \varphi$ tức là công thức φ là đúng (có giá trị *true*) ở trạng thái c . Với tập $a \subseteq \Phi$ và một trạng thái c , ta nói rằng c thoả mãn a khi và chỉ khi $c \models \bigwedge_{\theta_i \in a} \theta_i$.

Trong trừu tượng hoá vị từ, nhiều trạng thái chi tiết được kết hợp vào trong một trạng thái trừu tượng. Trạng thái trừu tượng là trạng thái được định nghĩa bởi một tập con của tập các vị từ. Do đó, một trạng thái trừu tượng được cho bởi một tập hợp các vị từ $a \subseteq \Phi$. Đôi khi a được biểu diễn dưới dạng một công thức, là hội của các vị từ trong a . Ví dụ, nếu $a = \{(x \geq y), (0 \leq x < n)\}$ thì a cũng được biểu diễn bởi công thức $(x \geq y) \wedge (0 \leq x < n)$. Kí hiệu $\gamma(a)$ để chỉ tập hợp các trạng thái chi tiết ứng với trạng thái trừu tượng a , tức là tất cả các trạng thái c thoả mãn a , $\gamma(a) = \{c \mid c \models a\}$.

2.3. Các dịch chuyển trên mô hình trừu tượng

Cho một hệ dịch chuyển trạng thái TS và tập các vị từ trừu tượng Φ . Lí thuyết trừu tượng hoá vị từ 4 chỉ ra trong hệ dịch chuyển trừu tượng sẽ bao gồm 3 loại quan hệ dịch chuyển có thể giữa hai trạng thái trừu tượng a và a' ($a, a' \subseteq \Phi$).

- $may(a, a')$ nếu tồn tại một trạng thái $c \in \gamma(a)$ và $c' \in \gamma(a')$, sao cho $c \rightarrow c'$
- $must^+(a, a')$ nếu và chỉ nếu với mọi $c \in \gamma(a)$, tồn tại $c' \in \gamma(a')$, sao cho $c \rightarrow c'$
- $must^-(a, a')$ nếu và chỉ nếu với mọi $c' \in \gamma(a')$, tồn tại $c \in \gamma(a)$, sao cho $c \rightarrow c'$

Theo lí thuyết trừu tượng hoá vị từ các dịch chuyển $must^{(+,-)}$ đóng với tính bắc cầu, và có thể sử dụng để chứng minh tính khả đạt trong các hệ thống. Nếu có một chuỗi các dịch chuyển $must^+$ liên tiếp từ a đến a' (kí hiệu bởi $must^{+*}(a, a')$) thì với mọi $c \in \gamma(a)$, tồn tại $c' \in \gamma(a')$, mà $c \rightarrow^* c'$. Nếu có một chuỗi các dịch chuyển $must^-$ liên tiếp từ a đến a' (được kí hiệu bởi $must^{-*}(a, a')$) thì với mọi $c' \in \gamma(a')$, tồn tại $c \in \gamma(a)$, mà $c \rightarrow^* c'$. Ngược lại các quan hệ dịch chuyển may không đóng với tính bắc cầu. Dễ thấy, ví dụ trường hợp có $may(a, a')$, $may(a', a'')$, nhưng với mọi $c \in a$ và $c'' \in a''$ không thể khẳng định $c \rightarrow^* c''$.

2.4. Tiên điều kiện yếu nhất và hậu điều kiện mạnh nhất

Trong nhiều ứng dụng của trừu tượng hoá vị từ, tập vị từ trừu tượng Φ bao gồm một vị từ biểu diễn con đếm chương trình (program counter). Do đó, mỗi trạng thái trừu tượng sẽ liên quan chặt chẽ đến một vị trí của chương trình, vì vậy đồng nghĩa nó cũng liên quan đến một câu lệnh. Cho một câu lệnh s và một vị từ e trên tập X các biến của chương trình, tiên điều kiện yếu nhất (weakest precondition) - $WP(s, e)$ và hậu điều kiện mạnh nhất (strongest postcondition)- $SP(s, e)$ được định nghĩa như sau [5]:

- Nếu s được thực thi từ một trạng thái thoả mãn $WP(s, e)$ thì chương trình sẽ chuyển đến một trạng thái thoả mãn e , và $WP(s, e)$ là vị từ yếu nhất đảm bảo điều này.
- Nếu s được thực thi từ một trạng thái thoả mãn $SP(s, e)$ thì chương trình sẽ chuyển đến một trạng thái thoả mãn e , và $SP(s, e)$ là vị từ mạnh nhất thoả mãn điều này.

Ví dụ, trong thủ tục Increment ở ví dụ 1, chúng ta có $WP(x := x + 2, n \leq x \leq 2n) = n \leq x + 2 < 2n$, $SP(x := x + 2, n \leq x < 2n) = n + 2 \leq x < 2n + 2$.

Các dịch chuyển $must^{(+,-)}$ có thể được tính toán tự động sử dụng các tiên điều kiện yếu nhất và hậu điều kiện mạnh nhất. Thực tế, câu lệnh s thực thi tạo ra dịch chuyển $must^+(a, a')$ khi và chỉ khi $a \Rightarrow WP(s, a')$, và tạo ra dịch chuyển $must^-(a, a')$ khi và chỉ khi $a' \Rightarrow SP(s, a)$. Đôi khi người ta cũng sử dụng khái niệm vị từ tiên điều kiện (pre-predicate). Cho một câu lệnh s và một vị từ e , nếu s được thực thi từ một trạng thái thoả mãn $pre(s, e)$ thì chương trình sẽ chuyển tới một trạng thái thoả mãn e . Dễ thấy, $pre(s, e) = \neg WP(s, \neg e)$.

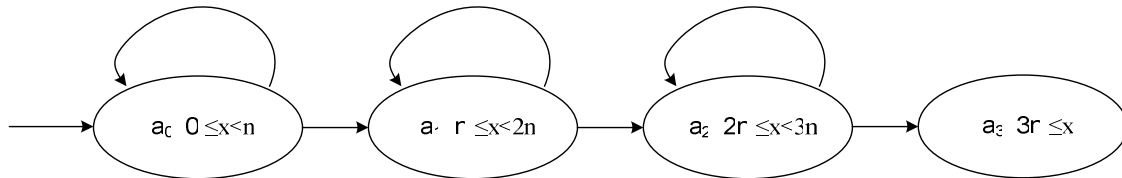
3. MỘT PHƯƠNG PHÁP TRỪU TƯỢNG HOÁ ĐỂ PHÂN TÍCH TÍNH KHẢ ĐẠT

3.1. Mục tiêu

Trừu tượng hoá vị từ được sử dụng giúp phân tích những chương trình có không gian trạng thái lớn. Phương pháp trừu tượng này rất hữu ích trong việc chứng minh các tính chất của chương trình nhưng có nhiều hạn chế trong việc xác định lỗi [5]. Một trong những lí do chính là việc phân tích phát hiện lỗi phụ thuộc rất nhiều vào xác định tính khả đạt, tuy nhiên phân tích tính khả đạt khi đã ứng dụng trừu tượng hoá vị từ lại bỏ qua nhiều trạng thái của hệ thống khi có sự xuất hiện của vòng lặp [6] [7]. Xét thủ tục *Increment* trong ví

dụ trên, thủ tục này đơn giản là tăng giá trị của biến x , và dễ dàng để thấy rằng giá trị của x sẽ đạt đến $3n$ và lệnh `printf("reached")` sẽ được thực thi. Tuy nhiên, hầu hết các phương pháp phân tích sẽ sinh ra một vị từ cho mỗi vòng lặp, dẫn tới bùng nổ không gian trạng thái và do đó nhanh chóng vượt quá khả năng xử lý của máy tính.

Xét thủ tục Increment trong ví dụ 1 và hệ dịch chuyển trừu tượng của thủ tục này theo các vị từ $\{0 \leq x < n, n \leq x < 2n, 2n \leq x < 3n, 3n \leq x\}$ được minh hoạ trong hình.



Hình 4. Hệ dịch chuyển trừu tượng của thủ tục Increment

Một cách chi tiết, hình 1 và hình 4, biểu diễn không gian trạng thái của thủ tục Increment và mô hình trừu tượng hoá theo bộ các vị từ $\{0 \leq x < n, n \leq x < 2n, 2n \leq x < 3n, 3n \leq x\}$, qua phép trừu tượng vị từ, các quan hệ dịch chuyển trở thành *may* và không đóng với phép bắc cầu, do đó không thể dựa trên mô hình trừu tượng để kết luận rằng, một trạng thái cụ thể thuộc a_3 là tới được từ một trạng thái cụ thể thuộc a_0 . Nói cách khác, trong hệ dịch chuyển trừu tượng, tất cả các dịch chuyển đều mang tính "có thể". Mọi trạng thái chi tiết trong a_3 đều có một trạng thái liền trước trong a_2 , vì vậy ta có $must^-(a_2, a_3)$. Tất cả các quan hệ dịch chuyển còn lại trong mô hình trừu tượng đều là các dịch chuyển *may*. Do đó không thể kết luận rằng trạng thái in ra chuỗi "reached" là tới được từ trạng thái khởi tạo. Mục tiêu bài báo muốn trình bày là cách tiếp cận để xác định tính khả đạt trong trường hợp như vậy mà không cần tinh chỉnh lại mô hình trừu tượng để bổ sung các trạng thái tới được qua vòng lặp.

Chứng minh tính khả đạt khi xuất hiện các vòng lặp hiện nay là một thách thức lớn đối với trừu tượng hoá vị từ và phân tích chương trình. Gần đây đã có những tiến bộ đáng kể trong chứng minh tự động tính kết thúc của chương trình [8], [9]. Các tiến bộ này có ý nghĩa lớn trong việc xác định tính khả đạt. Ý tưởng chính trong các chứng minh này là sử dụng các hàm thứ hạng và tập bị chặn dưới. Tuy nhiên, kĩ thuật này yêu cầu sinh ra các hàm thứ hạng và thường không phù hợp để chứng minh tồn tại một đường dẫn tới được một trạng thái cụ thể trong hệ thống không đơn định.

Trong nhiều trường hợp (đặc biệt, trong tất cả các hệ thống phần mềm thực tế), các hệ thống thường rất lớn nhưng vẫn có hữu hạn trạng thái. Mục tiêu của bài báo là nhằm giải quyết trong những trường hợp như vậy vẫn có khả năng phân tích tính khả đạt của hệ thống bằng phương pháp trừu tượng hoá vị từ, mà không phải xét duyệt toàn bộ các trạng thái chi

tiết trong các vòng lặp. Phương thức trong bài báo sử dụng tới các điều kiện dựa trên cấu trúc đồ thị chương trình (program graph) tương ứng với hệ thống chi tiết và các điều kiện này có thể cho phép kiểm tra tự động.

3.2. Giải pháp

Như đã trình bày ở phần trước, các dịch chuyển *may* không được đóng dưới tính bắc cầu, do đó các phương pháp trừu tượng không thể đối phó với tính khả đạt của chương trình có vòng lặp. Trong phần này chúng tôi sẽ mô tả phương pháp để đối phó với vòng lặp.

Định nghĩa một *entry port* 4 của một trạng thái trừu tượng a là một vị từ e_a sao cho $\gamma(e_a) \subseteq \gamma(a)$ và với mọi $c_e \in \gamma(e_a)$, c_e là khởi tạo hoặc $p(c_e) \setminus \gamma(a) \neq \emptyset$. Tức là mọi trạng thái cụ thể c_e được thể hiện bởi *entry port* e_a bên trong a và c_e là trạng thái khởi tạo hoặc là một vài trạng thái trước của c_e nằm ngoài a .

Định nghĩa một *exit port* 4 của một trạng thái trừu tượng a là một vị từ x_a sao cho $\gamma(x_a) \subseteq \gamma(a)$ và với mọi $c_x \in \gamma(x_a)$, $s(c_x) \setminus \gamma(a) \neq \emptyset$. Tức là mọi trạng thái cụ thể c_x được thể hiện bởi *exit port* x_a trong a và một vài trạng thái kế tiếp của c_x nằm ngoài a .

Định lí 1: Xét một trạng thái trừu tượng a , lấy e_a và x_a là *entry* và *exit port* của a sao cho tất cả những điều kiện sau được thoả mãn.

1. $\gamma(a)$ là hữu hạn;
2. Với mọi $c \in \gamma(a \wedge \neg x_a)$, chúng ta có $|s(c) \cap \gamma(a)| \leq 1$, tức là mọi trạng thái chi tiết trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$ có ít nhất một trạng thái kế tiếp trong $\gamma(a)$;
3. $must^-(a \wedge \neg x_a, a \wedge \neg e_a)$, tức là mọi trạng thái chi tiết trong $\gamma(a \wedge \neg e_a)$ có trạng thái liền trước trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$.

Thì $must^-(e_a, x_a)$, tức là với mọi $c' \in \gamma(x_a)$, tồn tại $c \in \gamma(e_a)$ sao cho $c \rightarrow^* c'$.

Chú ý rằng điều kiện 1 và 3 có nghĩa rằng e_a không thể là rỗng (trừ khi x_a là rỗng, trường hợp này chúng minh dễ dàng)

Chứng minh định lí 1: Chúng minh định lí 1 được dựa trên việc xây dựng một đồ thị có hướng không chu trình - DAG trong đó tất cả các trạng thái có thể tới được từ đỉnh nguồn. Tính hữu hạn của $\gamma(a)$ có nghĩa rằng đỉnh nguồn của DAG được chứa trong $\gamma(e_a)$.

Giả sử rằng $\gamma(e_a)$ không rỗng, ngược lại dễ dàng chứng minh $must^-(e_a, x_a)$. Xét đồ thị có hướng không chu trình $G = (V, E)$, cho $source(G) = \{c \in V \mid \forall c' \in V, \neg E(c', c)\}$ là tập các đỉnh không có đỉnh kề trước trong G . Xây dựng một chuỗi DAGs: G_0, G_1, \dots sao cho

với mọi $k \geq 0$, DAG $G_k = \langle V_k, E_k \rangle$ thoả mãn $\gamma(x_a) \subseteq V_k \subseteq \gamma(a)$ và mọi trạng thái trong V_k có thể tới được từ trạng thái nào đó trong $source(G_k)$. Ngoài ra, với mọi $k \geq 0$, hoặc $source(G_k) \subseteq \gamma(e_a)$ hoặc có thể xây dựng một DAG G_{k+1} thoả mãn 2 tính chất trên và chứa hoàn toàn G_k . Do $\gamma(a)$ là hữu hạn [điều kiện 1 của định lí], từ đó có $k \leq |\gamma(a)|$ mà $source(G_k) \subseteq \gamma(e_a)$.

Lưu ý rằng vì G_k là đồ thị con của hệ thống chi tiết, tính khả đạt tương ứng với $must^*(source(G_k), V_k)$. Vì thế, nếu tồn tại DAG G_k thoả mãn tất cả ba thuộc tính, thì $must^*(e_a, x_a)$.

Xác định G_k bằng phương pháp quy nạp theo k , là chiều cao của DAG. Dựa vào đó, cho $G_0 = \langle V_0, E_0 \rangle$ với $V_0 = \gamma(x_a)$ và $E_0 = \emptyset$. Dễ thấy G_0 thoả mãn cả hai thuộc tính thoát và khả đạt như trên. Đặc biệt, do $E_0 = \emptyset$, ta có $source(G_0) = V_0$, do tính khả đạt thoả mãn đối với đường rỗng. Lưu ý rằng vì $\gamma(x_a)$ không rỗng, vì thế có V_0 và $source(G_0)$.

Với bước quy nạp, cho $k \geq 0$ sao cho G_k thoả mãn cả hai thuộc tính thoát và khả đạt và không thoả mãn thuộc tính vào. Ta có thể xây dựng một DAG G_{k+1} thoả mãn thuộc tính thoát và khả đạt và hoàn toàn chứa G_k .

Lấy $S_k = source(G_k) \setminus \gamma(e_a)$. Để ý rằng từ G_k không thoả mãn thuộc tính đầu vào và $source(G_k)$ không rỗng, thì ta có tập S_k cũng không rỗng. Do $must^-(a \wedge \neg x_a, a \wedge \neg e_a)$ (điều kiện 3 của định lí) và $S_k \cap \gamma(e_a) = \emptyset$ (theo định nghĩa của S_k), mọi trạng thái trong S_k có một trạng thái liền kề trước trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$. Lấy $V'_k = \{p(c) \cap \gamma(a \wedge \neg x_a) \mid c \in S_k\}$, ($V'_k \neq \emptyset$). Đặt $V_{k+1} = V_k \cup V'_k$, và đặt $E_{k+1} = E_k \cup \{\langle c', c \rangle \mid c \in S_k \&\& c' \in p(c) \cap \gamma(a \wedge \neg x_a)\}$. Do đó, G_{k+1} thêm vào các trạng thái G_k trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$ có một dịch chuyển tới các trạng thái trong $source(G_k) \setminus \gamma(e_a)$, và cũng thêm vào các dịch chuyển từ các trạng thái đó tới các trạng thái trong $source(G_k) \setminus \gamma(e_a)$. Từ $V_k \subseteq V_{k+1}$ và từ giả thiết quy nạp, thì $\gamma(x_a) \subseteq V_{k+1}$, do vậy G_{k+1} thoả mãn với các thuộc tính thoát.

Từ giả thiết quy nạp, G_k là một DAG, thì G_{k+1} cũng là một DAG. Thật vậy, các đỉnh đã thêm vào G_k là các đỉnh từ V'_k tới V_k . Ngoài ra, từ $V'_k \neq \emptyset$, dễ dàng nhận thấy rằng nếu V_k và V'_k là tách rời thì V_{k+1} chỉ chứa đúng V_k .

Với trường hợp $k=0$, chúng ta có $V_0 = \gamma(x_a)$. Do V'_k chứa chỉ các trạng thái trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$, rõ ràng rằng $V_0 \cap V'_0 = \emptyset$. Với trường hợp $k>0$, giả sử ngược lại rằng tồn tại một $c \in V'_k \cap V_k$. Do V'_k và $\gamma(x_a)$ là tách rời, nên rõ ràng rằng $c \in V_k$, tức là có một j , $1 \leq j < k$ sao cho $c \in V'_j$. Do đó, có một $c' \in s(c) \cap \gamma(a)$ hay $c' \in \gamma(a)$ là nút kế tiếp của c . Do vậy, $c' \in S_k$. Nhưng c' là liền kề trước của c trong G_k , c' không nằm trong $source(G_k)$. Nên $c' \notin S_k$. Điều này mâu thuẫn. Nên G_{k+1} thoả mãn tính khả đạt. Theo định nghĩa, $source(G_{k+1}) = V'_k$,

nhưng theo giả thiết quy nạp, tất cả các trạng thái trong V_k là tới được từ một vài trạng thái trong $source(G_k)$. Từ mỗi trạng thái trong $source(G_k)$ là kế tiếp của một vài trạng thái trong V_k , dẫn đến rằng mọi trạng thái trong V_{k+1} là tới được từ một vài trạng thái trong $source(G_{k+1})$.

Tương tự, có định lý 2 như sau:

Định lý 2: Xét một trạng thái trừu tượng a , lấy e_a và x_a là entry và exit port của a sao cho tất cả những điều kiện sau đều thoả mãn.

1. $\gamma(a)$ là hữu hạn;
2. Với mọi $c \in \gamma(a \wedge \neg e_a)$, có $|p(c) \cap \gamma(a)| \leq 1$, tức là mọi trạng thái chi tiết trong $\gamma(a \wedge \neg e_a)$ có ít nhất một trạng thái kế tiếp trong $\gamma(a)$;
3. $must^+(a \wedge \neg x_a, a \wedge \neg e_a)$, tức là mọi trạng thái chi tiết trong $\gamma(a \wedge \neg x_a)$ đều có trạng thái liền trước trong $\gamma(a \wedge \neg e_a)$.

Thì $must^{+*}(e_a, x_a)$, tức là với mọi $c \in \gamma(e_a)$, tồn tại $c' \in \gamma(x_a)$ sao cho $c \rightarrow^* c'$.

Chứng minh định lý 2: Chứng minh tương tự định lý 1

Định lý 3: Cho a_1 và a_2 là các trạng thái trừu tượng với entry port lần lượt là e_{a_1} và e_{a_2} , và exit port lần lượt là x_{a_1} và x_{a_2} . Giả sử rằng với mọi $i \in \{1, 2\}$, ta có $\gamma(a_i)$ là hữu hạn, với mọi $c \in \gamma(a_i \wedge \neg x_{a_i})$ ta có $|s(c) \cap \gamma(a_i)| \leq 1$, và ta cũng có $must^-(a_i \wedge \neg x_{a_i}, a_i \wedge \neg e_{a_i})$, $must^{-*}(x_{a_1}, e_{a_2})$. Thì $must^{-*}(e_{a_1}, x_{a_2})$.

Chứng minh định lý 3: Theo điều kiện của định lý, các điều kiện của định lý 1 được thoả mãn với a_1 và a_2 cùng những entry port, exit port chúng. Do đó, ta có $must^{-*}(e_{a_1}, x_{a_1})$ và $must^{-*}(e_{a_2}, x_{a_2})$. Từ đó $must^{-*}(x_{a_1}, e_{a_2})$ thoả mãn do tính bắc cầu của các quan hệ dịch chuyển kiểu $must^-$. Tương tự, các dịch chuyển $must^+$ cũng có tính bắc cầu, áp dụng định lý 2 ta có điều phải chứng minh.

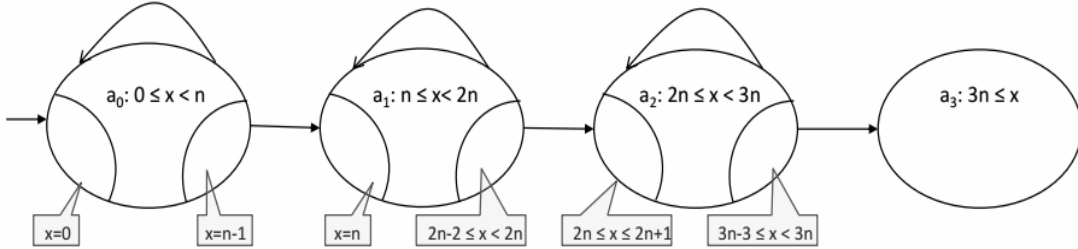
3.3. Ứng dụng

Phương pháp trừu tượng hoá mô hình dịch chuyển trạng thái theo vị từ đã trình bày có thể được ứng dụng trong kiểm chứng mô hình 10, hoặc phân tích chương trình tĩnh để xác định tính khả đạt. Quá trình trừu tượng, sinh vị từ có thể tự động hoá bằng cách kết hợp tương ứng một trạng thái trừu tượng với một lệnh thực thi và các trạng thái chi tiết phát sinh khi thực thi lệnh đó. Thực hiện chia làm 2 giai đoạn chính:

- Tính toán các entry port và exit port tương ứng với các trạng thái trừu tượng dọc theo đường thực thi;

- Kiểm tra các điều kiện tương ứng với giải pháp 1 hoặc 2, sau đó kết luận.

Ví dụ: Xem xét lại ví dụ về thủ tục *Increment* và trừu tượng của thủ tục này. Áp dụng phương pháp tiếp cận trên của bài báo cho trừu tượng của phương thức *Increment* được minh hoạ như 0.



Hình 5. Phân tích tính khả đạt trên trừu tượng của thủ tục *Increment*

Trạng thái trừu tượng a_0 : $0 \leq x \leq n$ có entry port $x=0$ và exit port $x = n-1$. Các điều kiện trong định lí 1 được thoả mãn trong a_0 với entry port và exit port này do:

1. n là hữu hạn do đó $\gamma(a_0)$ là hữu hạn.
2. Do thủ tục thực hiện theo cơ chế đơn định, nên mỗi trạng thái chi tiết chỉ có một trạng thái kế tiếp duy nhất.
3. Mỗi trạng thái cụ thể trừ $x=0$ có một nút liền kề trước trong a_0 .

Có thể kết luận rằng $must^-(x=0, x=n-1)$. Với chứng minh tương tự, các điều kiện được thoả mãn tại a_1 với entry port là $x=n$ và exit port là $2n-2 \leq x < 2n$, và tại a_2 với entry port là $2n \leq x \leq 2n+1$ và exit port là $3n-3 \leq x < 3n$. Từ đây ta có thể kết luận được $must^-(x=n, 2n-2 \leq x < 2n)$ và $must^-(2n \leq x \leq 2n+1, 3n-3 \leq x < 3n)$. Ngoài ra, $must^-(x=n-1, x=n)$, $must^-(2n-2 \leq x < 2n, 2n \leq x \leq 2n+1)$ và $must^-(3n-3 \leq x < 3n, 3n < x)$. Như vậy, có thể kết luận được $must^-(x=0, 3n \leq x)$ (do tính chất bắc cầu của $must^-$).

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo chúng tôi đã trình bày một phương pháp trừu tượng hoá theo vị từ giúp phân tích tính khả đạt đối với các hệ thống có không gian trạng thái lớn. Kết quả chính của phương pháp là có thể xác định chính xác tính khả đạt mà không phải làm mịn mô hình trừu tượng khi xuất hiện nhiều vòng lặp trong hệ thống.

Trong tương lai chúng tôi sẽ dự định tiếp tục nghiên cứu để phát triển công cụ kiểm chứng mô hình tự động dựa trên nội dung lí thuyết đã nghiên cứu.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Patrick Cousot, Jer C.Hunsaker (2005), "An informal overview of abstract interpretation", *Massachusetts Institute of Technology Department of Aeronautics Astronautics*, Course 16.399.
2. Michael I. Schwartzbach, "Lecture Notes on Static Analysis", BRICS, *Department of Computer Science University of Aarhus*, Denmark.
3. Christel Baier, Joost-Pieter Katoen (2008), "Principles of Model Checking", *The MIT Press*.
4. Thomas Ball, Orna Kupferman, Mooly Sagiv (2007), "Leaping loops in the presence of abstraction", *Proceeding CAV'07 Proceedings of the 19th International conference on Computer aided verification*, pp.491-503.
5. Cormac Flanagan, Shaz Qadeer (2002), "Predicate abstraction for software verification", *Proceeding POPL '02 Proceedings of the 29th ACM SIGPLAN-SIGACT symposium on Principles of programming languages*, pp.191-202.
6. A.R. Bradley, Z. Manna, H. Sipma (2005), "Linear Ranking with Reachability", *In Proc. of 17thCAV, LNCS 3576*, pp.491-504.
7. Rajeev Alur, Thao Dang, Franjo Ivančić (2006), "Predicate abstraction for reachability analysis of hybrid systems", *Journal ACM Transactions on Embedded Computing Systems (TECS)*, vol. 5 Issue 1, pp.152-199.
8. Byron Cook, Andreas Podelski, Andrey Rybalchenko (2011), "Proving Program Termination", *Communications of the ACM*, vol. 54 Issue 5, pp.88-98.
9. B. Cook, A. Podelski, A. Rybalchenko (2006), "Termination proofs for systems code", *In Proc. ACM PLDI*, pp.415-426.
10. P. Godefroid, R. Jagadeesan (2002), "Automatic abstraction using generalized model checking", *In Proc. 14th CAV, LNCS 2404*, pp.137-150.
11. Loveland, Donald W (1978), "Automated Theorem Proving: A Logical Basis", *Fundamental Studies in Computer Science*, Volume 6, North-Holland Publishing.

BASING ON THE GRAPH OF PROGRAM TO ANALYZE THE AVAILABILITY OF THE PROGRAM

Abstract: *The application of abstract technique in analytical program helps us expand the scope of the system processor to system of large space. The abstract technique has been using more and more in fault detection analysis programs. The analysis detected that a program error is tied to the determination of the availability of the program. If the availability proved its correction in the abstract model as the approximation of the program, it is also true in the program due to the preservation of abstraction. However, sometimes, the use of the abstract technique also caused the loss of accuracy in analyzing the availability due to a number of states was ignored, especially the appearance of the loop. Some current solutions solve this problem by using the below blocked file and ranking functions. Our solution did not use the below blocked file and ranking functions. Instead, we base on checking the conditions on the graph of program which corresponding with the real system, the conditions are checked automatically with abstract model.*

Keywords: *The graph of program, availability, ranking function, model checking*

DIFFUSION OF INTERSTITIAL ATOMS IN INTERSTITIAL ALLOYS FeSi AND FeH WITH BCC STRUCTURE UNDER PRESSURE

Nguyen Quang Học⁽¹⁾, Bui Duc Tinh¹, Dinh QuangVinh¹, Le Hong Viet²

Hanoi National University of Education

Tran Quoc Tuan University

Abstract: In our previous paper [10], the analytic expressions with free energy of interstitial atom, the nearest neighbor distance between two interstitial atoms, the alloy parameters for interstitial atom, the diffusion quantities such as the jumping frequency of interstitial atom, the effective jumping length, the correlation factor, the diffusion coefficient and the activated energy together with the equation of state for the interstitial AB with BCC structure under pressure are derived from the statistical moment method. In this paper, we apply these theoretical results to interstitial FeSi and FeH in the interval of interstitial atom concentration from 0 to 5%, the interval of temperature from 100 to 1000K and the interval of pressure from 0 to 70GPa. Our calculated results are in good agreement with experiments or predict the experimental results.

Keywords: Interstitial alloy, jumping frequency, effective jumping length, correlation factor, diffusion coefficient, activated energy

1. INTRODUCTION

Study on the diffusion theory of metals and alloys pays attention to researchers [1-10]. In previous paper [10], by the statistical moment method (SMM) [5-7, 10] we derive the analytic expressions of the free energy of interstitial atom, the nearest neighbor distance between two interstitial atoms, the alloy parameters for interstitial atom, the diffusion quantities such as the jumping frequency of interstitial atom, the effective jumping length, the correlation factor, the diffusion coefficient and the activated energy together with the equation of state for the interstitial AB with BCC structure under pressure. In this paper, we apply the theoretical results in [10] to the interstitial alloys FeSi and FeH in the interval of interstitial atom concentration from 0 to 5%, in the interval of temperature from 100 to

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 19.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Bùi Đức Tinh; Email: bdtinh@hnue.edu.vn

1000K and in the interval of pressure from 0 to 70GPa. Some calculated results are compared with experiments, where we use the Arrhenius law.

2. CONTENT

For the interstitial alloy FeSi, we use the n - m interaction potential [7]

$$\varphi(r) = \frac{d}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad (1)$$

where r_0 is the distance between two atoms corresponding to the minimum of potential energy, that takes the value $-d$, m and n are the numbers which have different values for different atoms and are determined empirically on the basis of experimental data. The parameters r_0 , d , m and n of the n - m potential (1) for the interaction potentials Fe-Fe and Si-Si are given in Table 1.

Table 1. The parameters r_0 , d , m and n of the interaction potentials Fe-Fe and Si-Si

	m	n	d (10⁻¹⁶ erg)	r_0(10⁻¹⁰ m)
Fe	7	11.5	6416.448	2.4775
Si	6	12	45128.34	2.295

We use the following approximation

$$\varphi_{\text{Fe-Si}} \approx \frac{1}{2} (\varphi_{\text{Fe-Fe}} + \varphi_{\text{Si-Si}}). \quad (2)$$

For the interstitial alloy FeH, we use the Morse potential [10]

$$\varphi(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right], \quad (3)$$

where α has the dimension of distance inverse, D has the dimension of energy (eV) and $D = -\varphi(r_0)$, r_0 the equilibrium distance of two atoms. The parameters of the Morse potential for the alloy FeH are given in Table 2.

Table 2. The parameters of the Morse for the interstitial alloy FeH

r_0 (Å)	D (eV)	α (Å)
1.73	0.32	1.34

For the interstitial alloy FeSi, we use the potential (1) for the interaction potentials Fe-Fe and Si-Si with the potential parameters in Table 1 and use the approximation (2) for the interaction potential Fe-Si. Using the formulae in the previous paper, we find the expressions of the cohesive energy U_{0B} and the alloy parameters k^B, γ_B of the atom Si in the position 1 in the interstitial alloy FeSi as follows

$$U_{01B} = \frac{1.755118523.10^{-8}}{r^{11,5}} - \frac{5.586962213.10^{-10}}{r^7} + \frac{4.969164799.10^{-8}}{r^{12}} - \frac{8.453440955.10^{-10}}{r^6}, \quad (4)$$

$$k^{1B} = \frac{2.451815336.10^{-6}}{r^{13,5}} - \frac{2.693657436.10^{-7}}{r^9} + \frac{7.543922121.10^{-6}}{r^{14}} - \frac{2.808431783.10^{-8}}{r^8}, \quad (5)$$

$$\gamma_{1B} = \frac{5.17258208.10^{-5}}{r^{15,5}} - \frac{2.117826188.10^{-7}}{r^{11}} + \frac{1.735930771.10^{-4}}{r^{16}} - \frac{1.671565741.10^{-7}}{r^{10}}. \quad (6)$$

Analogously, we can obtain the expressions of the cohesive energy U_{0B} and the alloy parameters k^B, γ_B of the atom Si in the positions 2 and 3 in the interstitial alloy FeSi.

For the interstitial alloy FeH, we use the potential (3) for the interaction potentials Fe-Fe, Fe-H, H-Fe, H-H with the potential parameters r_0, D and α in Table 2. The expressions of the cohesive energy U_{0B} and the alloy parameters k^B, γ_B of the atom Si in the position 1 in the interstitial alloy FeH have the form:

$$U_{01B} = 5.289022639.10^{-11} e^{-2.68r} - 1.0414153.10^{-11} e^{-1.34r} + 1.057804528.10^{-10} e^{-3.790092346r} - 2.0828306.10^{-11} e^{-1.895046173r}, \quad (7)$$

$$k^{1B} = 3.79878762.10^{-10} e^{-2.68r} - 1.869965313.10^{-11} e^{-1.34r} + 3.039030097.10^{-10} e^{-5.992662178r} - 1.49597225.10^{-11} e^{-2.996331089r} - \frac{2.004588422.10^{-10} e^{-3.790092346r}}{r} - \frac{1.973530079.10^{-11} e^{-1.895046173r}}{r}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1B} = & 4.547402034.10^{-10} e^{-2.68r} - 5.59618286.10^{-12} e^{-1.34r} - \frac{1.018075082.10^{-9} e^{-2.68r}}{r} + \\ & + \frac{2.505753519.10^{-11} e^{-1.34r}}{r} - \frac{7.198877938.10^{-10} e^{-3.790092346r}}{r} + \\ & + \frac{1.771835304.10^{-11} e^{-1.895046173r}}{r} + \frac{7.59757524.10^{-10} e^{-2.68r}}{r^2} + \frac{3.739930626.10^{-11} e^{-1.34r}}{r^2} + \\ & + \frac{2.834916134.10^{-10} e^{-2.68r}}{r^3} + \frac{2.790993004.10^{-11} e^{-1.34r}}{r^3}, \quad (9) \end{aligned}$$

Analogously, we can obtain the expressions of the cohesive energy U_{0B} and the alloy parameters k^B, γ_B of the atom Si in the positions 2 and 3 in the interstitial alloy FeH.

In the case of applying the n - m potential (1), the cohesive energy between atoms in the clean metal A has the form [6]

$$U_{0A} = \frac{d}{n-m} \left[mA_n \left(\frac{r_0}{r_{1A}} \right)^n - nA_m \left(\frac{r_0}{r_{1A}} \right)^m \right], \quad (10)$$

where r_{1A} is the nearest neighbour between atoms A at temperature T , r_{01A} is the nearest neighbour between atoms A at temperature 0 K and is determined from the minimum condition of the cohesive energy. Therefore, it has the following form:

$$r_{01A} = r_0 \sqrt[n-m]{\frac{A_n}{A_m}}. \quad (11)$$

Then, the metal parameters k^A , γ_{1A} , γ_{2A} and γ_A have the form as in [6]

According to figures from Figure 1 to Figure 3, at the same pressure, when the temperature increases, the activated energy E decreases, the coefficient D_0 changes negligibly and the diffusion coefficient D increases. In the same pressure, D is a monotonously decreasing function of $1/T$. In the same temperature, when the pressure increases, the activated energy E increases, the coefficient D_0 increases, the diffusion coefficient D and $\ln D$ decreases.

The dependences of the diffusion coefficient D and the coefficient D_0 on interstitial atom concentration, temperature and pressure for the interstitial alloy FeSi are illustrated by figures from Figure 4 to Figure 11. When the concentration of interstitial atoms Si increases, the coefficients D_0 and D of alloy FeSi increase. This absolutely agrees with experiments.

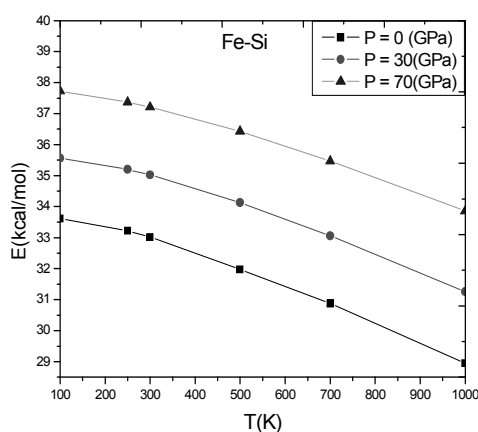


Fig 1. $E(T)$ of FeSi at $P = 0, 30$ and 70 GPa

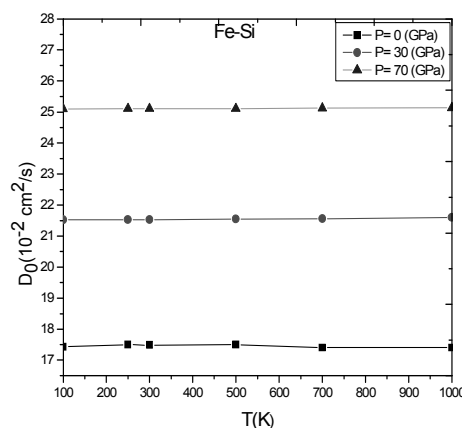


Fig 2. $D_0(T)$ of FeSi at $P = 0, 30$ and 70 GPa

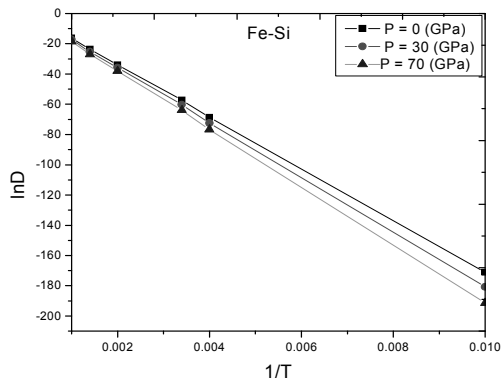


Fig 3. $\ln D(1/T)$ at $P = 0, 30$ and 70 GPa for FeSi

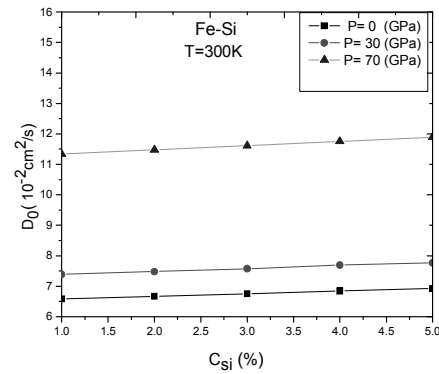


Fig 4. $D_0(c_{Si})$ of FeSi at $P = 0, 30, 70$ GPa and $T = 300K$

According to our numerical results for alloy FeSi, when the interstitial atom Si is in face centres of BCC lattice of Fe at zero pressure and under pressure, this atom Si can not diffuse through sides of lattice cells to come next cell (the first way) but only can move from this face centre to other face centre (the second way). The interstitial atom Si changes locally the lattice constants. In the lattice cells containing the interstitial atom Si, the lattice constants expand considerably. Our calculated results are in relatively good agreement with the experimental data [8,9]. At $P = 0, T = 1150^\circ\text{C}$ and $c_{Si} = 4.9\%$, the alloy FeSi has $D = 1.4 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ according to the experimental data [8]. According to our calculated result, at $P = 0, T = 1000\text{K}$, $c_{Si} = 5\%$, the alloy FeSi has $D = 0.08 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$.

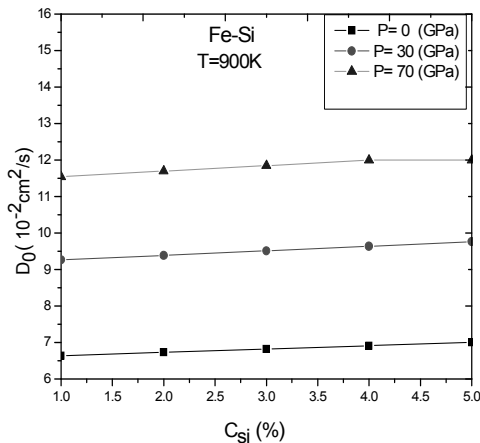


Fig 5. $D_0(c_{Si})$ of FeSi at $P = 0, 30, 70$ GPa and $T = 900K$

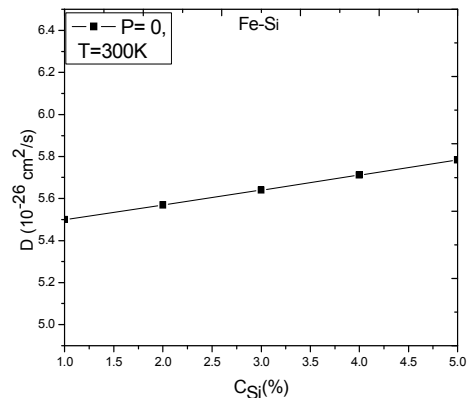


Fig 6. $D(T)$ of FeSi at $P = 0$ and $T = 300K$

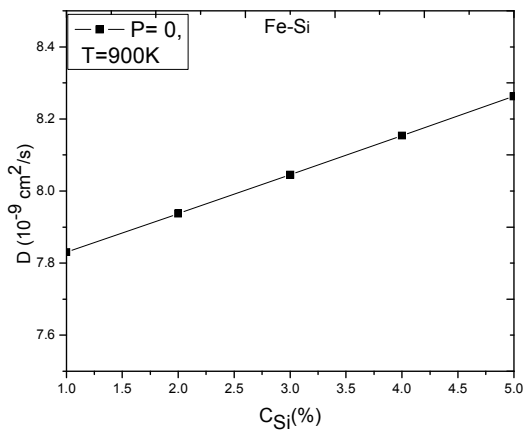


Fig 7. $D(T)$ of FeSi at $P = 0$ and $T = 900K$

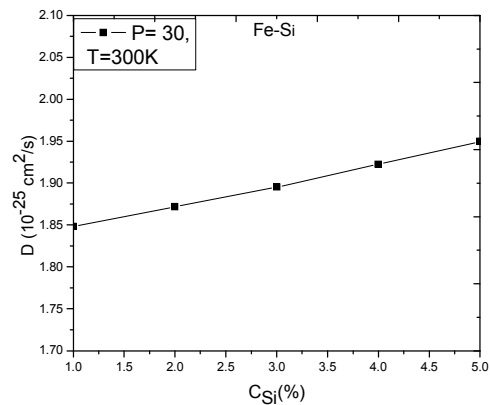


Fig 8. $D(T)$ of Fe-Si at $P = 30$ GPa and $T = 300K$

At $P = 0$ and from 200 to 780°C, the alloy FeH has $D_0 = 1.4 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$, $E = 0.139 \text{ eV}$ and at $T = 700^\circ\text{C}$, the alloy FeH có $D = 2.45 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ according to the experimental data [9]. According to our calculated result, at $P = 0$, $T = 1000\text{K}$, the alloy FeH has $D_0 = 0.9 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$, $E = 0.19479 \text{ kcal/mol}$. Figure 3 shows the dependence of $\ln D$ on $1/T$ for alloy FeSi and has a linear form. This means that in the interval of temperature from 100 to 1000K, the Arrhenius law absolutely is satisfied.

Our calculate results for alloy FeH are an analogue with ones for alloy FeSi and are illustrated by figures from Figure 12 to Figure 19. According to our numerical results for alloy FeH, when the interstitial atom H is in face centres of BCC lattice of Fe at zero pressure and under pressure, this atom H also can not diffuse through sides of lattice cells to come next cell (the first way) but only can move from this face centre to other face centre (the second way). Our calculated result can predict the experimental result.

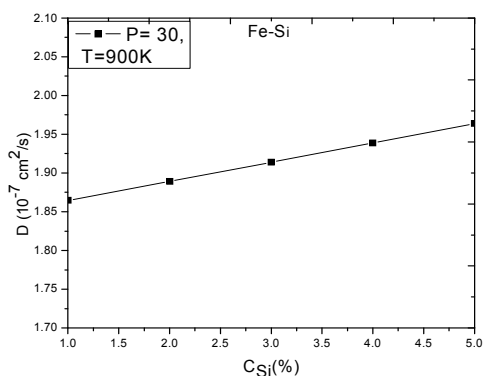


Fig 9. $D(T)$ of FeSi at $P = 30$ GPa and $T = 900K$

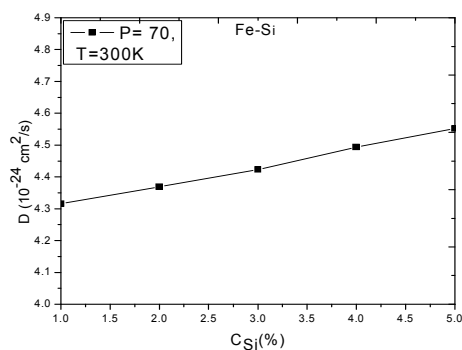


Fig 10. $D(T)$ of FeSi at $P = 70$ GPa and $T = 300K$

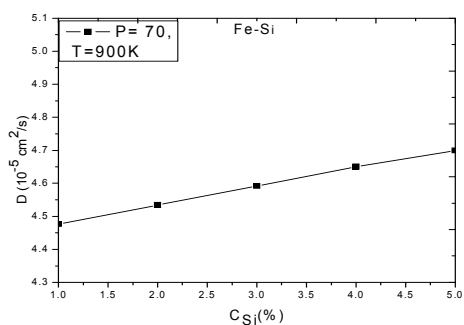


Fig 11. $D(T)$ of FeSi at $P = 70$ GPa and $T = 900$ K

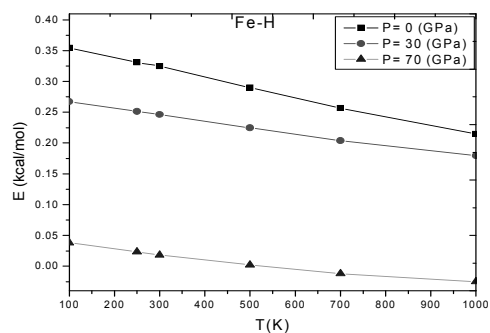


Fig 12. $E(T)$ of FeH at $P = 0, 30$ and 70 GPa

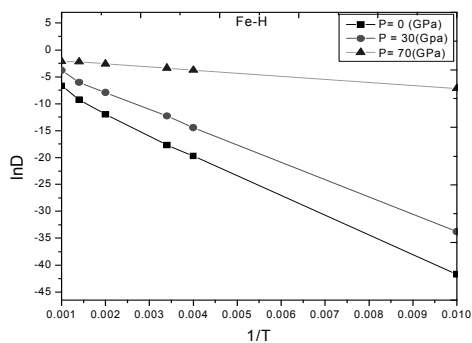


Fig 13. $\ln D (1/T)$ at $P = 0, 30$ and 70 GPa for FeH

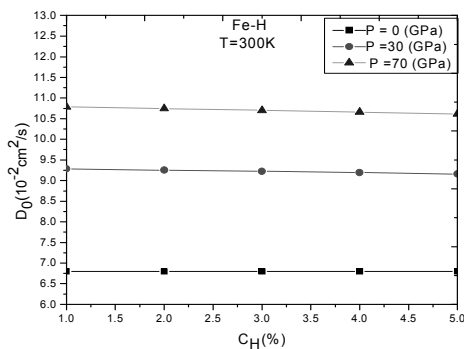


Fig 14. $D_0(c_H)$ of FeH at $P = 0, 30, 70$ GPa and $T = 300$ K

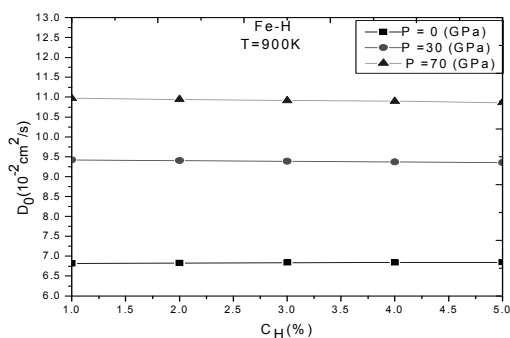


Fig 15. $D_0(c_H)$ of Fe-H at $P = 0, 30, 70$ GPa and $T = 900$ K

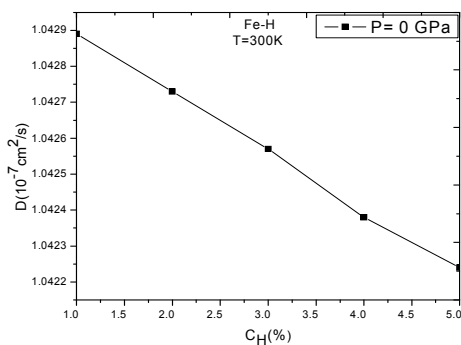


Fig 16. $D(c_H)$ of FeH at $P = 0$ and $T = 300$ K

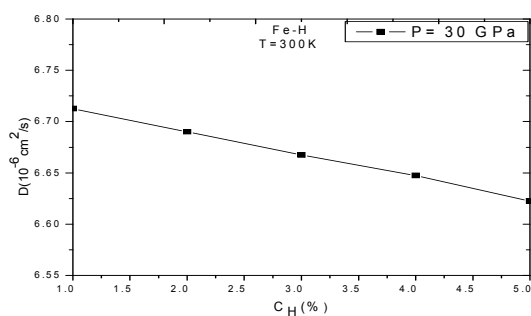


Fig 17. $D(c_H)$ of FeH at $P = 30$ GPa and $T = 300$ K

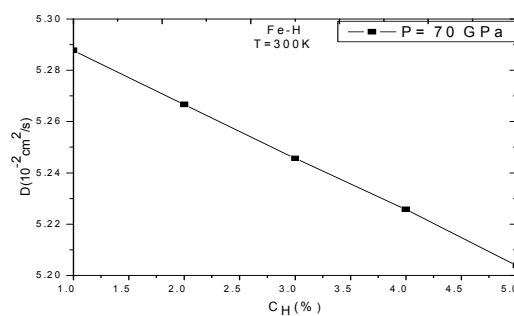


Fig 18. $D(c_H)$ of FeH at $P = 70$ GPa and $T = 300$ K

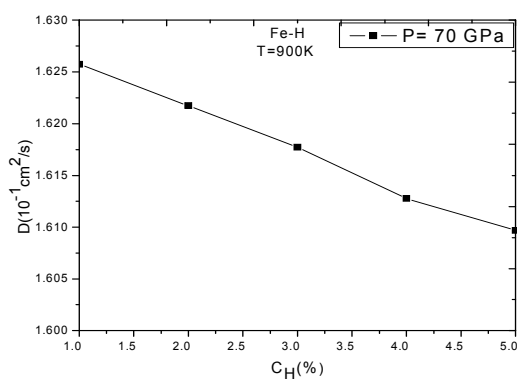


Fig 19. $D(c_H)$ of FeH at $P = 70$ GPa and $T = 900$ K

3. CONCLUSION

Our numerical results for alloys FeX (X = Si, H) are obtained by applying the diffusion theory builded from the SMM, using the n - m potential and the Morse potential and the coordination sphere method. These results show that the diffusion mechanism of interstitial atom in interstitial alloy depends on the size of interstitial atom and the interaction between interstitial atom and main atom of alloy. The numerical results are in good agreement with experiments or can predict the experimental results because the exact determination of diffusion quantities is a very difficult problem experimentally. Figure 13 for the dependence of $\ln D$ on $1/T$ has the linear form This mean that our obtained results are in good agreement with the Arrhenius law in the interval of temperature below the structural phase transition of iron.

REFERENCES

1. K.M.Zhao, G.Jiang, L.Wang (2011), Electronic and thermodynamic properties of B2-FeSi from first principles, *Physica B*406, pp.363-357.
2. W. F. Smith, 1993, *Structure and properties of engineering alloys*, McGraw-Hill, Inc.
3. S. L. Chaplot, R. Mittal, N. Choudhry (2010), *Thermodynamic properties of solids: experiment and modeling*, Wiley-VCH VerlagGmbH&Co.KgaA.
4. Y. Fukai (1993), *The metal-hydrogen system*. Springer. Berlin.
5. H. V. Tich (2000), *Diffusion theory of metal and alloy*, PhD thesis, Hanoi National University of Education (HNUE).
6. V. V. Hung (2009), *Statistical moment method in studying on thermodynamic and elastic properties of crystal*, HNUE Publishing House.
7. N. Q. Hoc, D. Q.Vinh, B. D.Tinh, T.T.C.Loan, N.L.Phuong, T.T.Hue, D.T.T.Thuy (2015), Thermodynamic properties of binary interstitial alloys with a BCC structure: dependence on temperature and concentration of interstitial atoms, *Journal of Science of HNUE, Math. and Phys. Sci.* 60, 7, pp.146-155
8. C.J. Smithells (1962), *Metals reference book*, Butter Worths, XIV, pp.586-1105
9. A.S.Nowich, J.J.Burton, J.Volkl, G.Alefeld (1975), *Diffusion in solids: Recent developments*
10. N.Q.Hoc, D.Q.Vinh, L.H.Viet, N,V.Phuong (2016), Study on diffusion theory of binary interstitial alloy with BCC structure under pressure, *Journal of Science of HNUE, Math. and Phys. Sci.* 61,4, pp.3-9.

NGHIÊN CỨU SỰ KHUẾCH TÁN CỦA NGUYÊN TỬ XEN KẾ TRONG CÁC HỢP KIM XEN KẾ Fe-Si VÀ Fe-H VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI DƯỚI TÁC DỤNG CỦA ÁP SUẤT

Tóm tắt: Trong bài báo trước [10], chúng tôi rút ra biểu thức giải tích đối với năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối dưới tác dụng của áp suất bằng phương pháp mômen thống kê. Trong bài báo này, chúng tôi áp dụng các kết quả lý thuyết này cho các hợp kim xen kẽ Fe-Si và Fe-H trong vùng nồng độ nguyên tử xen kẽ từ 0 đến 5%, vùng nhiệt độ từ 100 đến 1000K và vùng áp suất từ 0 đến 70GPa. Kết quả tính toán phù hợp khá tốt với số liệu thực nghiệm hoặc dự báo thực nghiệm

Từ khóa: Hợp kim xen kẽ, tần số bước nhảy, độ dài bước nhảy hiệu dụng, nhân tố tương quan, hệ số khuếch tán, năng lượng kích hoạt

ĐỘ ĐO PHỤ THUỘC HÀM XẤP XỈ TRONG CƠ SỞ DỮ LIỆU MÔ HÌNH DẠNG KHỐI

Nguyễn Minh Huy¹⁽¹⁾, Nguyễn Năng Hưng¹, Nguyễn Năng Anh Đức²

¹ Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

² Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Tóm tắt: Trong báo cáo này, chúng tôi trình bày mô hình dữ liệu dạng khối được xem là mở rộng của mô hình dữ liệu quan hệ. Phụ thuộc hàm là một loại ràng buộc dữ liệu giữa các thuộc tính trong một cơ sở dữ liệu quan hệ, góp phần vào việc đảm bảo tính nhất quán của dữ liệu, loại bỏ bớt dữ liệu dư thừa. Phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu dạng khối và các tính chất được quan tâm và nghiên cứu.

Trong bài báo trình bày phương pháp xây dựng độ đo phụ thuộc xấp xỉ trong mô hình dữ liệu dạng khối. Với hai tập thuộc tính X và Y thuộc khối R , độ đo được xây dựng dựa trên việc tính toán các độ đo xấp xỉ từ các lát cắt (giá trị độ đo xấp xỉ nằm trong khoảng từ 0 đến 1) và lấy giá trị lớn nhất của các độ đo đó. Giá trị độ đo xấp xỉ của phụ thuộc hàm trên khối R nằm trong khoảng $[0-1]$. Một phụ thuộc hàm xấp xỉ trên khối có độ đo bằng 0 thì tất cả các phụ thuộc hàm xấp xỉ trên lát cắt chính là phụ thuộc hàm (kinh điển).

Từ khóa: Phụ thuộc hàm, Khai phá dữ liệu, Phụ thuộc hàm xấp xỉ, Mô hình dữ liệu quan hệ, Mô hình dữ liệu dạng khối.

1. GIỚI THIỆU

Cơ sở dữ liệu là một trong những lĩnh vực quan trọng của công nghệ thông tin. Cơ sở dữ liệu đã được nghiên cứu, ứng dụng thành công trong nhiều lĩnh vực và đem lại hiệu quả kinh tế cao cho đời sống và xã hội. Đã có rất nhiều bài báo nghiên cứu về cơ sở dữ liệu và mô hình cơ sở dữ liệu. Có 3 mô hình thường được sử dụng: mô hình phân cấp, mô hình mạng và mô hình quan hệ. Trong đó, mô hình quan hệ được quan tâm hơn cả. Do các quan hệ có cấu trúc phẳng (tuyến tính) nên mô hình này chưa đủ đáp ứng đối với các ứng dụng phức tạp, các cơ sở dữ liệu có cấu trúc phi tuyến... Do đó việc mở rộng mô hình dữ liệu quan hệ thành mô hình dữ liệu dạng khối nhằm mở ra khả năng quản lý dữ liệu, đáp ứng nhu cầu thực tế tốt hơn [2].

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 23.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Minh Huy; Email: nmhuy@daihocthudo.edu.vn

Phụ thuộc hàm (Functional Dependency) là một loại ràng buộc dữ liệu giữa các thuộc tính trong một cơ sở dữ liệu quan hệ, góp phần vào việc đảm bảo tính nhất quán của dữ liệu, loại bỏ bớt dữ liệu dư thừa. Phụ thuộc hàm cũng thể hiện tính chất ngữ nghĩa giữa các thuộc tính và có thể tồn tại trong một tập dữ liệu độc lập với mô hình quan hệ. Nghiên cứu về các phụ thuộc hàm là một hướng quan trọng trong thiết kế cơ sở dữ liệu quan hệ và đã đạt được nhiều thành tựu [11, 12, 13, 20]; bên cạnh đó, nghiên cứu về phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu dạng khối [2] đã có những kết quả [2, 5] để tăng cường hơn nữa khả năng đảm bảo ngữ nghĩa, góp phần hoàn chỉnh thêm về mô hình dữ liệu dạng khối.

Cho lược đồ khối $R = (id; A_1, A_2, \dots, A_n)$, $r(R)$ là một khối trên R , $X, Y \subseteq \bigcup_{i=1}^n id^{(i)}$,

$X \rightarrow Y$ là kí hiệu một phụ thuộc hàm. Một khối r thoả $X \rightarrow Y$, nếu với mọi $t_1, t_2 \in r$ sao cho $t_1(X) = t_2(X)$ thì $t_1(Y) = t_2(Y)$.

Từ định nghĩa phụ thuộc hàm ở trên, ta nhận thấy: nếu tồn tại $t_1, t_2 \in r$ sao cho $t_1(X) = t_2(X)$ và $t_1(Y) \neq t_2(Y)$, thì có thể kết luận rằng r không thoả phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ (hay phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ không đúng trên r).

Trong thực hành, điều này tỏ ra quá chặt và cứng nhắc khi ta hình dung quan hệ r có hàng nghìn bộ, trong đó chỉ có một vài bộ vi phạm phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ do có một số dữ liệu bị sai lệch hoặc ngoại lệ. Do đó việc mở rộng khái niệm phụ thuộc hàm (kinh điển) thành phụ thuộc hàm xấp xỉ (trong mô hình dữ liệu quan hệ, mô hình dữ liệu dạng khối) theo một cách thức, một nghĩa nào đó là nhu cầu tất yếu và tự nhiên.

Các phụ thuộc hàm xấp xỉ khai phá được từ mô hình cơ sở dữ liệu quan hệ, mô hình dữ liệu dạng khối là các mẫu quan trọng, là những tri thức có giá trị về cấu trúc của các bộ dữ liệu.

2. MÔ HÌNH DỮ LIỆU DẠNG KHỐI

2.1. Khối, lược đồ khối

Khái niệm toán học làm nền tảng cho mô hình cơ sở dữ liệu dạng khối (gọi tắt là mô hình khối) là các khối hiểu theo nghĩa của lý thuyết tập hợp. Khối được định nghĩa như sau:

Định nghĩa 2.1: Gọi $R = (id; A_1, A_2, \dots, A_n)$ là một bộ hữu hạn các phân tử, trong đó id là tập chỉ số hữu hạn khác rỗng, A_i ($i=1, n$) là các thuộc tính. Mỗi thuộc tính A_i ($i=1, n$) có miền giá trị tương ứng là $dom(A_i)$. Một khối r trên tập R , kí hiệu $r(R)$ gồm một số hữu hạn phân tử mà mỗi phân tử là một họ các ánh xạ từ tập chỉ số id đến các miền trị của các thuộc tính A_i , ($i=1, n$). Nói một cách khác: $t \in r(R) \Leftrightarrow t = \{t^i: id \rightarrow dom(A_i)\}_{i=1, n}$.

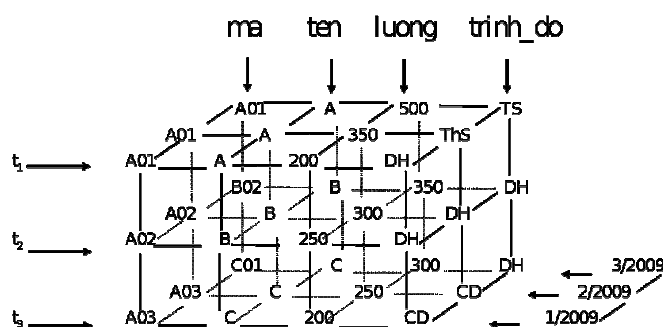
Ta kí hiệu khối đó là $r(R)$ hoặc $r(id; A_1, A_2, \dots, A_n)$, hoặc kí hiệu đơn giản là r .

Khi đó khối $r(R)$ được gọi là có lược đồ khối R . Như vậy trên cùng một lược đồ khối R ta có thể xây dựng được nhiều khối khác nhau.

Ví dụ 2.1: Ta xây dựng khối nhân viên (kí hiệu $NV(R)$) (hình 1) để quản lí nhân viên trong một cơ quan như sau:

Cho lược đồ khối $R = (id; A_1, A_2, A_3, A_4)$, trong đó: $id = \{1/2009, 2/2009, 3/2009, \dots, 12/2009\}$, và các thuộc tính là $A_1 = ma$ (mã), $A_2 = ten$ (tên), $A_3 = luong$ (lương), $A_4 = trinh_do$ (trình độ).

Với khối $NV(R)$ ở hình 1, ta thấy nó gồm 3 phần tử: t_1, t_2, t_3 .



Hình 1. Biểu diễn khối nhân viên $NV(R)$.

Khi đó ta có:

Lương của nhân viên t_1 ở thời điểm tháng 1/2009 là:

$$t_1(1/2009, luong) = 200.$$

- Tên của cán bộ t_2 vào tháng 2/2009 là: $t_2(2/2009, ten) = 'B'$.
- Trình độ của cán bộ t_3 vào tháng 2/2009 là:
 $t_3(2/2009, trinh_do) = 'CD'$.
- Mã số của cán bộ t_3 vào tháng 3/2009 là: $t_3(3/2009, ma) = 'C01'$.

2.2. Lát cắt

Cho $R = (id; A_1, A_2, \dots, A_n)$, $r(R)$ là một khối trên R . Với mỗi $x \in id$ ta kí hiệu $r(R_x)$ là một khối với $R_x = (\{x\}; A_1, A_2, \dots, A_n)$ sao cho:

$$t_x \in r(R_x) \Leftrightarrow t_x = \{t_x^i = t^i\}_{i=1, n} \text{ với } t \in r(R),$$

$$x \text{ và } t = \{t^i: id \rightarrow \text{dom}(A_i)\}_{i=1, n}$$

Ở đây $t_x^i(x) = t^i(x)$ với $i=1, \dots, n$.

Khi đó $r(R_x)$ được gọi là một lát cắt trên khối $r(R)$ tại điểm x .

Ví dụ 2.2: Với khối $NV(R)$ đã cho ở trên, $R = (\text{id}; A_1, A_2, A_3, A_4)$

Trong đó: $\text{id} = \{1/2009, 2/2009, 3/2009, \dots, 12/2009\}$

$$A_1 = \text{ma}, A_2 = \text{ten}, A_3 = \text{luong}, A_4 = \text{trinh_do}.$$

Nếu $x = 2/2009 \in \text{id}$ thì lát cắt $r(R_{2/2009})$ có dạng như sau:

$r(R_{2/2009})$:	ma	ten	luong	trinh_do
	A01	A	350	ThS
	A02	B	300	DH
	A03	C	250	CD

3. PHỤ THUỘC HÀM XÁP XỈ TRONG MÔ HÌNH DỮ LIỆU DẠNG KHỐI

3.1. Phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu dạng khối

Sau đây, để cho đơn giản ta sử dụng các kí hiệu:

$$x^{(i)} = (x; A_i); \text{id}^{(i)} = \{x^{(i)} \mid x \in \text{id}\}.$$

Ta gọi $x^{(i)}$ ($x \in \text{id}, i = 1..n$) là các thuộc tính chỉ số của lược đồ khối $R = (\text{id}; A_1, A_2, \dots, A_n)$.

Định nghĩa 3.1. Cho lược đồ khối $R = (\text{id}; A_1, A_2, \dots, A_n)$, $r(R)$ là một khối trên R , $X, Y \subseteq \bigcup_{i=1}^n \text{id}^{(i)}$, $X \rightarrow Y$ là kí hiệu một phụ thuộc hàm. Một khối r thoả $X \rightarrow Y$ nếu với mọi $t_1, t_2 \in R$ sao cho $t_1(X) = t_2(X)$ thì $t_1(Y) = t_2(Y)$.

3.2. Phụ thuộc hàm được suy diễn từ tập phụ thuộc hàm F

Cho lược đồ khối $R = (\text{id}; A_1, A_2, \dots, A_n)$, F là tập các phụ thuộc hàm trên R và $X \rightarrow Y$ là một phụ thuộc hàm với $X, Y \subseteq \bigcup_{i=1}^n \text{id}^{(i)}$. Nói rằng $X \rightarrow Y$ được suy diễn logic từ F nếu với mỗi khối r xác định trên R thoả các phụ thuộc hàm trong F thì cũng thoả $X \rightarrow Y$. Kí hiệu là:

$$F \models X \rightarrow Y$$

3.3. Các tính chất của phụ thuộc hàm trên khối

Cho lược đồ khối $R = (\text{id}, A_1, A_2, \dots, A_n)$, $r(R)$ là một khối bất kì, F là tập các phụ thuộc hàm và $X, Y, Z, W \subseteq \bigcup_{i=1}^n \text{id}^{(i)}$, ta có một số tính chất cơ bản của các phụ thuộc hàm như sau:

- F1) Nếu $Y \otimes X$ thì $X \rightarrow Y$ (tính phản xạ)
- F2) Nếu $X \rightarrow Y$ thì $XW \rightarrow YW$ (tính gia tăng)
- F3) Nếu $X \rightarrow Y, Y \rightarrow Z$ thì $X \rightarrow Z$ (tính bắc cầu)
- F4) Nếu $X \rightarrow Y, YZ \rightarrow W$ thì $XZ \rightarrow W$ (tính tựa bắc cầu)
- F5) Nếu $X \rightarrow Y, Z \rightarrow W$ thì $XZ \rightarrow YW$ (cộng tính đầy đủ)
- F6) Nếu $X \rightarrow Y$ thì $XZ \rightarrow Y$ (tính mở rộng về trái)
- F7) Nếu $X \rightarrow Y, X \rightarrow Z$ thì $X \rightarrow YZ$ (cộng tính về phải)
- F8) Nếu $X \rightarrow YZ$ thì $X \rightarrow Y$ (bộ phận về phải)
- F9) Nếu $X \rightarrow YZ, Z \rightarrow WV$ thì $X \rightarrow YZV$ (tính tích lũy)

Khái niệm phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu khối, một khối r thoả $X \rightarrow Y$ là đúng nếu với mọi $t_1, t_2 \in r$ sao cho $t_1(X) = t_2(X)$ thì $t_1(Y) = t_2(Y)$. Điều này trong thực hành tỏ ra quá cứng ngắt bởi có thể phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trong khối dữ liệu $R = (id, A_1, A_2, \dots, A_n)$ vi phạm do một vài sai lệch hoặc ngoại lệ. Do đó việc mở rộng phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu khối thành phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu khối là điều tất yếu. Nói cách khác là phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu khối chỉ đúng trên các tập con của khối $r(R)$, tức là khối $r'(R)$ nhận được bằng cách loại bỏ đi một số rất ít các phần tử trong khối $r(R)$. Có thể xem phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu khối là mở rộng của phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu quan hệ.

Cho $R = (id, A_1, A_2, \dots, A_n)$, r là một khối trên R , $X, Y \subseteq \bigcup_{i=1}^n id^{(i)}$, $X \rightarrow Y$ là kí hiệu một phụ thuộc hàm. Giả sử r thoả phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ là đúng. Khi đó nếu $id = \{x\}$ thì r trở thành quan hệ $r(id, A_1, A_2, \dots, A_n)$.

Phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trở thành phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu quan hệ.

3.4. Phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu quan hệ

Định nghĩa 3.2: Cho U là một tập thuộc tính, $R(U)$ là một lược đồ quan hệ trên U . Cho $X, Y, \subseteq U$. Khi đó, Y được gọi là phụ thuộc hàm xấp xỉ vào X trên lược đồ $R(U)$ với mức độ $\alpha \in [0, 1]$ và kí hiệu $X \approx_\alpha Y$, dựa trên số tối thiểu những hàng cần loại bỏ khỏi r để phụ thuộc $X \approx_\alpha Y$ thành $X \rightarrow Y$ được xác định như sau:

$$\alpha = |r| - \max\{|s| \mid s \subseteq r, s \models X \rightarrow Y\}$$

Định nghĩa 3.3: Cho U là một tập thuộc tính, $R(U)$ là một lược đồ quan hệ trên U . Cho $X, Y \subseteq U$, Độ đo lỗi của phụ thuộc hàm xấp xỉ $X \approx_\alpha Y$ được xác định như sau:

$$g_3(X \rightarrow Y) = 1 - \frac{\max\{|s| \mid s \subseteq r, s \models X \rightarrow Y\}}{|r|}$$

Từ đó: $X \rightarrow Y$ đúng trên r ứng với một ngưỡng lỗi $\alpha \in [0,1]$ khi và chỉ khi $g_3(X \rightarrow Y) \leq \alpha$

$X \rightarrow Y$ là phụ thuộc hàm khi và chỉ khi $g_3 = 0$

Một số tính chất:

– *Tính chất 1:* Cho r là một quan hệ trên tập thuộc tính R . Một phụ thuộc hàm đúng trên r cũng là phụ thuộc hàm xấp xỉ loại 2 với mức δ tùy ý ($0 < \delta < 1$) đúng trên r .

Tính chất này dễ dàng suy theo định nghĩa của phụ thuộc hàm xấp xỉ loại 2.

– *Tính chất 2:* Cho r là một quan hệ trên $R: X, Y \subseteq R$, δ_1, δ_2 là 2 số sao cho $0 \leq \delta_1 \leq \delta_2 \leq 1$. Kí hiệu $X \approx_{\delta_1} Y$ và $X \approx_{\delta_2} Y$ là 2 phụ thuộc hàm xấp xỉ loại 2 mức δ_1 và mức δ_2 giữa X và Y trên r , khi đó nếu $X \approx_{\delta_1} Y$ đúng trên r thì $X \approx_{\delta_2} Y$ cũng đúng trên r .

– *Tính chất 3: Tính phản xạ*

Nếu $Y \approx X$ khi đó $X \approx_{\delta} Y$ là phụ thuộc hàm xấp xỉ loại 2 với mức δ tùy ý ($0 \leq \delta < 1$)

– *Tính chất 4: Tính bắc cầu*

Nếu $X \approx_{\delta} Y$ và $Y \approx_{\delta} Z$ thì $X \approx_{\delta} Z$

– *Tính chất 5: Tính gia tăng*

Với mọi $X, Y, Z \subseteq R$ và mức δ nào đó, nếu $X \approx_{\delta} Y$ thì $XZ \approx_{\delta} YZ$

3.5. Phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu dạng khối

Định nghĩa 3.5: Cho lược đồ khối $R = (id; A_1, A_2, \dots, A_n)$, $r(R)$ là một khối trên R , $X, Y \subseteq \bigcup_{i=1}^n id^{(i)}$. Khi đó, Y được gọi là phụ thuộc hàm xấp xỉ và X trên khối R là số hàng nhiều nhất cần phải loại bỏ trong tất cả các lát cắt thuộc khối R để phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y^{id}$ (trên lát cắt id) và $X \rightarrow Y^R$ trên khối R là đúng.

Kí hiệu $g_3(X \rightarrow Y)^R$ là độ đo lỗi của phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên khối R , $(X \rightarrow Y)^{id}$ là phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên lát cắt id , $id \in R$.

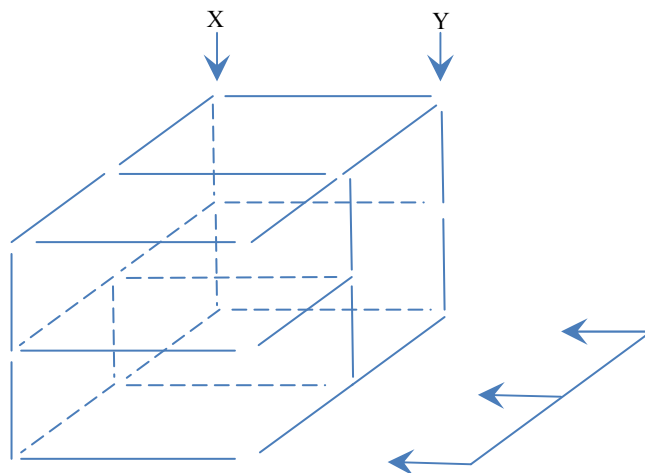
$g_3(X \rightarrow Y)^R$ được xác định như sau:

$$g_3(X \rightarrow Y)^R = \max(g_3(X \rightarrow Y)^{id}, id \in R)$$

Khi $g_3 = 0$ thì tất cả các phụ thuộc hàm xấp xỉ trên lát cắt chính là phụ thuộc hàm (kinh điển).

Minh họa:

Với khối $R = (id; X; Y)$, trong đó: $id = \{1, 2, 3\}$, 2 thuộc tính X, Y



Có thể biểu diễn khối dữ liệu trên ở hình 1. dưới dạng bảng dữ liệu như sau:

Bảng 1. Bảng biểu diễn khối dữ liệu

Id	X	Y
1	A	@
1	B	#
1	C	\$
2	A	%
2	B	&
2	D	\$
3	A	!
3	A	*
3	C	&

Xét phụ thuộc hàm xấp xỉ $X \rightarrow Y$ trên khối R , ta tính được

$$g_3(X \rightarrow Y)^1 = 1 - (1+1+1)/3 = 0.$$

Phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên lát cắt 1 là đúng

$$g_3(X \rightarrow Y)^2 = 1 - (1+1+1)/3 = 0.$$

Phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên lát cắt 2 là đúng.

$$g_3(X \rightarrow Y)^3 = 1 - (1+1)/3 = 0.34.$$

Phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên lát cắt 3 có độ lỗi là 0.34

Do đó:

$$g_3(X \rightarrow Y)^R = \max(0, 0, 0.34) = 0.34$$

Như vậy, độ lỗi của phụ thuộc hàm $X \rightarrow Y$ trên khối R là 0.34

4. KẾT LUẬN

Trong báo cáo này, chúng tôi trình bày mô hình dữ liệu dạng khối được xem là mở rộng của mô hình dữ liệu quan hệ. Trình bày phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu dạng khối và các tính chất của phụ thuộc hàm trong mô hình dữ liệu quan hệ.

Trong bài báo trình bày phương pháp xây dựng độ đo phụ thuộc xấp xỉ trong mô hình dữ liệu dạng khối. Với hai tập thuộc tính X và Y thuộc khối R, độ đo được xây dựng dựa trên việc tính toán các độ đo xấp xỉ từ các lát cắt và lấy giá trị lớn nhất của các độ đo đó. Giá trị độ đo xấp xỉ của phụ thuộc hàm trên khối R nằm trong khoảng [0-1]. Một phụ thuộc hàm xấp xỉ trên khối có độ đo bằng 0 thì tất cả các phụ thuộc hàm xấp xỉ trên lát cắt chính là phụ thuộc hàm.

Dựa trên các nghiên cứu về phụ thuộc hàm xấp xỉ trong mô hình dữ liệu dạng khối chúng tôi sẽ nghiên cứu thuật toán khai phá các phụ thuộc hàm xấp xỉ trên khối với ngưỡng phụ thuộc cho trước.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Xuân Huy (2006), *Các phụ thuộc logic trong cơ sở dữ liệu*, Nxb Thống kê, Hà Nội.
2. Trịnh Đình Thắng (2011), *Mô hình dữ liệu dạng khối*, Nxb Lao động.
3. Vũ Đức Thi (1997), *Cơ sở dữ liệu- Kiến thức và thực hành*, Nxb Thống kê, Hà Nội.
4. Nguyễn Tuệ (2008), *Giáo trình cơ sở dữ liệu*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.
5. Trịnh Đình Vinh (2011), *Một số phụ thuộc dữ liệu trong cơ sở dữ liệu dạng khối*, Luận án Tiến sĩ, Viện Công nghệ Thông tin.
6. Lê Tiên Vương (1997), *Nhập môn Cơ sở dữ liệu quan hệ*, Nxb Khoa học và kỹ thuật, Hà Nội.
7. Aravind Krishna Kalavagattu (2008), *Mining Approximate Functional Dependencies as Condensed Representations of Association Rules*, Arizona State University.
8. Dalkilic, M.M., Robertson, E.L (2000): "Information Dependencies", *Proceedings of ACM PODS.*, pp.245–253.
9. Giannella, Chris and Robertson (2004), Edward, "On Approximation Measures for Functional Dependencies", *Information Systems Archive*, 29(6), pp.483-507.
10. Han J., and Kamber M. (2000), *Data Mining Concepts and Techniques*, Morgan Kaufmann.
11. Hong Yao, Howard J. Hamilton, Cory J. Butz, FD_Mine: "Discovering Functional Dependencies in a Database Using Equivalences", *Second IEEE International Conference on Data Mining*, 2002.

12. Hector Garcia-Molina, Jeffrey D. Ullman, and Jennifer Widom (2000), *Database Systems: The Complete Book*, Prentice Hall Publisher.
13. Huhtala, Y., Karkkainen, J., Porkka P., and Toivonen, H., TANE (1999): An Efficient Algorithm for Discovering Functional and Approximate Dependencies, *The Computer Journal*, 42(2), pp.100-111.
14. Jalal Atoum (2009), "Mining Approximate Functional Dependencies from Databases Based on Minimal Cover and Equivalent Classes", *European journal of scientific research*, 33 (2), pp. 338-346.
15. Kivinen, J., and Mannila (1995), "H. Approximate Inference of Functional Dependencies From Relations", *Theoretical Computer Science*, 149, pp.129-149.
16. Kwok-Wa Lam, Victor C.S.Lee (2004), "Building Decision Trees Using Functional Dependencies", *Processdings, of the International Conference on Information Technology: Coding and Computing (ITCC'04)*.
17. L.B. Cristofor (2000), "A Rough Sets Based Generalization of Functional Dependencies", *Umass/Boston, Dept. of Mathand Comp. Sci. Technical Report*.
18. Q. Wei, GQ. Chen (2004), "Efficient Discovery of Functional Dependencies with Degrees of Satisfaction", *International journal of intelligent systems*, Vol. 19.
19. Ronald S. King, James J. Legendre (2003), "Discovery of Functional and Approximate Functional Dependencies in Relational Databases", *Journal of applied mathematics and decision sciences*, 7(1), pp.49-59.
20. Stéphane Lopes, Jean-Marc Petit, and Lotfi Lakhel (2000), "Efficient Discovery of Functional Dependencies and Armstrong Relations", *EDBT 2000, LNCS 1777*, pp.350-364.

MEASURING THE APPROXIMATE FUNCTIONAL DEPENDENCY ON DATABASE OF CUBE MODEL

Abstract: *In this report, we present data model of building blocks, which is considered as an extension of the relational data model. Functional Dependency (FD) is a data binding of the attributes in a relational database to ensure the consistency of the data and to eliminate redundant data. Dependencies in the data model and the nature of blocks are great interests that should be researched.*

The article presents the method of approximation measurement in model building blocks. With two sets of attributes X and Y of R , the measurement is based on the calculation of the approximate measurement of the sections (approximate measurement values range from 0 to 1), and takes the largest values. The approximate measurement value of the FD in R is in the range of $[0-1]$. If the measurement of an approximate FD equals 0 then all approximate FDs on sections are Functional Dependencies (classic).

Keywords: *Functional Dependency, data exploitation, approximate Functional Dependency, data model, relation, cube data model*

PHÁT HIỆN LUẬT KẾT HỢP LIÊN KẾT CHUỖI THỜI GIAN TỪ CƠ SỞ DỮ LIỆU ĐỊNH LƯỢNG CÓ YẾU TỐ THỜI GIAN

Trương Đức Phương¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Bài báo này nghiên cứu phát hiện các luật kết hợp thể hiện được mối quan hệ theo thời gian của các thời điểm xảy ra các sự kiện từ các cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian. Thuật toán tìm các luật như vậy được đề xuất dựa trên việc phát triển thuật toán Apriori kết hợp với việc mờ hoá khoảng cách thời gian giữa các thời điểm xảy ra sự kiện cũng như mờ hoá các thuộc tính định lượng.

Từ khoá: khai phá dữ liệu, luật kết hợp, cơ sở dữ liệu.

1. GIỚI THIỆU

Phát hiện luật kết hợp là hướng nghiên cứu và ứng dụng quan trọng trong lĩnh vực khai phá dữ liệu. Phát hiện luật kết hợp từ cơ sở dữ liệu tác vụ (hay nhị phân) và không có yếu tố thời gian đã được Rakesh Agrawal cùng cộng sự đề xuất lần đầu năm 1993 [1] và đến nay đã nhận được rất nhiều kết quả nghiên cứu [2, 7, 9, 10, 13, 14].

Vấn đề phát hiện các luật kết hợp từ cơ sở dữ liệu tác vụ có yếu tố thời gian được giới thiệu năm 1995 [11]. Các luật kết hợp phát hiện được khi đó được gọi là luật chuỗi. Các luật chuỗi cho biết mối quan hệ giữa các tác vụ (hay sự kiện) xảy ra theo thứ tự thời gian của từng đối tượng gây ra các tác vụ (hay sự kiện) đó. Việc phát hiện các luật chuỗi đã được nghiên cứu theo nhiều cách tiếp cận khác nhau và cũng đã đạt được nhiều kết quả [18, 24].

Bằng cách sử dụng lý thuyết tập mờ [5-6, 16] để chuyển giá trị của các thuộc tính trong cơ sở dữ liệu định lượng thành các tập mờ nhằm khắc phục tính "thiếu tự nhiên và không hợp lý" của cách chuyển các thuộc tính nhận giá trị định lượng thành các thuộc tính nhận giá trị nhị phân tại các điểm nút phân chia khi tìm các luật kết hợp từ các cơ sở dữ liệu định

¹ Nhận bài ngày 15.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.09.2016

Liên hệ tác giả: Trương Đức Phương; Email: tdphuong@daihocthudo.edu.vn

lượng, luật kết hợp mờ đã được đề xuất [5-6, 16]. Kết quả nghiên cứu về phát hiện luật kết hợp mờ là rất phong phú và có thể tham khảo trong [5-6, 16, 17, 19, 20, 22]...

Trong quá trình nghiên cứu phát hiện luật kết hợp người ta còn quan tâm đến khoảng cách thời gian xảy ra giữa các tác vụ (hay sự kiện) [3, 4, 21, 25]. Phản ánh mối quan hệ về thời gian xảy ra của các tác vụ trong luật kết hợp đã được Yen - Liang Chen và cộng sự đề xuất lần đầu vào năm 2003 [3] bằng việc phân khoảng thời gian xảy ra của các tác vụ thành các đoạn và sau đó phát triển tiếp bằng việc mờ hoá các thuộc tính được đề cập trong chúng [4]. Ý tưởng chính của nghiên cứu [4] có thể tóm tắt như sau:

– Sử dụng lý thuyết tập mờ để mờ hoá khoảng cách thời gian giữa tác vụ liên tiếp trong chuỗi.

– Tìm các mẫu chuỗi thời gian mờ phổ biến dạng (A, I_1, B, I_2, C) trong đó A, B, C là các mục dữ liệu (hay thuộc tính), I_1, I_2 là các giá trị mờ tương ứng khoảng cách thời gian của các tác vụ.

– Đề xuất một số thuật toán khác nhau gồm FTI - Apriori, FTI-PrefixSpan để tìm các chuỗi thời gian mờ phổ biến.

Tuy nhiên nghiên cứu [4] chỉ đề cập đến việc phát hiện luật chuỗi thời gian đối với cơ sở dữ liệu tác vụ chuỗi khách hàng, các giao dịch được xem xét theo từng khách hàng và các sự kiện chỉ có thể là xuất hiện hay không, chứ không áp dụng cho cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian ở đó mỗi giao dịch gắn với một thời điểm xảy ra và các sự kiện xảy ra đều kèm theo số lượng hoặc giá trị phân loại tương ứng. Nói cách khác nghiên cứu nêu trên chỉ nhằm phát hiện các luật có dạng "Nếu khách hàng C mua mặt hàng A trong ngày hôm nay thì khách hàng này sẽ mua mặt hàng B trong ÍT ngày kế tiếp".

Mục đích của bài báo này là phát hiện luật kết hợp liên kết chuỗi thời gian mờ từ cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian, không có yếu tố khách hàng trong giao dịch. Cụ thể bài báo tập trung nghiên cứu phát hiện các luật có dạng "Nếu một mặt hàng A được mua một lượng Ít ở thời điểm ngày hôm nay thì mặt hàng B sẽ được mua NHIỀU ở ÍT ngày kế tiếp". Luật này là phù hợp và có ý nghĩa thực tiễn.

Tương tự như quá trình phát hiện luật kết hợp dựa vào các thuật toán Apriori, Charm hay Aclose, ... [1, 2, 12], quá trình phát hiện luật kết hợp liên kết chuỗi thời gian mờ cũng được chia thành 2 giai đoạn: Giai đoạn 1 tìm các mẫu chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến và giai đoạn 2 sinh ra các luật kết hợp dựa trên tập các mẫu chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến tìm được trong giai đoạn 1 theo cách tương tự như [1, 2, 12].

Thuật toán được đề xuất để giải quyết vấn đề đặt ra trong bài báo này được gọi là FTIQ-ARM. Thuật toán được xây dựng dựa trên việc cải tiến thuật toán Apriori [2], một thuật toán tìm tập phổ biến thông qua liên kết 2 chuỗi độ dài $n-1$ thành chuỗi độ dài n .

Phần còn lại của bài báo được cấu trúc như sau: Phần hai sẽ giới thiệu và đề xuất một số khái niệm cơ bản cần thiết cho nghiên cứu tiếp theo. Phần ba trình bày bài toán đặt ra và thuật toán tìm các mẫu thời gian mờ phổ biến, FTIQ-ARM. Minh họa thuật toán cũng được trình bày trong phần này. Cuối cùng, phần kết luận trình bày những đóng góp nghiên cứu chủ yếu của bài báo.

2. MỘT SỐ KHÁI NIỆM CƠ BẢN

Định nghĩa 1 [7]: Giả sử $S = \{s_1, s_2, \dots, s_u\}$ là tập thuộc tính, $T_i = \{s_1(i), s_2(i), \dots, s_u(i)\}$ ($1 \leq i \leq n$) là tập các giá trị của S tại thời điểm i , $s_k(i)$ là giá trị của thuộc tính s_k tại thời điểm i ($1 \leq k \leq u$) và nó được xem là một sự kiện, $s_k(i)$ có thể nhận giá trị số hoặc giá trị phân loại. Tập các giao dịch $D = \{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ được gọi là cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian.

Ví dụ 1: Về cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian

Bảng 1. Ví dụ cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian

Thời điểm xảy ra	Sự kiện (hay tập mục dữ liệu)
1	a(2), g(5)
2	a(5), b(7), d(1), f(6)
3	a(4), j(5)
4	b(2), c(6)
5	a(3), b(1), h(3)
6	b(5)
11	a(1), d(2), i(4)
12	a(5)
18	a(3), h(2)
19	f(3)
20	c(1)
22	b(6)
25	d(2)
29	e(5)
31	e(1)

Ở đây tập $S = \{a, b, c, d, e, f, g, h, i, j\}$ là tập các thuộc tính; các a, b, c, d, \dots là các thuộc tính (hay mục dữ liệu trong các cơ sở dữ liệu tác vụ). $T_{11} = \{a(1), d(2), i(4)\}$ là các giá trị của S (cũng được gọi là tập các sự kiện trong S) xuất hiện tại thời điểm 11 (thời điểm cách thời điểm tính mốc 11 đơn vị đo thời gian, trong trường hợp này đơn vị đo thời gian được chọn là ngày), $a(1), d(2), i(4)$ là kí hiệu số lượng của a, d, i tương ứng xảy ra.

Định nghĩa 2: Gọi T là tập các tập sự kiện và cũng được gọi là tập các giao dịch, S là tập các thuộc tính và $FS = \{F^{s_1}, F^{s_2}, \dots, F^{s_u}\}$ là tập các tập mờ tương ứng gắn với các thuộc tính trong S , $F^{s_k} = \{f_{h_k,1}^{s_k}, f_{h_k,2}^{s_k}, \dots, f_{h_k,h_k}^{s_k}\}$ là tập các tập mờ gắn với s_k ($k=1, \dots, u$), trong đó $f_{h_k,j}^{s_k}$ là tập mờ thứ j ($1 \leq j \leq h_k$). Khi đó $D' = (T, S, FS)$ được gọi là cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian và mỗi tập mờ $f_{h_k,j}^{s_k}$ được gọi là một mục dữ liệu mờ. Mỗi tập mờ có một hàm thành viên tương ứng $\mu: X \rightarrow [0,1]$.

Ví dụ 2: Lấy các phân hoạch mờ theo [15] với $K=3$ cho tất cả các thuộc tính trong Ví dụ 1 với giá trị hàm thành viên được tính như sau:

$$\mu_{K,i_m}^{x_m}(v) = \max\{1 - |v - a_{i_m}^K|/b^K, 0\} \quad (1)$$

Trong đó:

$$\bullet \quad a_{i_m}^K = mi + (ma - mi)(i_m - 1)/(K - 1) \quad (2)$$

$$\bullet \quad b^K = (ma - mi)/(K - 1) \quad (3)$$

Ở đây: $\mu_{K,i_m}^{x_m}$ là hàm thành viên gắn với tập mờ thứ i của thuộc tính x_m ; x_m là thuộc tính thứ m trong tập S , K là số tập mờ gắn với thuộc tính (trong ví dụ này $K=3$), i_m là tập mờ thứ i , mi , ma lần lượt là các giá trị nhỏ nhất và lớn nhất của thuộc tính x_m thì ta thu được cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian D' (Bảng 2).

Trong cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian trên thì $f_{K,i_m}^{x_m}(v)$ biểu diễn tập mờ $f_{K,i_m}^{x_m}$ và v là giá trị mờ sau khi đã được chuyển đổi từ giá trị định lượng. Chẳng hạn $f_{3,2}^a(0.5)$ tại thời điểm 1 có nghĩa giá trị mờ là 0.5 tương ứng với tập mờ thứ 2 trong số 3 tập mờ gắn với thuộc tính a trong cơ sở dữ liệu định lượng.

Bảng 2. Ví dụ cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian D'

Thời điểm xảy ra	Tập mục dữ liệu mờ
1	$f_{3,1}^a(0.5), f_{3,2}^a(0.5), f_{3,1}^g(1)$
2	$f_{3,3}^a(1), f_{3,3}^b(1), f_{3,1}^d(1), f_{3,3}^f(1)$
3	$f_{3,2}^a(0.5), f_{3,3}^a(0.5), f_{3,1}^j(1)$
4	$f_{3,1}^b(0.667), f_{3,2}^b(0.333), f_{3,3}^c(1)$
5	$f_{3,2}^a(1), f_{3,1}^b(1), f_{3,3}^h(1)$
6	$f_{3,2}^b(0.667), f_{3,3}^b(0.333)$
11	$f_{3,1}^a(1), f_{3,3}^a(1), f_{3,1}^i(1)$
12	$f_{3,3}^a(1)$
18	$f_{3,2}^a(1), f_{3,1}^h(1)$
19	$f_{3,1}^f(1)$
20	$f_{3,1}^c(1)$
22	$f_{3,2}^b(0.333), f_{3,3}^b(0.667)$
25	$f_{3,3}^d(1)$
29	$f_{3,3}^e(1)$
31	$f_{3,1}^e(1)$

Định nghĩa 3 [4]: Một chuỗi sự kiện mờ A được biểu diễn dạng $((a_1, t_1), (a_2, t_2), \dots, (a_n, t_n))$ trong đó a_j là một mục dữ liệu mờ và t_j là thời điểm a_j xảy ra ($1 \leq j \leq n$ và $t_{j-1} \leq t_j$ trong trường hợp $2 \leq j \leq n$). Nếu các mục dữ liệu mờ xảy ra cùng thời điểm thì chuỗi A sẽ được sắp xếp theo thứ tự tăng dần theo tên của các mục này. Khoảng cách thời gian giữa 2 thời điểm xảy ra 2 tập mục dữ liệu mờ liên tiếp tương ứng trong chuỗi sự kiện sẽ là $t_j = t_{j+1} - t_j$ ($1 \leq j \leq n-1$). Chẳng hạn chuỗi sự kiện $A = ((x_1, 1), (x_2, 4), (x_3, 29))$ thì các giá trị thời gian $t_1=3$ và $t_2=4 \dots$

Kí hiệu $LT = \{lt_j | j = 1, 2, \dots, p\}$ là tập các tập mờ gắn với khoảng cách thời gian giữa các sự kiện, $\mu_{lt_j}(ti) : X \rightarrow [0, 1]$ là hàm thành viên ứng với khái niệm mờ lt_j [4].

Ví dụ 3: Tập $LT = \{Short, Medium, Long\}$

Các hàm thành viên tương ứng với các tập mờ thuộc LT có thể được định nghĩa như sau:

$$\mu_{Short}(ti_j) = \begin{cases} 1, & ti_j \leq 2 \\ \frac{15 - ti_j}{13}, & 2 < ti_j < 15 \\ 0, & ti_j \geq 15 \end{cases}$$

$$\mu_{Medium}(ti_j) = \begin{cases} 0, & ti_j \leq 2 \text{ or } ti_j \geq 28 \\ \frac{ti_j - 2}{13}, & 2 < ti_j \leq 15 \\ \frac{28 - ti_j}{13}, & 15 < ti_j < 28 \end{cases}$$

$$\mu_{Long}(ti_j) = \begin{cases} 0, & ti_j \leq 15 \\ \frac{ti_j - 15}{13}, & 15 < ti_j < 28 \\ 1, & ti_j \geq 28 \end{cases}$$

Định nghĩa 4: Gọi FS là tập các mục dữ liệu mờ gắn với các thuộc tính có yếu tố thời gian trong cơ sở dữ liệu định lượng và $LT = \{lt_j | j = 1, 2, \dots, p\}$ là tập các tập mờ về khoảng cách thời gian, khi đó chuỗi $\alpha = (b_1, lt_1, b_2, lt_2, \dots, b_{r-1}, lt_{r-1}, b_r)$ được gọi là chuỗi liên kết thời gian mờ nếu $b_j \in FS$ và $lt_j \in LT$ với $1 \leq j \leq r-1$ và $b_r \in FS$. Chẳng hạn chuỗi $\alpha = (f_{3,1}^a, Short, f_{3,1}^b, Medium, f_{3,1}^e)$ là một chuỗi liên kết thời gian mờ.

Định nghĩa 5: Chuỗi liên kết thời gian mờ $\alpha = (b_1, lt_1, b_2, lt_2, \dots, b_{r-1}, lt_{r-1}, b_r)$ được gọi là có độ dài r nếu có r mục dữ liệu mờ. Khi chuỗi liên kết thời gian mờ $\alpha = (b_1)$ thì ta gọi là chuỗi độ dài 1. Chẳng hạn chuỗi liên kết thời gian mờ $\alpha = (f_{3,1}^a, Short, f_{3,1}^b, Medium, f_{3,1}^e)$ có độ dài là 3.

Định nghĩa 6: Chuỗi liên kết thời gian mờ $\beta = (a_1, lta_1, a_2, lta_2, \dots, a_{p-1}, lta_{p-1}, a_p)$ được gọi là chuỗi con của chuỗi $\alpha = (b_1, ltb_1, b_2, ltb_2, \dots, b_{r-1}, ltb_{r-1}, b_r)$ nếu tồn tại giá trị nguyên w sao cho $a_i = b_{w+i}$ và $lta_i = ltb_{w+i}$ với $\forall i | 1 \leq i \leq p$. Chẳng hạn chuỗi liên kết thời gian mờ $(f_{3,1}^a, Short, f_{3,1}^b)$ là chuỗi con của $(f_{3,1}^a, Short, f_{3,1}^b, Medium, f_{3,1}^e)$

Định nghĩa 7: Một luật chuỗi liên kết thời gian mờ có dạng $X \rightarrow Y(t_i)$, trong đó X là chuỗi liên kết thời gian mờ, Y là một mục dữ liệu mờ trong cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian D' , $t_i \in LT$. Chẳng hạn: $f_{3,1}^a \rightarrow f_{3,3}^a$ (Short)

Định nghĩa 8: Cho chuỗi sự kiện mờ $B = ((b_1, t_1), (b_2, t_2), \dots, (b_r, t_r))$ và chuỗi liên kết thời gian mờ $\alpha = (b_1, t_1, b_2, t_2, \dots, b_{r-1}, t_{r-1}, b_r)$, $b_i(t_i)$ $1 \leq i \leq r$ là giá trị mờ của b_i tại thời điểm t_i . Khi đó ta định nghĩa độ hỗ trợ của B đối với α như sau:

$$\gamma_B(\alpha) = \begin{cases} b_1(t_1) & \text{nếu } r = 1 \\ \min_{1 \leq i \leq r} \{\mu_{i, g_{b_i}}(t_{i+1} - t_i)\} \times \min_{1 \leq i \leq r} \{b_i(t_i)\} & \text{nếu } r > 1 \end{cases} \quad (2)$$

Ví dụ 4: Xét chuỗi sự kiện mờ $B = ((f_{3,2}^b, 6), (f_{3,3}^a, 12), (f_{3,1}^e, 31))$, chuỗi liên kết thời gian mờ $\alpha = (f_{3,2}^b, \text{Short}, f_{3,3}^a, \text{Medium}, f_{3,1}^e)$ thì ta có độ hỗ trợ của B đối với α là

$$\begin{aligned} \min\{\mu_{\text{Short}}(6), \mu_{\text{Medium}}(18)\} \times \min\{0.667, 1, 1\} &= \min\{0.769, 0.692\} \times \min\{0.667, 1, 1\} \\ &= 0.692 \times 0.667 = 0.461 \end{aligned}$$

(các hàm thành viên về thời gian và cơ sở dữ liệu mờ được cho trước như trong minh họa của Định nghĩa 2).

Gọi D' là cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian, n là tổng số giao dịch trong D' khi đó ta có các định nghĩa về độ hỗ trợ của chuỗi liên kết thời gian mờ và độ tin cậy của luật chuỗi liên kết thời gian mờ như sau:

Độ hỗ trợ của chuỗi liên kết thời gian mờ α : là tỉ số giữa tổng độ hỗ trợ của các chuỗi sự kiện mờ B tương ứng với α trong D' và tổng số giao dịch n trong D' :

$$\text{Supp}(\alpha) = \sum_{B \in D'} \gamma_B(\alpha) / n \quad (3)$$

Độ tin cậy của luật chuỗi liên kết thời gian mờ $X \rightarrow Y$ là khả năng hỗ trợ chuỗi $X \cup Y$ trong trường hợp hỗ trợ X

$$\text{Conf}(X \rightarrow Y) = \text{sup } p(XY) / \text{sup } p(X) \quad (4)$$

Độ hỗ trợ của luật $X \rightarrow Y$ kí hiệu $\text{Supp}(X \rightarrow Y)$ là khả năng hỗ trợ chuỗi $X \cup Y$

$$\text{Supp}(X \rightarrow Y) = \text{Supp}(X \cup Y) \quad (5)$$

Chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến là chuỗi liên kết thời gian mờ có độ hỗ trợ lớn hơn hoặc bằng ngưỡng cực tiểu min_sup cho trước.

3. THUẬT TOÁN TÌM LUẬT CHUỖI LIÊN KẾT THỜI GIAN MỜ – FTIQ-ARM (FUZZY TIME - INTERVAL QUANTITATIVE IN TIME SERIES – ASSOCIATION RULE MINING)

A. Bài toán đặt ra

Cho trước cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian D , ngưỡng cực tiểu \min_sup , độ tin cậy cực tiểu \min_conf , tập mờ về khoảng cách thời gian LT cùng các hàm thành viên tương ứng, tập mờ cùng các hàm thành viên tương ứng với các thuộc tính trong D .

Bài toán đặt ra là phát hiện các luật chuỗi liên kết thời gian mờ có độ hỗ trợ không nhỏ hơn ngưỡng cực tiểu \min_sup và độ tin cậy không nhỏ hơn độ tin cậy cực tiểu \min_conf .

B. Thuật toán FTIQ-ARM

Thuật toán FTIQ-ARM tìm tất cả các luật chuỗi liên kết thời gian mờ từ cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian.

a) Ý tưởng thuật toán

Đầu tiên, cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian D ban đầu được chuyển đổi thành cơ sở dữ liệu mờ có yếu tố thời gian D' dựa vào việc mờ hoá các thuộc tính định lượng. Tiếp theo, thuật toán FTIQ-ARM tìm các chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến. Quá trình tìm các chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến được phát triển theo thuật toán Apriori: lặp lại 2 giai đoạn trong quá trình sinh chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến cho đến khi không thể sinh được. Ở giai đoạn 1, các chuỗi ứng cử viên độ dài k , kí hiệu là C_k được sinh ra từ tập các chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến độ dài $k-1$, kí hiệu là L_{k-1} . Giai đoạn 2, các chuỗi ứng cử viên trong C_k được tính độ hỗ trợ để xác định tập các chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến độ dài k , L_k .

Việc sinh tập ứng cử viên C_k được thực hiện cụ thể như sau:

Trường hợp $k=1$: Đưa tất cả thuộc tính của cơ sở dữ liệu mờ D' vào C_1 , tập các ứng cử viên độ dài 1.

Trường hợp $k=2$: Tập các ứng cử viên độ dài 2, C_2 , sẽ được sinh ra bằng cách kết hợp 2 mục thuộc L_1 và LT là $L_1 \times LT \times L_1$. Chẳng hạn, giả sử $L_1 = \{fb, fc\}$ và $LT = \{lt1, lt2, lt3\}$ thì 9 ứng cử viên được sinh ra là $(fb, lt1, fb)$, $(fb, lt2, fb)$, $(fb, lt3, fb)$, $(fb, lt1, fc)$, $(fb, lt2, fc)$, $(fb, lt3, fc)$, $(fc, lt1, fc)$, $(fc, lt2, fc)$, $(fc, lt3, fc)$.

Trường hợp $k > 2$: Giả sử $(b1, lt1, b2, lt2, \dots, ltk-2, bk-1)$ và $(b2, lt2, b3, lt3, \dots, ltk-1, bk)$ là 2 chuỗi liên kết thời gian mờ phổ biến thuộc L_{k-1} , khi đó ta sẽ sinh ra được chuỗi ứng cử viên độ dài k cho C_k là $\alpha = (b1, lt1, b2, lt2, b3, lt3, \dots, bk-1, ltk-1, bk)$ [4]. Tương tự như vậy, tất cả các chuỗi ứng cử viên thuộc C_k được sinh ra.

Tiếp theo là giai đoạn tính độ hỗ trợ của các ứng cử viên thuộc C_k :

Một mảng danh sách giá trị thời gian được sử dụng. Trước tiên, bổ sung tất cả các giao dịch tại thời điểm t có chứa b_1 vào phần tử đầu tiên của mảng danh sách là $lst[i][1]$ (i là chuỗi thứ i chứa b_1), mỗi phần tử của mảng gồm cặp giá trị (time - thời điểm xảy ra, value - giá trị mờ). Tiếp theo, tất cả các giao dịch t có chứa b_2 vào phần tử thứ 2 của mảng danh sách $lst[i][2]$ nếu $t > lst[i][1].time$. Tiếp tục như vậy ta lần lượt sinh ra các phần tử $lst[i][m]$ ($3 \leq m \leq k$) nếu thoả mãn giao dịch t chứa b_m và $t > lst[i][m-1].time$. Kết quả thu được là các danh sách có độ dài k tương ứng chuỗi α và $lst[i][r].time - lst[i][r-1].time$ ($2 \leq r \leq k$) là khoảng cách thời gian giữa 2 phần tử của chuỗi. Công thức (3) được sử dụng để tính độ hỗ trợ của chuỗi α .

Sinh các luật chuỗi liên kết thời gian mờ từ các tập phổ biến có độ dài ≥ 2 tìm được. Các luật sinh ra được tính độ tin cậy theo công thức (4) và loại bỏ các luật có độ tin cậy nhỏ hơn min_conf . Tập các luật tìm được còn lại chính là kết quả cần tìm.

b) Thuật toán FTIQ-ARM

Input: Cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian D , tập các tập mờ về khoảng cách thời gian LT , tập mờ và các hàm thành viên tương ứng với các thuộc tính trong D , độ hỗ trợ cực tiểu min_sup , độ tin cậy cực tiểu min_conf .

Output: Các luật chuỗi liên kết mờ thời gian có độ tin cậy $\geq min_conf$.

Thuật toán được mô tả như sau:

Chuyển D thành cơ sở dữ liệu mờ D'

$C_1 = \{\text{các mục trong } D'\}$

$L_1 = \{c \in C_1 | \text{Supp}(c) \geq min_sup\}$

$C_2 = \emptyset$;

for each $a_1 \in L_1$

for each $a_2 \in L_1$

for each $ltd \in LT$ {

$c = a_1 * ltd * a_2$;

add c to C_2 ;

}

for each $c \in C_2$

$c.count = \text{Supp}(c)$;

$L_2 = \{c \in C_2 | c.count \geq min_sup\}$

for ($k > 2$; $L_{k-1} \neq \emptyset$; $k++$)

{

```

    Ck=fuzzy_apriori_gen(Lk-1);
    for each c∈Ck
        c.count=Supp(c);
    Lk={c∈Ck|c.count ≥min_sup}
}
return gen_rules(∪Lk);

```

Supp(c)//Hàm tính độ hỗ trợ của chuỗi

```

{
m=0;
for each tj∈T
    If (bi∈tj){
        m++;
        lst[m][1].time=j;
        lst[m][1].value=bi(tj);//fuzzy value of bi in transaction tj in D'
    }
for (i=2;i≤|c|;i++)
    For each tj∈T
        If (bi∈tj) and j≥lst[mj][i-1].time)
        {
            lst[mj][i].time=j;
            lst[mj][i].value=bi(tj);
        }
        count=0;
for (i=1;i≤m;i++)
{
    if (|lst[i]|=|c|)
    {
        s=1;
        v=1;
        for (j=1;j<|c|;j++)
        {
            s=min(s, μtj(lst[i][j+1].time - lst[i][j].time));
            v=min(v,lst[i][j].value);
        }
    }
}

```

```

    v=min(v,lst[i][c].value);
  }
  count=count + v*s;
}
return count/|D|;
}

fuzzy_apriori_gen(Lk-1)//Hàm sinh ứng cử viên
{
  Ck=∅;
  for each a∈Lk-1
    for each b∈Lk-1
      {
        c=∅;
        for (i=2;i≤k-2;i++)
          {
            if (ai≠bi or alti≠blti) break;
            c=c*ai*alti;
          }
        if (i=k-1 and ak-1=bk-1)
          {
            c=a1*alt1 * c*ak-1*bltk-1*bk;
            add c to Ck;
          }
      }
  return Ck;
}

gen_rules(L)//Hàm sinh luật
{
  R=∅;
  for each p∈L
    {
      r=(p1,plt1,p2,plt2,..p|p|-1)→p|p|(plt|p|-1);
      if (Supp(p)/Supp(p|p|)>=min_conf)
        add r to R;
    }
  return R;
}

```

Trong thuật toán trên phép $*$ là phép kết hợp các giá trị để được chuỗi thời gian mờ. Ví dụ: $a_1 * \text{Short} * a_2$ sẽ trả lại chuỗi liên kết thời gian mờ (a_1, Short, a_2) với $\text{Short} \in \text{LT}$ là tập mờ, a_1, a_2 là các mục dữ liệu. $|p|$ là độ dài của chuỗi liên kết thời gian mờ p , $p_{|p|}$ là mục dữ liệu cuối cùng của chuỗi liên kết mờ p .

4. KẾT QUẢ THỬ NGHIỆM

Môi trường được sử dụng để thử nghiệm thuật toán là Chip Intel Core i5 2.5 GHz, RAM 4 GB, hệ điều hành Windows7. Thuật toán được lập trình bằng ngôn ngữ C#.

Dữ liệu thử nghiệm lấy tại [8] bao gồm kết quả của Istanbul Stock Exchange với 07 chỉ số chứng khoán của các thị trường: SP, DAX, FTSE, NIKKEI, BOVESPA, MSCE_EU, MSCI_EM từ ngày Jun 5, 2009 đến Feb 22, 2011 có mô tả như trong bảng 3.

Bảng 3. Cơ sở dữ liệu thử nghiệm

Tên cơ sở dữ liệu	Số thuộc tính (I)	Số giao dịch (D)
ISTANBUL STOCK EXCHANGE	8	537

Tập $\text{LT} = \{\text{Short}, \text{Medium}, \text{Long}\}$ được gán với khoảng cách thời gian và các hàm thành viên tương ứng với 3 tập mờ Short, Medium, Long thuộc LT được định nghĩa như trong định nghĩa 3.

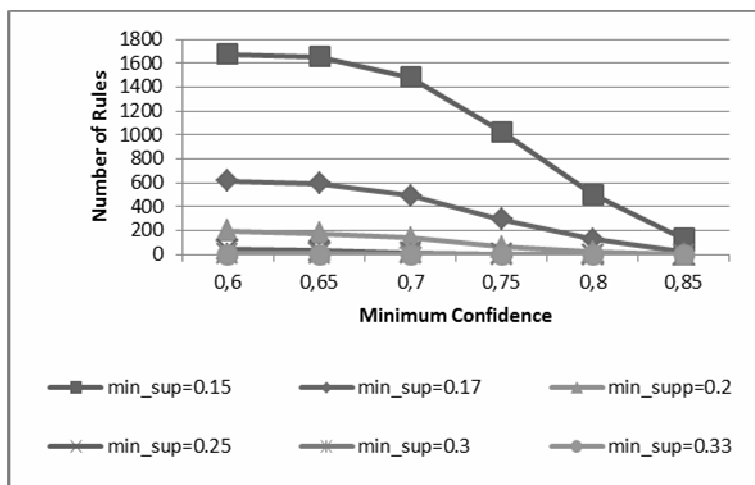
Mỗi thuộc tính định lượng được phân hoạch thành 3 giá trị mờ ($K=3$) và các hàm thành viên được định nghĩa theo công thức (1).

Kết quả thử nghiệm đầu tiên thể hiện số luật sinh ra tương ứng với các độ hỗ trợ cực tiểu và độ tin cậy cực tiểu được mô tả trong bảng 4.

Bảng 4. Kết quả số luật sinh ra tương ứng với độ hỗ trợ cực tiểu (min_supp) và độ tin cậy cực tiểu (min_conf)

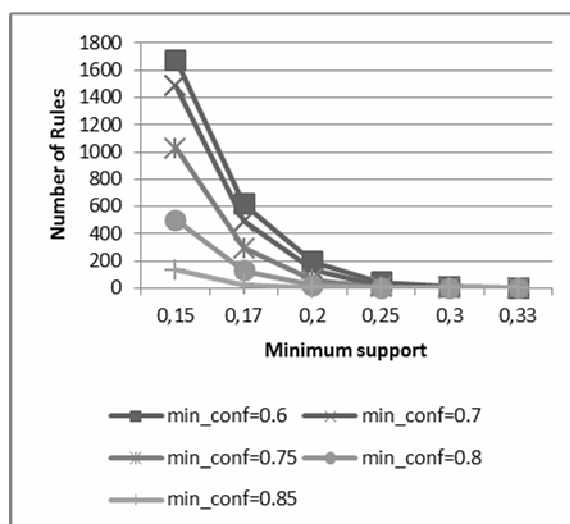
$\text{min_supp} \backslash \text{min_conf}$	0.60	0.65	0.70	0.75	0.80	0.85
0.15	1676	1655	1481	1028	501	131
0.17	615	594	490	291	130	23
0.20	195	177	137	61	18	1
0.25	41	32	17	4	0	0
0.30	9	9	5	0	0	0
0.33	1	1	1	0	0	0

Dựa vào bảng 4, hình 1 là biểu đồ thể hiện mối quan hệ giữa độ tin cậy cực tiểu và số luật sinh ra với các độ hỗ trợ cực tiểu khác nhau. Từ hình 1, ta thấy số lượng các luật giảm mạnh khi độ tin cậy cực tiểu tăng dần đối với cùng độ hỗ trợ cực tiểu thấp. Khi độ hỗ trợ cực tiểu cao thì mối quan hệ giữa số luật và độ tin cậy cực tiểu trở nên mịn hơn.



Hình 1. Biểu đồ thể hiện mối quan hệ giữa độ tin cậy cực tiểu min_conf và số luật sinh ra với các độ hỗ trợ cực tiểu khác nhau

Tiếp theo, hình 2 mô tả mối quan hệ giữa số lượng luật sinh ra và độ hỗ trợ cực tiểu đối với các độ tin cậy cực tiểu khác nhau. Hình 2, số lượng luật tăng nhanh khi độ hỗ trợ giảm.

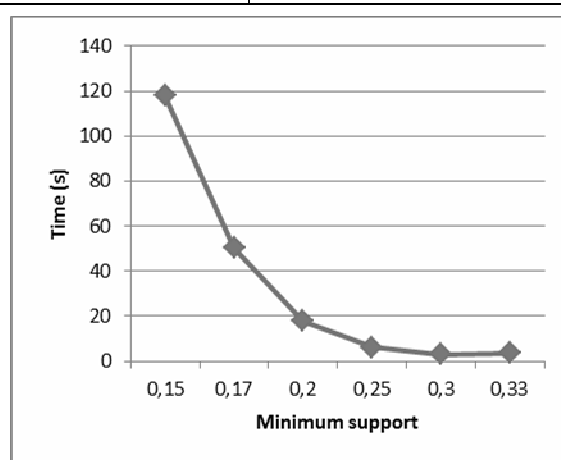


Hình 2. Biểu đồ thể hiện mối quan hệ giữa độ hỗ trợ cực tiểu min_supp và số luật sinh ra với các độ hỗ trợ cực tiểu khác nhau

Cuối cùng, mối quan hệ giữa chi phí thời gian thực hiện thuật toán và độ hỗ trợ cực tiểu ứng với độ tin cậy cực tiểu là 0.6 được thể hiện như trong bảng 5 và hình 3.

Bảng 5. Mối quan hệ giữa thời gian thực hiện và độ hỗ trợ cực tiểu với $min_conf=0.6$

Độ hỗ trợ cực tiểu	Thời gian thực hiện (s)
0.15	118.01
0.17	50.14
0.20	17.909
0.25	6.306
0.30	3.179
0.33	3.565

**Hình 3.** Biểu đồ thể hiện mối quan hệ về thời gian thực hiện và độ hỗ trợ cực tiểu ứng với độ tin cậy cực tiểu $min_conf=0.6$

Từ hình 3, ta thấy chi phí thời gian tăng rất nhanh khi giảm độ hỗ trợ cực tiểu. Điều này là hợp lí do khi giảm độ hỗ trợ cực tiểu thì số lượng tập phổ biến được sinh ra sẽ tăng theo rất nhanh.

5. KẾT LUẬN

Bài báo đã đề xuất thuật toán FTIQ-ARM nhằm phát hiện các luật liên kết thời gian mờ phổ biến từ cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian. Thuật toán FTIQ-ARM được cải tiến từ thuật toán Apriori để tìm các chuỗi liên kết mờ thời gian phổ biến. Bài báo đã trình bày thuật toán dưới dạng giả mã. Kết quả thực nghiệm đã chỉ ra mối quan hệ giữa số lượng các luật kết quả và độ hỗ trợ cực tiểu, độ tin cậy cực tiểu cũng như thời gian thực hiện. Nghiên cứu của bài báo đã góp phần giải quyết vấn đề phát hiện các mối quan hệ về thời gian giữa các sự kiện trong cơ sở dữ liệu định lượng có yếu tố thời gian.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. R. Agrawal, T. Imielinski, A. Swami, "Mining association rules between sets of items in large database", In: P. Buneman, S. Jajodia eds. *Proc. of 1993 ACM SIGMOD Conf on Management of Data*. Washington DC: ACM Press, 1993. pp.207-216.
2. R. Agrawal, R. Srikant (1994), "Fast algorithms for mining association rules", In: J. Bocca, M. Jarke, C. Zaniolo eds. *Proc. of the 20th Int'l Conf on Very Large DataBases (VLDB'94)*, Santiago: Morgan Kaufmann, pp. 487-499.
3. Y. L. Chen, M. C. Chiang, and M. T. Ko (2003), "Discovering time-interval sequential patterns in sequence databases", *Expert Syst. Applicat.*, vol. 25, no. 3, pp.343-354.
4. Yen-Liang Chen, Cheng-Kui Huang (2005), "Discovering fuzzy time-interval sequential patterns in sequence databases", *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics* 35, pp.959-972.
5. Attila Gyenesi (2000), "A Fuzzy Approach for Mining Quantitative Association Rules", *Turku Centre for Computer Sciences*, TUCS Technical Report, No 336.
6. Kuod. M, Ada. P (1998), "Mining Fuzzy Association Rules", In *SIGMOD Record*, 27(1).
7. L. Qin, P. Luo, Z. Shi (2004), "Efficiently mining frequent itemsets with compact FP-tree". In: Z. Shi and Q. He eds. *Proc. of Int'l Conf. on Intelligent Information Processing 2004 (IIP2004)*, Beijing, China. Springer Press, pp.397-406.
8. UCI-Machine Learning Repository, <http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.html>
9. Liang-Xi Qin, Zhong-Zhi Shi (2006), "Efficiently mining association rules from time series", *International Journal of Information Technology*, Vol.12 No.4. pp.30-38.
10. Saravanan, M.S.; Sree, R.J.R (2011), "A Simple Process model generation using a new Association Rule Mining algorithm and Clustering Approach", *Advanced Computing (ICoAC)*, 2011 Third International Conference on Digital Object Identifier, pp.265-269.
11. R. Srikant and R. Agrawal (1995), "Mining Sequential Patterns", *Proc. of the 11th Int'l Conference on Data Engineering*, Taipei, Taiwan.
12. Zadeh, L. A. (1995), "Fuzzy sets", *Information and Control*, Vol. 8, pp.338-353.
13. M. J. Zaki and C.-J. Hsiao (1999), "CHARM: An efficient algorithm for closed association rule mining", *Technical Report 99-10, Computer Science Dept.*, Rensselaer Polytechnic Institute, October..
14. Sumathi, R. and Kirubakaran, E. (2012), "Architectural perspective of parallelizing association rule mining", *Advances in Engineering, Science and Management (ICAESM)*, International Conference, pp.437-442.
15. Yi-Chung Hu, Gwo-Hshung Tzeng, Chin-Mi Chen, "Deriving two-stage learning sequences from knowledge in fuzzy sequential pattern mining", *Information Sciences 159 (2004)*, pp.69-86.
16. Fu A, Wong MH, Sze SC, Wong WC, Wong WL, Yu WK (1998) "Finding fuzzy sets for the mining of fuzzy association rules for numerical attributes", In: *IDEAL-98, 1st International symposium on intelligent data engineering and learning*, Hong Kong, pp.263-268.
17. Shu-Yue J, Tsang E, Yengg D, Daming S (2000) "Mining fuzzy association rules with weighted items". In: *Proceedings of the IEEE international conference on systems, man, and cybernetics*. Nashville, TN, pp.1906-1911.

18. Chung-I Chang; Hao-En Chueh; Lin, N.P. "Sequential Patterns Mining with Fuzzy Time-Intervals", *Fuzzy Systems and Knowledge Discovery*, 2009. FSKD '09. Sixth International Conference on, On page(s): 165-169 Volume: 3, 14-16 Aug, 2009.
19. W. H. Au and K. C. C. Chan, "FARM: A data mining system for discovering fuzzy association rules", *Proc. FUZZ IEEE*, vol. 3, pp.22-25, 1999.
20. W. Zhang (1999), "Mining fuzzy quantitative association rules", Proc. 11th Int. Conf. Tools Artificial Intelligence, pp.99-102.
21. Chung-I Chang; Hao-En Chueh; Yu-Chun Luo (2013), "An integrated sequential patterns mining with fuzzy time-intervals", *Systems and Informatics (ICSAI)*, International Conference on, On page(s): 2294 – 2298
22. Weng, Cheng-Hsiung; Chen, Yen-Liang (2010), "Mining fuzzy association rules from uncertain data", *Knowledge and Information Systems*, Volume.23, Issue.2, pp.129.
23. CHANG, Joong Hyuk; PARK, Nam Hun (2013), "Finding Interesting Sequential Patterns in Sequence Data Streams via a Time-Interval Weighting Approach", *IEICE Transactions on Information and Systems*, Volume.E96.D, Issue.8, pp.1734.
24. Chang JH (2011) "Mining weighted sequential patterns in a sequence database with a time-interval weight", *Know Based Syst* 24(1):1-9.
25. Moskovitch R, Walsh C, Hripsack G, Tatonetti N (2014) "Prediction of biomedical events via time intervals mining", *ACM KDD Workshop on Connected Health in Big Data Era*, NY, USA.
26. C.H. Chen, T.P. Hong, and V.S. Tseng (2012), "Fuzzy data mining for time-series data", *Appl. Soft Comput.*, 12(1):536-542.

OPTICAL MODES IN A FREE STANDING QUANTUM WIRE

Abstract: *A continuum model is employed to describe the allowed longitudinal-optical (LO) phonons of a cylindrical free-standing GaAs wire. The confinement of optical modes in a quantum wire of polar material is described by a theory involving the triple hybridization of LO, transverse optical (TO) phonon, and IP (interface polariton) modes. In this work, we tried to calculate the LO, TO, and IP modes in a quantum wire using conditions of both mechanical and electromagnetic boundary.*

Keywords: *LO, TO, IP, mechanical and electromagnetic boundary.*

NGHIÊN CỨU TÁCH THUỐC BẢO VỆ THỰC VẬT KHÓ PHÂN HỦY (POP) TỒN DƯ TRONG ĐẤT BẰNG PHƯƠNG PHÁP CHIẾT NƯỚC VỚI PHỤ GIA QH5

Nguyễn Quang Hợp¹, Nguyễn Văn Bằng

Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

Tóm tắt: Hiện nay, ở Việt Nam cũng như các nước trên thế giới tình trạng ô nhiễm thuốc bảo vệ thực vật (BVTV) xảy ra trên diện rộng do lượng dư thuốc bảo vệ thực vật sau khi sử dụng vẫn còn tồn dư ngấm sâu trong đất, di chuyển sang nguồn nước và phát tán ra môi trường xung quanh. Đặc biệt là loại khó phân huỷ (Persistent Organic Pollutant - POP), có tác hại cực kỳ nguy hiểm, nó không những gây ra nhiều bệnh ung thư mà còn có thể tạo ra biến đổi gen di truyền gây dị tật bẩm sinh cho thế hệ sau. Vì vậy, việc nghiên cứu các phương pháp xử lý ô nhiễm, khắc phục tình trạng trên để trả lại môi trường tự nhiên cho sinh hoạt và các hoạt động sản xuất nông nghiệp.

Từ khoá: Thuốc bảo vệ thực vật khó phân huỷ, nguy hiểm, biến đổi gen, xử lý ô nhiễm

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ở Việt Nam, cũng như nhiều nước khác, đang tồn tại các vấn đề về đất bị ô nhiễm bởi một số hoá chất bảo vệ thực vật (BVTV) thuộc nhóm khó phân huỷ - POP, điển hình là diclorodiphenyl tricloeretan (DDT). Theo kết quả từ dự án điều tra của Trung tâm Công nghệ xử lý môi trường, thuộc Bộ Tư lệnh Hoá học, kiểm kê ban đầu về tổng lượng thuốc bảo vệ thực vật tồn đọng và quá hạn cần tiêu huỷ hiện nay trên phạm vi toàn quốc là khoảng 300 tấn, trong đó có khoảng 10 tấn DDT.

Theo nghiên cứu của tác giả Vũ Đức Thảo và các cộng sự năm 1992, đã phát hiện sự tồn dư của DDT với hàm lượng lớn trong đất cùng với các chất biến đổi từ DDT (như DDE 1,1-diclo-2,2-bis(4-clophenyl)eten và DDD 1,1-diclo-2,2-bis(4-clophenyl) etan, là các sản phẩm biến đổi độc hại hơn DDT). Trong môi trường đất có DDT các loài sinh vật thường bị nhiễm độc DDT, cũng như các chất dẫn xuất đi kèm ở trên. Lưu ý là mỗi chất lại có 3 đồng phân do vị trí khác nhau của nguyên tử clo trong công thức cấu tạo, trong đó các đồng phân phổ biến nhất là DDT, DDE và DDD.

¹ Nhận bài ngày 16.6.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Quang Hợp; Email: nguyenhophgh@gmail.com

Để xử lý đất bị ô nhiễm POP hiện có hai phương pháp chính là chôn lấp và đào lấy đi toàn bộ đất ô nhiễm để đốt trong lò xi măng.

Tiếp theo một số kết quả đã giới thiệu [4, 5], bài báo này chúng tôi tiếp tục giới thiệu một phương pháp chiết rửa hoàn nguyên đất ô nhiễm thuốc BVTV - POP bằng phương pháp chiết nước với phụ gia hoạt hoá, kí hiệu QH5.

2. ĐỐI TƯỢNG, NỘI DUNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng

Mẫu đất được lấy ở những vị trí được đánh giá bằng cảm quan - kinh nghiệm là có mức độ ô nhiễm nặng nhất với hàm lượng tồn dư thuốc BVTV - POP cao nhất, tại khu vực kho lưu giữ ở khu Hòn Trơ, xã Diên Yên, huyện Diên Châu, tỉnh Nghệ An.

Mẫu được bao gói kín trong túi nhựa PE, sử dụng ba lớp túi kín khí. Sau đó, cho vào thùng nhựa có nắp đậy kín trước khi vận chuyển. Mẫu được bảo quản kín khí, cách ly an toàn, ở nhiệt độ và áp suất thường.

2.2. Nội dung và phương pháp nghiên cứu

Hoá chất: nước cất và phụ gia chất hoạt động bề mặt QH5.

Dụng cụ: Bình tam giác, cốc thuỷ tinh 1000 ml, phễu thuỷ tinh, pipet, ống đong, giấy lọc, đá bọt, bông, đĩa thuỷ tinh, lọ đựng dung dịch sau khi chiết, cột sắc kí, giá sắt, gang tay, khẩu trang, áo bảo hộ.

Thực nghiệm

Tại phòng thí nghiệm, lấy 06 mẫu đất giống nhau, cân mỗi mẫu 100g để riêng, sau đó trộn đều từng mẫu sao cho không bị vón cục và bột, hạt nhỏ mịn đều.

Pha chế 06 mẫu dung môi khác nhau, mỗi dung môi có thể tích $V = 300$ ml, trong đó có thể tích QH5 lần lượt 0% (nước trắng), 2,5%, 5%, 7,5%, 10% và 12,5% thể tích phụ gia QH5, và để ngâm lưu tối thiểu 30 phút cho phụ gia phân tán đều trong dung môi nước. Kí hiệu lần lượt là: QH5-0, QH5-2.5; QH5-5; QH5-7.5 QH5-10 và QH5-12.5.

Chiết mẫu đất thứ nhất với 300ml dung dịch QH5-0 như sau: Lắp thẳng đứng cột chiết đã được rửa sạch bằng nước cất lên giá sắt và nhồi cột chiết với thứ tự sau:

Lớp lót mịn 1 → Lớp lót xốp → Lớp lót mịn 2 → Mẫu đất → Lớp phủ mịn → Lớp phủ định vị

Tiến hành chiết lần 1 bằng 100ml đầu dung dịch QH5-0 vào cột và chiết với tốc độ 10 giọt/phút. Mẫu chiết lần 1 được kí hiệu là QH5-0-1, chiết lần 2 và kí hiệu là QH5-0-2, chiết lần 3 và kí hiệu là QH5-0-3.

Đối với mẫu đất thứ 2 đến mẫu đất thứ 6 với dung môi phụ gia tương ứng là QH5-2.5, QH5-5, QH5-7.5, QH5-10 và QH5-12.5, các bước tiến hành tương tự như mẫu đất thứ nhất QH5-0.

Tất cả các mẫu dung dịch chiết QH5-0-i, QH5-2.5-i; QH5-5-i; QH5-7.5-i; QH5-10-i và QH5-12.5-i (với $i=1,2,3$) đều được bảo quản cẩn thận trong lọ nhựa kín.

Mẫu đất sau khi chiết được lưu cất trong túi kín khí, sau đó đóng gói cẩn thận đem đi phân tích hàm lượng POP chiết rửa được bằng phương pháp sắc kí khí ghép khối phổ (GCMS).



Hình 1: Bộ dụng cụ thực nghiệm

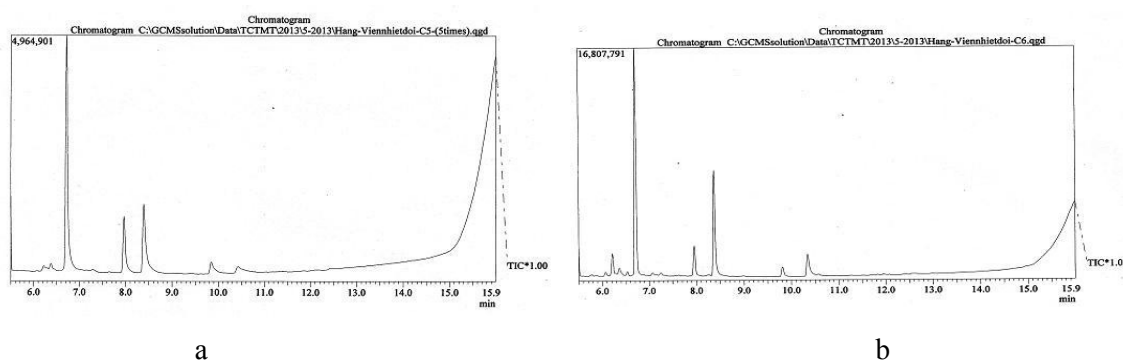
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hàm lượng POP tổng trong mẫu đất được phân tích bằng phương pháp sắc kí lỏng hiệu năng cao. Kết quả được ghi trong bảng 1.

Bảng 1: Kết quả phân tích độ ẩm và hàm lượng POP tổng trong mẫu đất, mg/ 100g

Mẫu đất	POP1	POP2	Trung bình	R _H , %
Hàm lượng	166,41	182,57	174,49	15,23

Hình 2 (a và b) giới thiệu một số sắc đồ đặc trưng của thuốc BVTV rửa từ mẫu đất ra dung dịch nước có phụ gia QH5.

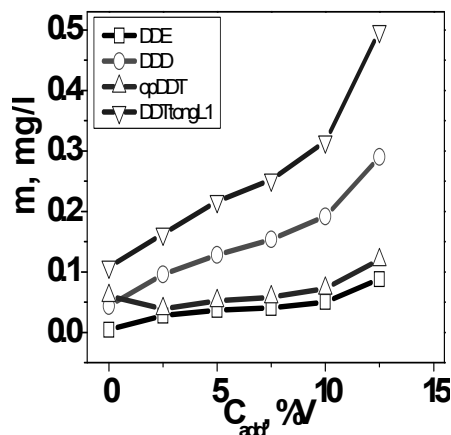


Hình 2: Giản đồ sắc kí thuốc BVTV chiết rửa trong dung môi nước có phụ gia QH5

Nghiên cứu ảnh hưởng của hàm lượng phụ gia QH5 và số lần chiết rửa mẫu đất đến hàm lượng thuốc bảo vệ thực vật chiết ra trong nước chiết, được thực hiện ở điều kiện nhiệt độ và áp suất thường. Kết quả chiết rửa phân tích được trong dung môi nước chiết với tỉ lệ phụ gia khác nhau được trình bày trong các hình 3-9.

+ Lần chiết 1 (100 ml dung môi đầu tiên)

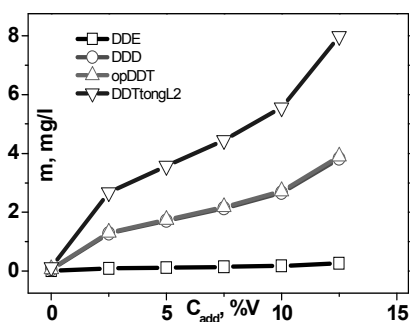
Hàm lượng chất chiết được tăng theo nồng độ chất phụ gia. Khi chiết rửa với nước thông thường, vẫn có một hàm lượng thuốc BVTV được rửa trôi. Tuy nhiên, khi tăng nồng độ chất phụ gia đến 12,5% lượng thuốc BVTV chiết được tăng lên rõ rệt, lúc ban đầu còn tăng lên từ từ, nhưng đến nồng độ 12,5% thì tăng đột biến, nhất là với tổng hàm lượng thuốc BVTV chiết được (đường cong DDTongL1 trong hình 3). Trong đó, hàm lượng DDD cao gần gấp đôi so với DDE và *o,p*-DDT. Hàm lượng DDE và *o,p*-DDT khác nhau không nhiều.



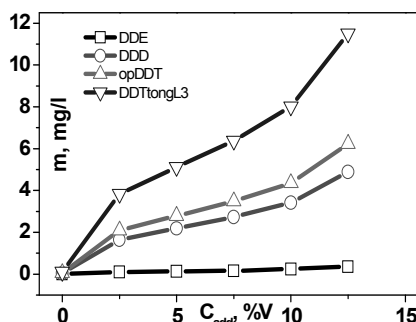
Hình 3. Sự phụ thuộc hàm lượng POP chiết được vào chất phụ gia ở lần chiết 1

+ Lần chiết 2 và lần chiết 3 (các dung môi tiếp theo)

Từ hình 4, cho ta thấy với lần chiết thứ 2 lượng DDD thu được tương đương với *o,p*-DDT. Đáng chú ý hơn là hàm lượng thuốc BVTV chiết được gần gấp 20 lần so với lần chiết 1. Với nước cất thông thường ở lần chiết 2 không rửa được thuốc BVTV ra khỏi đất. Lần chiết 2 gần không thu được DDE.



Hình 4. Sự phụ thuộc hàm lượng POP chiết được vào chất phụ gia ở lần chiết 2



Hình 5. Sự phụ thuộc hàm lượng POP chiết được vào chất phụ gia ở lần chiết 3

Với nồng độ 12,5% chất phụ gia, hàm lượng thuốc BVTV tăng mạnh, có sự khác thường so với các nồng độ phụ gia thấp hơn. Ở nồng độ 12,5% chất phụ gia ta còn thấy:

hàm lượng DDD thu được gấp gần 20 lần lần chiết 1 và hàm lượng *o,p*-DDT thu được gấp gần 40 lần lần chiết 1.

Với lần chiết 3 (hình 5) hàm lượng DDT và DDD chiết được đã khác nhau, nhưng *o,p*-DDT cao hơn DDD. Điểm này hoàn toàn ngược lại so với kết quả chiết lần 1 (hình 3), hàm lượng DDD chiết được cao hơn so với *o,p*-DDT.

Tổng hàm lượng tổng thuốc BVTV chiết được ở lần 3 cao gần 1,5 lần so với lần 2, điều này được thể hiện rõ ở hình 5. Hàm lượng tổng cộng 3 lần chiết, với nồng độ chất phụ gia khác nhau, cũng tăng đột biến ở nồng độ 12,5%.

Các hợp phần POP chiết được và ảnh hưởng của điều kiện nồng độ chất phụ gia

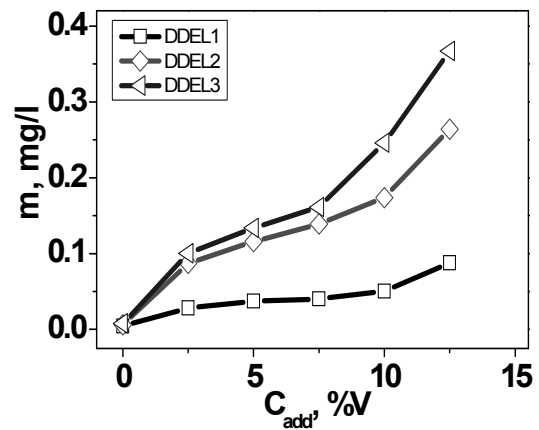
+ Hợp phần DDE (hình 6)

Từ hình 6, ta thấy lần chiết 1 hợp phần DDE thu được tăng rất thấp theo nồng độ của chất phụ gia, nhưng hợp phần DDE tăng rõ rệt ở nồng độ 12,5% chất phụ gia.

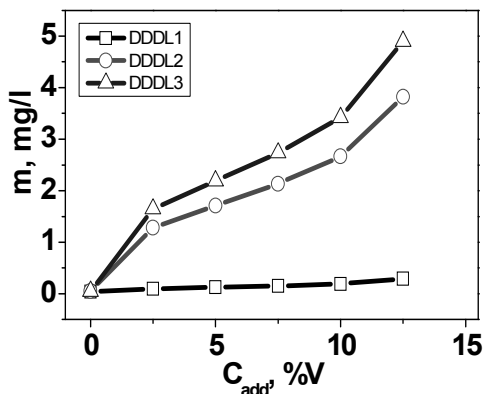
Lần chiết 2 tăng mạnh hơn lần chiết 1. Đặc biệt lần chiết 2 tăng so với lần chiết 1 gần 2,5 lần ở nồng độ 12,5% chất phụ gia.

Lần chiết 3 tăng cao nhất. Điều này được thể hiện lần chiết 3 tăng so với lần chiết 2 gần 1,3 lần và lần chiết 1 gần 4 lần ở nồng độ chất phụ gia là 12,5%.

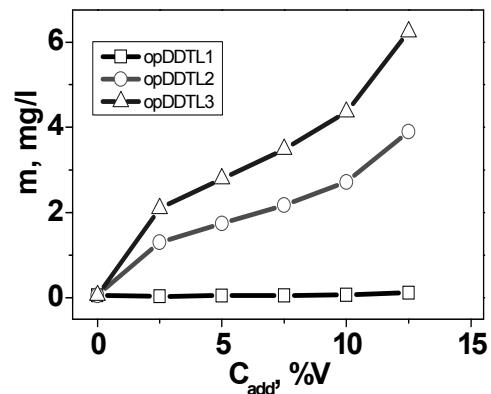
Qua đó cho ta thấy hợp phần DDE tăng mạnh ở nồng độ 12,5% chất phụ gia.



Hình 6. Hàm lượng tổng của DDE chiết được ở nồng độ chất phụ gia và số lần chiết.



Hình 7. Hàm lượng của DDD chiết được ở nồng độ chất phụ gia và số lần chiết.



Hình 8. Hàm lượng của *o,p*-DDT chiết được ở vào nồng độ chất phụ gia và số lần chiết.

+ Hợp phần DDD (hình 7)

Từ hình 7, ta thấy được hợp phần DDD ở lần chiết 1 thu được là thấp nhất và ở lần chiết 3 thu được là cao nhất. Khi tăng nồng độ chất phụ gia thì hợp phần DDD thu được cũng tăng theo nồng độ chất phụ gia. Đặc biệt hợp phần DDD ở cả ba lần chiết đều tăng nhiều nhất với nồng độ chất phụ gia là 12,5%.

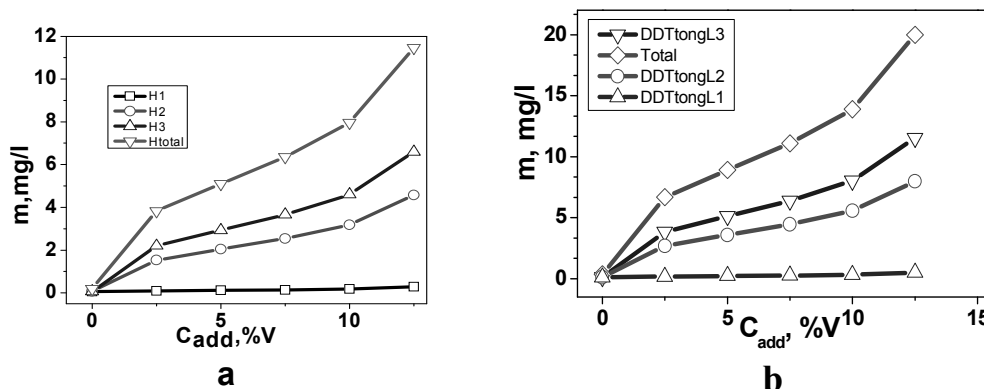
Ta thấy hợp phần DDD chiết lần 1, lần 2 và lần 3 (hình 7) nói chung cao hơn hợp phần DDE chiết lần 1, lần 2 và lần 3 (hình 6).

+ Hợp phần *o,p*-DDT (hình 8)

Từ hình 8, ta thấy cả hai lần chiết 2 và 3 đều tăng đột biến ở nồng độ chất phụ gia là 12,5%. Ta thấy lần chiết 3 thu được hợp phần *o,p*-DDT là cao nhất và chiết lần 1 là thấp nhất.

Ta thấy lượng *o,p*-DDT thu được và lượng DDD thu được là gần tương đương nhau và cao hơn hẳn lượng DDE chiết rửa được (hình 6, hình 7, hình 8).

+ Tổng lượng DDT chiết rửa được và hiệu suất chiết rửa đất (hình 9a và 9b)



Hình 9: Tổng lượng DDT chiết rửa cho cả quá trình và hiệu suất chiết rửa cho cả quá trình.

Từ hình 9a và 9b thể hiện tổng hàm lượng thuốc BVTV chiết rửa được và hiệu suất chiết rửa thuốc BVTV bằng phụ gia QH5. Ta thấy, nồng độ phụ gia càng tăng thì hiệu suất chiết rửa thuốc BVTV càng tăng. Tổng hàm lượng và hiệu suất chiết rửa tổng ở nồng độ chất phụ gia 12,5% thu được gần 12%, ở nồng độ chất phụ gia 2,5% có hiệu suất chiết rửa tổng là gần 4%. Hiệu suất chiết rửa tổng tăng mạnh ở nồng độ chất phụ gia 12,5%.

4. KẾT LUẬN

Đã tiến hành chiết rửa đất ô nhiễm thuốc BVTV khó phân huỷ (POPs) bằng phương pháp chiết nước với phụ gia QH5 có các nồng độ 0%; 2,5%; 5%; 7,5%; 10% và 12,5%.

Đã thực hiện chiết ba lần cho mỗi mẫu. Kết quả phân tích cho thấy, thành phần thu được trong dung dịch chiết là DDE, DDD và *o,p*-DDT.

Khi tăng nồng độ phụ gia QH5 từ 2,5% đến 12,5% thể tích thì hiệu suất chiết rửa POP tăng từ 4 đến 12 (tăng gấp 3 lần). Tuy nhiên, hiệu suất này chưa cao, cần sử dụng nồng độ phụ gia cao hơn hoặc bổ sung các chất thêm khác. Mặt khác, có thể chiết rửa nhiều lần hơn đối với một mẫu đất.

Kiến nghị: Cần có những nghiên cứu sâu hơn nữa về tương quan tỉ lệ phụ gia, thời gian ngâm rửa mẫu lớn hơn và tăng số lần chiết để xác định được điều kiện tối ưu rửa sạch thuốc BVTV trong đất ô nhiễm.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bùi Xuân Vững (2008), *Giáo trình Cơ sở phân tích sắc kí*, Trường Đại học Sư phạm Đà Nẵng.
2. Dương Quang Huân, Lê Xuân Quế... (2013), *Báo cáo khoa học "Xử lý đất ô nhiễm thuốc BVTV khó phân huỷ POP"*, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2.
3. L. Ritter, K.R. Solomon, J. Forget, M. Stemeroff and C.O'Leary (2007), "Persistent Organic Pollutants", *Báo cáo "Chương trình môi trường Liên Hợp Quốc"*, <http://www.chem.unep.ch/pops/ritter/en/ritteren.pdf>.
4. Nguyễn Quang Hợp, Lê Thị Thuỳ Dương, Phan Thị Ngát, Dương Quang Huân, Nguyễn Văn Bằng, Lê Xuân Quế (2013), "Nghiên cứu tách thuốc bảo vệ thực vật khó phân huỷ (POP) tồn dư trong đất bằng phương pháp chiết nước với phụ gia QH1", *Tạp chí Hoá học*, T. 51 (6ABC), tr.445-448.
5. Nguyễn Quang Hợp, Phạm Thị Lâm, Dương Quang Huân, Nguyễn Văn Bằng, Trần Quang Thiện, Lê Xuân Quế (2014), "Nghiên cứu tách thuốc bảo vệ thực vật khó phân huỷ (POP) tồn dư trong đất bằng phương pháp chiết nước với phụ gia QH3", *Ki yếu Hội thảo Khoa học Cán bộ trẻ các trường ĐHSP toàn quốc lần thứ IV*, Hải Phòng, tr.475-481.
6. Vũ Đức Toàn (2008), *Đánh giá ô nhiễm và biến đổi DDT trong đất tại Hà Nội*.
7. Trần Quốc Sơn, Đặng Văn Liễu (2001), *Cơ sở Hoá học hữu cơ Tập 2*, Nxb Giáo dục.
8. Trung tâm Công nghệ xử lý môi trường, Bộ Tư lệnh Hoá học (2005), *Dự án xử lý, tiêu huỷ lượng thuốc BVTV tồn đọng, quá hạn sử dụng và cấm lưu hành ở Việt Nam*, Hà Nội,

RESEARCHING ON SEPARATION OF PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (POP) BY EXTRACTING WATER AND CHEMICAL ADDITIVES QH5

Abstract: Presently, both Viet Nam and many other countries in the world, Plant Protection Products (PPPs) have been polluted on a large scale due to the pesticide residues in soils and its spread out the surrounding environment. Specially, the Persistent Organic Pollutants are dangerous and harmful to human's health such as cancer or genetic modification causing birth defects to the next generation. Therefore, study on methods of polluted treatment is necessary to refresh the natural environment.

Keywords: Persistent Organic Pollutants, dangerous, genetic modification, pollution treatment

PHÂN TÍCH, ĐÁNH GIÁ HÀM LƯỢNG CHÌ VÀ MANGAN TRONG NƯỚC GIẾNG SINH HOẠT TRÊN ĐỊA BÀN XÃ PHÚC TRẠCH, HUYỆN BỐ TRẠCH, TỈNH QUẢNG BÌNH

Nguyễn Mậu Thành¹

Trường Đại học Quảng Bình

Tóm tắt: Xã hội ngày càng phát triển thì nhu cầu sử dụng nước sạch ngày càng cao. Tuy nhiên, sự bùng nổ dân số cùng với tốc độ đô thị hoá, công nghiệp hoá nhanh chóng đã tạo ra một sức ép lớn tới môi trường sống. Đặc biệt là với nguồn nước ngầm và nước sinh hoạt. Phương pháp quang phổ hấp thụ nguyên tử (AAS) được áp dụng để xác định hàm lượng chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt ở khu vực xã Phúc Trạch huyện Bố Trạch tỉnh Quảng Bình. Phương pháp này cho độ lặp lại cao với RSD < 5,38%, độ thu hồi 94,76 ÷ 103,16%, giới hạn phát hiện thấp. Kết quả này cho thấy hàm lượng trung bình của chì và mangan tương đối thấp, lần lượt là 0,0027 mg/l và 0,160 mg/l. Hàm lượng chì và mangan trong nước đạt với các tiêu chuẩn cho phép của Việt Nam.

Từ khóa: Nước giếng, phương pháp AAS, chì, mangan, tiêu chuẩn

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Nước là tài nguyên vô cùng quan trọng đối với mọi sự sống trên trái đất, là cơ sở cho sự sống của mọi sinh vật. Tuy nhiên cùng với sự phát triển của khoa học công nghệ, quá trình đô thị hoá diễn ra mạnh mẽ nhu cầu của con người ngày càng được nâng cao, cuộc sống ngày càng cải thiện. Kéo theo đó là các vấn đề ô nhiễm môi trường, ô nhiễm nguồn nước ngày càng nghiêm trọng do chất thải của các nhà máy, xí nghiệp, công trình đô thị thải ra môi trường chưa qua xử lý, các chất thải rắn do con người sử dụng trong sinh hoạt hàng ngày không được thu gom để xử lý triệt để đã làm ô nhiễm và ảnh hưởng đến chất lượng của các nguồn nước ngầm. Vì vậy vấn đề sức khỏe của con người đang bị đe dọa nghiêm trọng nếu như chất lượng nước không được đảm bảo [1,4].

Chì (Pb) gây ảnh hưởng đến sự tổng hợp máu, phá vỡ hồng cầu, gây hại đến hệ thần kinh, nhất là hệ thần kinh của trẻ sơ sinh, chì kìm hãm việc sử dụng oxi và glucoza để sản

¹ Nhận bài ngày 02.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Mậu Thành; Email: Thanhhk18@gmail.com

xuất năng lượng cho quá trình sống. Sự kìm hãm này có thể nhận thấy khi nồng độ chì trong máu khoảng 0,3 mg/l. Nếu hàm lượng trong máu 0,5 - 0,8 mg/l sẽ gây rối loạn chức năng thận và phá huỷ não [1]. 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. 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 [6].

Phúc Trạch là một xã miền núi nằm trong vùng đệm vườn Quốc gia Phong Nha – Kẻ Bàng, nằm cách trung tâm huyện khoảng 36 km về phía Tây, gồm có 12 thôn phân bố thành 4 khu vực: Khu vực Phúc Đồng có 4 thôn từ thôn 1 đến thôn 4; khu vực Phúc Khê có 3 thôn: thôn 1, 2 và thôn 3; khu vực Thanh Sen có 4 thôn: Thôn 1 đến thôn 4. Khu vực chày lập có 1 thôn đó là thôn Chày Lập. Theo thống kê thực tế của xã thì tính đến năm 2016, trên toàn xã có 100% hộ dân dùng nước giếng đào hoặc rất ít giếng khoan cho sinh hoạt. Đặc biệt, trên địa bàn của xã có địa hình không bằng phẳng, bao gồm 3 dạng chủ yếu là: Địa hình đồi núi đá vôi; địa hình đồi núi nằm xen lẫn giữa vùng đồng bằng và địa hình núi đá. 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, trong bài báo này chúng tôi trình bày kết quả xác định, đánh giá hàm lượng chì và mangan (Pb) trong nước giếng sinh hoạt của một vài hộ dân ở xã Phúc Trạch huyện Bố Trạch, tỉnh Quảng Bình bằng phương pháp AAS.

2. THỰC NGHIỆM

2.1. Thiết bị, dụng cụ, hoá chất

Các ống nghiệm thủy tinh chịu nhiệt 30 ml có nắp xoáy; Cốc thủy tinh chịu nhiệt, thể tích 100 ml, 250 ml, 1000 ml; Bình định mức thủy tinh, thể tích 25 ml, 50 ml, 100 ml, 1000 ml. Thiết bị quang phổ hấp thụ nguyên tử AA 400 của hãng Perkin Elmer với kỹ thuật ngọn lửa; các micropipette Eppendorf và đầu hút.

Các hoá chất sử dụng có độ tinh khiết PA của Merck: Dung dịch chuẩn chì, mangan (1001 ± 2 ppm; 1000 ± 2 ppm), axit HNO_3 đặc, H_2O_2 đặc, nước cất.

2.2. Nguyên liệu, thời điểm và thiết bị lấy mẫu

Mẫu nước sinh hoạt được lấy ở 8 giếng đào của 8 hộ dân trong 4 khu vực (Phúc Đồng, Phúc Khê, Thanh Sen và Chày Lập) tại xã Phúc Trạch huyện Bố Trạch tỉnh Quảng Bình

vào 2 đợt. Các giếng được lựa chọn để lấy mẫu là những giếng đang được dùng thường xuyên cho sinh hoạt gia đình.

Thời điểm lấy mẫu: Đợt 1 ngày 19/06/2016 (trời nóng bức, nhiệt độ không khí 38⁰C); Đợt 2 ngày 7/08/2016 (trời nắng nhẹ, nhiệt độ không khí 33⁰C, trước thời điểm lấy mẫu 1 ngày trời có mưa giông, thời điểm lấy mẫu trời không mưa)

Thiết bị lấy mẫu và bảo quản mẫu: Thiết bị lấy mẫu kiểu ngang, loại chuyên dùng cho lấy mẫu nước mặt. Việc lấy mẫu và bảo quản mẫu theo các quy định trong Tiêu chuẩn Việt Nam: TCVN 5993:1995 – Chất lượng nước – Lấy mẫu. Hướng dẫn bảo quản và xử lý mẫu; TCVN 5996:1995 – Chất lượng nước – Lấy mẫu. Kí hiệu mẫu nước giếng là Ni-j, trong đó: $i = 1 \div 2$ (đợt lấy mẫu), $j = 1 \div 8$ (vị trí giếng lấy mẫu).

2.3. Phương pháp phân tích

Trong nghiên cứu này, áp dụng kỹ thuật phân tích quang phổ hấp thụ nguyên tử với kỹ thuật pha mẫu ướt. Được thực hiện tại Trung tâm Kỹ thuật Đo lường Thử nghiệm - Chi cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng Quảng Bình và chấp nhận những điều kiện hoạt động của thiết bị đã được công bố [2], như nêu ở Bảng 1.

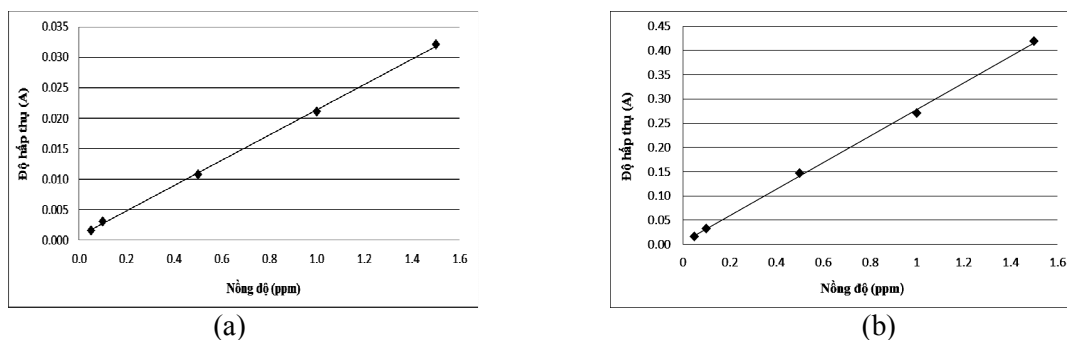
Bảng 1. Điều kiện đo F-AAS xác định Pb và Mn trong nước

Thông số	Pb	Mn
λ (nm)	283,31	279,48
Khe đo (mm)	2,7/1,8	2,7/1,8
Hỗn hợp khí đốt	KK-C ₂ H ₂	KK-C ₂ H ₂
Kiểu đèn	Catot rỗng chì	Catot rỗng mangan
Đèn bổ chính nền	D2	D2

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 chì và mangan được thể hiện trên Hình 1 và Bảng 2, với Pb phương trình có dạng: $A = 0,021C + 0,001$; và Mn phương trình có dạng: $A = 0,274C + 0,005$, trong đó C là hàm lượng (ppm).



Hình 1. Đường chuẩn xác định Pb và Mn trong nước (a.Pb; b.Mn)

Để xác định giới hạn phát hiện (LOD) và độ nhạy của phương pháp, chúng tôi áp dụng theo quy tắc "3 σ " [8]. 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 [8]:

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

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: $LOQ = 10S_y/b \approx 3,3 LOD$. 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 $A = bC + a$

Me	a	b	S_y	R	LOD, ppm	LOQ, ppm
Pb	0,001	0,021	0,001	0,9997	0,052	0,173
Mn	0,005	0,274	0,006	0,9996	0,063	0,210

Từ Bảng 2 ta thấy, giới hạn phát hiện (LOD), giới hạn định lượng (LOQ) của phép đo F-AAS trong phép xác định chì và mangan đã được xác định. Cụ thể LOD xác định chì là 0,052 và mangan là 0,063 ppm; LOQ xác định chì và mangan lần lượt là 0,173 và 0,210 ppm.

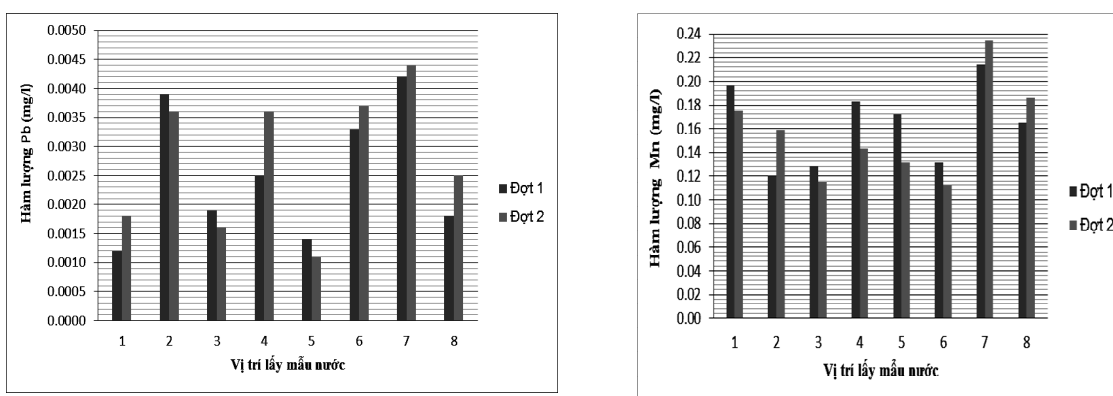
3.2. Đánh giá độ lặp lại và độ đúng của phép đo

Độ lặp lại được xác định qua độ lệch chuẩn (S) hay độ lệch chuẩn tương đối (RSD) [8]. Chúng tôi tiến hành phân tích trên mẫu nước N_{1-j} . Đo ba mẫu N_{1-j} , mỗi mẫu đo ba lần. Theo Horwitz, khi phân tích những nồng độ cỡ ppb, thì sai số trong nội bộ phòng thí nghiệm nhỏ hơn $\frac{1}{2}$ RSD tính theo công thức [8]: $RSD(\%) = 2^{(1 - 0,51gC)}$ (C là nồng độ chất phân tích) thì đạt yêu cầu. Lấy mẫu N_{1-j} , rồi thêm chuẩn vào mẫu này ba lần với nồng độ của chì và mangan tăng dần. Các kết quả cho thấy, phương pháp F-AAS khi phân tích mẫu nước đạt độ lặp lại tương đối tốt $RSD < 4,18\%$ đối với chì và $RSD < 5,38\%$ đối với mangan.

Độ đúng của phương pháp phân tích chì và mangan bất kì được xác định thông qua độ thu hồi (Recovery) theo công thức [9]: $Re v(\%) = \frac{C_2 - C_1}{C_0} \times 100$. 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 chì và mangan sau ba lần đo khi thêm đồng thời 0,5 ppm Pb và 0,5 ppm Mn vào ba mẫu nước nói trên cho độ thu hồi lần lượt đạt từ $94,76 \div 98,85\%$ và $96,57 \div 103,16\%$. Vậy, phương pháp F-AAS đạt được độ đúng tốt, nên có thể áp dụng để phân tích chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt.

3.3. Xác định hàm lượng chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt

Kết quả phân tích hàm lượng chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt của 8 hộ dân thuộc 4 thôn tại xã Phúc Trạch huyện Bố Trạch, sau 2 đợt với 16 mẫu nước được biểu diễn trên Hình 2.

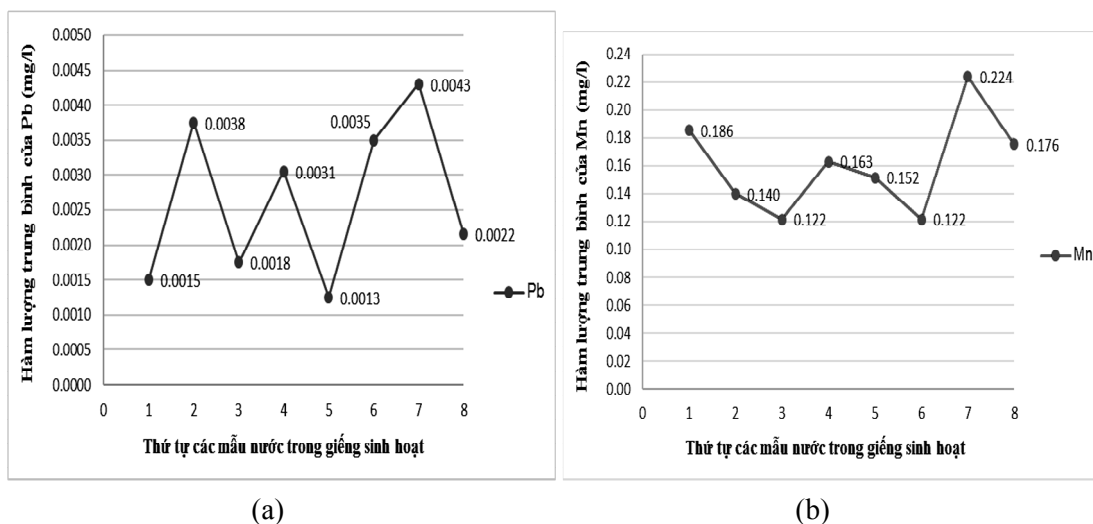


Hình 2. Kết quả xác định hàm lượng Pb và Mn trong nước giếng sinh hoạt (a.Pb; b.Mn)

Từ kết quả trên Hình 2, thấy hàm lượng chì và mangan trung bình trong nước giếng là tương đối thấp (0,0027 mg/l đối với Pb và 0,160 mg/l đối với Mn).

3.4. Đánh giá, so sánh hàm lượng chì và mangan trong nước giếng

3.4.1. Đánh giá hàm lượng Pb và Mn trong nước sinh hoạt tại thời điểm khảo sát



Hình 3. Kết quả hàm lượng \overline{Me} trong 16 mẫu nước giếng ở 8 vị trí (a.Pb; b.Mn)

Để đánh giá hàm lượng trung bình chì và sắt theo vị trí và thời gian lấy mẫu chúng tôi áp dụng phương pháp thống kê vào xử lý số liệu. Từ kết quả thu được, chúng tôi biểu diễn qua Hình 3. Dùng Data Analysis trong Microsoft Excel 2010, áp dụng phương pháp Anova 1 chiều đánh giá sự khác nhau về hàm lượng các kim loại giữa hai đợt lấy mẫu, thu được các kết quả ở Bảng 3.

Bảng 3. Kết quả phân tích anova 1 chiều của sự biến động hàm lượng Pb và Mn

Me	Nguồn phương sai	Tổng bình phương	Bậc tự do	Phương sai	$F_{tính}$	P	$F_{bảng}$ (F_{crit})
Pb	Giữa các vị trí	$2,76.10^{-7}$	1	$2,76.10^{-7}$	0,199	0,661	4,600
	Sai số thí nghiệm	$1,93.10^{-5}$	14	$1,38.10^{-6}$			
	Phương sai tổng	$1,96.10^{-5}$	15				
Mn	Giữa các vị trí	0,00019	1	0,00019	0,133	0,721	4,600
	Sai số thí nghiệm	0,01984	14	0,00142			
	Phương sai tổng	0,02013	15				

Từ Bảng 3 ta thấy, $P > 0,05$ và $F_{\text{tính}} < F_{\text{bảng}}$ thì không có sự sai khác và không có ý nghĩa về sai khác. Hay nói cách khác hàm lượng các kim loại trong các mẫu nước giếng sinh hoạt ở hai đợt lấy mẫu không khác nhau về mặt thống kê.

3.4.2. So sánh hàm lượng Pb và Mn trong nước giếng với tiêu chuẩn nước uống của Việt Nam

Kết quả so sánh hàm lượng chì và mangan trong nước giếng với tiêu chuẩn nước uống, cụ thể: Theo QCVN 01:2009/BYT (do Cục Y tế dự phòng và Môi trường biên soạn và được Bộ trưởng Bộ Y tế ban hành theo thông tư số 04/2009/TT-BYT ngày 17 tháng 6 năm 2009), (TCVN 6002-1995, ISO 6333-1986) [7] được thể hiện ở Bảng 4.

Bảng 4. Kết quả so sánh hàm lượng Pb và Mn với nước uống tiêu chuẩn

Kim loại	Vị trí lấy mẫu	Hàm lượng TB (mg/l)	TC cho phép VN (mg/l) [7]	Phương sai (S^2)	Độ lệch chuẩn (S)	$t_{\text{tính}}$	$t_{\text{li thuyết}}$ ($p=0,95; f=15$)
Pb	Xã	0,0027	$\leq 0,01$	$1,21 \cdot 10^{-6}$	0,0011	25,711	2,131
Mn	Phúc Trạch	0,160	$\leq 0,3$	$1,23 \cdot 10^{-3}$	0,035	15,252	2,131

Qua Bảng 4 cho thấy, các giá trị $t_{\text{tính}}$ đều lớn hơn $t_{\text{li thuyết}}$ ($p = 0,95; f = 15$). Điều đó có nghĩa cho thấy hàm lượng chì và mangan trong nước sinh hoạt của một vài hộ dân ở xã Phúc Trạch huyện Bố Trạch khác với tiêu chuẩn cho phép với $p < 0,95$ về mặt thống kê. Cụ thể hàm lượng cho chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt ở đây đều nằm trong phạm vi cho phép của tiêu chuẩn Việt Nam. Điều này cho thấy chưa có sự bất an cho người tiêu dùng về chì và mangan trong nước giếng sinh hoạt tại các địa điểm khảo sát.

4. KẾT LUẬN

Đã áp dụng phương pháp AAS để xác định hàm lượng chì và mangan trong 16 mẫu nước giếng sinh hoạt ở 8 hộ dân thuộc xã Phúc Trạch. Kết quả có độ lặp lại, độ chính xác cao và giới hạn phát hiện thấp.

Kết quả phân tích các mẫu nước ở đây, cho thấy hàm lượng trung bình của chì và mangan tương đối thấp lần lượt là 0,0017 mg/l và 0,160 mg/l, nằm trong giới hạn cho phép với tiêu chuẩn nước uống. Có thể nói rằng không có sự bất an về chì và mangan trong nước cho người sinh hoạt ở các thời gian và địa điểm khảo sát.

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

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Lê Huy Bá (2001), *Độc học môi trường*, Nxb Đại học Quốc gia TP.Hồ Chí Minh.
2. Phạm Luận (2006), *Phương pháp phân tích phổ nguyên tử*, Nxb Đại học Quốc gia, Hà Nội.
3. Từ Vọng Nghi, Huỳnh Văn Trung, Trần Tứ Hiếu (1986), *Phân tích nước*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
4. Nguyễn Thanh Sơn, Trần Ngọc Anh (2010), "Chất lượng nước sinh hoạt nông thôn tỉnh Quảng Trị - kết quả điều tra năm 2008", *Tạp chí Khoa học Đại học Quốc gia Hà Nội*, Khoa học Tự nhiên và Công nghệ 26, số 3S tr. 443-448.
5. Nguyễn Mậu Thành, Trần Đức Sỹ, Nguyễn Thị Hoàn (2015), "Phân tích và đánh giá hàm lượng sắt trong hào ở khu vực sông Nhật Lệ, thị trấn Quán Hàu - Quảng Bình", *Tạp chí Khoa học và Giáo dục*, Đại học Sư phạm Huế, 1(33), tr.111-117.
6. Nguyễn Mậu Thành, Hoàng Thị Cẩm Chương, Nguyễn Đức Vượng (2015), "Xác định, đánh giá hàm lượng sắt và mangan trong nước giếng sinh hoạt tại một vài hộ dân trên địa bàn xã Lộc Ninh - Đồng Hới - Quảng Bình", *Tạp chí Khoa học và Giáo dục*, Đại học Sư phạm Đà Nẵng, 15(02), tr.21-25.
7. Bộ Y Tế (2009), "Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia về chất lượng nước ăn uống", Ban hành kèm theo thông tư số 04/2009/TT-BYT.
8. Miller J. C., Miller J. N. (1998), *Statistics for Analytical Chemistry*, 2th, Ellis Howood Limited, Great Britain.
9. Miller J. C., Miller J. N. (2010), *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*, Ed. 6th, Pearson Education Limited, England.

ANALYSING AND EVALUATING THE CONTENT OF LEAD AND MAGANESE IN DRINKING-WATER IN PHUC TRACH COMMUNE, BO TRACH DISTRICT, QUANG BINH PROVINCE

Abstract: *The more developing the social is, the higher need of using clean water is. However, the overpopulation, urbanization and industrialization are fast causing high pressure to our environment; especially, to the ground water and well-water. The atomic absorption spectrophotometric method is applied to determine the content of lead and manganese in well-water at some households in Phuc Trach Commune, Bo Trach District, Quang Binh Province. This method has high repeatability with RSD < 5,38% and the recovery from 94,76% to 103,16% and low limit of detection. This result shows that the average of lead and manganese's content in water is relatively low 0,0027 mg/l and 0,160 mg/l. The lead and manganese content in water meets the allowed standards of Viet Nam.*

Key words: *Well-water; AAS method; lead; manganese; standard*

$\bar{f}f \rightarrow \phi\phi$ AND $\bar{f}f \rightarrow \phi h$ COLLISIONS IN THE RANDALL-SUNDRUM MODEL

Dao Thi Le Thuy¹, Le Nhu Thuc, Bui Thi Ha Giang,
Nguyen Thi Hau, Nguyen Dinh Quang, Nguyen Van Minh
Hanoi National University of Education

Abstract: The process of $\bar{f}f \rightarrow \phi\phi$ and $\bar{f}f \rightarrow \phi h$ scattering in the Randall-Sundrum model with the polarization of the \bar{f}, f beams are studied in detail. We shown that the differential cross section has changed very small when $-1 \leq \cos\theta \leq 1$ and the total cross-section decreased very small when \sqrt{s} increased.

Keywords: Radion, RS model, cross-section

1. INTRODUCTION

The Randall-Sundrum (RS) model is one of a number of new physics models which can solve the large hierarchy problem of the weak and the Plank scale. The RS model is based on a 5D space-time with the fifth dimension is compactified on an orbifold S^1/Z_2 which has two fixed points, $\phi = 0$ and $\phi = \pi$. They correspond to the high energy brane and the brane we live on, respectively. Graviton is the only particle that can propagate through the bulk between these two branes. The 5-dimensional warped metric is given by [1]:

$$ds^2 = e^{-2kr|\phi|} \left(\eta_{\mu\nu} + \frac{2}{3} h_{\mu\nu} \right) dx^\mu dx^\nu - r^2 d\phi^2, \quad 0 \leq |\phi| \leq \pi, \quad (1)$$

$$M_{PL}^2$$

with $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ and where ϕ is the five dimensional coordinate, k is a scale of order of the Plank scale, r is compactification radius of the extra dimensional circle and $h_{\mu\nu}$ is the graviton metric. Solving the 5-dimensional Einstein equation and using Eq. (1), we can get the relation between the 4-dimensional reduced Plank scale \bar{M}_{PL} and the 5-dimensional Plank scale M_{PL} [2],

¹ Nhận bài ngày 15.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Đào Thị Lê Thủy; Email: thuydtl@hnue.edu.vn

$$\bar{M}_{PL} = \frac{M_{PL}^3}{k} (1 - e^{-2kr\pi}). \quad (2)$$

The physical mass m of a field in 4-dimension, is related to the fundamental mass parameter m_0 as following:

$$m = e^{-kr\pi} m_0. \quad (3)$$

Thus the hierarchy problem can be solved by assuming $kr \sim 12$ [1].

The 4-dimensional effective Lagrangian is then:

$$L = -\frac{\phi_0}{\Lambda_\phi} T_\mu^\mu - \frac{1}{\hat{\Lambda}_W} T^{\mu\nu}(x) \sum_{n=1}^{\infty} h_{\mu\nu}^n, \quad (4)$$

where $\Lambda_\phi \equiv \sqrt{6} M_{PL} \Omega_0$ is the VEV of the radion field and $\hat{\Lambda}_W \equiv \sqrt{2} M_{PL} \Omega_0$. $T^{\mu\nu}(x)$ is the energy-momentum tensor of TeV brane localized SM fields. The T_μ^μ is the trace of the energy-momentum tensor which is given at the tree level as

$$T_\mu^\mu = \sum_f m_f \bar{f}f - 2m_W^2 W_\mu^+ W^{-\mu} - m_Z^2 Z_\mu Z^\mu + (2m_{h_0}^2 h_0^2 - \partial_\mu h_0 \partial^\mu h_0) + \dots \quad (5)$$

The gravity-scalar mixing arises at the TeV brane by [3]

$$S_\xi = -\xi \int d^4x \sqrt{-g_{vis}} R(g_{vis}) \hat{H}^+ \hat{H}, \quad (6)$$

where $R(g_{vis})$ is the Ricci scalar for the induced metric on the visible brane or TeV brane, $g_{vis}^{\mu\nu} = \Omega_b^2(x)(\eta^{\mu\nu} + \varepsilon h^{\mu\nu})$. \hat{H} is the Higgs field before re-scaling, i.e., $H_0 = \Omega_0 \hat{H}$. The parameter ξ denotes the size of the mixing term.

The characteristic features of the radion have been studied, including the phenomenological aspects of the radion in various colliders [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. In this paper, we study the production of the Higgs boson and radion at e^+e^- , $\mu^+\mu^-$ collider.

This paper is organized as follows: In Sec.2, we have interaction vertices between fermionic coupling, Higgs boson, radion in the RS model. Production of the Higgs boson in the collider is calculated in Sec.3. We show our numerical results with discussion in Sec 4 and our conclusions in Sec.5.

2. THE VERTICES

Following the Feynman rule for interaction between fermionic coupling, Higgs boson, radion in the RS model it is straightforward to have the interaction vertices:

$$V(\bar{f}, f, h) = -i \frac{gm_Z}{2m_W} (d + \gamma b), \quad V(\bar{f}, f, \phi) = -i \frac{gm_Z}{2m_W} (c + \gamma a), \quad (7)$$

$$V(\phi, h, h) = \frac{1}{\Lambda_\phi} [\{6b\xi(\gamma(ad + bc) + cd) + ad^2\}(k_1^2 + k_2^2) + d\{12ab\gamma\xi + 2bc + ad(6\xi - 1)\}k_3^2 - 4d(ad + 2bc)m_{h_0}^2 - 3\gamma^{-1}cd^2m_{h_0}^2], \quad (8)$$

$$V(\phi, \phi, \phi) = \frac{1}{\Lambda_\phi} [ac\{[12a\gamma\xi + c(6\xi + 1)](k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) - 12cm_{h_0}^2\} - 3\gamma^{-1}c^3m_{h_0}^2] \quad (9)$$

$$V(\phi, \phi, h) = \frac{1}{\Lambda_\phi} [\{6a\xi(\gamma(ad + bc) + cd) + bc^2\}(k_1^2 + k_2^2) + c\{12ab\gamma\xi + 2ad + bc(6\xi - 1)\}k_3^2 - 4c(2ad + bc)m_{h_0}^2 - 3\gamma^{-1}c^2dm_{h_0}^2], \quad (10)$$

By using these vertices, we calculate the matrix element of $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi, \phi h$ collisions in the next section.

2.1. The matrix elements of $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi, \phi h$ collisions

We are interested in the production of radion and Higgs boson in the high energy \bar{f}, f colliders when the \bar{f}, f beams are polarized,

$$f(p_1) + \bar{f}(p_2) \rightarrow \phi, h(k_1) + \phi(k_2). \quad (11)$$

Here p_i, k_i stand for the momentum of the particle, respectively. There are three Feynman diagrams contributing to reaction (11), representing the s, u, t – channel exchange depicted in Figure 1.

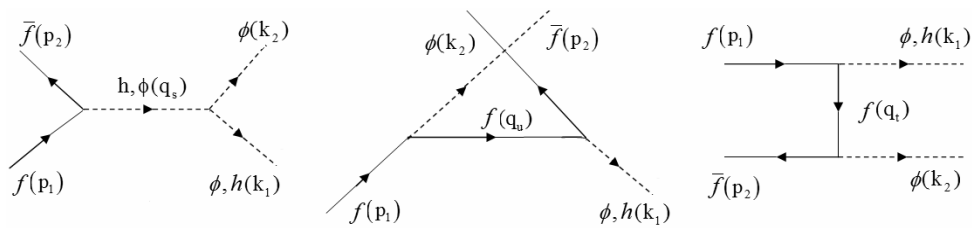


Figure 1. Feynman diagrams for $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi, \phi h$

Use Feynman rules, the matrix element for process $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi$ can be written as the following cases:

+ For s – channel:

$$M_s = -i \frac{gm_f}{2m_W} \left(\frac{(c + \gamma a) \bar{g}_{\phi\phi\phi}}{q_s^2 - m_\phi^2} + \frac{(d + \gamma b) \bar{g}_{h\phi\phi}}{q_s^2 - m_h^2} \right) \bar{v}(p_2) u(p_1), \quad (12)$$

$$M_{sLR} = -i \frac{gm_f}{4m_W} \left(\frac{(c + \gamma a) \bar{g}_{\phi\phi\phi}}{q_s^2 - m_\phi^2} + \frac{(d + \gamma b) \bar{g}_{h\phi\phi}}{q_s^2 - m_h^2} \right) \bar{v}(p_2) (1 - \gamma_5) u(p_1), \quad (13)$$

$$M_{sRL} = -i \frac{gm_f}{4m_W} \left(\frac{(c + \gamma a) \bar{g}_{\phi\phi\phi}}{q_s^2 - m_\phi^2} + \frac{(d + \gamma b) \bar{g}_{h\phi\phi}}{q_s^2 - m_h^2} \right) \bar{v}(p_2) (1 + \gamma_5) u(p_1), \quad (14)$$

+ For u – channel:

$$M_u = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_u^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) (\hat{q}_u + m_f) u(p_1), \quad (15)$$

$$M_{uLR} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{m_f}{q_u^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \frac{1 + \gamma_5}{2} u(p_1),$$

$$M_{uRL} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{m_f}{q_u^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \frac{1 - \gamma_5}{2} u(p_1), \quad (16)$$

$$M_{uLL} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_u^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \hat{q}_u \frac{(1 - \gamma_5)}{2} u(p_1), \quad (17)$$

$$M_{uRR} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_u^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \hat{q}_u \frac{(1 + \gamma_5)}{2} u(p_1). \quad (18)$$

+ For t – channel:

$$M_t = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_t^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) (\hat{q}_t - m_f) u(p_1), \quad (19)$$

$$M_{tLR} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{m_f}{q_t^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \frac{1 + \gamma_5}{2} u(p_1), \quad (20)$$

$$M_{tRL} = -im_\mu \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{m_f}{q_t^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \frac{1 - \gamma_5}{2} u(p_1), \quad (21)$$

$$M_{tLL} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_t^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \hat{q}_t \frac{(1 - \gamma_5)}{2} u(p_1), \quad (22)$$

$$M_{tRR} = -i \left(\frac{gm_f(c + \gamma a)}{2m_W} \right)^2 \frac{1}{q_t^2 - m_f^2} \bar{v}(p_2) \hat{q}_t \frac{(1 + \gamma_5)}{2} u(p_1). \quad (23)$$

Similar as the process $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi$, we obtained the matrix element for process $\bar{f} f \rightarrow \phi h$ by replacing $\bar{g}_{\phi\phi\phi} \rightarrow \bar{g}_{\phi\phi h}, \bar{g}_{h\phi\phi} \rightarrow \bar{g}_{\phi h h}, a \rightarrow b, c \rightarrow d$.

Using these matrix elements, we evaluate the differential and total cross-section for radion and Higgs boson production in the $f \bar{f}$ collider in the next section.

2.2. Numerical Results

In this section, we present the numerical results for differential and total cross-section for Higgs boson and radion production in the e^+e^- , $\mu^+\mu^-$ collider when the e^+, e^-, μ^+, μ^- beams are polarized and non-polarized. From the expression of the cross-section:

$$\frac{d\sigma}{d(\cos\theta)} = \frac{1}{64\pi} \frac{|\vec{k}|}{|\vec{p}|} |M|^2, \quad (24)$$

where M is the matrix element, we assess the number, make the identification and evaluation of the results obtained from the dependence of the differential cross-section by $\cos\theta$, the total cross-section fully follows \sqrt{s} .

We choose $m_e = 0,00051 GeV$, $m_\mu = 0,1055 GeV$, $m_\gamma = 0$, $m_Z = 91,2 GeV$, $\alpha = \frac{1}{137}$, $e = \sqrt{4\pi\alpha}$, $s_w^2 = 0,23$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 1$, $g = 0,634$. We obtain some estimates for the cross-section as follows:

i) We show in Fig.2, Fig.3 the behavior of $d\sigma/d\cos\theta$ at fixed collision energy $\sqrt{s} = 3000 GeV$ (this energy can be done in LHC, in future can up to 14TeV [11]). We see that the differential cross-section changes very small when value of $\cos\theta$ changes from -1 to 1 . In e^+e^- collision, the differential cross-section has value greatest for the case $e_L^+e_R^-$. In $\mu^+\mu^-$ collision, the differential cross-section has value greatest for the case $\mu_L^+\mu_R^-$, too.

The value of differential cross-section obtained in $\mu^+\mu^-$ collision bigger than $\mu^+\mu^-$ collision about 10^3 time. But the differential cross-section in two case this were very small.

ii) In Fig.4, Fig.5, we plot total cross-section as function of the collision energy with the collision energy is in region $500 GeV \leq \sqrt{s} \leq 5000 GeV$. The figure shows the total cross section is decreases very slowly when the the center - of mass energy increases.

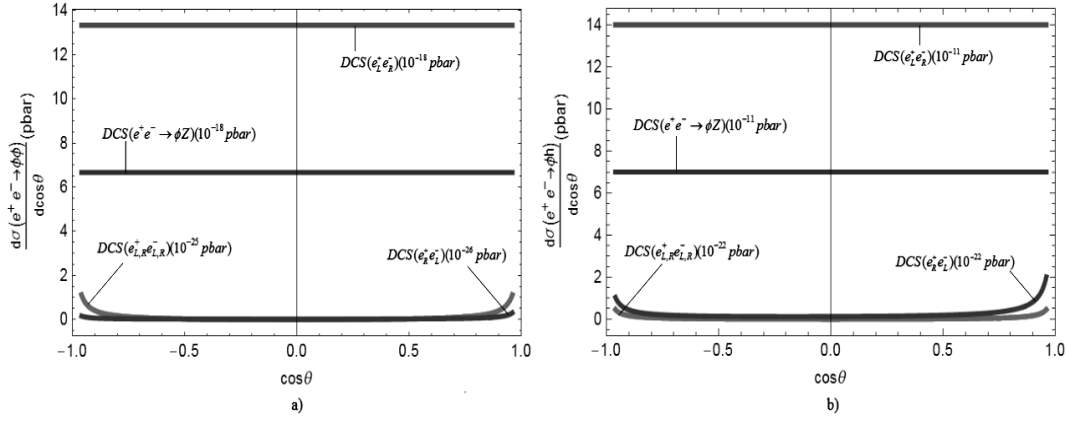


Figure 2. Differential cross-section of the process $e^+e^- \rightarrow \phi\phi, \phi h$ as a function of $\cos\theta$

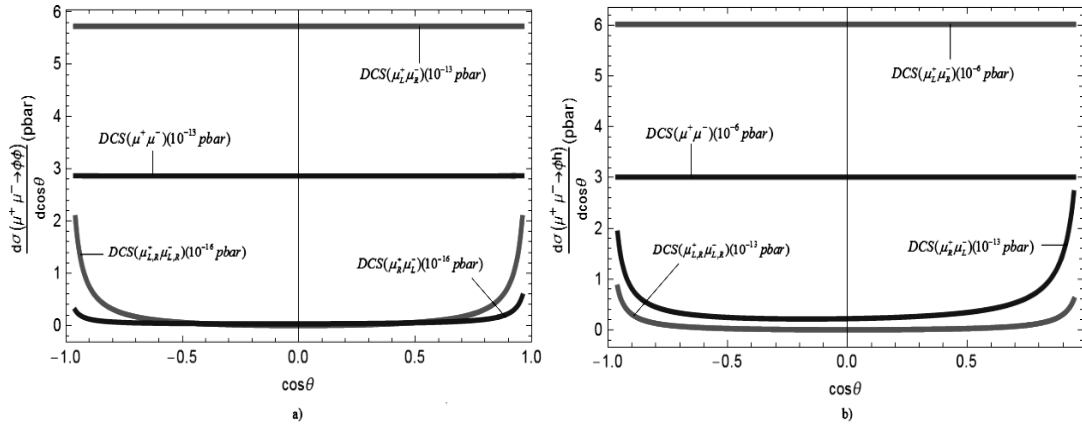


Figure 3. Differential cross-section of the process $\mu^+\mu^- \rightarrow \phi\phi, \phi h$ as a function of $\cos\theta$

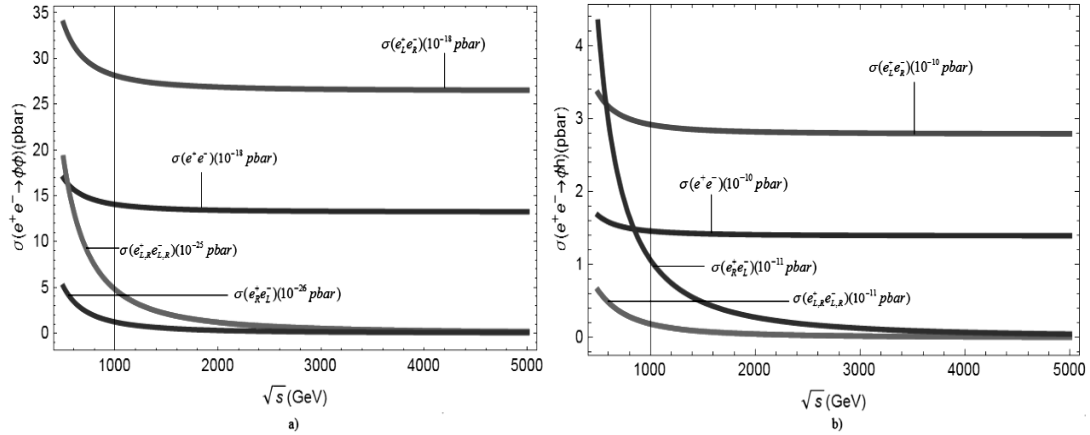


Figure 4. Total cross-section of the process $e^+e^- \rightarrow \phi\phi, \phi h$ as a function of the collision energy \sqrt{s}

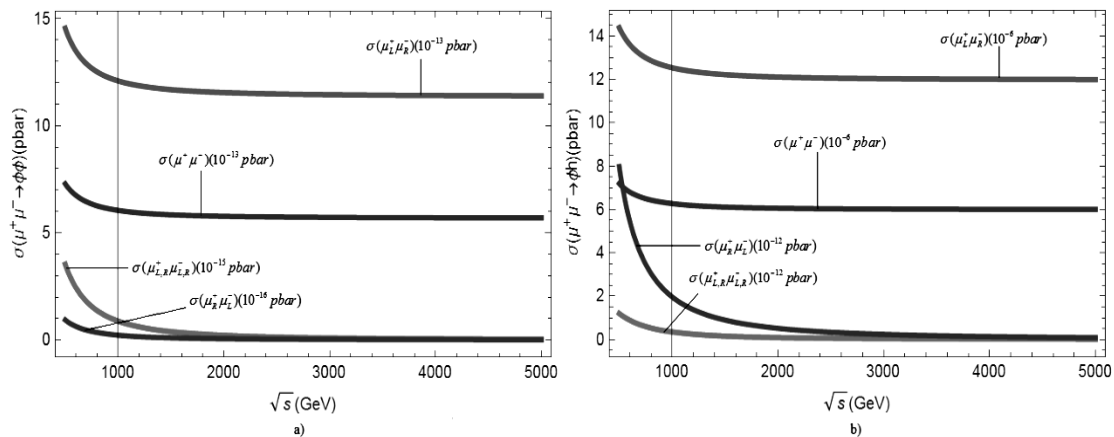


Figure 5. Total cross-section of the process $\mu^+ \mu^- \rightarrow \phi\phi, \phi h$ as a function of the collision energy \sqrt{s}

3. CONCLUSION

In this paper, we have calculated production of the Higgs boson and radion in the $\bar{f} f$ collider when the \bar{f}, f beams are polarized, the results show that, the differential cross-section and total cross-section changes very small. The value of cross-section obtained in $\mu^+ \mu^-$ collision bigger than $e^+ e^-$ collision about 10^3 time. But the cross-section in two case this were very small. So it is hard scattering observed in laboratory conditions.

REFERENCES

1. S. A. Li, C. S. Li, H. T. Li and J. Gao, (2015), "Constraints on Randall-Sundrum model from the events of dijet production with QCD next-to-leading order accuracy at the LHC", [arXiv:1408.2762v2 [hep-ph]].
2. L. Randall and R. Sundrum, (1999), *Phys. Rev. Lett.* 83, 3370.
3. G. F. Giudice, R. Rattazzi and J. D. Wells, (2001), "Graviscalars from higher dimensional metrics and curvature Higgs mixing", *Nucl. Phys. B* 595, 250 [hep-ph/0002178].
4. D. Dominici, B. Grzadkowski, J. F. Gunion and M. Toharia, (2003), "The Scalar sector of the Randall-Sundrum model", *Nucl. Phys. B* 671, 243, [hep-ph/0206192].
5. N. Desai, U. Maitra and B. Mukhopadhyaya, "An updated analysis of radion-higgs mixing in the light of LHC data", arXiv:1307.3765.
6. M. Battaglia, S. De Curtis, A. De Roeck, D. Dominici and J. F. Gunion, (2003), "On the complementarity of Higgs and radion searches at LHC", *Phys. Lett. B* 568, 92, [hep-ph/0304245].

7. K. Cheung, C. S. Kim and J. -h. Song, (2003), "A Probe of the radion Higgs mixing in the Randall-Sundrum model at $e^+ e^-$ colliders", *Phys. Rev. D* 67, 075017, [hep-ph/0301002].
8. G. Abbiendi et al. [OPAL Collaboration], (2005), "Search for radions at LEP2", *Phys. Lett. B* 609, 20, [Erratum-ibid. B 637, 374 (2006)] [hep-ex/0410035].
9. S. Bae, P. Ko, H. S. Lee and J. Lee, "Radion phenomenology in the Randall-Sundrum scenario", hep-ph/0103187 and S. Bae, P. Ko, H. S. Lee and J. Lee, (2000), "Phenomenology of the radion in Randall-Sundrum scenario at colliders", *Phys. Lett. B* 487, 299, [hep-ph/0002224].
10. U. Mahanta and A. Datta, (2000), "Production of light stabilized radion at high-energy hadron collider", *Phys. Lett. B* 483, 196, [hep-ph/0002183].
11. E. S. Reich, 2013, "Physicists plant to build a bigger LHC", *Nature News*, *Nature Publishing Group*, Nov 12.

QUÁ TRÌNH VA CHẠM $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi$ VÀ $\bar{f} f \rightarrow \phi h$ TRONG MÔ HÌNH RANDALL-SUNDRUM

Tóm tắt: Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu chi tiết sự sinh Higgs boson và radion từ các quá trình va chạm $\bar{f} f \rightarrow \phi\phi$ và $\bar{f} f \rightarrow \phi h$ trong mô hình Randall-Sundrum có xét đến sự phân cực của chùm hạt \bar{f}, f . Kết quả thu được cho thấy, tiết diện tán xạ vì phân thay đổi không đáng kể khi giá trị $\cos\theta$ thỏa mãn $-1 \leq \cos\theta \leq 1$, còn tiết diện tán xạ toàn phần giảm rất ít khi năng lượng khối tâm \sqrt{s} tăng.

Từ khóa: Radion, mô hình RS, tiết diện tán xạ

MỘT TIẾP CẬN ĐÁNH GIÁ ĐỘ TRÙNG LẶP VĂN BẢN SỬ DỤNG TRỌNG SỐ MỜ

Đỗ Nam Tiến¹⁽¹⁾, Khiếu Văn Bằng¹, Nguyễn Tu Trung¹,
Trần Thành Trung², Nguyễn Huy Đức³

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

²Trường Đại học Sư phạm Hà nội 2

³Trường Cao đẳng Sư phạm Trung Ương

Tóm tắt: Trùng lặp nội dung văn bản là vấn đề phổ biến từ các trang báo, trang tin đến các tác phẩm. Việc phát hiện trùng lặp là rất cần thiết. Bản chất là kiểm tra sự tương tự giữa các tài liệu. Tuy nhiên, đây là bài toán phức tạp và đang được quan tâm nghiên cứu. Hiện nay, có nhiều phương pháp được nghiên cứu để giải quyết vấn đề này. Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một cải tiến độ đo tương tự dựa trên logic mờ và ứng dụng trong vấn đề phát hiện trùng lặp nội dung bài báo.

Từ khoá: Văn bản, phát hiện trùng lặp, độ tương tự.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trùng lặp nội dung văn bản là hiện tượng phổ biến trong đời sống. Vì nhiều nguyên nhân, các văn bản thường bị sao chép, trích dẫn. Đây là lí do mà các văn bản có thể tìm được từ nhiều nguồn khác nhau như các trang báo điện tử. Vì những lí do khác nhau, nhiều khi chúng ta muốn tìm và phát hiện sự trùng lặp giữa các văn bản. Ví dụ liên quan đến vấn đề tác quyền, tác giả muốn kiểm tra xem nội dung tác phẩm của họ có bị sử dụng dụng lại một cách trái phép hay không. Vấn đề đạo nhạc, đạo bài hát, tác phẩm văn học... hiện đang khiến giới chuyên môn bức xúc. Đối với các hệ thống lưu trữ tài liệu, việc lưu các văn bản có độ trùng lặp cao chỉ gây lãng phí và tốn tài nguyên. Với các máy tìm kiếm, khi thu thập dữ liệu từ Internet, nếu đánh giá tốt độ trùng lặp của dữ liệu mới so với các tài liệu có trong kho dữ liệu sẽ tránh được việc tiếp tục tải thêm và lưu trữ một dữ liệu mới trùng lặp vào kho dữ liệu... Vì vậy, vấn đề phát hiện trùng lặp hiện đang được quan tâm.

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 11.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Đỗ Nam Tiến; Email: tiendonam@gmail.com

Phát hiện trùng lặp là bài toán phức tạp vì các văn bản thường không bị sao chép toàn phần mà chỉ một phần có thể ít, có thể nhiều. Các phần bị sao chép có thể bị thay đổi và nằm ở vị trí khác nhau trong văn sao chép. Hiện tại, có nhiều kỹ thuật phát hiện trùng lặp khác nhau bao gồm: Shingling[1], I-Match[2], Phép chiếu ngẫu nhiên, SpotSigs, Sự tương tự giữa hai tài liệu...

Có thể thấy vấn đề phát hiện trùng lặp thực chất là việc tính toán độ tương tự trong nội dung của văn bản cần so sánh với các văn bản có sẵn trong kho dữ liệu (Corpus). Độ tương tự của văn bản được xác định dựa trên các chỉ số như:

- Độ tương tự về ngữ nghĩa của các văn bản: Từ khoá, TF - IDF;
- Độ tương tự về câu văn, đoạn văn;
- Độ tương tự về ngữ pháp của văn bản: Cú pháp câu, từ loại,...
- Độ tương tự về các thẻ HTML của các trang web;

Việc sử dụng một tiêu chí để đánh giá độ tương tự của các văn bản trong kho văn bản ngày càng trở nên thiếu hiệu quả do người dùng Internet và các công cụ sao chép nội dung ngày càng thông minh hơn. Do đó, ngày càng có nhiều nghiên cứu tập trung vào việc kết hợp các tiêu chí đánh giá độ tương tự với nhau để từ đó làm tăng độ chính xác của các công cụ đánh giá độ tương tự văn bản, phát hiện trùng lặp, máy tìm kiếm,...

Trong [4], Muneer và cộng sự đã đề xuất thuật toán cho việc thiết lập các cụm trang web trùng lặp. Ngoài ra, Fresno và cộng sự đã đề xuất hàm trọng số FCC là hệ mở cho việc gán các trọng số đặc trưng và sự kết hợp của chúng [5][3].

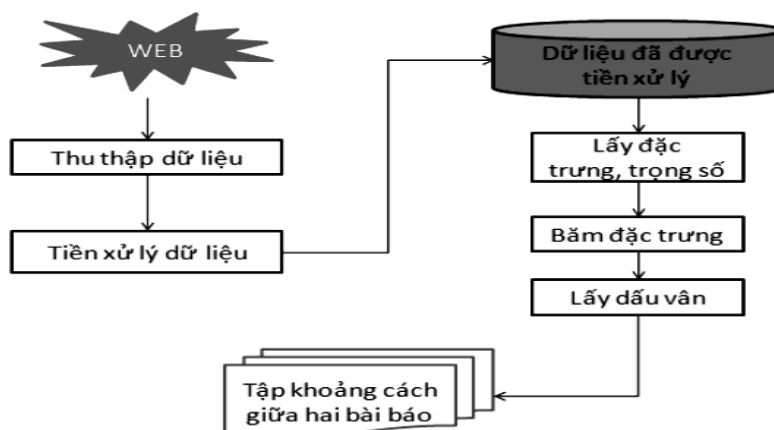
Hiện nay, trong nước cũng đã có một số công trình nghiên cứu về việc phát hiện nội dung trùng lặp trong kho văn bản tiếng Việt [9], [6], [8], các nghiên cứu cho thấy việc kết hợp các tiêu chí đánh giá nội dung văn bản để phát hiện sự trùng lặp trong kho văn bản tiếng Việt làm tăng độ chính xác trong việc đánh giá của các thuật toán. Tuy nhiên, các nghiên cứu cũng cho thấy vẫn cần phải nghiên cứu thêm để cải tiến, tối ưu hoá việc kết hợp các tiêu chí đánh giá để nâng cao độ chính xác của việc phát hiện trùng lặp.

Bài báo này đề xuất cải tiến đánh giá độ tương tự giữa hai văn bản tiếng Việt. Các phần còn lại của bài báo này được trình bày như sau. Phần 2 trình bày hệ thống tra cứu văn bản nói chung và đo độ tương tự giữa hai văn bản. Phần 3 trình bày độ đo tương tự mới cải tiến từ độ đo đã có sử dụng logic mờ. Một số thử nghiệm được trình bày trong phần 4. Phần 5 là kết luận bài báo.

2. HỆ THỐNG TRA CỨU VĂN BẢN TRÙNG LẶP

Trong [6] đưa ra một mô hình hệ thống tra cứu văn bản trùng lặp. Chương trình thực hiện kiểm tra một bài báo điện tử được thu thập về xem có giống/gần giống với các bài đã

được thu thập trước đó hay không. Dữ liệu được lấy từ các bài báo điện tử được viết bằng Tiếng Việt.

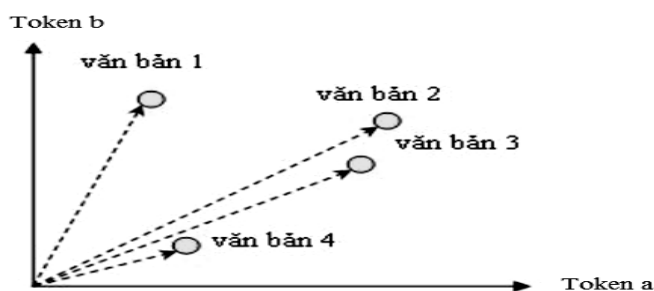


Hình 1. Mô hình thử nghiệm vấn đề phát hiện trùng lặp nội dung các bài báo [6].

Các bước thực hiện như sau:

- Bước 1: Thu thập các bài báo điện tử
- Bước 2: Lấy nội dung của các bài báo đã được thu thập và loại bỏ nhiễu.
- Bước 3: Thực hiện shingling cho mỗi tài liệu.
- Bước 4: Lấy dấu vân cho mỗi tài liệu.
- Bước 5: So sánh và cho ra kết quả.

3. ĐỘ ĐO TƯƠNG TỰ



Hình 2. Mô hình không gian vector cho văn bản [7].

Văn bản thường được biểu diễn dưới dạng vector dựa theo mô hình tần suất [7] mà tiêu biểu là các phương pháp dựa trên tần số (TF) và nghịch đảo tần số (IDF). Hình 2 là ví dụ trong trường hợp biểu diễn văn bản với số Token là 2. Về mặt tổng quát, số Token rất nhiều, ví dụ: Tổng số âm tiết (nếu dùng đặc trưng âm tiết), Tổng số từ (nếu dùng đặc trưng từ).

Có một số độ đo được sử dụng như: độ tương tự cosine (cosine similarity), hệ số Jaccard (Jaccard coefficient), khoảng cách Euclide (Euclidean distance), hệ số tương quan Pearson (Pearson Correlation coefficient) [7]... Trong bài báo này, chúng tôi xem xét độ đo khoảng cách Euclide được biểu diễn theo công thức sau đây (1):

$$d_{Euclidean}(A, B) = \sqrt{\sum_i (A_i - B_i)^2}$$

4. THUẬT TOÁN PHÂN CỤM DỮ LIỆU

Khi cơ sở dữ liệu văn bản rất lớn, việc tra cứu trên toàn bộ kho văn bản khiến tốc độ thực thi rất chậm. Vì vậy, người ta có thể tiến hành cụm kho văn bản trước để tăng tốc độ tra cứu. Ngoài ra, kỹ thuật phân cụm còn được sử dụng để hỗ trợ phân lớp kho dữ liệu văn bản.

Thuật toán KMeans [10] bao gồm 4 bước, được trình bày như sau:

Đầu vào: n đối tượng x_i với $i = 1..n$ và số cụm c

Đầu ra: Các cụm C_j ($j = 1..c$) sao cho hàm mục tiêu E sau đây đạt cực tiểu:

$$E = \sum_{j=1}^c \sum_{x \in C_j} d^2(x, C_j) \quad (1)$$

Các bước thuật toán như sau:

Bước 1: Khởi tạo

Chọn k đối tượng C_j ($j=1..c$) là tâm ban đầu của c cụm dữ liệu đầu vào (lựa chọn ngẫu nhiên hoặc theo kinh nghiệm).

Bước 2: Gán tâm cụm theo khoảng cách

Với mỗi đối tượng x_i ($i = 1..n$), tính khoảng cách của nó tới mỗi tâm C_j với $j = 1..c$. Đối tượng thuộc về cụm C_S mà khoảng cách từ tâm C_S tương ứng đến đối tượng đó là nhỏ nhất.

$$d(x, C_S) = \min d(x, C_j), j = 1..c \quad (2)$$

Bước 3: Cập nhật tâm cụm

Đối với mỗi $j = 1..c$, cập nhật lại tâm cụm C_j bằng cách xác định trung bình cộng của các vector đối tượng dữ liệu đã được gán về cụm.

$$C_{j/k} = \frac{\sum_{x \in \text{cluster}(j)} x_k}{\text{count}(\text{cluster}(j))} \quad (3)$$

Bước 4: Lặp và kiểm tra điều kiện dừng

Lặp lại các bước 2 và 3 cho đến khi các tâm cụm không thay đổi giữa hai lần lặp liên tiếp.

Trong đó:

- $d(x, C_j)$: khoảng cách từ x đến tâm C_j
- C_{jk} : thành phần thứ k của tâm cụm C_j
- x_k : thành phần thứ k của đối tượng x

5. ĐỀ XUẤT ĐỘ ĐO TƯƠNG TỰ CẢI TIẾN

Hiện tại, các độ đo tương tự đều đánh giá các đặc trưng có vai trò như nhau và chỉ dựa vào tần suất để phân biệt giá trị đặc trưng theo từng văn bản cụ thể. Nếu chỉ sử dụng đặc trưng mức âm tiết – đơn vị đặc trưng không có nghĩa thì không sao. Tuy nhiên, nếu sử dụng đặc trưng mức từ, điều này là không hợp lí. Lí do là vì các từ thông thường sẽ được sử dụng nhiều hơn so với tên riêng, tên người, con số... nên khả năng lặp lại cao hơn rất nhiều. Hay chữ viết tắt có khả năng lặp lại rất thấp trong các văn bản. Nói cách khác, xét về khả năng lặp lại thì các từ thông thường có ảnh hưởng lớn nhất còn các chữ viết tắt ảnh hưởng ít nhất. Như vậy, nếu chúng ta phân hạng đặc trưng theo các mức khác nhau thì có thể đánh giá độ tương tự văn bản chính xác hơn.

Từ đây, nhóm tác giả đề xuất tập luật để xác định mức độ ảnh hưởng của các loại đặc trưng như sau:

- 1) Nếu đặc trưng là Từ thông thường thì ảnh hưởng rất lớn.
- 2) Nếu đặc trưng là Tên riêng thì ảnh hưởng lớn.
- 3) Nếu đặc trưng là Tên người hoặc tên thực thể thì ảnh hưởng trung bình.
- 4) Nếu đặc trưng là Phần trăm hoặc Số thì ảnh hưởng nhỏ.
- 5) Nếu đặc trưng là Chữ viết tắt thì ảnh hưởng rất nhỏ.

Gọi F_i là đặc trưng thứ i , hàm ảnh hưởng theo loại đặc trưng của đặc trưng F_i là $effect(F_i)$. Khi này, công thức đo độ tương tự (1) cải tiến trở thành (2):

$$d_{Euclidean}(A, B) = \sqrt{\sum_i (effect(A_i)A_i - effect(B_i)B_i)^2}$$

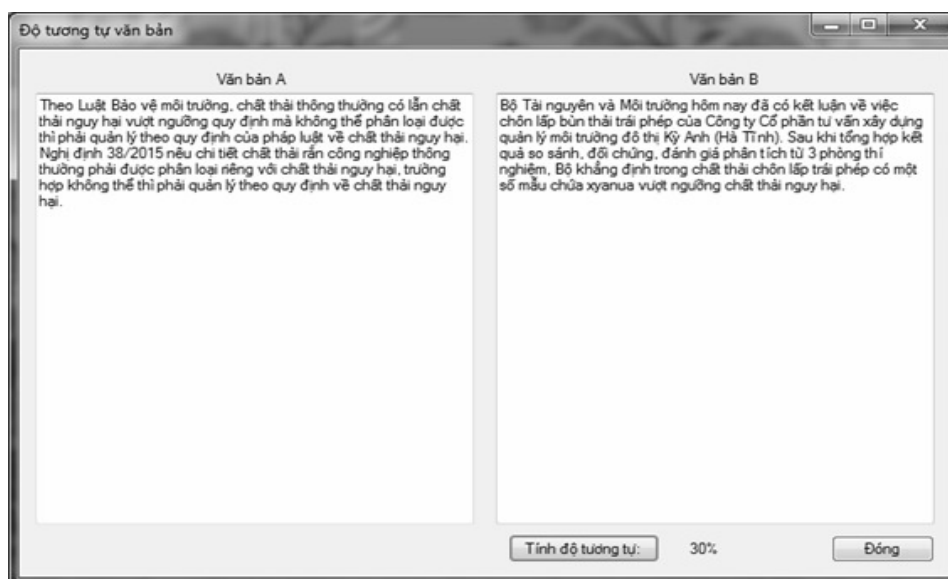
6. THỰC NGHIỆM

Độ đo tương tự văn bản được ứng dụng trong vấn đề tra cứu văn bản trùng lặp. Cụ thể, cơ sở dữ liệu nhóm tác giả sử dụng bao gồm danh sách trên 500 bài báo (tên, tóm tắt). Với bài báo mới, hệ thống thực hiện việc so sánh độ tương tự của phần tóm tắt với các bài báo trong cơ sở dữ liệu. Từ đây, hệ thống thực hiện việc phân cụm kho văn bản. Trong giai đoạn tra cứu, hệ thống đưa ra danh sách 5 bài báo có độ tương tự cao nhất từ các cụm. Hệ thống đưa ra hai cách thức tìm văn bản trùng lặp. Trường hợp 1, khi số lượng văn bản trong kho không quá nhiều, có thể duyệt toàn bộ văn bản và so sánh độ tương tự với văn

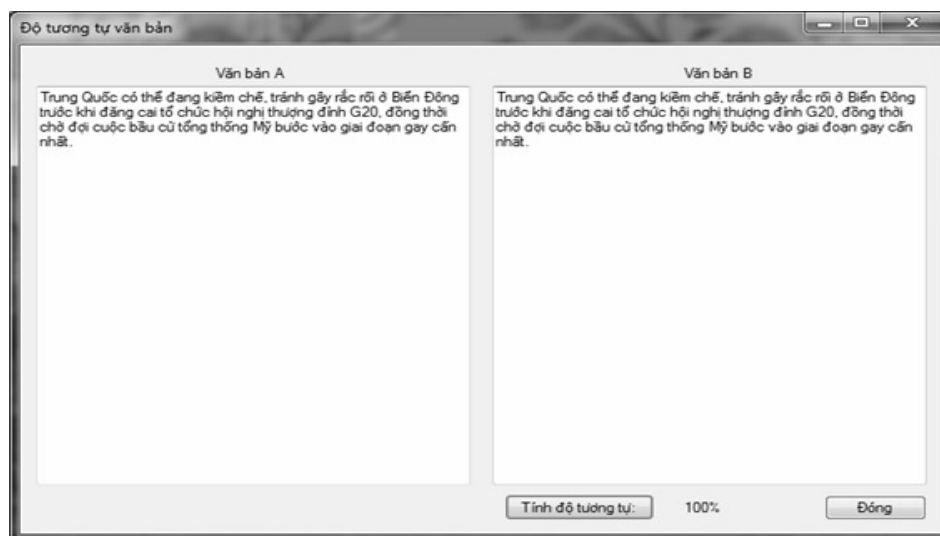
bản đầu vào. Trường hợp 2, số lượng văn bản trong kho quá lớn, giai đoạn tra cứu chia làm hai bước. Bước 1, hệ thống thực hiện so sánh độ tương tự của văn bản đầu vào với các cụm dữ liệu trong kho văn bản. Bước 2, từ các cụm gần nhất, hệ thống so sánh văn bản đầu vào với các văn bản thuộc cụm này.

Trong thử nghiệm của chúng tôi, để rút trích được đặc trưng mức từ và phân biệt loại đặc trưng như trên, chúng tôi sử dụng công cụ phân tích đoạn văn "vn.hus.nlp.tokenizer" của nhóm nghiên cứu TS. Lê Hồng Phương.

6.1. Thử nghiệm đo độ tương tự hai văn bản



Hình 3. So sánh hai văn bản khác nhau



Hình 5. So sánh cùng một văn bản

6.2. Đánh giá chất lượng phân cụm kho văn bản

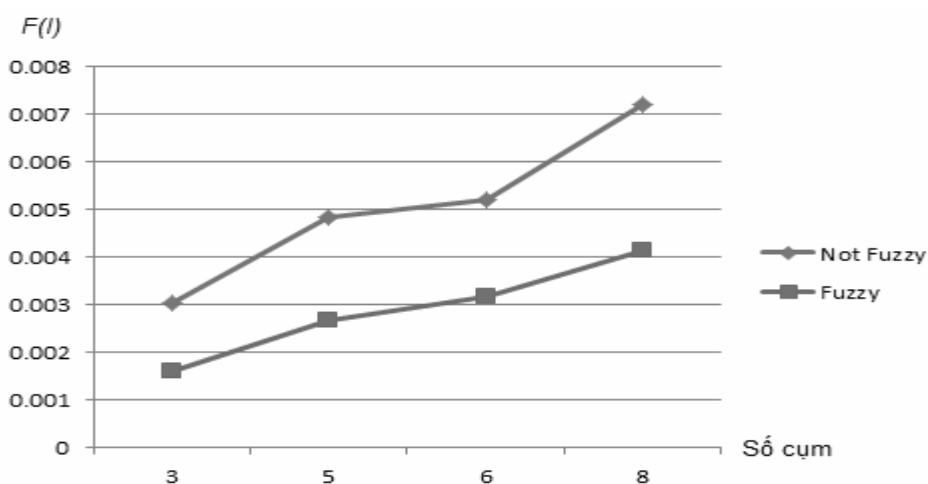
Để đánh giá chất lượng phân cụm, trong [11], các tác giả đã sử dụng chỉ số $F(I)$ [13], tuân theo các tiêu chí về sự đồng nhất cụm [11] [12], để so sánh kết quả phân cụm của các thuật toán. Giá trị của $F(I)$ càng nhỏ thì độ đồng nhất càng cao. Chỉ số này được tính như sau:

$$F(I) = \frac{1}{1000(N \times M)} \sqrt{R \sum_{i=1}^R \frac{e_i}{\sqrt{A_i}}} \quad (8)$$

Bảng 1 và hình 6 thống kê chỉ số so sánh chất lượng phân cụm văn bản trong các trường hợp dùng và không dùng trọng số mờ trong các trường hợp 3, 5, 6 và 8 cụm.

Bảng 1. So sánh độ đồng nhất cụm

	3	5	6	8
Not Fuzzy	0.00303	0.00485	0.00521	0.0072
Fuzzy	0.0016	0.00266	0.00316	0.00415



Hình 6. So sánh độ đồng nhất cụm văn bản

6.3. Tra cứu văn bản tương tự

a) Thử nghiệm 1

Bảng 1. Văn bản đầu vào thử nghiệm 1

Tên	Tóm tắt
Nghiên cứu hành vi xã hội, trí nhớ và học tập trên động vật thực nghiệm được tiêm thuốc gây bệnh tâm thần phân liệt	Đánh giá hoạt động vận động, tương tác xã hội, trí nhớ không gian của chuột nhắt chủng Swiss trước và sau khi tiêm ketamine trường diễn với dải liều từ 10 - 35 mg/kg/ngày; Xây dựng mô hình gây bệnh TTPL thực nghiệm bằng liều ketamine phù hợp, sau đó điều trị bằng các thuốc chống loạn thần. Đánh giá sự biến đổi hành vi, trí nhớ và học tập của động vật trước và sau khi điều trị.

Bảng 2. Kết quả tìm kiếm với thử nghiệm 1 trong cơ sở dữ liệu.

Tên	Độ tương tự
Nghiên cứu hành vi xã hội, trí nhớ và học tập trên động vật thực nghiệm được tiêm thuốc gây bệnh tâm thần phân liệt	100%
Nghiên cứu, ứng dụng hệ thống thông tin địa lí (GIS) và mô hình SWAT để dự báo lưu lượng dòng chảy và xói mòn đất tại tiểu lưu vực sông Ôn Lương - Hợp Thành.	71%
Nghiên cứu ảnh hưởng của mật độ trồng đến năng suất và chất lượng giống sắn mới HL2004-28 tại trường Đại học Nông Lâm Thái Nguyên	71%
Nghiên cứu vi sinh vật ứng dụng cho sản xuất biogas làm tăng hiệu suất trong điều kiện môi trường nước lợ và nước mặn	70%
Phần mềm ôn luyện A 2 và IC 3 trực tuyến	70%

b) Thử nghiệm 2**Bảng 3.** Văn bản đầu vào thử nghiệm 2

Tên	Tóm tắt
Tác động của biến đổi khí hậu đến hạn hán khu vực Nam Trung Bộ Việt Nam, khả năng dự tính và giải pháp ứng phó	Tổng quan về tình hình hạn hán và các nghiên cứu về hạn hán, dự tính hạn hán theo các kịch bản phát thải khí nhà kính; Thử nghiệm, lựa chọn chỉ số hạn khí tượng phù hợp, từ đó xác định mức độ biến đổi của hạn hán khu vực Nam Trung Bộ trong quá khứ, xu thế biến đổi trong tương lai theo các kịch bản phát thải khí nhà kính và đề xuất giải pháp ứng phó.

Bảng 2. Kết quả tìm kiếm với thử nghiệm 2 trong cơ sở dữ liệu

Tên	Độ tương tự
Tác động của biến đổi khí hậu đến hạn hán khu vực Nam Trung Bộ Việt Nam, khả năng dự tính và giải pháp ứng phó	100%
Phân tích đặc điểm địa hoá và thạch học của đá mẹ than và sét than trầm tích miocen khu vực phía bắc bể trầm tích sông Hồng	71%
Nghiên cứu, ứng dụng hệ thống thông tin địa lí (GIS) và mô hình SWAT để dự báo lưu lượng dòng chảy và xói mòn đất tại tiểu lưu vực sông Ôn Lương - Hợp Thành.	70%
Nghiên cứu vi sinh vật ứng dụng cho sản xuất biogas làm tăng hiệu suất trong điều kiện môi trường nước lợ và nước mặn	70%
Xác lập cơ sở khoa học phục vụ quy hoạch bảo vệ môi trường huyện phú lộc tỉnh thừa thiên huế	70%

c) Thử nghiệm 3

Bảng 4. Văn bản đầu vào thử nghiệm 3

Tên	Tóm tắt
Nâng cao năng lực tài chính của các ngân hàng thương mại cổ phần ở Việt Nam hiện nay	Hệ thống hoá và hoàn thiện hơn những lí luận cơ bản về năng lực tài chính của NHTM như đưa ra quan điểm về tài chính, năng lực tài chính NHTM. Đặc biệt luận án đã chú trọng vào việc phân tích cơ sở để dẫn giải đưa đến nội dung trình bày về lí luận năng lực tài chính của NHTM; Phân tích rõ hơn cơ sở và ý nghĩa của các tiêu chí đánh giá năng lực tài chính NHTM, đồng thời cách tiếp cận khi phân tích các nhân tố ảnh hưởng cũng thể hiện tính logic và hệ thống với các giải pháp; Trên cơ sở nghiên cứu kinh nghiệm nâng cao năng lực tài chính của ngân hàng một số nước trên thế giới, chỉ ra căn nguyên chính dẫn đến những yếu kém về năng lực tài chính ngân hàng là tình trạng tăng trưởng tín dụng nóng và phát triển thiếu bền vững. Mặt khác, để nâng cao năng lực tài chính của các NHTM thì ngoài những nỗ lực của chính các NHTM còn rất cần nhưng hỗ trợ từ phía Ngân hàng Trung ương và Chính Phủ. Đây cũng chính là những bài học cần thiết trong việc nâng cao năng lực tài chính của các NHTMCP Việt Nam.

Bảng 2. Kết quả tìm kiếm với thử nghiệm 1 trong cơ sở dữ liệu

Tên	Độ tương tự
Nâng cao năng lực tài chính của các ngân hàng thương mại cổ phần ở Việt Nam hiện nay	100%
Hoàn thiện công tác lập và trình bày báo cáo tài chính hợp nhất trong các doanh nghiệp sản xuất thép thuộc Hiệp hội Thép Việt Nam	46%
Quản trị rủi ro tài chính của doanh nghiệp Việt Nam	46%
Phân tích đặc điểm địa hoá và thạch học của đá mẹ than và sét than trầm tích miocen khu vực phía bắc bể trầm tích sông Hồng	45%
Một thuật toán phân cụm K-Means tăng cường cho phân đoạn ảnh đa phổ không giám sát	45%

7. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã đề xuất cải tiến độ đo tương tự giữa hai văn bản dựa trên luật mờ. Luật mờ được xây dựng để sinh ra trọng số ảnh hưởng theo loại đặc trưng. Kết quả cho thấy độ đo cải tiến áp dụng tốt cho việc so sánh văn bản tiếng Việt. Ngoài ra, chúng tôi áp dụng độ đo cải tiến trong việc tìm kiếm văn bản trùng lặp.

Trong nghiên cứu tiếp theo, chúng tôi dự kiến phân tích nghiên cứu sâu hơn về vai trò, vị trí của đặc trưng trong câu để đưa ra mức độ ảnh hưởng theo ngữ cảnh cụ thể.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. A.Z. Broder, S.C. Glassman, M.S. Manasse, G. Zweig (1997), "Syntactic Clustering of the Web", *Computer Network*.
2. E. Uyar (2009), *Near-duplicate news detection using name entities*.
3. M.A. Hearst (2006), "Clustering versus faceted categories for information exploration", *In Communications of the ACM*.
4. Muneer K., Syed Farook K (2014), "An Innovative Approach for Clustering of Web Pages Based on Transduction", *International Journal of Advanced Research in Computer Science & Technology IJARCSST*, Vol. 2, Issue 3, pp. 241-244.
5. Xuemin Lin Chuan Xiao (2008), "Efficient similarity joins for near duplicate detection", *In 17th International conference on World Wide Web*.
6. Phạm Kim Hồng (2013), *Phát hiện sự trùng lặp nội dung của các bài báo*, Luận văn Thạc sĩ.
7. Lê Mạnh Hùng (2012), *Tra cứu văn bản tiếng Việt dựa trên kỹ thuật phân cụm*, Luận văn Thạc sĩ.
8. Dương Thăng Long, Báo cáo đề tài nghiên cứu: *Nghiên cứu độ đo tương tự trong văn bản tiếng Việt và ứng dụng đánh giá việc sao chép bài điện tử*.
9. Nguyễn Tuấn Anh (2009), *Phát hiện trùng lặp văn bản và xây dựng chỉ mục hiệu quả cho WebCrawler*, Luận văn Thạc sĩ.
10. <http://www.onmyphd.com/?p=KMeans.clustering>.
11. Valliammal N., S.N.Geethalakshmi (2012), "Leaf Image Segmentation Based On the Combination of Wavelet Transform and K Means Clustering", *International Journal of Advanced Research in Artificial Intelligence*, Vol. 1, No.3.
12. R. H. Haralick, and L. G. Shapiro (1985), "Image segmentations techniques", *Computer Vision Graphics Image Processing* 29, pp.100-132.
13. J. Liu, and Y. H. Yang (1994), "Multiresolution color image segmentation", *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol.16, no.7, pp.689-700.

AN APPROACH TO ASSESS DUPLICATION LEVEL OF TEXT USING FUZZY WEIGHT

Abstract: Content duplication of text is a common issue of newspapers, news websites and publications. Duplication detecting is essential. Essence of this work is checking the similarity of documents. However, this is the complex problem and being interested in research. Presently, there are many researching methods to solve this problem. In this paper, we propose an improvement of similarity measure, which is based on fuzzy logic and applied it in duplication detecting of article content.

Keywords: Text, duplication detecting, similarity measure

TÍNH DUY NHẤT NGHIỆM β – NHÓT CỦA PHƯƠNG TRÌNH HAMILTON-JACOBI TRONG KHÔNG GIAN BANACH

Phan Trọng Tiên¹

Trường Đại học Quảng Bình

Tóm tắt: bài viết đưa ra một số kết quả về dưới vi phân β – nhót và tính duy nhất nghiệm β – nhót của phương trình Hamilton-Jacobi trong lớp hàm liên tục và bị chặn.

Từ khoá: borno β , β – tron, nghiệm dưới β – nhót, nghiệm trên β – nhót, phương trình Hamilton-Jacobi.

1. MỞ ĐẦU

Lí thuyết nghiệm nhót của phương trình đạo hàm riêng đã xuất hiện từ đầu những năm 80 của thế kỉ trước, nó được đề xuất bởi Crandall M. G và Lions P.-L. trong bài báo [8]. Cho đến nay đã có rất nhiều công trình nghiên cứu về nghiệm nhót và ứng dụng của chúng như: [2], [8], [13] về phương trình đạo hàm riêng trong không gian hữu hạn chiều; [1], [3], [4], [7], [9], [11], [12], [14], [15], [5], [6] về phương trình đạo hàm riêng trong không gian vô hạn chiều...

Ban đầu, khi nghiên cứu nghiệm nhót của phương trình đạo hàm riêng người ta dùng dưới vi phân Fréchet. Trong công trình nghiên cứu của mình, Borwein và Preiss (xem [5]) đã đưa ra khái niệm β – dưới vi phân. Trong đó β là một lớp các tập con của không gian X mà trong các trường hợp đặc biệt của β thì ta nhận được các dưới vi phân quen thuộc như dưới vi phân Fréchet, Hadamard, Hadamard yếu, Gâteaux.

Bài viết này nghiên cứu tính duy nhất của nghiệm β – nhót của phương trình Hamilton-Jacobi dạng $u + H(x, Du) = 0$. Cụ thể là tính duy nhất nghiệm β – nhót của phương trình cho lớp hàm liên tục và bị chặn. Đây là sự mở rộng cho kết quả được nêu trong [6], ở đó các tác giả đã chứng minh được tính duy nhất nghiệm của phương trình $u + H(x, Du) = 0$ cho lớp hàm liên tục đều và bị chặn.

¹ Nhận bài ngày 02.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Phan Trọng Tiên; Email: trongtien2000@gmail.com

Ngoài phần giới thiệu, kết luận và TÀI LIỆU THAM KHẢO, nội dung của bài viết bao gồm hai phần với hai nội dung trọng tâm là: trình bày dưới vi phân β -nhót và các kết quả về quy tắc tổng mờ của dưới vi phân; trình bày nghiệm β -nhót của phương trình Hamilton-Jacobi và kết quả về tính duy nhất của nghiệm β -nhót.

2. NỘI DUNG

2.1. Dưới vi phân β -nhót

Trong bài viết này, chúng tôi sử dụng các kí hiệu thông dụng sau đây: Cho X là không gian Banach với chuẩn được kí hiệu $\|\cdot\|$, nếu không gian X không có chuẩn tron nhưng có chuẩn tương đương với chuẩn β -tron thì ta tính theo chuẩn tương đương này, X^* là không gian đối ngẫu của X . Không gian tích $X^N = \underbrace{X \times X \times \dots \times X}_{N\text{-lần}}$. Với tập $S \subset X$ ta kí hiệu đường kính của nó bởi $\text{diam}(S) := \sup\{\|x - y\| : x, y \in S\}$. Với $u \in X, p \in X^*$ thì $\langle p, u \rangle$ để chỉ giá trị của p tại u .

Trong [6] các tác giả đã đưa ra khái niệm borno β , trong đó β là một họ các tập con của X thoả mãn một số điều kiện xác định. Trong một số trường hợp đặc biệt của β thì thu được các borno thường gặp, những kết quả đó được nhắc lại trong Định nghĩa dưới đây.

Định nghĩa 2.1. Một borno β trên X là một họ không rỗng các tập con đóng, bị chặn và đối xứng tâm của X thoả mãn ba điều kiện sau:

$$1) X = \bigcup_{B \in \beta} B,$$

2) Họ β đóng kín đối với phép nhân với một vô hướng,

3) Hợp của hai phần tử bất kì trong β đều chứa trong một phần tử của β .

Nhận xét 2.2. Một số trường hợp đặc biệt:

1) Họ F tất cả các tập con đóng, bị chặn, đối xứng tâm của X là một borno và gọi là *borno Fréchet*;

2) Họ H tất cả các tập con compact, đối xứng tâm của X là một borno và gọi là *borno Hadamard*;

3) Họ WH tất cả các tập con compact yếu, đóng, đối xứng tâm của X là một borno và gọi là *borno Hadamard yếu*;

4) Họ G tất cả các tập con hữu hạn, đối xứng tâm của X là một borno và gọi là *borno Gâteaux*.

Định nghĩa 2.3. Giả sử $f_m, f \in X^*, m \in \mathbb{N}$. Ta nói f_m hội tụ về f đối với borno β nếu $f_m \rightarrow f$ khi $m \rightarrow \infty$ đều trên mọi phần tử của β , có nghĩa là với mọi tập $M \in \beta$ và mọi

$\varepsilon > 0$ cho trước, tồn tại $n_0 \in \mathbb{N}$ sao cho với mọi $m \geq n_0$, mọi $x \in M$ ta đều có $|f_m(x) - f(x)| < \varepsilon$.

Cho một borno β trên X kí hiệu τ_β là tôpô trên X^* với sự hội tụ đều trên β tập hợp và X_β^* là không gian véc tơ tôpô (X^*, τ_β) .

Ta luôn giả thiết rằng với mỗi hàm số được xét đến đều nhận giá trị trong tập số thực mở rộng và quy ước là nửa liên tục dưới (trên) thì không đồng nhất bằng $+\infty(-\infty)$ và không nhận giá trị bằng $-\infty(+\infty)$.

Cho hàm f xác định trên X , ta nói rằng f là β - khả vi tại x và có β - đạo hàm $\nabla_\beta f(x)$ nếu $f(x)$ hữu hạn và

$$\frac{f(x+tu) - f(x) - t\langle \nabla_\beta f(x), u \rangle}{t} \rightarrow 0$$

khi $t \rightarrow 0$ đều trên $u \in V$ với bất kì $V \in \beta$. Ta nói rằng hàm f là β - trơn tại x nếu $\nabla_\beta f : X \rightarrow X_\beta^*$ là liên tục trong lân cận của x .

Định nghĩa 2.4. Cho $f : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ là một hàm nửa liên tục dưới và $f(x) < +\infty$. Ta nói rằng f là khả dưới vi phân β -nhót và x^* là một dưới đạo hàm β -nhót của f tại x nếu tồn tại một hàm Lipschitz địa phương $g : X \rightarrow \mathbb{R}$ sao cho g là β -trơn tại x , $\nabla_\beta g(x) = x^*$ và $f - g$ đạt cực tiểu địa phương tại x . Ta kí hiệu tập tất cả các dưới đạo hàm β -nhót của f tại x là $D_\beta^- f(x)$ và gọi là dưới vi phân β -nhót của f tại x .

Cho $f : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ là một hàm nửa liên tục trên và $f(x) > -\infty$. Ta nói rằng f là khả trên vi phân β -nhót và x^* là một trên đạo hàm β -nhót của f tại x nếu tồn tại một hàm Lipschitz địa phương $g : X \rightarrow \mathbb{R}$ sao cho g là β -trơn tại x , $\nabla_\beta g(x) = x^*$ và $f - g$ đạt cực đại địa phương tại x .

Ta kí hiệu tập tất cả các trên đạo hàm β -nhót của f tại x là $D_\beta^+ f(x)$ và gọi là trên vi phân β -nhót của f tại x .

Định lí dưới đây cho chúng ta thông tin về sự liên hệ giữa các dưới đạo hàm β -nhót của hàm bị chặn, nửa liên tục dưới. Kết quả này được sử dụng trong việc chứng minh tính duy nhất nghiệm β -nhót của phương trình Hamilton-Jacobi.

Định lí này lấy kĩ thuật chứng minh ở [Theorem 2.9, [6]] và ý tưởng ở [Lemma III.6, [5]].

Định lí 2.5. Cho X là một không gian Banach với chuẩn tương đương với chuẩn β -trơn và $f_1, \dots, f_N : X \rightarrow \mathbb{R}$ là N hàm nửa liên tục dưới, bị chặn.

Khi đó, với mỗi $\varepsilon > 0$, tồn tại $x_n \in X, n = 1, \dots, N$ và $x_n^* \in D_{\beta}^- f_n(x_n)$ thoả mãn:

$$\text{i) } \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \cdot \max(1, \|x_1^*\|, \dots, \|x_N^*\|) < \varepsilon,$$

$$\text{ii) } \sum_{n=1}^N f_n(x_n) < \inf_{x \in X} \sum_{n=1}^N f_n(x) + \varepsilon,$$

$$\text{iii) } \left\| \sum_{n=1}^N x_n^* \right\| < \varepsilon.$$

Chứng minh: Với mỗi số thực $t > 0$, ta xác định hàm $w_t : X^N \rightarrow \mathbb{R}$ cho bởi:

$$w_t(x_1, \dots, x_N) = \sum_{n=1}^N f_n(x_n) + t \sum_{n,m=1}^N \|x_n - x_m\|^2.$$

Đặt $M_t = \inf w_t$, khi đó M_t đơn điệu tăng theo t và bị chặn trên bởi:

$$\alpha := \liminf_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\}.$$

Thật vậy, với $\varepsilon > 0$ bất kì, tồn tại $\eta_0 > 0$ sao cho với mọi $0 < \eta < \eta_0$ thì:

$$\inf \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} < \alpha + \varepsilon.$$

Chọn $\eta \in (0, \eta_0)$ thoả mãn $t.N^2.\eta^2 < \varepsilon$. Khi đó, tồn tại y_1, \dots, y_N sao cho:

$$\text{diam}(y_1, \dots, y_N) < \eta$$

Và:

$$\sum_{n=1}^N f_n(y_n) < \inf \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} + \varepsilon.$$

Theo cách chọn η ở trên ta có: $t \sum_{n,m=1}^N \|y_n - y_m\|^2 < \varepsilon$ nên:

$$\sum_{n=1}^N f_n(y_n) + t \sum_{n,m=1}^N \|y_n - y_m\|^2 < \inf \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} + 2\varepsilon < \alpha + 3\varepsilon.$$

Do đó $M_t < \alpha + 3\varepsilon$, mà $\varepsilon > 0$ bất kì nên $M_t \leq \alpha$. Đặt $M = \lim_{t \rightarrow +\infty} M_t$. Trên không gian tích X^N có một chuẩn tương đương với một chuẩn β -trơn. Với mỗi $t > 0$ áp dụng nguyên lí biến phân trơn [5] cho hàm w_t tồn tại một hàm ϕ_t lồi, C^1 và $x_n^t, n = 1, \dots, N$ sao cho $w_t + \phi_t$ đạt cực tiểu địa phương tại (x_1^t, \dots, x_N^t) , $\|\nabla_{\beta} \phi_t(x_1^t, \dots, x_N^t)\| < \varepsilon / N$ và

$$w_t(x_1^t, \dots, x_N^t) < \inf w_t + \frac{1}{t} \leq M + \frac{1}{t}. \quad (1)$$

Với mỗi n , hàm $y \mapsto w_t(x_1^t, \dots, x_{n-1}^t, y, x_{n+1}^t, \dots, x_N^t) + \phi_t(x_1^t, \dots, x_{n-1}^t, y, x_{n+1}^t, \dots, x_N^t)$ đạt cực tiểu địa phương tại $y = x_n^t$. Như vậy, với $n = 1, \dots, N$ thì:

$$x_{n_t}^* := -\nabla_{\beta x_n} \phi_t(x_1^t, \dots, x_N^t) - 2t \sum_{m=1}^N \nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x_n^t - x_m^t) \in D_{\beta}^- f_n(x_n^t). \quad (2)$$

Do đó:

$$\sum_{n=1}^N x_{n_t}^* = -\sum_{n=1}^N \nabla_{\beta x_n} \phi_t(x_1^t, \dots, x_N^t) - 2t \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x_n^t - x_m^t).$$

Vì: $\|-\sum_{n=1}^N \nabla_{\beta x_n} \phi_t(x_1^t, \dots, x_N^t)\| < \varepsilon$ và $\nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x_n^t - x_m^t) + \nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x_m^t - x_n^t) = 0$ nên:

$$\left\| \sum_{n=1}^N x_{n_t}^* \right\| < \varepsilon.$$

Theo Định nghĩa M_t , kết hợp với (1) ta có:

$$\begin{aligned} M_{t/2} &\leq w_{t/2}(x_1^t, \dots, x_N^t) \\ &= w_t(x_1^t, \dots, x_N^t) - \frac{t}{2} \sum_{n,m=1}^N \|x_n^t - x_m^t\|^2 \\ &\leq M_t + \frac{1}{t} - \frac{t}{2} \sum_{n,m=1}^N \|x_n^t - x_m^t\|^2. \end{aligned}$$

Do đó:

$$t \sum_{n,m=1}^N \|x_n^t - x_m^t\|^2 \leq 2(M_t - M_{t/2} + \frac{1}{t})$$

và từ đó ta có kết luận:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} t \sum_{n,m=1}^N \|x_n^t - x_m^t\|^2 = 0.$$

Suy ra:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{diam}(x_1^t, \dots, x_N^t) = 0.$$

Mặt khác ta có đánh giá $\|\nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x)\| \leq 2\|x\|$ nên từ công thức (2) ta có

$$\begin{aligned} \|x_{n_t}^*\| &\leq \left\| -\nabla_{\beta x_n} \phi_t(x_1^t, \dots, x_N^t) \right\| + 2t \left\| \sum_{m=1}^N \nabla_{\beta} \|\cdot\|^2(x_n^t - x_m^t) \right\| \\ &\leq \frac{\varepsilon}{N} + 2t \sum_{m=1}^N 2\|x_n^t - x_m^t\| \leq \frac{\varepsilon}{N} + 4tN \text{diam}(x_1^t, \dots, x_N^t) \end{aligned}$$

suy ra: $\lim_{t \rightarrow +\infty} \|x_{n_t}^*\| = 0$ do đó

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{diam}(x_1^t, \dots, x_N^t) \cdot \max(\|x_1^*\|, \dots, \|x_N^*\|) = 0.$$

Và:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{diam}(x_1^t, \dots, x_N^t) \cdot \max(1, \|x_1^*\|, \dots, \|x_N^*\|) = 0.$$

Như vậy, vì α là một chặn trên của M_t nên ta có:

$$\begin{aligned} M &\leq \liminf_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} \\ &\leq \liminf_{t \rightarrow +\infty} \sum_{n=1}^N f_n(x_n^t) = \liminf_{t \rightarrow +\infty} \sum_{n=1}^N w_t(x_1^t, \dots, x_N^t) \leq M \end{aligned}$$

Nên:

$$M = \liminf_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\}.$$

Với $\eta > 0$ bất kì ta có:

$$\inf \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} \leq \inf_{x \in X} \sum_{n=1}^N f_n(x)$$

suy ra:

$$M = \liminf_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{n=1}^N f_n(x_n) : \text{diam}(x_1, \dots, x_N) \leq \eta \right\} \leq \inf_{x \in X} \sum_{n=1}^N f_n(x).$$

Theo cách xác định hàm w_t ta có $\sum_{n=1}^N f_n(x_n^t) \leq w_t(x_1^t, \dots, x_N^t)$. Từ công thức (1) ta có:

$$\sum_{n=1}^N f_n(x_n^t) < M + \frac{1}{t} \leq \inf_{x \in X} \sum_{n=1}^N f_n(x) + \frac{1}{t}.$$

Lấy $x_n = x_n^t$ và $x_n^* = x_n^*$, $n = 1, \dots, N$ với t đủ lớn ta có kết luận của Định lí.

2.2. Nghiệm β – nhót của phương trình Hamilton-Jacobi

Cho X là không gian Banach thực, X^* là không gian đối ngẫu của nó. Xét phương trình đạo hàm riêng:

$$F(x, u, Du) = 0.$$

Trong trường hợp tổng quát, phương trình (3) không có nghiệm cổ điển. Nghiệm nhót của phương trình đã được đề xuất bởi Crandall và Lions [8] để thay thế cho nghiệm cổ điển. Định nghĩa ban đầu của nghiệm nhót được trình bày trong [8] và [7] trên cơ sở dưới vi phân Fréchet. Trong [[9], [6]], nghiệm β – nhót được định nghĩa cho phương trình (3) trên không gian không có chuẩn Fréchet tron. Ta nhắc lại định nghĩa dưới đây.

Định nghĩa 2.6. (Definition 3.1, [6])

Cho X là một không gian Banach với chuẩn tương đương một chuẩn β -trơn. Một hàm $u: X \rightarrow \mathbb{R}$ là *nghiệm dưới β -nhót* của phương trình (3) nếu u là một hàm nửa liên tục trên và với mỗi $x \in X$, với mỗi $x^* \in D_\beta^+ u(x)$,

$$F(x, u(x), x^*) \leq 0.$$

Một hàm $u: X \rightarrow \mathbb{R}$ là *nghiệm trên β -nhót* của phương trình (3) nếu u là một hàm nửa liên tục dưới và với mỗi $x \in X$, với mỗi $x^* \in D_\beta^- u(x)$,

$$F(x, u(x), x^*) \geq 0.$$

Hàm u được gọi là *nghiệm β -nhót* của phương trình (3) nếu u vừa là nghiệm dưới β -nhót vừa là nghiệm trên β -nhót của phương trình (3).

Một kết quả quan trọng của mục này là Định lý dưới đây. Định lý này là sự mở rộng cho Định lý 3.2 trong [6] ở đây u, v trong Định lý được phát biểu là hai hàm bị chặn sao cho u nửa liên tục trên và v nửa liên tục dưới còn kết quả ở Định lý 3.2 trong [6] thì hàm u, v bị chặn và liên tục đều trên X . Đây cũng là cơ sở để chứng minh tính duy nhất nghiệm cho phương trình (3)

Định lý 2.7. Cho X là một không gian Banach với chuẩn tương đương với một chuẩn β -trơn. Xét $F(x, u, Du) = u + H(x, Du)$ với $H: X \times X_\beta^* \rightarrow \mathbb{R}$ thoả mãn giả thiết: (A) với mọi $x, y \in X$ và $x^*, y^* \in X_\beta^*$,

$$|H(x, x^*) - H(y, y^*)| \leq w(x - y, x^* - y^*) + K \cdot \max(\|x^*\|, \|y^*\|) \|x - y\|,$$

Trong đó: K là hằng số dương và $w: X \times X_\beta^* \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm liên tục với $w(0, 0) = 0$.

Cho u, v là hai hàm bị chặn sao cho u nửa liên tục trên và v nửa liên tục dưới. Nếu u là nghiệm β -nhót dưới v là nghiệm β -nhót trên của phương trình $F(x, u, Du) = 0$ thì $u \leq v$.

Chứng minh: Lấy ε là hằng số dương bất kì. Theo giả thiết (A) tồn tại $\eta \in (0, \varepsilon)$ và một lân cận V_β của 0 trong X_β^* sao cho với $\|x_1 - x_2\| < 2\eta$ và $x_1^* - x_2^* \in V_\beta$ thì

$$|H(x_1, x_1^*) - H(x_2, x_2^*)| < \varepsilon + K \cdot \max(\|x_1^*\|, \|x_2^*\|) \|x_1 - x_2\|.$$

Trên X^* , tô pô Fréchet τ_F là tô pô mạnh nhất trong các tô pô τ_β , nên V_β là một τ_F -lân cận của 0. Do vậy, tồn tại $r > 0$ (ta có thể giả thiết $r > \eta$, nếu không thì ta giảm η) sao cho $B(0, r) \subset V_\beta$.

Áp dụng Định lý 2.5 cho hàm $f_1 = v, f_2 = -u$ tồn tại $x_1^* \in D_\beta^- v(x_1)$ và $x_2^* \in D_\beta^+ u(x_2)$ thoả mãn

$$(i) \|x_1^*\| \cdot \|x_1 - x_2\| < \varepsilon \text{ và } \|x_2^*\| \cdot \|x_1 - x_2\| < \varepsilon;$$

$$(ii) x_1^* - x_2^* \in B(0, r);$$

$$(iii) v(x_1) - u(x_2) < \inf_X (v - u) + \varepsilon.$$

Vì u là nghiệm β -nhót dưới nên ta có:

$$F(x_2, u(x_2), x_2^*) = u(x_2) + H(x_2, x_2^*) \leq 0$$

và v là nghiệm β -nhót trên:

$$F(x_1, v(x_1), x_1^*) = v(x_1) + H(x_1, x_1^*) \geq 0.$$

Do đó, với $\|x_1 - x_2\| < 2\eta$ và $x_1^* - x_2^* \in V_\beta$,

$$\begin{aligned} \inf_X (v - u) &> v(x_1) - u(x_2) - \varepsilon \\ &\geq H(x_2, x_2^*) - H(x_1, x_1^*) - \varepsilon \\ &\geq -(\varepsilon + K \cdot \max(\|x_1^*\|, \|x_2^*\|) \|x_1 - x_2\|) - \varepsilon \\ &\geq -\varepsilon(2 + K). \end{aligned}$$

Vì $\varepsilon > 0$ bất kì nên $\inf_X (v - u) \geq 0$ hay $v \geq u$.

Hệ quả 2.8. Dưới các giả thiết của Định lý 2.7, nghiệm β -nhót trong lớp hàm liên tục, bị chặn của phương trình $F(x, u, Du) = 0$ là duy nhất.

Nếu u, v là hai nghiệm β -nhót của phương trình $F(x, u, Du) = 0$ khi đó: u là nghiệm dưới β -nhót, v là nghiệm trên β -nhót nên theo Hệ quả 2.8 ta có $u \leq v$, tương tự v là nghiệm dưới β -nhót, u là nghiệm trên β -nhót nên theo Hệ quả 2.8 ta có $v \leq u$. Từ đó ta có $u = v$.

Như vậy, ta đã chứng minh được tính duy nhất nghiệm β -nhót cho phương trình $F(x, u, Du) = 0$ trong lớp hàm liên tục và bị chặn, kết quả này là sự mở rộng thực sự cho [Corollary 3.3, [6]]. Ở đó đưa ra kết quả tính duy nhất nghiệm β -nhót của phương trình $F(x, u, Du) = 0$ trong lớp hàm bị chặn và liên tục đều.

Nhận xét 2.9.

1) Xét phương trình Hamilton-Jacobi gắn liền với lý thuyết điều khiển tối ưu (xem [6]): Cho X là một không gian Banach với chuẩn β -tron, U là một không gian mêtric, $g: X \times U \rightarrow X$ là một hàm liên tục, Lipschitz theo biến x đều trên U , tồn tại $K \in \beta$ sao cho $g(x, U) \subset K$ với mọi $x \in X$, $f: X \times U \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm liên tục, bị chặn, Lipschitz theo biến x đều trên U .

Ta xác định hàm $H : X \times X^* \rightarrow \mathbb{R}$ bởi

$$H(x, p) = \sup_{\alpha \in U} \{-\langle p, g(x, \alpha) \rangle - f(x, \alpha)\}.$$

Khi đó H thỏa mãn giả thiết (A) của Định lý 2.7. Thật vậy, với $x, y \in X$ và $p, q \in X^*$, ta có:

$$\begin{aligned} |H(x, p) - H(y, q)| &\leq \sup_{\alpha \in U} |\langle q, g(y, \alpha) \rangle - \langle p, g(x, \alpha) \rangle| + \sup_{\alpha \in U} |f(y, \alpha) - f(x, \alpha)| \\ &\leq \sup_{\alpha \in U} |\langle q - p, g(y, \alpha) \rangle| + \sup_{\alpha \in U} |\langle p, g(y, \alpha) - g(x, \alpha) \rangle| + M \|x - y\| \\ &\leq \sup_{x \in K} |\langle q - p, x \rangle| + L \|p\| \|x - y\| + M \|x - y\| \\ &\leq \sup_{x \in K} |\langle q - p, x \rangle| + L \max\{\|p\|, \|q\|\} \|x - y\| + M \|x - y\|. \end{aligned}$$

Trong đó M là hằng số Lipschitz theo biến x đều trên U của hàm f . L là hằng số Lipschitz của hàm g . Điều kiện (A) của Định lý 2.7 thỏa mãn với

$$w(x - y, p - q) = \sup_{x \in K} |\langle q - p, x \rangle| + M \|x - y\|.$$

Theo Hệ quả 2.8, phương trình $u + H(x, Du) = 0$ có nghiệm β -nhớt duy nhất.

2) Ví dụ sau chỉ ra một phương trình mà điều kiện (A) của Định lý 2.7 không thỏa mãn và phương trình không có nghiệm duy nhất.

Xét $X = \mathbb{R}$, với borno Fréchet, $H : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ xác định bởi $H(x, p) = -p^2$.

Phương trình: $u + H(x, Du) = 0$ có hai nghiệm cố định là hàm $u \equiv 0$, và hàm $u = \frac{1}{4}x^2$.

Giả thiết A) ta có thể thấy rằng nếu $x - y$ dần đến 0 và $x^* - y^*$ dần đến 0 thì $|H(x, x^*) - H(y, y^*)|$ dần đến 0, tuy nhiên điều này không đúng. Thật vậy với $\delta > 0$, chọn $x^* = \delta + \frac{1}{\delta}, y^* = \frac{1}{\delta}$ thì $|H(x, x^*) - H(y, y^*)| > 2$.

3. KẾT LUẬN

Bài viết đã chứng minh được tính duy nhất nghiệm β -nhớt của phương trình Hamilton-Jacobi trong lớp hàm liên tục và bị chặn. Đây là sự mở rộng cho kết quả được trình bày trong [6], ở đó kết quả được trình bày cho lớp hàm liên tục đều và bị chặn. Tuy nhiên, tính duy nhất nghiệm β -nhớt cho lớp hàm liên tục và không bị chặn cũng như Hamilton H trong phương trình $u + H(x, Du)$ trong đó H phụ thuộc ba ẩn $H(x, u, Du)$ chưa được trình bày. Trong thời gian tới chúng tôi hy vọng rằng sẽ có được những kết quả mới cho các vấn đề quan tâm đó.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Barbu V., Prato G. D., (1983), *Hamilton-Jacobi equations in Hilbert spaces*, Boston, London, Melbourne.
2. Bardi M., Capuzzo-Dolcetta I. (1997), *Optimal control and viscosity solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman equations*, Birkhauser, Boston. Basel. Berlin.
3. Borwein J. M. and Zhu Q. J. (1999), "A survey of subdifferential calculus with applications", *Journal nonlinear analysis*, Vol. (38), pp.687-773.
4. Crandall M. G. and Lions P. L. (1986), "Hamilton-Jacobi equations in infinite dimensions", II, *J. Funct. Anal.*, (65), pp.368-405.
5. Borwein J. M., Preiss D. (1987), "A smooth variational principle with applications to subdifferentiability and to differentiability of convex functions", *Trans. Amer. Math. Soc.*, (303), pp.517-527.
6. Borwein J. M., Zhu Q. J., (1996), "Viscosity solutions and viscosity subderivatives in smooth Banach spaces with applications to metric regularity", *SIAM J. Control and Optimization*, (34), pp.1568-1591.
7. Crandall M. G. and Lions P. L. (1985), "Hamilton-Jacobi equations in infinite dimensions", I, *J. Funct. Anal.*, (62), pp.379-398.
8. Crandall M. G., Lions P. L. (1983): "Viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations", *Trans. Amer. Math. Soc.*, (277), pp.1-42.
9. Deville R., Godefroy G. & Zizler V. (1993), "A Smooth variational principle with applications to Hamilton-Jacobi equations in infinite dimensions", *J. Funct. Anal.*, (111), pp.197-212.
10. Deville R., Godefroy G. & Zizler V. (1993), "Smoothness and Renormings in Banach Spaces", *Pitman Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics*, (64), J. Wiley & Sons, Inc., New York.
11. Durea M. (2003), "Applications of the Fréchet subdifferential", *Serdica Math. J.*, (29), pp.301-314.
12. El Haddad E., Deville R. (1996), "The Viscosity Subdifferential of the Sum of Two Functions in Banach Spaces, I: First Order Case", *Journal of Convex Analysis*, Volume 3, (2), pp.295-308.
13. Ishii H. (1987), "Perron's method for Hamilton-Jacobi equations", *Duke Math. J.*, (55), pp.369-384.
14. Mordukhovich B. S., Nam N. M., Yen N. D. (2007), "Subgradients of marginal functions in parametric mathematical programming", *Math. Program., Ser. B*, (116), pp.369-396.
15. Mordukhovich B. S., Yongheng Shao, Zhu Q. J., (2000), "Viscosity Coderivatives and Their Limiting Behavior in Smooth Banach Spaces", *Kluwer Academic Publishers*, Printed in the Netherlands, (4), pp.1-39.

**THE UNIQUENESS OF β – VISCOSITY SOLUTIONS OF
HAMILTON-JACOBI EQUATIONS IN BANACH SPACES**

Abstract: *This article provides some results on β – viscosity sub - differential and the uniqueness of β – viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations in the class of bounded and continuous functions.*

Keywords: *Bornology β , β – smooth, β – viscosity subsolution, β – viscosity supersolution, Hamilton-Jacobi equations.*

SỰ MÃN CẢM CỦA CÂY LÚA SAU KHI XỬ LÝ LẶP LẠI LIÊN TIẾP QUA BA THỂ HỆ BẰNG TÁC NHÂN GÂY ĐỘT BIẾN - TIA γ (Nguồn Cơ⁶⁰)

Nguyễn Như Toàn¹⁽¹⁾, Hoàng Quang Minh²

¹Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

²Viện Di truyền Nông nghiệp Việt Nam

Tóm tắt: Trong bài báo này, chúng tôi đã chứng minh mức độ gây hại của tác nhân gây đột biến tác động đến cây trồng là một trong những biểu hiện đặc trưng đánh giá hiệu quả của đột biến cảm ứng trong công tác chọn giống. Bức xạ gamma đã phá vỡ cấu trúc nhiễm sắc thể ở ngay giai đoạn phân bào đầu tiên trong tế bào hạt lúa sau khi xử lý, tạo lên các sai hình nhiễm sắc thể, dẫn đến cây lúa chết dần trong suốt quá trình sinh trưởng và phát triển. Tỷ lệ hạt lép/bông của cây lúa sau khi xử lý, ở tất cả các công thức thí nghiệm đều tăng cao hơn so với đối chứng. Các chỉ số ở các công thức thí nghiệm (về khả năng sống sót và tỷ lệ hạt lép/bông) tăng theo chiều tăng của liều lượng và số lần xử lý.

Từ khóa: Lúa gạo, Đột biến, Biến dị hình thái, Lặp lại liên tiếp qua ba thế hệ.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Đột biến thực nghiệm có vai trò quan trọng trong di truyền chọn giống sinh vật. Với việc sử dụng các tác nhân gây đột biến đó làm gia tăng sự sai khác di truyền trong quần thể. Hàng loạt các đột biến thu được, có nhiều đột biến ưu tú (*hội tụ các tính trạng có giá trị chọn giống cao*), chúng được nhân trực tiếp thành giống mới hoặc được sử dụng làm vật liệu trong lai tạo.

Trong thực tế, mức độ gia tăng đa hình di truyền quần thể, khả năng phát sinh những đột biến có lợi do sử dụng từng loại tác nhân gây đột biến lên những loài cây trồng khác nhau là không giống nhau. Kết quả nghiên cứu trên nhiều dòng/giống lúa thuần cho thấy, những vật liệu sử dụng có kiểu gen ổn định (*càng đồng nhất về mặt di truyền*), thì tần suất và phổ đột biến xuất hiện thấp hơn so với những dòng đột biến hay con lai.

Tính đồng nhất về mặt di truyền của từng giống lúa đó tạo ra sự ổn định và khả năng bền vững trước tác động của tác nhân gây đột biến. Do đó, để nâng cao hiệu ứng của tác

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 16.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Như Toàn; Email: nntoan@daihocthudo.edu.vn

nhân đột biến lên giống lúa chúng tôi tiến hành nghiên cứu: "Sự miễn cảm của cây lúa sau khi xử lí lặp lại liên tiếp qua ba thế hệ bằng tác nhân gây đột biến - tia γ (nguồn Co^{60})".

2. VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu

+ Vật liệu khởi đầu đưa vào xử lí đột biến để chọn tạo là giống lúa Bắc Thơm số 7.

Tuy là một giống lúa có chất lượng gạo thương phẩm cao (*gạo thơm, trong, cơm mềm và ngon*), song Bắc Thơm số 7 cho năng suất chưa cao, chống chịu với sâu bệnh và điều kiện bất thuận của thời tiết kém và cũng bộc lộ một số nhược điểm khác trong sản xuất.

+ Tác nhân gây đột biến: Lí học - tia γ (nguồn Co^{60})

2.2. Phương pháp nghiên cứu

+ Xử lí chiếu xạ (*xử lí hạt khô*) bằng tia gamma (nguồn Co^{60}) vào hạt lúa giống Bắc Thơm số 7 được tiến hành với 3 liều lượng (*10 krad; 15 krad; 20 krad*) và được lặp lại 3 lần trong 3 vụ liên tiếp theo đúng liều lượng đó được sử dụng lần trước cho các công thức nghiên cứu.

2.3. Nội dung nghiên cứu

Trong phòng thí nghiệm: Xác định tỉ lệ nảy mầm, khả năng sống sót và mức độ bất thụ (*tỉ lệ hạt lép*) của các mẫu. Nghiên cứu những biến đổi sinh lí, hình thái các biến dị thu được.

Ngoài đồng ruộng: Theo dõi quá trình sinh trưởng và phát triển của cây lúa sau xử lí. nghiên cứu các chỉ tiêu nông-sinh học (*thời gian sinh trưởng, chiều cao cây, khả năng đẻ nhánh...*).

2.4. Xử lí số liệu

Các số liệu được xử lí bằng các phương pháp của toán thống kê.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Mức độ gây hại của các tác nhân gây đột biến tác động đến cây trồng là một trong những biểu hiện đặc trưng đánh giá hiệu quả của đột biến cảm ứng. Vì thế, việc nghiên cứu các quá trình sinh trưởng, phát triển của cây lúa sau khi xử lí các tác nhân gây đột biến là rất cần thiết. Trong số các chỉ tiêu nghiên cứu, chúng tôi đặc biệt chú ý tới hai chỉ tiêu cơ bản là (1) Khả năng (*tỉ lệ*) sống sót của cây lúa và (2) Mức độ bất thụ (*tỉ lệ lép*) của hạt ở các công thức thí nghiệm.

Các công trình nghiên cứu trước đây đã khẳng định: khi xử lý tia gamma với liều lượng cao đã ức chế khả năng đẻ nhánh, làm giảm tỉ lệ sống sót và tăng tỉ lệ lép (*bất thụ*) của cây lúa.

a) Khả năng sống sót

Trong quá trình sinh trưởng và phát triển tỉ lệ sống sót của cây lúa ở từng giai đoạn ngay từ sau khi xử lý đến khi thu hoạch chính là hiệu quả gây chết của tác nhân gây đột biến. Do đó, muốn so sánh hiệu quả của tác nhân gây đột biến thì phải dựa vào tỉ lệ sống sót của giai đoạn đầu tiên sau khi xử lý làm chỉ tiêu đánh giá sơ bộ hiệu quả của tác nhân gây đột biến.

Khả năng nảy mầm của hạt (*một trong những giai đoạn phát triển của cây lúa*) ở các công thức thí nghiệm sau khi xử lý thực chất là khả năng sống sót của hạt ở giai đoạn đó. Vì thế, khả năng sống sót của cây lúa được xác lập vào 3 thời điểm: (1) tỉ lệ nảy mầm của hạt sau khi xử lý; (2) cuối giai đoạn mạ (*khi cây lúa đó đạt được 4-5 lá thật - vào cuối giai đoạn mạ - tại thời điểm nhổ mạ đưa đi cấy*) và (2) ngay trước khi thu hoạch (*kết thúc quá trình sinh trưởng và phát triển*).

Kết quả thu được ở tất cả các công thức thí nghiệm (*trong bảng 1*) sau các lần xử lý bức xạ gamma lên giống lúa Bắc Thơm số 7 cho thấy: khả năng sống sót của cây cũng tương tự như tỉ lệ nảy mầm của hạt đều giảm dần khi tăng liều lượng hoặc tăng số lần chiếu xạ.

Nếu xem xét từ một góc độ (*ngay sau mỗi lần xử lý - cũng là thế hệ thứ nhất*) tỉ lệ sống sót của cây lúa so với đối chứng ở lần xử lý đầu tiên (M_1) là 84,57 %; sang lần xử lý thứ hai [$M_1(M_2)$] - 70,22 % và đến lần xử lý thứ ba [$M_1[M_2(M_3)]$] chỉ còn 56,57 %.

Khả năng sống sót của cây lúa còn phụ thuộc rất nhiều vào liều lượng của tác nhân gây đột biến ngay trong cùng một lần xử lý. Ví dụ: ở thế hệ $M_1[M_2(M_3)]$ tỉ lệ sống sót của cây lúa giảm mạnh từ $76,80 \pm 2,10$ % bằng 84,24 % so với đối chứng ở công thức $\{M_1[M_2(M_3)]$ - tia γ - 10 krad} xuống còn $67,33 \pm 2,18$ % tương ứng với 73,85 % so với đối chứng ở công thức $\{M_1[M_2(M_3)]$ - tia γ - 15 krad} và chỉ còn $51,58 \pm 2,07$ % bằng 56,57 % ở công thức $\{M_1[M_2(M_3)]$ - tia γ - 20 krad}.

Như vậy, dưới tác động của tác nhân gây đột biến lên hạt lúa đã phá vỡ cấu trúc nhiễm sắc thể ở ngay giai đoạn phân bào đầu tiên trong tế bào mới bị xử lý. Các sai hình nhiễm sắc thể (NST) này đã gây chết tế bào sau một số ít lần phân bào dẫn đến cây lúa chết dần trong suốt quá trình sinh trưởng và phát triển, do đó đã làm giảm khả năng sống sót của cây.

b) Mức độ bất thụ (tỉ lệ lép) của cây lúa

Mức độ bất thụ (tỉ lệ hạt lép trong bông lúa) là một trong những đặc tính thể hiện phản ứng của cây lúa đối với mọi tác động bất thường của ngoại cảnh. Đối với hầu hết các giống lúa đang được gieo trồng phổ biến, trong điều kiện canh tác bình thường tỉ lệ lép ở mức trung bình 10-15%.

Do tác động của tác nhân gây đột biến lên hạt lúa (ở các công thức xử lí) đã làm biến đổi cấu trúc nhiễm sắc thể, các sai hình nhiễm sắc thể (NST) này đã gây lên sự xáo trộn sau một số lần phân bào dẫn đến tăng mức độ bất thụ ở cây lúa. Hiện tượng gây bất thụ cao ở cây lúa sau khi xử lí tác nhân gây đột biến là do sự cấu trúc lại nhiễm sắc thể (chủ yếu là quá trình chuyển mạch và đảo mạch trong nhiễm sắc thể). Trong công trình nghiên cứu của chúng tôi, số hạt lép/bông (tỉ lệ lép) tăng mạnh ở các công thức thí nghiệm, do tăng liều lượng và số lần xử lí.

Bảng 1. Khả năng sống sót của cây lúa giống Bắc Thơm số 7 qua các thế hệ sau 3 lần xử lí lặp lại liên tiếp bằng bức xạ gamma với 3 liều lượng

Tác nhân gây đột biến và liều lượng		Khả năng sống sót của cây lúa sau các lần xử lí					
		Xử lí chiếu xạ một lần		Xử lí chiếu xạ hai lần		Xử lí chiếu xạ ba lần	
		%	So với Đ/C	%	So với Đ/C	%	So với Đ/C
Thế hệ thứ nhất		M ₁		M ₁ (M ₂)		M ₁ [M ₂ (M ₃)]	
Không xử lí		94,85±1,42	-	86,28±1,63	-	91,17±1,56	-
tia γ	10 krad	91,73±1,04	96,72	64,27±2,14	74,49	76,80±2,10	84,24
	15 krad	87,07±1,36	91,79	65,03±2,39	75,37	67,33±2,18	73,85
	20 krad	80,22±1,97	84,57	60,59±1,91	70,22	51,58±2,07	56,57
Thế hệ thứ hai		M ₂		M ₂ (M ₃)		M ₂ [M ₃ (M ₄)]	
Không xử lí		86,28±1,63	-	91,17±1,56	-	88,53±1,47	-
tia γ	10 krad	82,21±1,42	95,28	82,30±1,28	90,27	68,25±1,97	77,09
	15 krad	76,67±1,60	88,86	76,58±1,57	83,99	63,38±1,58	71,59
	20 krad	69,30±1,20	80,32	65,22±2,11	71,54	57,74±2,17	65,22
Thế hệ thứ ba		M ₃		M ₃ (M ₄)		M ₃ [M ₄ (M ₅)]	
Không xử lí		91,17±1,56	-	88,53±1,47	-	-	-
tia γ	10 krad	90,28±1,52	99,02	81,17±1,93	91,68	-	-
	15 krad	86,37±2,07	94,73	78,93±1,75	89,16	-	-
	20 krad	89,04±1,59	97,66	85,57±1,68	96,65	-	-

Kết quả khảo sát số lượng hạt lép/bông sau các lần xử lí, được trình bày ở bảng 2 đã cho thấy: Dưới tác động của bức xạ gamma tỉ lệ hạt lép/bông của cây lúa ở tất cả các công thức thí nghiệm đều tăng cao hơn so với đối chứng. Trong cùng một thế hệ (thế hệ đầu) sau mỗi lần xử lí: chỉ số tỉ lệ hạt lép/bông cao nhất thu được ở công thức (M₁[M₂(M₃)] – Tia γ - 20 krad) là 40,2 % (so với đối chứng – 281,1%) và thấp nhất là 21,9 % (so với đối chứng – 158,7%) ở công thức M₁ - Tia γ - 10 krad.

Tỉ lệ hạt lép/bông ở mức cao (từ 31,9 % đến 40,2%) thu được tại các công thức của thể hệ thứ nhất sau 3 lần xử lí { $M_1[M_2(M_3)]$ -Tia γ -10 krad; $M_1[M_2(M_3)]$ -Tia γ -15 krad và $M_1[M_2(M_3)]$ -Tia γ -20 krad}. Tiếp đến thể hệ thứ nhất của lần xử lí thứ 2 [$M_1(M_2)$] là 28,4 % - 36,3 %; và 2 thể hệ thứ hai của cả lần xử lí thứ nhất và lần xử lí thứ hai [M_2 và $M_2(M_3)$]. Sang thể hệ thứ 3 của tất cả các lần xử lí thì mức độ bất thụ (tỉ lệ hạt lép/bông) ở hầu hết các công thức thí nghiệm cứ đều giảm.

Như vậy, dưới tốc độ của tác nhân gây đột biến, tia γ (nguồn Co^{60}), đã làm giảm khả năng hữu thụ (tăng tỉ lệ hạt lép/bông) của cây lúa không chỉ ở ngay thể hệ đầu tiên sau khi xử lí, mà còn gây hiệu ứng mạnh ở thể hệ thứ hai, thậm chí đến thể hệ thứ ba sau mỗi lần xử lí. Chỉ số tỉ lệ hạt lép/bông ở các công thức thí nghiệm tăng theo chiều tăng của liều lượng xử lí và số lần tác động.

Bảng 2. Mức độ bất thụ (tỉ lệ lép) của cây lúa giống Bắc Thơm số 7 qua các thể hệ sau 3 lần xử lí lặp lại liên tiếp bằng bức xạ gamma với 3 liều lượng

Tác nhân gây đột biến và liều lượng	Xử lí chiếu xạ một lần			Xử lí chiếu xạ hai lần			Xử lí chiếu xạ ba lần			
	Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)	Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)	Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)	
Thể hệ thứ nhất	M_1			$M_1(M_2)$			$M_1[M_2(M_3)]$			
Không xử lí	19,02±1,23	13,8	-	16,45±0,78	12,5	-	18,50±1,87	14,3	-	
tia γ	10 krad	29,62±1,12	21,9	158,7	34,87±1,59	26,6	212,9	41,49±1,59	31,9	223,1
	15 krad	32,50±1,19	24,1	174,6	39,58±2,02	30,2	241,7	48,22±1,32	37,1	259,4
	20 krad	38,78±2,10	28,2	204,3	40,41±1,43	30,8	246,8	51,87±1,14	40,2	281,1
Thể hệ thứ hai	M_2			$M_2(M_3)$			$M_2[M_3(M_4)]$			
Không xử lí	16,45±0,78	12,5	-	18,50±1,87	14,3	-	16,54±2,03	12,6	-	
tia γ	10 krad	31,50±1,16	24,0	192,0	36,23±2,08	28,3	192,5	30,49±1,94	23,1	183,3
	15 krad	34,62±1,19	26,4	211,4	38,08±2,56	30,5	207,5	31,62±2,15	24,7	196,0
	20 krad	32,87±1,35	25,1	200,7	40,72±2,35	31,1	211,6	34,45±1,98	26,5	210,3
Thể hệ thứ ba	M_3			$M_3(M_4)$			$M_3[M_4(M_5)]$			

Tác nhân gây đột biến và liều lượng		Xử lý chiếu xạ một lần			Xử lý chiếu xạ hai lần			Xử lý chiếu xạ ba lần		
		Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)	Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)	Số hạt lép/bông	%	So với Đ/C, (%)
Không xử lý		18,50±1,87	14,3	-	16,54±2,03	12,6	-	-	-	-
tia γ	10 krad	21,99±1,13	17,0	119,2	18,56±1,83	14,2	112,7	-	-	-
	15 krad	23,02±1,02	17,8	124,5	21,88±1,72	16,7	132,5	-	-	-
	20 krad	20,45±1,41	15,9	110,8	25,23±1,19	19,3	152,8	-	-	-

4. KẾT LUẬN

Từ kết quả nghiên cứu những biến đổi di truyền của cây lúa sau khi xử lý chiếu xạ tia γ (nguồn Co^{60}) lên hạt khô giống Bắc Thơm số 7 với 3 liều lượng (10 krad; 15 krad; 20 krad) được lặp lại 3 lần trong 3 vụ liên tiếp, chúng tôi đưa ra một số kết luận sau đây:

1. Bức xạ gamma đã phá vỡ cấu trúc nhiễm sắc thể ở ngay giai đoạn phân bào đầu tiên trong tế bào hạt lúa sau khi xử lý, tạo lên các sai hình nhiễm sắc thể (NST), dẫn đến cây lúa chết dần trong suốt quá trình sinh trưởng và phát triển. Khả năng sống sót của cây lúa giảm mạnh sau mỗi lần xử lý và đạt giá trị thấp nhất là $51,58 \pm 2,07$ % (bằng 56,57 % so với đối chứng) ở thế hệ thứ nhất sau lần xử lý thứ 3 $\{M_1[M_2(M_3)]\}$.

2. Tỷ lệ hạt lép/bông của cây lúa sau khi xử lý, ở tất cả các công thức thí nghiệm đều tăng cao hơn so với đối chứng. Trong cùng một thế hệ (thế hệ đầu) sau mỗi lần xử lý: chỉ số tỷ lệ hạt lép/bông cao nhất thu được ở công thức $(M_1[M_2(M_3)] - \text{Tia } \gamma - 20 \text{ krad})$ là 40,2 % (so với đối chứng – 281,1%) và thấp nhất là 21,9 % (so với đối chứng – 158,7%) ở công thức $M_1 - \text{Tia } \gamma - 10 \text{ krad}$.

3. Tác nhân gây đột biến, tia γ (nguồn Co^{60}), đã làm giảm khả năng sống sót và tăng tỷ lệ hạt lép/bông của cây lúa không chỉ ở ngay thế hệ đầu tiên sau khi xử lý, mà còn gây hiệu ứng mạnh ở thế hệ thứ hai, thậm chí đến thế hệ thứ ba sau mỗi lần xử lý. Các chỉ số này (khả năng sống sót và tỷ lệ hạt lép/bông) ở các công thức thí nghiệm tăng theo chiều tăng của liều lượng và số lần xử lý.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Amano E., (1995), "Development of breeding for M₁ Agriculture of rice", *Regional Workshop on Cereal Crop Mutation Breeding*, Oct, 9-15, Philippines.
2. Awan M. A., Cheena A. A and Tahir G. R. (1990), "Induced mutations for genetic analysis in rice", *Rice genetics, International rice research Institute*, pp.679-705.
3. Nguyễn Hữu Đồng, Đào Thanh Bằng, Lâm Quang Dự, Phan Đức Trực (1997), *Đột biến cơ sở lý luận và ứng dụng*, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội, tr.7-127.
4. Vũ Tuyên Hoàng (1978), "Ảnh hưởng của tia gamma đến quá trình sinh trưởng, phát triển của cây lúa", *Tạp chí Khoa học và Kỹ thuật nông nghiệp*, số 189, 3-1978, tr.180-185.
5. 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*, Viện Di truyền Nông nghiệp, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội.
6. Mohamad O., Abdullah M. Z., Othman O., Hadzim K., Mahmud J. and Ramli O, (1991), *Induced mutation for rice improvement in Malaysia*, *Rice genetics (II)*, pp.749-751.
7. Moo Young Eun, Yong Gucho, Yong Kwon Kim and Tae Young Chung, (1991), *Induced mutations for defying and characterizing genes in rice*, *Rice Genetics (II)*, IRRI, pp.788-789.
8. Trần Minh Nam (1991), "Một số phương pháp có hiệu quả và thành tựu về chọn giống đột biến cây trồng ở nước ta", *Di truyền học và Ứng dụng*, số đặc biệt, Hà Nội, tr. 6-8.
9. Takamura I. and Kinoshita T., (1996), *Genetic analysis of morphological mutation in rice spikelets*, *Rice genetics, IRRI, Manila*, pp.387-390.

THE SUSCEPTIBILITY OF RICE AFTER TACKLED CONSECUTIVE REPEATEDLY PASS THREE GENERATIONS BY EVIDENCE MUTAGENIC AGENT - γ RAY (Co⁶⁰)

Abstract: *In this article, we studied on the injurious level of mutant pathogens to crop. It is as one of characteristics aiming to evaluate the effectiveness of estimator in breeding. Gamma radiation has broken through the structure of chromosomes at first division stage in rice grain cell after tackling, created chromosomes aberrations that caused gradually death during the growth and development of rice. Rate unfruitful seed/spica of rice at all studying formulas after tackling has increased more higher than against control. The indexes at all studying formulas (survival potential and rate unfruitful seed/spica) increase according to the tendency of dose and tackling times.*

Keywords: *Rice, mutation, appearing form mutation, repeats consecutively over three generation.*

NGHIÊN CỨU MỘT SỐ VẬT LIỆU TỪ NANO DỰA TRÊN GRAPHENE

Nguyễn Anh Tuấn¹⁽¹⁾, Lưu Thị Hậu², Nguyễn Văn Thành²

¹Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

²Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội

Tóm tắt: Dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi đã nghiên cứu cấu trúc hình học, cấu trúc điện tử và tính chất từ của một số vật liệu từ nano dựa trên graphene. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi cho thấy nano graphene có thể kết hợp với một số nguyên tử như H, O, N và S để tạo thành các phân tử từ tính. Tuy nhiên, khi các phân tử này kết cặp với nhau để tạo thành dạng dimer thì hình thành tương tác phản sắt từ do sự phủ lấp trực tiếp của các trạng thái π giữa các phân tử. Hệ quả là mô men từ tổng cộng ở dạng dimer bằng 0. Để tránh sự phủ lấp trực tiếp giữa các trạng thái π của các phân tử từ tính, vật liệu có cấu trúc bánh kẹp với một phân tử phi từ xen giữa hai phân tử từ tính đã được nghiên cứu. Bằng phương pháp này, nhiều vật liệu dựa trên graphene có cấu trúc sắt từ đã được thiết kế. Những kết quả này góp phần định hướng cho việc tổng hợp các vật liệu từ dựa trên graphene mới có từ độ lớn và nhiệt độ trật tự từ cao.

Từ khoá: vật liệu từ d^0 , tương tác trao đổi, khoa học vật liệu tính toán, dịch chuyển điện tích, nam châm hữu cơ.

1. GIỚI THIỆU

Trong những năm gần đây, thế giới chứng kiến sự phát triển bùng nổ của khoa học và công nghệ vật liệu. Điều đó đã đem lại những bước đột phá lớn trong mọi mặt của cuộc sống. Các linh kiện và thiết bị điện tử ngày càng nhỏ gọn, tốc độ ngày càng cao và thân thiện với người sử dụng. Trong đó phải kể đến sự phát triển của vật liệu từ. Đầu tiên phải kể đến các vật liệu từ truyền thống, đó là các kim loại chuyển tiếp, đất hiếm và các hợp chất của chúng. Vật liệu từ truyền thống đóng một vai trò quan trọng trong xã hội ngày nay, chiếm thị phần hàng chục tỉ đô la mỗi năm. Tuy nhiên, với đòi hỏi ngày một cao về việc rút gọn kích thước, tăng mật độ lưu trữ thông tin và tốc độ xử lý của các linh kiện điện tử thì trong nhiều trường hợp các vật liệu từ truyền thống không còn đáp ứng được nữa, vì dị hướng từ của chúng biến mất khi kích thước của chúng bị thu nhỏ do hiệu ứng siêu thuận từ.

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 14.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Anh Tuấn; Email: natuan@hnmu.vn

Để giải quyết vấn đề này một lớp vật liệu từ mới đã được tìm ra và được gọi là nam châm đơn phân tử [1-3]. Đó là các phân tử bao gồm một vài nguyên tử kim loại chuyển tiếp, đất hiếm và một số nguyên tử phi kim. Các phân tử này có kích thước chỉ một vài nano mét nhưng lại có nhiều tính chất từ rất đặc biệt và mở ra nhiều triển vọng mới về ứng dụng như lưu trữ thông tin ở cấp độ phân tử, tính toán lượng tử...

Gần đây, các nhà khoa học lại tìm ra những loại vật liệu từ mà chúng được tạo thành từ các nguyên tố phi từ [4-15]. Điều làm cho các nhà khoa học sửng sốt ở đây là từ tính của chúng được hình thành hoàn toàn từ các trạng thái s và p của điện tử, không hề có sự đóng góp của các trạng thái d cũng như f. Nên chúng được gọi là vật liệu từ d^0 . Vật liệu từ d^0 là một vấn đề nghiên cứu mới có ý nghĩa quan trọng cả về phương diện nghiên cứu cơ bản và ứng dụng. Vật liệu từ d^0 đem lại sự hiểu biết vô cùng mới mẻ về từ tính của vật liệu cùng với những tiềm năng ứng dụng vô cùng to lớn trong lĩnh vực điện tử học spin và những ứng dụng trong y sinh. Trong lớp vật liệu mới này có nhiều hệ được cấu thành hoàn toàn từ các nguyên tố phi kim như O, N, C và H rất thân thiện với môi trường và cơ thể sống.

Như chúng ta đã biết các bon không chỉ được biết đến như là nguyên tố của sự sống mà ngày càng có nhiều loại vật liệu tiên tiến với những cấu trúc và tính năng đặc biệt được làm từ các bon như fullerence, ống nano các bon, graphene... Đặc biệt là từ các bon cũng có thể chế tạo được các vật liệu từ thế hệ mới [4-15]. Việc phát hiện ra các vật liệu từ không chứa kim loại được làm từ các bon mở ra một lĩnh vực mới trong nghiên cứu và hứa hẹn sẽ mang đến những đột phá trong nhiều lĩnh vực khoa học và công nghệ [6,7]. Trong tương lai không xa các nam châm và linh kiện điện tử nhẹ và dẻo như nhựa nhưng thân thiện với môi trường và sự sống sẽ trở nên quen thuộc với chúng ta.

Nghiên cứu về cơ chế hình thành mômen từ định xứ và trật tự từ xa trong các vật liệu từ dựa trên các bon là vấn đề cốt yếu để phát triển loại vật liệu này. Từ những năm 2000, vật liệu từ dựa trên các bon với trật tự từ xa tại nhiệt độ phòng đã được phát hiện [7]. Tuy nhiên, sự tồn tại của các vật liệu dựa trên các bon có tính sắt từ tại nhiệt độ phòng vẫn chỉ mang tính tình cờ, khó lặp lại [7-10,12]. Hơn thế nữa từ độ bão hoà của chúng thường nhỏ $M_S \approx 0,1 - 1$ emu/g [7]. Cho đến nay, chỉ có một công bố về vật liệu từ dựa trên graphite có mô men từ bão hoà đạt đến giá trị $M_S = 9,3$ emu/g [10]. Làm thế nào để tạo ra được các vật liệu từ dựa trên các bon với trật tự sắt từ tại nhiệt độ cao và có từ độ lớn vẫn là một thách thức lớn cho các nhà khoa học.

Trong bài báo này, chúng tôi tập trung nghiên cứu nguồn gốc từ tính của một số hệ vật liệu từ các bon đặc biệt dạng nano graphene nhằm góp phần định hướng cho việc thiết kế và chế tạo các vật liệu từ thế hệ mới với tính chất từ mong muốn.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Các tính toán trong nghiên cứu này được thực hiện bằng phần mềm DMol³ [16] với hệ hàm cơ sở kép phân cực. Để xác định năng lượng tương quan trao đổi, phiếm hàm xấp xỉ

biến đổi mật độ tổng quát PBE đã được sử dụng [17]. Tương tác giữa các điện tử hoá trị và điện tử các lớp bên trong được tính trực tiếp chứ không sử dụng hàm giả thế. Phương pháp Grimme [18] đã được sử dụng để tính năng lượng tương tác van der Waals. Điện tích và mômen từ của các nguyên tử thu được bởi việc sử dụng phương pháp phân tích phân bố Mulliken [19,20]. Để đảm bảo độ chính xác cao, bán kính nguyên tử được lấy đến giá trị 6 Å đối với tất cả các nguyên tử. Điều kiện hội tụ năng lượng trong tính toán tự hợp để xác định mật độ điện tử ứng với năng lượng cực tiểu là 1×10^{-6} Ha. Trong quá trình tìm cấu trúc tối ưu, điều kiện hội tụ tương ứng là 1×10^{-5} , 1×10^{-4} and 1×10^{-3} đơn vị nguyên tử đối với năng lượng, lực tác dụng và độ dịch chuyển của các nguyên tử.

Tham số tương tác trao đổi hiệu dụng J của các vật liệu từ dựa trên các bon đã được tính toán thông qua sự tách mức giữa các trạng thái singlet và triplet [21-23]:

$$2J = \Delta E_{ST} = E_S - E_T$$

Trong đó, E_S và E_T tương ứng là tổng năng lượng điện tử trong các trạng thái singlet và triplet của vật liệu.

Ái lực điện tử của các phân tử phi từ được tính theo công thức:

$$E_a = E^- - E$$

Trong đó E và E^- tương ứng là năng lượng của phân tử phi từ trong trạng thái trung hoà và trạng thái nhận thêm một điện tử.

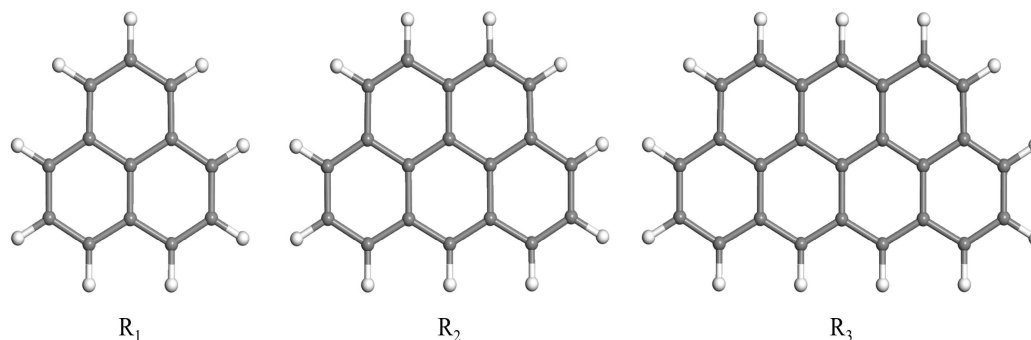
Năng lượng hình thành stacks từ các phân tử thành phần được xác định theo công thức:

$$E_f = E_{\text{stack}} - (2E_{\text{radical}} + E_{\text{diamagnetic_molecule}})$$

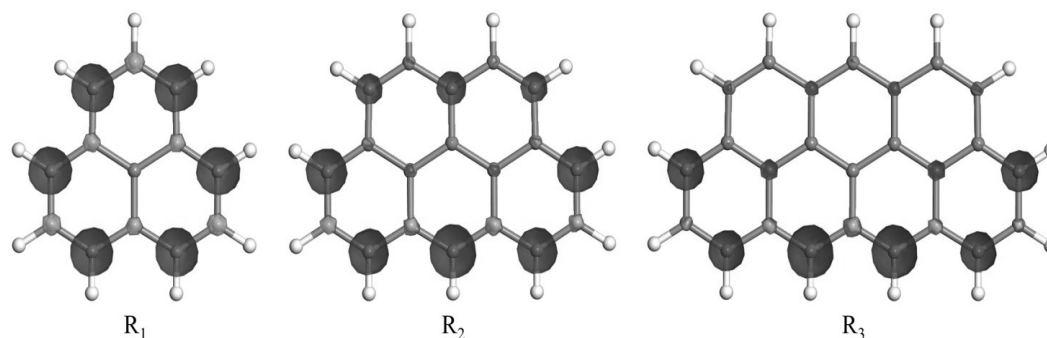
Ở đây E_{stack} , E_{radical} , và $E_{\text{diamagnetic_molecule}}$ tương ứng là tổng năng lượng của stack, phân tử từ tính, và phân tử phi từ.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Để làm sáng tỏ cơ chế hình thành mô men từ và cơ chế tương tác trong các vật liệu từ dựa trên graphene, chúng tôi đã thiết kế và nghiên cứu một cách hệ thống nhiều cấu trúc vật liệu từ nano dựa trên graphene từ đơn giản đến phức tạp [23-28].

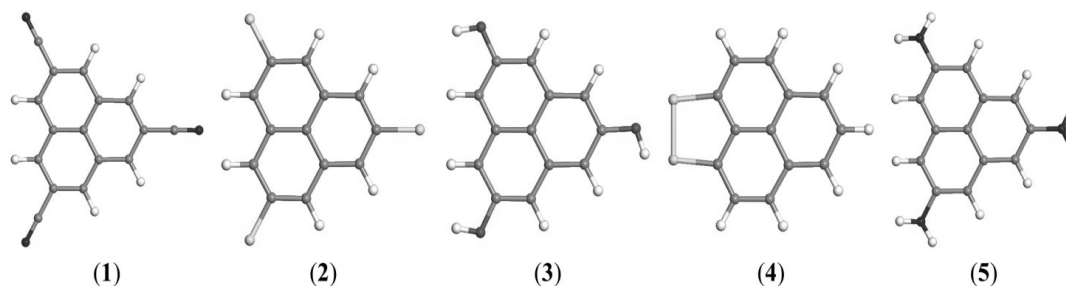


Hình 1. Cấu trúc hình học của một số phân tử từ tính dựa trên nano graphene R_1 , R_2 và R_3 .

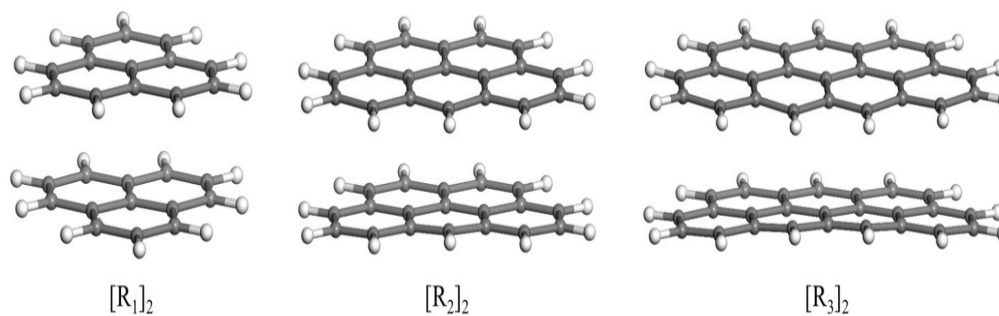


Hình 2. Sự phân cực spin của một số phân tử từ tính dựa trên nano graphene R_1 , R_2 và R_3 .

Trước tiên chúng tôi đã nghiên cứu hệ các đơn phân tử dựa trên graphene có công thức tổng quát $C_{6n+7}H_{2n+7}$ (kí hiệu là R_n , $n = 1, 2, 3, \dots$) [23-28]. Cấu trúc hình học của một số phân tử thuộc hệ này được biểu diễn trên Hình 1. Đây là các phân tử dạng nano graphene, mỗi phân tử được tạo thành từ $2n+1$ vòng thơm C_6 và $2n+7$ nguyên tử H nằm ở biên của phân tử. Kết quả tính toán của chúng tôi cho thấy mỗi phân tử R_n có mô men từ bằng $1 \mu_B$. Mô men từ này được hình thành từ các trạng thái π có nguồn gốc từ sự tổ hợp của một số quỹ đạo $2p_z$ của các nguyên tử các bon. Sự phân cực spin của một số phân tử từ tính dựa trên nano graphene được biểu diễn trên Hình 2. Việc thay thế một số nguyên tử H của phân tử R_n bằng các nhóm chức như F, Cl, S, CN, OH, NH_2 , CH_3, \dots cũng tạo ra các phân tử hữu cơ mới có mô men từ bằng $1 \mu_B$ [25-28], như được minh họa trên Hình 3.



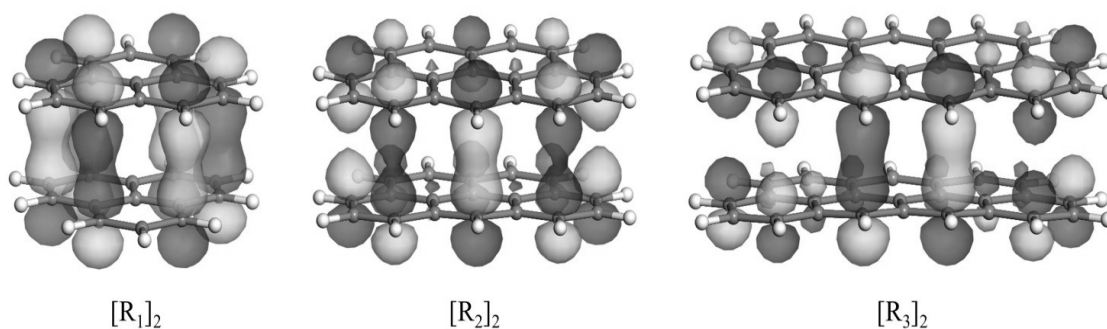
Hình 3. Cấu trúc hình học của một số phân tử từ tính thu được khi thay thế H bởi một số nguyên tử phi từ khác: (1) $C_{13}H_6(CN)_3$, (2) $C_{13}H_6Cl_3$, (3) $C_{13}H_6(OH)_3$, (4) $C_{13}H_7S_2$, (5) $C_{13}H_6(NH_2)_3$.



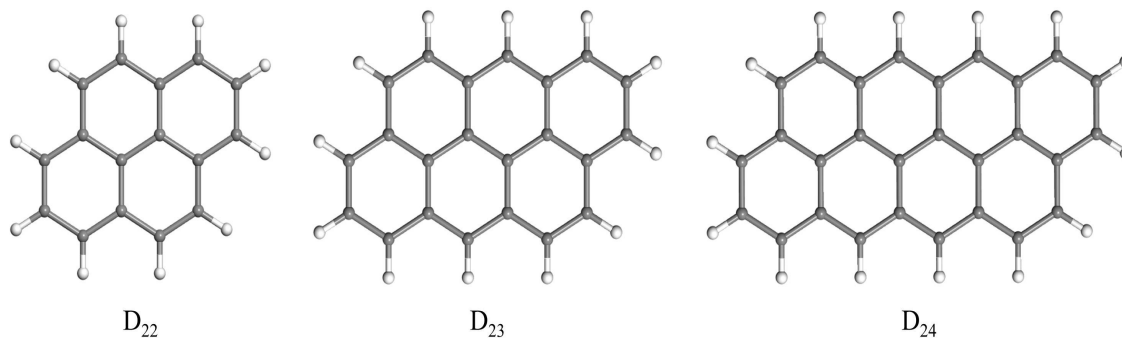
Hình 4. Cấu trúc hình học của một số dimer $[R_1]_2$, $[R_2]_2$ và $[R_3]_2$.

Để tạo ra các cấu trúc vật liệu từ dựa trên graphene có mô men từ lớn hơn, các cấu trúc tổ hợp dựa trên các phân tử R_n đã được thiết kế và nghiên cứu [23-28]. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi cho thấy rằng các phân tử R_n có thể kết hợp với nhau để tạo thành trạng thái dimer R_n-R_n , như được biểu diễn trên Hình 4. Tuy nhiên, trong trạng thái này tương tác từ giữa các phân tử R_n là phản sắt từ dẫn đến mô men từ tổng cộng bằng 0. Nguyên nhân của tương tác phản sắt từ là do sự phủ lấp trực tiếp giữa các trạng thái π của các phân tử R_n [23-28] như được biểu diễn trên Hình 5. Hệ quả của sự phủ lấp trực tiếp giữa các trạng thái π của các phân tử R_n là sự lai hoá mạnh giữa các trạng thái này, dẫn đến sự tách mức năng lượng giữa các trạng thái sau khi lai hoá là lớn và hệ quả là liên kết phản sắt từ chiếm ưu thế [23-28].

Để tránh sự phủ lấp trực tiếp giữa các trạng thái π của các phân tử R_n , các phân tử phi từ dựa trên nano graphene có công thức tổng quát $C_{2(mk+m+k)}H_{2(m+k+1)}$ (kí hiệu là D_{mk} với $m, k = 1-10$) đã được thiết kế xen vào giữa hai phân tử R_n tạo thành các cấu trúc dạng bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ [23-28]. D_{mk} là họ các phân tử nano graphene không có từ tính, mỗi phân tử gồm có $2(m.k+m+k)$ nguyên tử C liên kết với nhau tạo $m.k$ vòng benzene bao quanh bởi $2(m+k+1)$ nguyên tử H ở biên của phân tử. Cấu trúc hình học của một số phân tử D_{mk} được biểu diễn trên Hình 6.



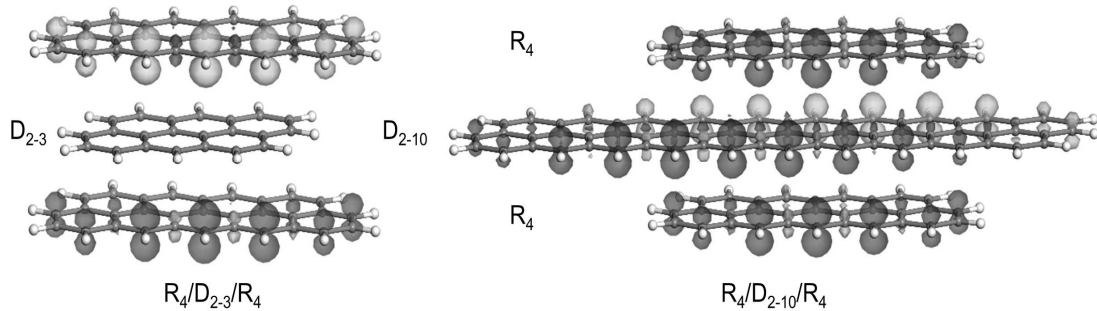
Hình 5. Quỹ đạo phân tử cao nhất bị chiếm của một số dimer $[R_1]_2$, $[R_2]_2$ và $[R_3]_2$.



Hình 6. Cấu trúc hình học của một số phân tử phi từ dựa trên nano graphene D_{mk} .



Hình 7. Mô hình vật liệu có cấu trúc bánh kẹp dựa trên nano graphene $R_n/D_{mk}/R_n$.



Hình 8. Sự phân cực spin trong một số cấu trúc bánh kẹp dựa trên nano graphene $R_n/D_{mk}/R_n$. Cấu trúc bánh kẹp $R_4/D_{2-10}/R_4$ có tương tác sắt từ, trong khi cấu trúc $R_4/D_{2-3}/R_4$ có tương tác phản sắt từ. (Mã màu: màu xanh/đậm là spin up, màu vàng/nhạt là spin down).

Mô hình vật liệu có cấu trúc bánh kẹp được trình bày trên Hình 7. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi cho thấy rằng rất nhiều cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ có tương tác sắt từ giữa các phân tử từ tính R_n [23-28]. Hệ quả là mô men từ của các cấu trúc bánh kẹp này là $2 \mu_B$. Sự phân cực spin trong một số cấu trúc bánh kẹp được biểu diễn trên Hình 8.

Tuy nhiên, trong một số hệ cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$, tương tác giữa các phân tử R_n lại là phản sắt từ dẫn đến mô men từ tổng cộng bằng 0 [23,26,27], như mô tả trên Hình 8 cho trường hợp cấu trúc bánh kẹp $R_4/D_{2-3}/R_4$. Kết quả này đòi hỏi phải làm rõ cơ chế của tương tác từ trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ để từ đó định hướng cho việc tổng hợp các hệ vật liệu từ dựa trên graphene có tính chất mong muốn, đặc biệt là hệ vật liệu có mô men từ lớn và tương tác sắt từ mạnh. Chúng tôi đã từng bước làm sáng tỏ điều này.

Trước tiên, chúng tôi nghiên cứu các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ có tương tác sắt từ [26]. Trong mỗi cấu trúc này, có hai điện tử không ghép cặp, hai điện tử này chiếm hai mức năng lượng cao nhất SOMO và SOMO-1 (SOMO = Single Occupied Molecular Orbital). Kết quả nghiên cứu bước đầu của chúng tôi đã chỉ ra rằng khe năng lượng giữa hai quỹ đạo SOMO và SOMO-1 càng nhỏ thì tương tác sắt từ càng mạnh, như được thể hiện trong Bảng 1 [26]. Tuy nhiên, kết quả này không vận dụng để lí giải được cho trường hợp tương tác là phản sắt từ.

Bảng 1. Mối tương quan giữa tham số tương tác trao đổi (J) và khe năng lượng SOMO (ΔE_{SOMO}) trong một số cấu trúc bánh kẹp [26].

J/k_B (K)	232	691	210	104	1073	2275
ΔE_{SOMO} (eV)	0.092	0.087	0.028	0.027	0.011	0.009

Bảng 2. Một số tham số đặc trưng của hệ vật liệu có cấu trúc bánh kẹp $R_4/D_{2m}/R_4$ ($m = 3-10$): khoảng cách giữa R_4-R_4 (d), tham số tương tác trao đổi (J), điện tích chuyển từ R_4 đến D_{2m} (Δn), sự phân cực spin trên D_{2m} (Δm), ái lực điện tử của D_{2m} (E_a), năng lượng hình thành (E_f) [23].

m	3	4	5	6	7	8	9	10
d (Å)	3.259	3.239	3.231	3.230	3.226	3.214	3.217	3.217
J/k_B (K)	-38	-35	103	232	345	507	689	832
Δn (e)	0.034	-0.024	-0.094	-0.124	-0.181	-0.186	-0.185	-0.182
Δm (μ_B)	0.078	0.142	0.287	0.387	0.418	0.454	0.390	0.392
E_a (eV)	-1.01	-1.51	-1.87	-2.15	-2.33	-2.43	-2.48	-2.53
E_f (eV)	-2.25	-2.59	-2.96	-3.20	-3.51	-3.59	-3.67	-3.52

Tiếp theo các nghiên cứu kỹ hơn của chúng tôi cho thấy khi các phân tử R_n kết hợp với phân tử D_{mk} để tạo thành các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ thì có sự chuyển điện tích giữa phân tử R_n và phân tử D_{mk} [23-25,27]. Điện tử có thể chuyển từ phân tử R_n sang phân tử D_{mk} hoặc ngược lại. Càng có nhiều điện tử chuyển từ phân tử R_n sang phân tử D_{mk} thì tương tác sắt từ trong cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ càng mạnh, đồng thời sự phân cực spin trên phân tử phi từ D_{mk} càng lớn [23-25,27], như được liệt kê trong Bảng 2 và 3. Ngược lại, khi tương tác phản sắt từ sẽ chiếm ưu thế khi điện tử được chuyển từ phân tử D_{mk} sang phân tử R_n [23,25,27], trong trường hợp này sự phân cực spin trên phân tử phi từ D_{mk} gần như bằng 0 [23], như được chỉ ra trong Bảng 3. Như vậy sự chuyển điện tích đóng một vai trò quan trọng đối với tương tác từ trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$. Sự chuyển điện tích giữa các phân tử R_n và D_{mk} có thể được điều chỉnh bởi ái lực điện tử tương đối giữa chúng. Sử dụng các phân tử phi từ D_{mk} có ái lực điện tử lớn so với các phân tử từ tính R_n có thể tăng cường sự chuyển điện tử từ phân tử từ tính R_n sang phân tử phi từ D_{mk} , và do đó có thể tăng cường tương tác sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ [23,25,27].

Bảng 3. Một số tham số đặc trưng của hệ vật liệu có cấu trúc bánh kẹp $R_1-X/D_{25}/R_1-X$ stacks: tham số tương tác trao đổi (J), khoảng cách giữa R_1-X-R_1-X (d), điện tích chuyển từ R_1-X đến D_{25} (Δn), sự phân cực spin trên D_{25} (Δm), ái lực điện tử của R_1-X (E_a), năng lượng hình thành (E_f) [27].

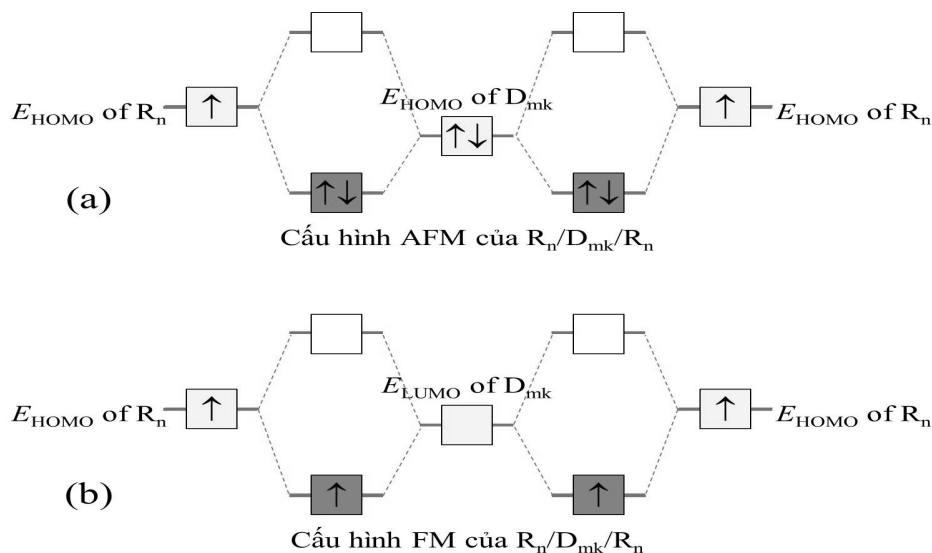
Stacks	J/k_B (K)	d (Å)	Δn (e)	Δm (μ_B)	E_a (eV)	E_f (eV)
$R_1-CN/D_{25}/R_1-CN$	-340	6.302	0.423	0.000	-3.09	-0.09
$R_1-Cl/D_{25}/R_1-Cl$	129	6.382	-0.007	0.390	-2.26	-2.05
$R_1-OH/D_{25}/R_1-OH$	248	6.454	-0.244	0.397	-1.54	-2.00
$R_1/D_{25}/R_1$	277	6.375	-0.194	0.389	-1.43	-1.70
$R_1-S/D_{25}/R_1-S$	603	6.359	-0.277	0.420	-1.33	-2.00
$R_1-NH_2/D_{25}/R_1-NH_2$	654	6,389	-0.411	0.490	-1.13	-2.24

Bảng 4. Ái lực điện tử của hệ phân tử phi từ D_{mk} ($m, k = 2-10$) tính theo đơn vị eV.

D_{mk}	2	3	4	5	6	7	8	9	10
2	-0.32	-1.01	-1.51	-1.88	-2.15	-2.33	-2.43	-2.49	-2.53
3		-1.51	-1.90	-2.19	-2.40	-2.51	-2.58	-2.62	-2.64
4			-2.20	-2.54	-2.55	-2.62	-2.66	-2.75	-2.82
5				-2.56	-2.63	-2.67	-2.79	-2.85	-2.88
6					-2.70	-2.80	-2.86	-2.89	-2.95
7						-2.81	-2.87	-2.97	-3.02
8							-3.12	-3.03	-3.04
9								-3.05	-3.10
10									-3.16

Để định hướng rõ hơn cho việc tổng hợp các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ có tính chất từ mong muốn, chúng tôi đã nghiên cứu một cách hệ thống ái lực điện tử của các phân tử phi từ D_{mk} và phân tử từ tính R_n . Kết quả nghiên cứu của chúng tôi chỉ ra rằng ái lực điện tử của các phân tử D_{mk} và R_n tăng theo các chỉ số n, m và k , như được liệt kê trong Bảng 4. Điều này có nghĩa là ái lực điện tử của các phân tử D_{mk} và R_n tăng theo kích thước của chúng, cụ thể phân tử D_{22} có ái lực điện tử bằng -0.32 eV và tăng đến giá trị -3.16 eV với D_{10_10} . Kết quả này cho phép dự đoán rằng tương tác sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ sẽ tăng theo kích thước của phân tử phi từ D_{mk} . Để khẳng định điều này chúng tôi đã tính toán hằng số tương tác trao đổi (J) trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$. Kết

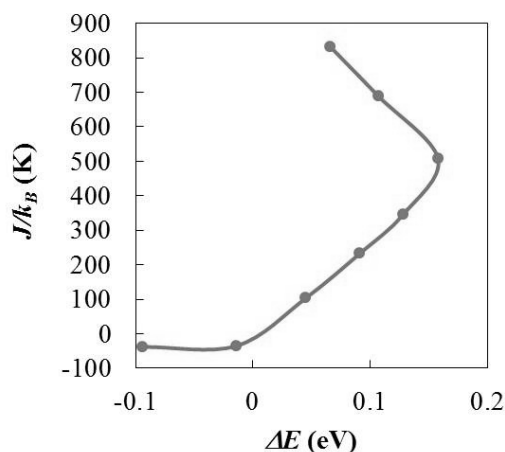
quả đúng như được mong đợi, $J > 0$ đối với các bánh kẹp có phân tử D_{mk} lớn và J tăng theo kích thước của phân tử D_{mk} [23,25], như được minh hoạ trong Bảng 2. Một số cấu trúc bánh kẹp có hằng số tương tác trao đổi $J/k_B \sim 1000$ K đã được chúng tôi công bố [23]. Ngược lại, việc giảm kích thước của phân tử D_{mk} hoặc tăng kích thước của phân tử R_n có thể dẫn đến việc chuyển từ tương tác sắt từ sang tương tác phản sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp [23].



Hình 9. Giản đồ mô tả cơ chế tương tác sắt từ (FM) và phản sắt từ (AFM) trong các vật liệu có cấu trúc bánh kẹp dựa trên graphene $R_n/D_{mk}/R_n$: (a) Cấu hình AFM kết quả từ sự lai hoá giữa R_n HOMO và D_{2m} HOMO, (b) Cấu hình FM kết quả từ sự lai hoá giữa R_n HOMO and the D_{mk} LUMO.

Bên cạnh việc thay đổi ái lực điện tử của thông qua kích thước của các phân tử R_n và D_{mk} , chúng tôi cũng đã làm biến đổi ái lực điện tử của các phân tử R_n và D_{mk} bằng việc thay thế các nhóm phối tử có ái lực điện tử khác nhau cho một số nguyên tử H ở biên của các phân tử R_n và D_{mk} . Cách tiếp cận này có ưu điểm là không làm thay đổi nhiều đến kích thước của cấu trúc bánh kẹp nhưng vẫn có thể điều khiển được tính chất từ cũng như tương tác trao đổi trong các cấu trúc bánh kẹp [24,27]. Việc thay thế một số nguyên tử H ở biên của phân tử D_{mk} bởi các nhóm phối tử có ái lực điện tử lớn hơn, ví dụ như CN và Cl, cho có thể làm tăng cường tương tác sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp. Tương tác sắt từ cũng được tăng cường khi thay thế một số nguyên tử H ở biên của phân tử R_n bởi các nhóm phối tử có ái lực điện tử nhỏ hơn, ví dụ như NH_2 và S_2 [27], như được minh hoạ trong Bảng 3. Ngược lại, tương tác phản sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ sẽ được tăng cường khi thay thế một số nguyên tử H của phân tử R_n bởi các nhóm phối tử có ái lực điện tử lớn hơn, hoặc thay thế một số nguyên tử H của phân tử D_{mk} bởi các nhóm phối tử có ái lực điện tử nhỏ hơn.

Các kết quả nghiên cứu trên đây đã chỉ ra được các tương quan từ-cấu trúc, tương quan giữa sự chuyển điện tích và tương tác trao đổi, hiệu ứng kích thước, vai trò của phối tử cũng như vai trò của biên đối với tính chất từ của một số hệ vật liệu từ dựa trên graphene. Những mối tương quan này đã góp phần định hướng cho việc tổng hợp và điều khiển tính chất từ của vật liệu từ dựa trên graphene. Tuy nhiên, để làm sáng tỏ cơ chế của tương tác trao đổi trong vật liệu từ dựa trên graphene, cần tiến hành những nghiên cứu sâu hơn về cấu trúc điện tử cũng như bản chất của tương tác để chỉ ra được điều kiện nào thì hình thành tương tác sắt từ, điều kiện nào thì hình thành tương tác phản sắt từ.



Hình 10. Mô tả mối liên hệ giữa hằng số tương tác trao đổi (J) và tham số tiêu chuẩn sắt từ (ΔE) của hệ vật liệu có cấu trúc bánh kẹp $R_4/D_{2k}/R_4$ ($k = 3-10$) [23]. Khi $\Delta E > 0$ vật liệu có cấu trúc FM với $J > 0$, ngược lại khi $\Delta E < 0$ vật liệu có cấu trúc AFM với $J < 0$.

Để thực hiện được điều này chúng tôi đã tiến hành nghiên cứu sâu cấu trúc điện tử của một số hệ vật liệu từ dựa trên graphene, trong đó có hệ có cấu trúc bánh kẹp $R_4/D_{2k}/R_4$ ($k = 3-10$) [23]. Chúng tôi đã khám phá ra rằng trong các hệ vật liệu từ dựa trên graphene có cấu trúc bánh kẹp $R_n/D_{mk}/R_n$ có sự cạnh tranh giữa tương tác sắt từ và tương tác phản sắt từ. Tương tác sắt từ có nguồn gốc từ sự lai hoá giữa quỹ đạo phân tử cao nhất bị chiếm của phân tử từ tính R_n (HOMO, Highest Occupied Molecular Orbital) với quỹ đạo phân tử thấp nhất không bị chiếm của phân tử phi từ D_{mk} (LUMO, Lowest Unoccupied Molecular Orbital), như được mô tả trên Hình 9 [23,27]. Còn tương tác phản sắt từ có nguồn gốc từ sự lai hoá giữa trạng thái HOMO của phân tử từ tính R_n với trạng thái HOMO của phân tử phi từ D_{mk} [23,27]. Vì vậy, cường độ của các tương tác sắt từ và phản sắt từ phụ thuộc tương ứng vào mức độ lai hoá giữa trạng thái HOMO của phân tử R_n với các trạng thái LUMO và HOMO của phân tử D_{mk} . Mức độ lai hoá giữa trạng thái HOMO của phân tử R_n với các trạng thái LUMO và HOMO của phân tử D_{mk} phụ thuộc vào hình dạng quỹ đạo và năng lượng tương đối giữa chúng. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi cũng cho thấy rằng các trạng thái HOMO và LUMO của các phân tử R_n và D_{mk} đều là các trạng thái π . Do đó, mức độ lai hoá chủ yếu phụ thuộc vào năng lượng tương đối giữa các trạng thái này, sự

khác biệt năng lượng càng nhỏ thì mức độ lai hoá càng mạnh. Cụ thể là khi sự khác biệt năng lượng giữa trạng thái HOMO của phân tử R_n với trạng thái LUMO của phân tử D_{mk} (E_{FM}) nhỏ hơn sự khác biệt năng lượng giữa trạng thái HOMO của phân tử R_n với trạng thái HOMO của phân tử D_{mk} (E_{AFM}) thì sẽ dẫn đến trạng thái sắt từ trong các cấu trúc bánh kẹp. Ngược lại, khi $E_{FM} > E_{AFM}$ thì sẽ dẫn đến trạng thái phản sắt từ. Nói một cách khác tiêu chuẩn sắt từ cho hệ vật liệu từ dựa trên graphene có cấu trúc bánh kẹp là $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM} > 0$ [23,27], như được minh hoạ trên Hình 10.

4. KẾT LUẬN

Những kết quả nghiên cứu của chúng tôi đã làm sáng tỏ cơ chế tương tác trao đổi trong một số hệ vật liệu từ nano dựa trên graphene. Tiêu chuẩn sắt từ cho hệ vật liệu từ dựa trên graphene có cấu trúc bánh kẹp đã được xác định. Các mối tương quan giữa cấu trúc điện tử, cấu trúc hình học với tính chất từ đã được làm rõ. Hiệu ứng kích thước, vai trò của phối tử đối với tính chất từ cũng đã được làm sáng tỏ. Nhiều vật liệu từ dựa trên graphene có cấu trúc bánh kẹp với tương tác sắt từ mạnh đã được thiết kế. Những kết quả này góp phần định hướng cho việc tổng hợp các vật liệu từ mới dựa trên graphene với tính chất từ mong muốn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. K. L. M. Harriman, M. Murugesu (2016), *Acc. Chem. Res.*, 49, 1158.
2. N. A. Tuan, N. H. Sinh, D. H. Chi (2011), *Journal of Applied Physics*, 109, 07B105.
3. H. Chi, N. A. Tuan, P. T. Lam, N. V. Cuong, and H. T. Bao (2014), *Journal of Chemical Physics*, 140, 044101.
4. G. R. Bhimanapati, *et. al.* (2015), *Recent Advances in Two-Dimensional Materials beyond Graphene*, ACS Nano, 9, 11509.
5. A. L. Kuzemsky (2013), *International Journal of Modern Physics B (IJMPB)*, 27, 1330007.
6. S. K. Saha, M. Baskey, D. Majumdar (2010), *Adv. Mater.* 22, 5531.
7. *Carbon-Based Magnetism*, (Eds: T. Makarova, F. Palacio), Elsevier, Amsterdam, 2006.
8. P. Esquinazi, A. Setzer, R. Höhne, C. Semmelhack, Y. Kopelevich, D. Spemann, T. Butz, B. Kohlstrunk, M. Lösche (2002), *Phys. Rev. B* 66, 024429.
9. P. Esquinazi *et al.* (2003), *Phys. Rev. Lett.* 91, 227201.
10. H. Xia, W. Li, Y. Song, X. Yang, X. Liu, M. Zhao, Y. Xia, C. Song, T. Wang, D. Zhu, J. Gong, Z. Zhu (2008), *Adv. Mater.* 20, 4679.
11. T. Enoki and K. Takai (2009), *Solid State Commun.* 149, 1144.
12. S. Talapatra *et al.* (2005), *Phys. Rev. Lett.* 95, 097201.

13. A. V. Rode *et al.* (2004) *Phys. Rev. B* 70, 054407.
14. J. Zhou, Q. Wang, Q. Sun, X. S. Chen, Y. Kawazoe, P. Jena (2009), *Nano Letters*, 9, 3867.
15. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson (2008), *Nano Letters*, 8, 4373.
16. B. Delley (1990), *J. Chem. Phys.* 92, 508.
17. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof (1996), *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865.
18. S. Grimme (2004), *J. Comput. Chem.* 25, 1463.
19. R. S. Mulliken (1955), *J. Chem. Phys.* 23, 1833.
20. R. S. Mulliken (1955), *J. Chem. Phys.* 23, 1841.
21. K. Yamaguchi, H. Fukui, T. Fueno (1986), *Chemistry Letters*, 625-628.
22. Bovi, L. Guidoni, (2012), *Chemical Physics*, 137 114107.
23. N. A. Tuan, N. V. Thanh, P. T. T. Anh, D. V. Thang, N. H. Sinh, D. H. Chi, (2015), *AIP Advances* 5 107109.
24. N. D. Q. Trang, N. V. Thành, T. T. Oanh, L. H. Phước, N. A. Tuấn (2014), *Tạp chí Khoa học và Công nghệ*, 52 (3B), 97.
25. N. A. Tuan, N. V. Thanh, L. H. Phuoc, N. H. Sinh (2014), *IEEE Transactions on Magnetics*, 50, No. 6, 2700304.
26. N. V. Thanh, N. A. Tuan (2013), *Communications in Physics*, Vol. 23, No. 4, 321.
27. N. A. Tuan, N. V. Thanh, P. T. T. Anh, N. H. Sinh, N. V. Cuong, D. H. Chi (2016), *Materials Transaction*, Vol. 57, No. 10, 1680.
28. Nguyễn Anh Tuấn (2013), *Lý thuyết phiếm hàm mật độ và một số ứng dụng trong khoa học vật liệu*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.

STUDY ON NANO GRAPHENE-BASED MAGNETIC MATERIALS

Abstract: *Basing on density-functional theory, several carbon-based magnetic materials have been investigated. Our calculated results showed that nano graphene can combine with atoms such as H, O, N and S to form magnetic molecules. However, in the dimeric form, magnetic coupling between radicals is anti-ferromagnetic due to the direct overlap between their π states resulting in the net magnetic moment becoming 0. To avoid the direct overlap between π states of radicals, a diamagnetic molecule has been inserted between two radicals to form sandwich structure. By this approach, a lot of ferromagnetic carbon-based materials have been designed. These results give some hints for designing new carbon-based magnetic materials with high magnetic moment and high ordering temperature.*

Keywords: *d^0 magnetic materials, exchange coupling, computational materials design, charge transfers, organic magnets.*

QUINTIC B-SPLINE COLLOCATION METHOD FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE GENERALIZED BENJAMIN-BONA-MAHONY-BURGERS EQUATION

Nguyen Van Tuan¹⁽¹⁾, Nguyen Duc Thuyet²

¹Hanoi Metropolitan University

²Vinh Phuc Vocational College

Abstract: In this paper, numerical solutions of the Generalized Benjamin-Bona-Mahony-Burgers (GBBMB) equation are obtained by collocation of quintic B-splines-based method. Applying the Von-Neumann stability analysis, the proposed method is shown to be unconditionally stable. The numerical result shows that the present method is a successful numerical technique for solving the GBBMB equation.

Keywords: GBBMB equation; quintic B-spline; collocation method; finite difference.

1. INTRODUCTION

In this paper we consider the solution of the GBBMB equation:

$$\begin{aligned} u_t - u_{xxx} + \alpha u_{xx} + \beta u^2 u_x + \gamma u_x &= 0, \\ x \in [a, b], t \in [0, T] \end{aligned} \quad (1)$$

with the initial condition:

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in [a, b] \quad (2)$$

and the boundary condition:

$$\begin{cases} u(a, t) = \alpha_1, u(b, t) = \alpha_2 \\ u_x(a, t) = u_x(b, t) = 0 \\ u_{xx}(a, t) = u_{xx}(b, t) = 0, \end{cases} \quad (3)$$

where $\alpha, \beta, \alpha_1, \alpha_2$ are constants, $\alpha > 0, \beta \geq 1$ is an integer.

GBBMB equations play a dominant role in many branches of science and engineering. In the past several years, many different methods have been used to solution of the GBBMB equation and some their cases, see [1, 3, 5].

The paper is used quintic B-spline collocation method for equation (1).

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 15.7.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Nguyễn Văn Tuấn; Email: nvtuan@daihocthudo.edu.vn

2. QUINTIC B – SPLINE COLLOCATION METHOD

The interval $[a, b]$ is partitioned into a mesh of uniform length $h = x_{i+1} - x_i$ by the knots $x_i, i = \overline{0, N}$ such that:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b.$$

Our numerical study for GBBMB equation using the collocation method with quintic B-spline is to find an approximate solution $U(x, t)$ to exact solution $u(x, t)$ in the form:

$$U(x, t) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i(t) B_i(x) \tag{4}$$

$B_i(x)$ are the quintic B-spline basis functions at knots, given by [4].

$$B_i(x) = \frac{1}{h^5} \begin{cases} (x - x_{i-3})^5, & x_{i-3} \leq x \leq x_{i-2} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5, & x_{i-2} \leq x \leq x_{i-1} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5, & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - \\ \quad - 20(x - x_i)^5, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - 20(x - x_i)^5 + \\ \quad + 15(x - x_{i+1})^5, & x_{i+1} \leq x \leq x_{i+2} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - 20(x - x_i)^5 + \\ \quad + 15(x - x_{i+1})^5 - 6(x - x_{i+2})^5, & x_{i+2} \leq x \leq x_{i+3} \\ 0, & x < x_{i-3} \cup x > x_{i+3}. \end{cases}$$

The value of $B_i(x)$ and its derivatives may be tabulated as in Table 1.

$$U_i = \delta_{i-2} + 26\delta_{i-1} + 66\delta_i + 26\delta_{i+1} + \delta_{i+2}$$

$$U'_i = \frac{5}{h}(-\delta_{i-2} - 10\delta_{i-1} + 10\delta_{i+1} + \delta_{i+2})$$

$$U''_i = \frac{20}{h^2}(\delta_{i-2} + 2\delta_{i-1} - 6\delta_i + 2\delta_{i+1} + \delta_{i+2}).$$

Table 1. $B_i, B'_i,$ and B''_i at the node points

x	x_{i-3}	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	x_{i+3}
$B_i(x)$	0	1	26	66	26	1	0
$B'_i(x)$	0	$\frac{5}{h}$	$\frac{50}{h}$	0	$-\frac{50}{h}$	$-\frac{5}{h}$	0
$B''_i(x)$	0	$\frac{20}{h^2}$	$\frac{40}{h^2}$	$-\frac{120}{h^2}$	$\frac{40}{h^2}$	$\frac{20}{h^2}$	0

Using the finite difference method, from the equation (1), we have:

$$\frac{(u - u_{xx})^{n+1} - (u - u_{xx})^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{xxx}^{n+1} + u_{xxx}^n}{2} + \beta \frac{(u^2 u_x)^{n+1} + (u^2 u_x)^n}{2} + \gamma \frac{(u_x)^{n+1} + (u_x)^n}{2} = 0. \tag{5}$$

The nolinear term $(u^2 u_x)^{n+1}$ in Eq. (5) can be approximated by using the following formulas which obtained by applying the Taylor expansion

$$(u^2 u_x)^{n+1} = (u^2)^n u_x^{n+1} + 2u^n u_x^n u_x^{n+1} - 2(u^2)^n u_x^n.$$

So Eq. (5) can be rewritten as

$$\begin{aligned} (u - u_{xx})^{n+1} &+ \frac{\Delta t}{2} [\alpha u_x^{n+1} + \beta (u^2)^n u_x^{n+1} + 2\beta u^n u_x^n u_x^{n+1} + \gamma u_x^{n+1}] \\ &= (u - u_{xx})^n - \frac{\Delta t}{2} [\alpha u_x^n - \beta (u^2)^n u_x^n + \gamma u_x^n]. \end{aligned} \quad (6)$$

Using the value given in Table 1, Eq. (6) can be calculated at the knots $x_i, i = \overline{0, N}$ so that at $x = x_0$, Eq. (6) reduces to

$$\begin{aligned} r_0 \delta_{-2}^{n+1} + s_0 \delta_{-1}^{n+1} + v_0 \delta_0^{n+1} + p_0 \delta_1^{n+1} + q_0 \delta_2^{n+1} \\ = r'_0 \delta_{-2}^n + s'_0 \delta_{-1}^n + v'_0 \delta_0^n + p'_0 \delta_1^n + q'_0 \delta_2^n, \end{aligned} \quad (7)$$

Where:

$$\begin{aligned} r_0 &= 2h^2 + 20\alpha\Delta t - 5h\beta\Delta t L_{01}^2 + 10h\beta\Delta t L_{01} L_{02} - 5h\gamma\Delta t - 40; \\ s_0 &= 2(26h^2 + 20\alpha\Delta t - 25h\beta\Delta t L_{01}^2 + 130h\beta\Delta t L_{01} L_{02} - 25h\gamma\Delta t - 40); \\ v_0 &= 2(66h^2 - 60\alpha\Delta t + 330h\beta\Delta t L_{01} L_{02} + 120); \\ p_0 &= 2(26h^2 + 20\alpha\Delta t + 25h\beta\Delta t L_{01}^2 + 130h\beta\Delta t L_{01} L_{02} + 25h\gamma\Delta t - 40); \\ q_0 &= 2h^2 + 20\alpha\Delta t + 5h\beta\Delta t L_{01}^2 + 10h\beta\Delta t L_{01} L_{02} + 5h\gamma\Delta t - 40; \\ r'_0 &= 2h^2 - 20\alpha\Delta t - 5h\beta\Delta t L_{01}^2 + 5h\gamma\Delta t - 40; \\ s'_0 &= 2(26h^2 - 20\alpha\Delta t - 25h\beta\Delta t L_{01}^2 + 25h\gamma\Delta t - 40); \\ v'_0 &= 2(66h^2 + 60\alpha\Delta t + 120); \\ p'_0 &= 2(26h^2 - 20\alpha\Delta t + 25h\beta\Delta t L_{01}^2 - 25h\gamma\Delta t - 40); \\ q'_0 &= 2h^2 - 20\alpha\Delta t + 5h\beta\Delta t L_{01}^2 - 5h\gamma\Delta t - 40; \\ L_{01} &= \delta_{-2} + 26\delta_{-1} + 66\delta_0 + 26\delta_1 + \delta_2 \\ L_{02} &= \delta_{-1} + 26\delta_0 + 66\delta_1 + 26\delta_2 + \delta_3. \end{aligned} \quad (7)$$

At $x = x_i, i = \overline{1, N}$ Eq.

becomes

$$\begin{aligned} r_i \delta_{i-2}^{n+1} + s_i \delta_{i-1}^{n+1} + v_i \delta_i^{n+1} + p_i \delta_{i+1}^{n+1} + q_i \delta_{i+2}^{n+1} = r'_i \delta_{i-2}^n + s'_i \delta_{i-1}^n + v'_i \delta_i^n + p'_i \delta_{i+1}^n + \\ q'_i \delta_{i+2}^n, \end{aligned} \quad (8)$$

Where:

$$\begin{aligned} r_i &= 2h^2 + 20\alpha\Delta t - 5h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 10h\beta\Delta t L_{i1} L_{i2} - 5h\gamma\Delta t - 40; \\ s_i &= 2(26h^2 + 20\alpha\Delta t - 25h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 130h\beta\Delta t L_{i1} L_{i2} - 25h\gamma\Delta t - 40); \\ v_i &= 2(66h^2 - 60\alpha\Delta t + 330h\beta\Delta t L_{i1} L_{i2} + 120); \\ p_i &= 2(26h^2 + 20\alpha\Delta t + 25h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 130h\beta\Delta t L_{i1} L_{i2} + 25h\gamma\Delta t - 40); \\ q_i &= 2h^2 + 20\alpha\Delta t + 5h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 10h\beta\Delta t L_{i1} L_{i2} + 5h\gamma\Delta t - 40; \\ r'_i &= 2h^2 - 20\alpha\Delta t - 5h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 5h\gamma\Delta t - 40; \\ s'_i &= 2(26h^2 - 20\alpha\Delta t - 25h\beta\Delta t L_{i1}^2 + 25h\gamma\Delta t - 40); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v'_i &= 2(66h^2 + 60\alpha\Delta t + 120); \\
p'_i &= 2(26h^2 - 20\alpha\Delta t + 25h\beta\Delta tL_{i1}^2 - 25h\gamma\Delta t - 40); \\
q'_i &= 2h^2 - 20\alpha\Delta t + 5h\beta\Delta tL_{i1}^2 - 5h\gamma\Delta t - 40; \\
L_{i1} &= \delta_{-2} + 26\delta_{-1} + 66\delta_0 + 26\delta_1 + \delta_2 \\
L_{i2} &= \delta_{-1} + 26\delta_0 + 66\delta_1 + 26\delta_2 + \delta_3.
\end{aligned}$$

The system (8) consists of $N + 1$ equations in the $N + 5$ knowns $(\delta_{-2}, \delta_{-1}, \dots, \delta_{N+1}, \delta_{N+2})^T$.

To get a solution to this system, we need four additional constraints. These constraints are obtained from the boundary conditions (3) and can be used to eliminate from the system (8). Then, we get the matrix system equation:

$$A(\delta^n)\delta^{n+1} = B(\delta^n)\delta^n + r, \quad (9)$$

where the matrix $A(\delta^n)$, $B(\delta^n)$ are penta-diagonal $(N + 1) \times (N + 1)$ matrices and r is the $N + 1$ dimensional column vector. The algorithm is then used to solve the system (8). We apply first the initial condition:

$$U(x, 0) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i^0 B_i(x), \quad (10)$$

then we need that the approximately solution is satisfied following conditions:

$$\begin{cases}
U(x_i, 0) = f(x_i) \\
U_x(x_0, 0) = U_x(a, 0) = 0 \\
U_x(x_N, 0) = U_x(b, 0) = 0 \\
U_{xx}(x_0, 0) = U_{xx}(a, 0) = 0 \\
U_{xx}(x_N, 0) = U_{xx}(b, 0) = 0 \\
i = 0, 1, \dots, N.
\end{cases} \quad (11)$$

Eliminating $\delta_{-2}^0, \delta_{-1}^0, \delta_{N+1}^0$ and δ_{N+2}^0 from the system (11), we get: $A\delta^0 = r$, where A is the penta-diagonal matrix given by:

$$A = \begin{pmatrix}
54 & 60 & 6 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\frac{101}{4} & \frac{135}{2} & \frac{105}{4} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
\dots & & \dots & & \dots & & & \\
\dots & & \dots & & \dots & & & \\
0 & \dots & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 \\
0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \frac{105}{4} & \frac{135}{2} & \frac{101}{4} \\
0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 6 & 60 & 54
\end{pmatrix}$$

and $\delta^0 = (\delta_0^0, \delta_1^0, \dots, \delta_N^0)^T, r = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N))^T$.

3. STABILITY ANALYSIS

To apply the Von-Neumann stability for the system (7), we must first linearize this system.

We have:

$$\delta_j^m = \xi^n \exp(i\beta_j h), \quad i = \sqrt{-1}, \quad (12)$$

where β is the mode number and h is the element size.

Being applicable to only linear schemes the nonlinear term $\mathbf{U}^2 \mathbf{U}_x$ is linearized by taking \mathbf{U} as a locally constant value \mathbf{k} . The linearized form of proposed scheme is given as

$$p_1 \delta_{i-2}^{n+1} + p_2 \delta_{i-1}^{n+1} + p_3 \delta_i^{n+1} + p_4 \delta_{i+1}^{n+1} + p_5 \delta_{i+2}^{n+1} = p'_1 \delta_{i-2}^n + p'_2 \delta_{i-1}^n + p'_3 \delta_i^n + p'_4 \delta_{i+1}^n + p'_5 \delta_{i+2}^n \quad (13)$$

Where:

$$p_1 = 1 - \frac{20}{h^2} + \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} - \frac{5(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p_2 = 26 - \frac{40}{h^2} + \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} - \frac{25(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p_3 = 66 + \frac{120}{h^2} - \frac{60\alpha\Delta t}{h^2}$$

$$p_4 = 26 - \frac{40}{h^2} + \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} + \frac{25(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p_5 = 1 - \frac{20}{h^2} + \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} + \frac{5(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p'_1 = 1 - \frac{20}{h^2} - \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} + \frac{5(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p'_2 = 26 - \frac{40}{h^2} - \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} + \frac{25(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p'_3 = 66 + \frac{120}{h^2} + \frac{60\alpha\Delta t}{h^2}$$

$$p'_4 = 26 - \frac{40}{h^2} - \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} - \frac{25(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

$$p'_5 = 1 - \frac{20}{h^2} - \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} - \frac{5(k+\gamma)\Delta t}{2h}$$

Substitution of $\delta_j^n = \exp(i\beta jh)\xi^n$ into Eq. (13) leads to:

$$\xi[p_1 \exp(-2i\beta h) + p_2 \exp(-i\beta h) + p_3 + p_4 \exp(i\beta h) + p_5 \exp(2i\beta h)] = p'_1 \exp(-2i\beta h) + p'_2 \exp(-i\beta h) + p'_3 + p'_4 \exp(i\beta h) + p'_5 \exp(2i\beta h). \quad (14)$$

Simplifying Eq. (14), we get

$$\xi = \frac{X_1 - iY}{X_2 + iY'}$$

Where:

$$\begin{aligned} X_1 &= 2 \left(1 - \frac{20}{h^2} - \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} \right) \cos 2\phi + 2 \left(26 - \frac{40}{h^2} - \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} \right) \cos \phi + 66 + \frac{120}{h^2} + \frac{60\alpha\Delta t}{h^2}; \\ X_2 &= 2 \left(1 - \frac{20}{h^2} + \frac{10\alpha\Delta t}{h^2} \right) \cos 2\phi + 2 \left(26 - \frac{40}{h^2} + \frac{20\alpha\Delta t}{h^2} \right) \cos \phi + 66 + \frac{120}{h^2} - \frac{60\alpha\Delta t}{h^2}; \\ Y &= \frac{5(k+\gamma)\Delta t}{h} \sin 2\phi + \frac{50(k+\gamma)\Delta t}{h} \sin \phi, \quad \alpha, \gamma > 0, \phi = \beta h. \end{aligned}$$

It is clear that $X_2 \geq X_1 > 0$.

Therefore, the linearized numerical scheme for the GBBMB equation is unconditionally stable.

4. NUMERICAL EXAMPLE

We now obtain the numerical solution of the GBBMB equation for a problem. To show the efficiency of the present method for our problem in comparison with the exact solution, we report L_∞ and L_2 using formula

$$\begin{aligned} L_\infty &= \max_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|, \\ L_2 &= \left(h \sum_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

where U is numerical solution and u denotes exact solution.

Example. Consider the GBBMB equation with $\gamma = 3, \alpha = \beta = 0$. The exact of Eq. (1) is given in [7]

$$u(x, t) = A \operatorname{sech}(k(x - x_0 - ct))$$

where $c = \frac{\beta A^2}{6}$ and $k = 1$. A, c represent the amplitude and velocity of a single solitary wave initially centered at x_0 .

We choose the following parameters

$$a = 0; b = 80; A = 0,25; h = 0,05; \Delta t = 0,2; x_0 = 30, T = 5.$$

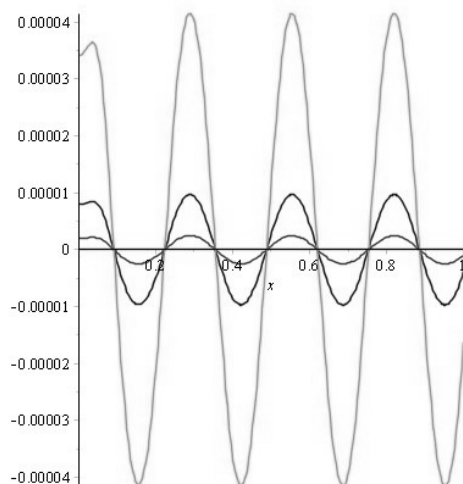


Fig.1. The Physical Behaviour of Numerical Solutions of Example at Different Time Levels
 $0 \leq t \leq 5$

Table 2. Erros at different time levels

Errors	t =1	t =2	t =3	t =4	t =5
L_{∞}	0.0054252098	0.0109452151	0.0165516810	0.0223096252	0.0337610187
L_2	0.008207923949	0.01642287375	0.02463674556	0.0328621363	0.06382919069

5. CONCLUSIONS

A numerical method based on collocation of quintic B-spline had been described in the previous section for solving GBBMB equation. A finite difference scheme had been used for discretizing time derivatives and quintic B-spline for interpolating the solution at is capable time level. From the test problem, the obtained resultf show that the present method is capable for solving GBBMB equation.

REFERENCES

1. G. Arora, R. C. Mittal, B. K. Singh (2014), "Numerical solution of BBM-Burger equation with quartic B-spline collocation method", *J. of Engineering Sci. and Technology*, special Issue on ICMTEA 2013 conference, pp.104-116.
2. D. J. Evans and K. R. Raslan (2005), "Solitar waves for the generalized equal width (GEW) equation", *International J. Computer Mathematics*, Vol. 82, No. 4, April., pp.445-455.
3. C. Hai – tao, P. Xin – tian, Z. Lu – ming and W. Yi – ju (2012), "Numerical analysis of a linear – implicit average scheme for generalized Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equation", *J. of Applied Mathematics*, Vol. 2012, Artich ID 308410.
4. P. M. Prenter (2008), "Spline and variational methods", *Dover Publications*, New York.

5. K. Shin – ichi and M. Ming and O. Seiro (2000), Convergence to diffusion waves of the solutions for *Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equations*, *Applicable Analysis*, Vol. 75 (3 – 40), pp.317-340.
6. Siraj-Ul-Islam, Fazal-I-Had and Ikram A. Tirmizi (2010), "Collocation method using quartic B-spline for numerical solution of the modified equal width wave equation", *J. Appl. Math. Informatics*, Vol. 28, No.3-4, pp.611-624.
7. G. Turabi, B. G. K. Seydi (2011), "Septic B – spline collocation Method for the numerical solution of the modified equal width wave equation", *Applied Mathematics*, 2, pp.739-749.
8. M. Zarebnia and R. Parvaz (2017), *Numerical study of the Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equation*, *Bol. Soc. Paran. Mat.* Vol. 35 1, pp.127-138.

PHƯƠNG PHÁP COLLOCATION VỚI CƠ SỞ B-SPLINE BẬC 5 GIẢI PHƯƠNG TRÌNH GENERALIZED BENJAMIN-BONA- MAHONY-BURGERS

Tóm tắt: Trong bài báo này chúng ta sử dụng phương pháp collocation với cơ sở B – spline bậc 5 giải xấp xỉ phương trình generalized Benjamin – Bona – mahony – Burgers. Sử dụng phương pháp Von – Neumann hệ phương trình sai phân ổn định vô điều kiện. Kết quả số chứng tỏ phương pháp đưa ra hữu hiệu để giải phương trình trên.

Từ khoá: Phương trình GBBMB, spline bậc 5, phương pháp collocation, phương pháp sai phân hữu hạn.

MẠNG QUAN HỆ KHOẢNG THỜI GIAN KHẢ NĂNG VÀ ỨNG DỤNG VÀO VẤN ĐỀ CHẨN ĐOÁN

Hà Đặng Cao Tùng¹

Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Xử lý thông tin có yếu tố thời gian được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực của Trí tuệ nhân tạo. Trong các lĩnh vực đó, chẩn đoán dựa trên mô hình thời gian đóng một vai trò quan trọng và được nhiều nhà nghiên cứu quan tâm ([2], [4], [7], [10]).

Thay vì cách tiếp cận xác suất được trình bày trong [7], bài báo này trình bày cách tiếp cận dựa trên lý thuyết khả năng xử lý quan hệ trên các khoảng thời gian không chắc chắn được giới thiệu trong [8], [9] và ứng dụng vào vấn đề chẩn đoán thông qua khái niệm mạng quan hệ khoảng thời gian khả năng.

Keywords: Temporal Diagnostics, Temporal Scenario, Temporal Relations, Uncertainty, Possibility.

1. GIỚI THIỆU

Chẩn đoán là một trong những lĩnh vực ứng dụng quan trọng của Trí tuệ nhân tạo. Một trong những phương pháp chẩn đoán quan trọng trong y tế thực hành là lập luận với dữ liệu hướng thời gian (time-oriented) [5].

Nhiều quyết định y tế (như chẩn đoán lâm sàng và lập kế hoạch điều trị) dựa trên thông tin thu được từ quá trình theo dõi diễn biến lâm sàng, trong đó thời gian đóng vai trò quan trọng. Thông tin thời gian về sự xuất hiện của các triệu chứng cũng đóng vai trò quan trọng để chẩn đoán chính xác và được sử dụng trong một số hệ chuyên gia chẩn đoán y tế [2] [10].

Trong [7], các tác giả đã sử dụng mạng quan hệ khoảng thời gian xác suất (PrTI hay Probabilistic Temporal Interval Network) để biểu thị một tình huống chẩn đoán y tế. Mạng PrTI là một đồ thị, trong đó, mỗi đỉnh biểu thị một triệu chứng, mỗi cạnh biểu thị một quan hệ thời gian không chắc chắn giữa hai triệu chứng bằng một phân bố xác suất trên tập Ω các quan hệ cơ bản Allen.

¹ Nhận bài ngày 14.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Hà Đặng Cao Tùng; Email: hcdtung@daihocthudo.edu.vn

Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một khái niệm tương tự với mạng PrTI. Đó là mạng PoTI (Possibilistic Temporal Interval Network). Điểm khác biệt so với mạng PrTI là ở chỗ chúng ta sử dụng mô hình khả năng thay cho mô hình xác suất để biểu thị các mối quan hệ thời gian. Việc sử dụng mô hình khả năng trong chẩn đoán xuất phát từ yếu tố chủ quan của các thông tin về các triệu chứng do bệnh nhân cung cấp và yếu tố kinh nghiệm (cũng mang tính chủ quan) của các chuyên gia y tế trong chẩn đoán.

2. MỘT SỐ KHÁI NIỆM

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kí hiệu được sử dụng trong bài báo này, biểu diễn quan hệ không chắc chắn giữa các điểm thời gian, quan hệ không chắc chắn giữa các khoảng thời gian, và khái niệm về khoảng cách giữa hai quan hệ.

Ta biểu thị điểm thời gian bằng các chữ cái nhỏ a, b, và khoảng thời gian bằng các chữ cái lớn A, B. Chúng ta biểu thị mối quan hệ giữa hai điểm thời gian bằng chữ cái r với chỉ số dưới là các điểm thời gian thành phần. Với khoảng thời gian, ta sử dụng kí hiệu tương tự nhưng với chữ cái lớn R.

Giữa các điểm thời gian, có ba quan hệ cơ bản là: "trước" (<), "đồng thời" (=), và "sau" (>). Giữa các khoảng thời gian, có mười ba quan hệ cơ bản được gọi là các quan hệ Allen [1]. Ta kí hiệu tập các quan hệ cơ bản này là $\Omega = \{p, m, o, s, d, f, e, P, M, O, S, D, F\}$. Chúng ta sẽ đề cập đến mỗi phần tử của tập hợp này là $\rho \in \Omega$.

A. Quan hệ thời gian không chắc chắn

Định nghĩa 1. (Quan hệ điểm thời gian không chắc chắn). Một quan hệ không chắc chắn r_{ab} giữa hai điểm thời gian a và b là một vectơ khả năng được chuẩn hoá $\Pi_{ab} = (\pi_{ab}^<, \pi_{ab}^=, \pi_{ab}^>)$, trong đó $\pi_{ab}^<$ (tương ứng $\pi_{ab}^=$ và $\pi_{ab}^>$) là khả năng $a < b$ (tương ứng $a = b$ và $a > b$).

Thuật ngữ "chuẩn hoá" trong định nghĩa được lấy từ lý thuyết khả năng được hiểu là $\max(\pi_{ab}^<, \pi_{ab}^=, \pi_{ab}^>) = 1$. Đôi khi, ta cũng sử dụng kí hiệu r_{ab} thay cho Π_{ab} .

Định nghĩa 2. (Quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn). Cho A và B là hai khoảng thời gian. Một quan hệ không chắc chắn R_{AB} giữa A và B được biểu diễn bởi một phân bố khả năng trên tập mười ba các quan hệ thời gian cơ bản của Allen $\Omega = \{p, m, o, s, d, f, e, P, M, O, S, D, F\}$. Phân bố này được kí hiệu bằng véc tơ $R_{AB} = V_{AB} = (\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f, \pi^e, \pi^P, \pi^M, \pi^O, \pi^S, \pi^D, \pi^F)$, trong đó π^ρ ($\rho \in \Omega$) là giá trị khả năng của quan hệ A(ρ)B.

Hiển nhiên phân bố khả năng phải thoả mãn tính chất chuẩn hoá, nghĩa là,

$$\max(\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f, \pi^e, \pi^P, \pi^M, \pi^O, \pi^S, \pi^D, \pi^F) = 1 \quad (1)$$

Kí hiệu V_{AB} được sử dụng để chỉ biểu diễn véc tơ của quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn. Quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn nhị phân là trường hợp đặc biệt của quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn, trong đó các thành phần của véc tơ V_{AB} chỉ giá trị 0 hoặc 1. Hiển nhiên, để thoả điều kiện chuẩn hoá thì phải có ít nhất $\rho \in \Omega$ sao cho $\pi^p = 1$.

Quan hệ được biểu diễn bởi véc tơ có một thành phần duy nhất bằng 1, các thành phần khác bằng 0 được gọi là quan hệ hoàn toàn chắc chắn và được kí hiệu là TCR (Totally Certain Relation). Quan hệ được biểu diễn bởi véc tơ có tất cả các thành phần bằng 1 được gọi là quan hệ hoàn toàn không chắc chắn và được kí hiệu là TUR (Totally Uncertain Relation).

Cách biểu diễn quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn bằng véc tơ như trong định nghĩa 2 phù hợp với quan niệm trực giác trong mối liên hệ với đại số khoảng của Allen. Tuy nhiên, trong việc định nghĩa các phép toán, biểu diễn này gặp nhiều khó khăn. Chúng ta sẽ sử dụng cách biểu diễn bằng ma trận các quan hệ không chắc chắn giữa các đầu mút của các khoảng thành phần [6].

Định nghĩa 3. (Biểu diễn ma trận của quan hệ không chắc chắn giữa hai khoảng thời gian). Cho $A=[a_1, a_2]$ và $B=[b_1, b_2]$ là hai khoảng thời gian. Một quan hệ không chắc chắn giữa A và B được biểu diễn bởi ma trận 2×2

$$R_{AB} = M_{AB} = \begin{bmatrix} r_{a_1 b_1} & r_{a_1 b_2} \\ r_{a_2 b_1} & r_{a_2 b_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{11}} & (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{12}} \\ (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{21}} & (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{22}} \end{bmatrix}$$

Trong đó, mỗi thành phần của ma trận là một quan hệ không chắc chắn giữa các đầu mút của các khoảng thành phần A và B, nghĩa là, theo định nghĩa 1, chúng phải thoả các ràng buộc chuẩn hoá sau đây:

$$\begin{aligned} \max(\pi_{11}^<, \pi_{11}^=, \pi_{11}^>) &= 1 \\ \max(\pi_{12}^<, \pi_{12}^=, \pi_{12}^>) &= 1 \\ \max(\pi_{21}^<, \pi_{21}^=, \pi_{21}^>) &= 1 \\ \max(\pi_{22}^<, \pi_{22}^=, \pi_{22}^>) &= 1 \end{aligned} \quad (2)$$

Mặt khác, vì $a_1 < a_2$ và $b_1 < b_2$, nên các giá trị khả năng trong công thức trên còn phải thoả mãn các ràng buộc sau:

$$\begin{aligned} \pi_{21}^< &\leq \pi_{11}^<, & \pi_{21}^= &\leq \pi_{11}^=, & \pi_{21}^> &\leq \pi_{11}^>, & \pi_{21}^= &\leq \pi_{22}^=, \\ \pi_{12}^= &\leq \pi_{11}^>, & \pi_{12}^> &\leq \pi_{11}^>, & \pi_{12}^= &\leq \pi_{22}^=, & \pi_{12}^> &\leq \pi_{22}^>, \\ \pi_{11}^< &\leq \pi_{12}^<, & \pi_{11}^= &\leq \pi_{12}^=, & \pi_{22}^< &\leq \pi_{12}^<, & \pi_{22}^= &\leq \pi_{12}^=, \\ \pi_{11}^= &\leq \pi_{21}^>, & \pi_{11}^> &\leq \pi_{21}^>, & \pi_{22}^= &\leq \pi_{21}^=, & \pi_{22}^> &\leq \pi_{21}^>. \end{aligned} \quad (3)$$

Giữa hai cách biểu diễn quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn bằng véc tơ và bằng ma trận, có một phép biến đổi bảo toàn các quan hệ cơ bản như đã được giới thiệu trong [9].

Mệnh đề 1. Nếu M_{AB} là một biểu diễn ma trận của một quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn (thỏa các ràng buộc (2) và (3)) thì các công thức dưới đây là một biểu diễn véc tơ (thỏa điều kiện (1)).

$$\begin{aligned}
 \pi^p &= \pi_{21}^< & \pi^p &= \pi_{12}^> \\
 \pi^m &= \pi_{21}^= & \pi^m &= \pi_{12}^= \\
 \pi^o &= \min(\pi_{11}^<, \pi_{21}^>, \pi_{22}^<) & \pi^o &= \min(\pi_{11}^>, \pi_{12}^<, \pi_{22}^>) \\
 \pi^s &= \min(\pi_{11}^=, \pi_{22}^<) & \pi^s &= \min(\pi_{11}^=, \pi_{22}^>) \\
 \pi^d &= \min(\pi_{11}^>, \pi_{22}^<) & \pi^d &= \min(\pi_{11}^<, \pi_{22}^>) \\
 \pi^f &= \min(\pi_{11}^>, \pi_{22}^=) & \pi^f &= \min(\pi_{11}^=, \pi_{22}^=) \\
 \pi^e &= \min(\pi_{11}^=, \pi_{22}^=) & &
 \end{aligned} \tag{4}$$

Mệnh đề 2. Nếu V_{AB} là một biểu diễn véc tơ của một quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn (thỏa (1)) thì các công thức dưới đây là một biểu diễn ma trận (thỏa (2) và (3)).

$$\begin{cases}
 \pi_{11}^< = \max(\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^d, \pi^f) \\
 \pi_{11}^= = \max(\pi^s, \pi^e, \pi^f) \\
 \pi_{11}^> = \max(\pi^d, \pi^f, \pi^p, \pi^m, \pi^o)
 \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases}
 \pi_{12}^< = \max(\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f, \pi^e, \pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f) \\
 \pi_{12}^= = \pi^m \\
 \pi_{12}^> = \pi^p
 \end{cases} \tag{6}$$

$$\begin{cases}
 \pi_{21}^< = \pi^p \\
 \pi_{21}^= = \pi^m \\
 \pi_{21}^> = \max(\pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f, \pi^e, \pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d, \pi^f)
 \end{cases} \tag{7}$$

$$\begin{cases}
 \pi_{22}^< = \max(\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d) \\
 \pi_{22}^= = \max(\pi^f, \pi^e, \pi^f) \\
 \pi_{22}^> = \max(\pi^p, \pi^m, \pi^o, \pi^s, \pi^d)
 \end{cases} \tag{8}$$

Các phép biến đổi từ ma trận sang véc tơ và từ véc tơ sang ma trận lần lượt được kí hiệu và T^V và T^M .

B. Khoảng cách giữa hai quan hệ thời gian không chắc chắn

Khoảng cách (metric) trên tập X là một hàm số $d: X \times X \rightarrow \mathbf{R}$ (trong đó \mathbf{R} là tập số thực) sao cho với mọi phân tử x, y, z thuộc X , hàm này thỏa mãn các điều kiện sau (các điều kiện này còn được gọi là tiên đề khoảng cách):

1. $d(x, y) \geq 0$

2. $d(x, y) = 0$ nếu và chỉ nếu $x = y$
3. $d(x, y) = d(y, x)$
4. $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$

Trong [7], các tác giả đã định nghĩa khoảng cách giữa hai quan hệ thời gian trong mô hình xác suất là khoảng cách số học giữa hai điểm cân bằng của từng quan hệ, trong đó điểm cân bằng của mỗi quan hệ được tính bằng công thức:

$$BAL(R_{AB}) = \sum_{i=0}^{12} \frac{i}{12} e_{AB}^{\rho_i}$$

Trong đó, $e_{AB}^{\rho_i}$ ($i=0, \dots, 12$) lần lượt là xác suất của các quan hệ cơ bản Allen giữa A và B theo thứ tự $\rho_0=p, \rho_1=m, \rho_2=o, \rho_3=f, \rho_4=D, \rho_5=S, \rho_6=e, \rho_7=s, \rho_8=d, \rho_9=f, \rho_{10}=O, \rho_{11}=M, \rho_{12}=P$. Định nghĩa khoảng cách như trong công thức trên có hai nhược điểm.

Thứ nhất, vì có một hệ số bằng 0 nên hai quan hệ thời gian tương ứng với hai phân bố xác suất khác nhau có thể có cùng một điểm cân bằng. Chẳng hạn, hai quan hệ thời gian xác suất dưới đây có phân bố xác suất hoàn toàn khác nhau nhưng lại có cùng điểm cân bằng là 0.25. Vì vậy, khoảng cách giữa chúng bằng 0. Thí dụ này chứng tỏ công thức đã nêu vi phạm tiên đề thứ hai về khoảng cách.

$$R_1 = \left(\frac{211}{3465}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{6}, 0, \frac{1}{10}, 0, \frac{1}{14}, 0, \frac{1}{18}, 0, \frac{1}{22}, 0 \right)$$

$$R_2 = \left(\frac{31}{80}, 0, \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{8}, 0, \frac{1}{12}, 0, \frac{1}{16}, 0, \frac{1}{20}, 0, \frac{1}{24} \right)$$

Thứ hai, không có cơ sở xác đáng để sắp xếp các quan hệ cơ bản của Allen theo thứ tự này hay theo một thứ tự khác. Trong khi đó, các nhân tử trong công thức có hệ số nhân khác nhau dẫn đến giá trị của điểm cân bằng được tính phụ thuộc vào thứ tự mang tính áp đặt của các quan hệ cơ bản.

Trong mô hình khả năng, ta định nghĩa khoảng cách giữa hai quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn như sau.

Định nghĩa 4. (Khoảng cách giữa hai quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn). Giả sử $R_1 = (\pi_1^p)_{p \in \Omega}$ và $R_2 = (\pi_2^p)_{p \in \Omega}$ là hai quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn, khoảng cách giữa R_1 và R_2 được xác định bởi công thức:

$$d(R_1, R_2) = \sum_{p \in \Omega} |\pi_1^p - \pi_2^p| \quad (9)$$

Hiển nhiên, định nghĩa 3 thỏa mãn các tiên đề khoảng cách. Trong các hệ chuyên gia, khoảng cách này có thể được hiệu chỉnh bởi bộ hệ số $W = (w_p)_{p \in \Omega}$, $w_p > 0$ ($\forall p \in \Omega$), nghĩa là

$$d(R_1, R_2) = \sum_{p \in \Omega} w_p |\pi_1^p - \pi_2^p| \quad (10)$$

3. CƠ CHẾ LẬP LUẬN

Trong phần này, chúng ta trình bày tổng quan về cơ chế suy luận gồm các phép toán nghịch đảo, tổ hợp và hợp thành đã được đề xuất trong [8]. Kí hiệu các phép toán được sử dụng chung cho điểm thời gian và khoảng thời gian. Sự phân biệt các phép toán được thể hiện ở các toán hạng.

A. Các phép toán trên quan hệ điểm thời gian

Các phép toán trên các quan hệ giữa các điểm thời gian dựa trên lý thuyết khả năng đã được Dubois và cộng sự định nghĩa trong [3].

Định nghĩa 5. (Các phép toán trên quan hệ điểm thời gian không chắc chắn).

(i) Nghịch đảo (Inversion) của quan hệ không chắc chắn $r_{ab} = (\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\geq})$ giữa hai điểm thời gian a, b là quan hệ $r_{ba} = \bar{r}_{ab} = (\pi_{ab}^{\geq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\leq})$.

(ii) Tổ hợp (Combination) của nhiều quan hệ không chắc chắn $r_{ab}^i = (\pi_{ab}^{i \leq}, \pi_{ab}^{i \bar{=}}, \pi_{ab}^{i \geq})$ ($i = \overline{1, k}$) là quan hệ $r_{ab} = \oplus_{i=\overline{1, k}}(r_{ab}^i) = (\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\geq})$ trong đó, $\pi_{ab}^{\leq} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \leq})$, $\pi_{ab}^{\bar{=}} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \bar{=}})$, $\pi_{ab}^{\geq} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \geq})$.

(iii) Hợp thành (composition) của quan hệ không chắc chắn $r_{ab} = (\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\geq})$ giữa cặp điểm (a, b) và quan hệ không chắc chắn $r_{bc} = (\pi_{bc}^{\leq}, \pi_{bc}^{\bar{=}}, \pi_{bc}^{\geq})$ giữa cặp điểm (b, c) là quan hệ $r_{ac} = r_{ab} \otimes r_{bc} = (\pi_{ac}^{\leq}, \pi_{ac}^{\bar{=}}, \pi_{ac}^{\geq})$, trong đó, $\pi_{ac}^{\leq} = \max(\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{bc}^{\leq})$, $\pi_{ac}^{\bar{=}} = \max(\pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{bc}^{\bar{=}})$, $\pi_{ac}^{\geq} = \max(\min(\pi_{ab}^{\geq}, \pi_{bc}^{\geq}), \min(\max(\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{bc}^{\leq}), \max(\pi_{ab}^{\geq}, \pi_{bc}^{\geq})))$

Đối với phép tổ hợp trong định nghĩa 5, có thể xảy ra tình huống véc tơ khả năng chưa được chuẩn hoá. Khi đó, ta xét hai trường hợp sau:

a) $0 < \max(\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\geq}) < 1$. Khi đó, véc tơ r_{ab} được chuẩn hoá bằng cách chia cả ba thành phần của nó cho $\max(\pi_{ab}^{\leq}, \pi_{ab}^{\bar{=}}, \pi_{ab}^{\geq})$.

b) $\pi_{ab}^{\leq} = \pi_{ab}^{\bar{=}} = \pi_{ab}^{\geq} = 0$. Khi đó, hai nguồn thông tin không thống nhất và ít nhất một trong hai nguồn đó bị sai, véc tơ tổ hợp sẽ được tính bởi công thức $\pi_{ab}^{\leq} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \leq})$, $\pi_{ab}^{\bar{=}} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \bar{=}})$, $\pi_{ab}^{\geq} = \min_{i=\overline{1, k}}(\pi_{ab}^{i \geq})$.

Trong tình huống này, giá trị khả năng lớn nhất của mỗi quan hệ thành phần được gán cho quan hệ tổ hợp là phương án cho nhiều thông tin nhất.

B. Các phép toán trên quan hệ khoảng thời gian

Phép nghịch đảo xác định quan hệ R_{BA} khi biết quan hệ R_{AB} .

Định nghĩa 6. (Phép toán nghịch đảo trên quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn). Giả sử A và B là hai khoảng thời gian và R_{AB} là quan hệ giữa hai khoảng thời gian đó.

$$R_{AB} = \begin{bmatrix} r_{a_1 b_1} & r_{a_1 b_2} \\ r_{a_2 b_1} & r_{a_2 b_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{11}} & (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{12}} \\ (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{21}} & (\pi^<, \pi^=, \pi^>)_{r_{22}} \end{bmatrix}$$

Khi đó, quan hệ nghịch đảo của quan hệ R_{AB} là quan hệ R_{BA} được tính bởi công thức sau:

$$\tilde{R}_{AB} = R_{BA} = \begin{bmatrix} r_{b_1 a_1} & r_{b_1 a_2} \\ r_{b_2 a_1} & r_{b_2 a_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\pi^>, \pi^=, \pi^<)_{r_{11}} & (\pi^>, \pi^=, \pi^<)_{r_{12}} \\ (\pi^>, \pi^=, \pi^<)_{r_{21}} & (\pi^>, \pi^=, \pi^<)_{r_{22}} \end{bmatrix}$$

Định nghĩa 7. (Phép toán tổ hợp trên quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn). Giả sử A và B là hai khoảng thời gian và có nhiều nguồn thông tin xác định quan hệ giữa A và B, được cho bởi các quan hệ R_{AB}^i ($i = \overline{1, k}$).

$$R_{AB}^i = \begin{bmatrix} r_{a_1 b_1}^i & r_{a_1 b_2}^i \\ r_{a_2 b_1}^i & r_{a_2 b_2}^i \end{bmatrix}$$

Khi đó, quan hệ R_{AB} , tổ hợp k quan hệ R_{AB}^i sẽ được tính bởi công thức:

$$R_{AB} = \oplus_{i=\overline{1, k}} (R_{AB}^i) = \begin{bmatrix} \oplus_{i=\overline{1, k}} (r_{a_1 b_1}^i) & \oplus_{i=\overline{1, k}} (r_{a_1 b_2}^i) \\ \oplus_{i=\overline{1, k}} (r_{a_2 b_1}^i) & \oplus_{i=\overline{1, k}} (r_{a_2 b_2}^i) \end{bmatrix}$$

Định nghĩa 8. (Phép toán hợp thành trên quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn). Giả sử $A=[a_1, a_2]$, $B=[b_1, b_2]$, $C=[c_1, c_2]$ là những khoảng thời gian và R_{AB} và R_{BC} là những quan hệ lần lượt giữa A, B và B, C.

$$R_{AB} = \begin{bmatrix} r_{a_1 b_1} & r_{a_1 b_2} \\ r_{a_2 b_1} & r_{a_2 b_2} \end{bmatrix}, R_{BC} = \begin{bmatrix} r_{b_1 c_1} & r_{b_1 c_2} \\ r_{b_2 c_1} & r_{b_2 c_2} \end{bmatrix}$$

Khi đó, quan hệ R_{AC} giữa A, C, hợp thành của hai quan hệ R_{AB} và R_{BC} sẽ được tính bởi công thức:

$$R_{AC} = \begin{bmatrix} r_{a_1 c_1} & r_{a_1 c_2} \\ r_{a_2 c_1} & r_{a_2 c_2} \end{bmatrix}$$

trong đó, với $i, j = 1, 2$,

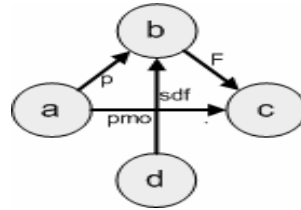
$$r_{a_i c_j} = (r_{a_i b_1} \otimes r_{b_1 c_j}) \oplus (r_{a_i b_2} \otimes r_{b_2 c_j})$$

Các phép toán trên biểu diễn véc tơ được định nghĩa thông qua các phép chuyển T^M và T^V .

4. TẠO LẬP KỊCH BẢN THỜI GIAN

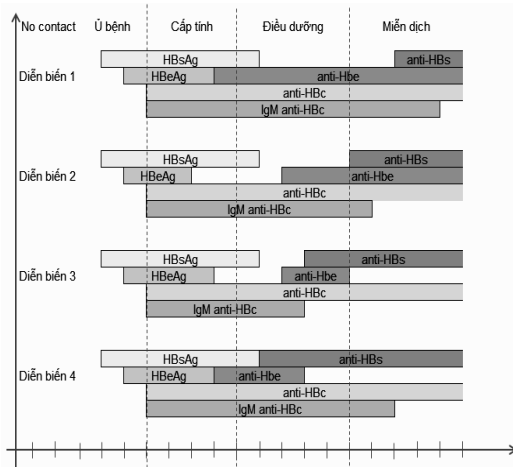
Trong phần này, chúng ta đề xuất một cách tạo ra các kịch bản thời gian không chắc chắn từ một số mạng quan hệ khoảng thời gian cho trước sử dụng cơ chế lập luận được trình bày trong mục III.

Ta biểu diễn mạng quan hệ thời gian không chắc chắn bằng một đồ thị có hướng, trong đó mỗi đỉnh biểu thị một sự kiện, mỗi cung biểu thị một quan hệ thời gian giữa các sự kiện này. Hình 1 minh họa một mạng thời gian không chắc chắn.

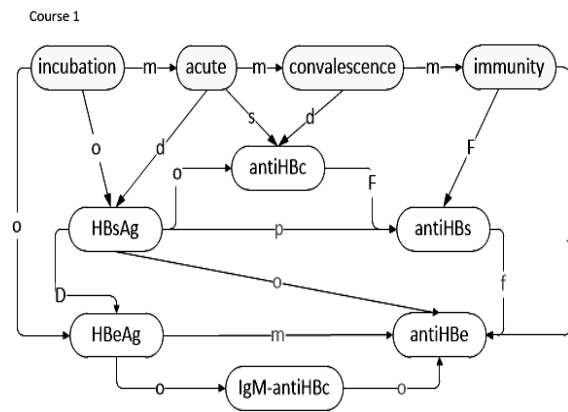


Hình 1. Một mạng quan hệ thời gian không chắc chắn

Thí dụ. Một trong những thí dụ điển hình về chẩn đoán sử dụng mạng thời gian là HEPAXPERT, một hệ chuyên gia giải thích tự động kết quả xét nghiệm huyết thanh bệnh viêm gan A và B của Adlassnig và Horak [11]. Trong HEPAXPERT, bệnh viêm gan B có bốn diễn biến khác nhau (hình 2a), quy định những liệu pháp điều trị khác nhau. Hình 2b minh họa việc biểu diễn một diễn biến của bệnh viêm gan B bằng mạng quan hệ thời gian giữa các dấu hiệu virus dương tính theo diễn biến đó.



a) Bốn diễn biến điển hình của bệnh viêm gan B



b) Mạng quan hệ thời gian diễn biến 1 của bệnh viêm gan B

Hình 2. Biểu diễn một diễn biến của bệnh viêm gan B bằng mạng quan hệ thời gian

Xét k mạng quan hệ thời gian không chắc chắn N_1, N_2, \dots, N_k ; k mạng này có chung tập sự kiện $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ nhưng mỗi mạng có tập quan hệ khác nhau $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \dots, \mathcal{R}_k$, trong đó, quan hệ thời gian giữa hai đỉnh v_i và v_j của \mathcal{R}_g ($g = \overline{1, k}$) được kí hiệu là R_{ij}^g . Hiển nhiên, bằng cách áp dụng phép toán nghịch đảo, nếu $R_{ij}^g \in \mathcal{R}_g$ thì R_{ji}^g cũng $\in \mathcal{R}_g$.

Ta gọi mạng S quan hệ khoảng thời gian không chắc chắn có tập đỉnh được xác định bởi chính tập hợp $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ và tập quan hệ là $\mathcal{R} = \mathcal{R}_1 \cup \mathcal{R}_2 \cup \dots \cup \mathcal{R}_k$ là một kịch bản (scenario) được xây dựng từ các mạng N_1, N_2, \dots, N_k . Hình 3 minh họa cho kịch bản được xây dựng từ hai mạng.

Chú ý rằng, ta chỉ cần xác định véc tơ khả năng của những quan hệ thời gian R_{ij} giữa hai đỉnh v_i và v_j mà có ít nhất một mạng thành phần N_g ($g = \overline{1, k}$) chứa quan hệ này, nghĩa là $R_{ij}^g \in \mathcal{R}_g$.

Trong kịch bản S , mỗi quan hệ của \mathcal{R} được tính bằng cách tổ hợp các quan hệ giữa các cặp đỉnh tương ứng trong mỗi \mathcal{R}_g ($g = \overline{1, k}$). Thuật toán xây dựng kịch bản được mô tả trong hình 3.

Vào: Tập các đỉnh $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$,

Các tập quan hệ thời gian $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \dots, \mathcal{R}_k$.

Ra: Tập hợp quan hệ \mathcal{R} của kịch bản.

Phương pháp:

1. **For** $i:=1$ **to** $n-1$ **do**
2. **For** $j:=i+1$ **to** n **do**
3. **If** $(R_{ij}^1 \in \mathcal{R}_1)$ **or** $(R_{ij}^2 \in \mathcal{R}_2)$ **or**... **or** $(R_{ij}^k \in \mathcal{R}_k)$
4. **then Begin**
5. **For** $g:=1$ **to** k **do**
6. Reasoning(R_{ij}^g, \mathcal{R}_g);
7. $R_{i,j} := \bigoplus_{g=\overline{1,k}} (R_{ij}^g)$
8. **End**

Hình 3. Thuật toán sinh kịch bản thời gian

Trong thuật toán, thủ tục Reasoning ở dòng 6 được thực hiện bằng cách xác định đường đi ngắn nhất $P = v'_1, v'_2, \dots, v'_m$ (độ dài đường đi được tính bằng số cung đi qua) từ v_i đến v_j theo thuật toán Dijkstra cho mạng N_g . Đường đi ngắn nhất từ v_i đến v_j là $v_i \rightarrow v'_1 \rightarrow v'_2 \rightarrow \dots \rightarrow v'_m \rightarrow v_j$. Khi đó, xảy ra ba khả năng sau:

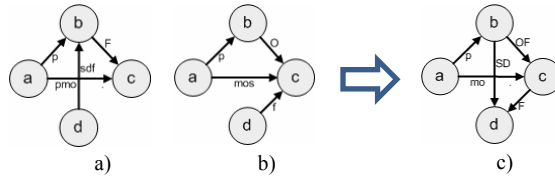
(i) Nếu P không xác định (không có đường đi giữa hai đỉnh) thì R_{ij}^g được gán bằng TUR.

(ii) Nếu $P=\emptyset$ thì $R_{ij}^g \in \mathcal{R}_g$ là quan hệ đã có.

(iii) Nếu $P \neq \emptyset$ thì R_{ij}^g được tính nhờ phép toán hợp thành của các quan hệ giữa những cặp đỉnh kề nhau trên đường đi và các phép chuyển đổi giữa véc tơ và ma trận.

Thí dụ. Giả sử a, b, c, d là các triệu chứng của một căn bệnh mà diễn biến lâm sàng được mô tả bằng quan hệ thời gian giữa các triệu chứng đó.

Dựa trên diễn biến lâm sàng của những trường hợp đã được xác định là nhiễm bệnh như được minh hoạ trong hình 4a và hình 4b, kịch bản như hình 4c được sinh ra bằng thuật toán nêu trên được sử dụng để đặc trưng căn bệnh.



Hình 4. Kịch bản được sinh ra từ hai mạng

Trong thí dụ, quan hệ giữa hai triệu chứng a và d không được sinh ra trong kịch bản vì nó không xuất hiện trong các mạng thành phần; quan hệ R_{bd} giữa b và d được tổ hợp từ (SDF) trong mạng 1 và kết quả hợp thành $(O) \otimes (F) = (OSD)$ trong mạng 2 để thu được $R_{bd} = (SD)$ trong kịch bản; ...

5. NHẬN DẠNG KỊCH BẢN THỜI GIAN

Trong [4], khi nghiên cứu về bệnh viêm gan B, các tác giả đã trình bày bốn diễn biến lâm sàng của bệnh này với biểu hiện dương tính của các kháng nguyên và kháng thể. Mỗi diễn biến lâm sàng có thời gian ủ bệnh, phát bệnh, điều trị và miễn dịch khác nhau và có thể có phác đồ điều trị khác nhau. Vì vậy, việc nhận dạng một trường hợp nhiễm bệnh thuộc vào diễn biến nào là cần thiết đối với việc điều trị.

Xét một mạng quan hệ thời gian N và một kịch bản S được xác định bởi cùng một tập hợp các đỉnh $V = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ và tập hợp các quan hệ tương ứng \mathcal{R}_N và \mathcal{R}_S . Quan hệ R_{ij}^N giữa hai đỉnh v_i và v_j trong \mathcal{R}_N là một phân bố khả năng trên tập những quan hệ thời gian cơ bản của Allen giữa hai triệu chứng được biểu thị bằng các đỉnh v_i và v_j . Tương tự, R_{ij}^S được sử dụng để kí hiệu quan hệ giữa v_i và v_j trong \mathcal{R}_S .

Ta giả định rằng hai tập hợp \mathcal{R}_N và \mathcal{R}_S bằng nhau ở mức kí hiệu, nghĩa là nếu tập hợp này có chứa một quan hệ giữa hai đỉnh v_i và v_j thì tập hợp kia cũng thế mặc dù giá trị của R_{ij}^N và R_{ij}^S có thể khác nhau.

Chỉ quan tâm đến các quan hệ mà không chú ý tới các đỉnh đầu cuối của chúng, ta kí hiệu các quan hệ này là R_i^N, R_i^S ($i = \overline{1, m}$). Khi đó, khoảng cách giữa N và S được tính bằng công thức

$$D(N, S) = \sum_{i=1}^m d(R_i^N, R_i^S) \quad (11)$$

Trong hệ chuyên gia, căn cứ vào mức độ quan trọng của mỗi quan hệ thời gian giữa một số cặp triệu chứng, người ta sử dụng các hệ số điều chỉnh $(z_i)_{i=1, \dots, m}$, $z_i > 0$ ($\forall i$). Khi đó, công thức (11) có dạng:

$$D(N, S) = \sum_{i=1}^m [z_i d(R_i^N, R_i^S)] \quad (12)$$

Tương tự như đã thực hiện trong [7], với một mạng quan hệ khoảng thời gian N ứng với một trường hợp bệnh lí và một số kịch bản S_1, \dots, S_n tương ứng với những diễn biến lâm sàng đã biết, người ta xét khoảng cách giữa N với các kịch bản đó $D(N, S_1), D(N, S_2), \dots, D(N, S_n)$. Diễn biến lâm sàng với kịch bản có khoảng cách tới mạng N nhỏ nhất sẽ được chẩn đoán, làm cơ sở cho việc xác định phương án điều trị.

6. KẾT LUẬN

Trong bài báo này chúng ta đề xuất cách tiếp cận khả năng cho việc ứng dụng phương pháp xử lí các quan hệ thời gian không chắc chắn vào vấn đề chẩn đoán y tế thông qua khái niệm mạng quan hệ khoảng thời gian khả năng. Cách tiếp cận này mở ra cơ hội đưa các ý kiến chuyên gia vào trong các kết luận chẩn đoán tự động thay vì chỉ dựa trên mô hình xác suất như được sử dụng trong HEPAXPERT.

Một mạng quan hệ khoảng thời gian với những yếu tố không chắc chắn được biểu diễn và lập luận dựa trên lí thuyết khả năng được sử dụng để mô tả diễn biến lâm sàng với các triệu chứng và các mối quan hệ thời gian giữa chúng. Bài báo đã trình bày phương pháp kết hợp một số mạng có cùng một tập hợp các triệu chứng thành một kịch bản thời gian. Hơn nữa, có thể đối sánh một mạng quan hệ mô tả diễn biến lâm sàng cụ thể với một số kịch bản bằng cách sử dụng khái niệm khoảng cách giữa mạng và kịch bản.

Một số kiểm chứng với dữ liệu giả định cho thấy phương pháp đề xuất là hợp lí. Việc thí nghiệm với bộ dữ liệu y tế thực sự, chẳng hạn trong việc chẩn đoán lâm sàng cho bệnh viêm gan B dựa trên các xét nghiệm huyết thanh được coi là một trong những hướng nghiên cứu tiếp theo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. J.F. Allen, "Maintaining knowledge about temporal intervals", *Comm. ACM* 26 (1983) 832–843.
2. L. Console, A. J. Rivolin, D. T. Dupr'e, P. Torasso (1989), "Integration of Causal and Temporal Reasoning in Diagnostic ProblemSolving". In: *Proceedings of the 9th International Workshop on Expert Systems and Their Applications*.

3. Dubois D., HadjAli A., Prade H., (2007), "A Possibility Theory–Based Approach to the Handling of Uncertainty Relations between Temporal Points". *International Journal Of Intelligent Systems (IJIS)*, Vol. 22, pp.157-179.
4. J. Gamper and W. Nejdl (1997), "Abstract Temporal Diagnosis in Medical Domains". *Artificial Intelligence in Medicine*, 10(3), pp.209-234.
5. John H. Nguyen, Yuval Shahar, Samson W., Amar K. D., Mark A. M., (1999), "Integration of Temporal Reasoning and Temporal-Data Maintenance into a Reusable Database Mediator to Answer Abstract, Time-Oriented Queries: The Tzolkin System". *Journal of Intelligent Information Systems 13*, pp.121-145.
6. V. Ryabov (2002), "Handling Uncertain Interval Relations", In: *Proceedings of the 2-nd IASTED International Conference on AI and Applications*, ACTA Press, pp.291-296.
7. V. Terziyan, V. Ryabov (2003), "Abstract Diagnostics Based on Uncertain Temporal Scenarios", In: M. Mohammadian (ed.), *Proceedings of the International Conference on Computational Intelligence for Modelling Control and Automation (CIMCA-2003)*, February 12-14, Vienna, Austria, pp.327-337.
8. Hà Đăng Cao Tùng (2011), "Tiếp cận dựa trên lý thuyết khả năng xử lý quan hệ không chắc chắn giữa các khoảng thời gian", *Đặc san Khoa học*, trường Đại học Sư phạm Hà Nội 56, tr.81-90.
9. Hà Đăng Cao Tùng (2013), "Transformation between possibilistic representations of time interval relations". *Tạp chí Khoa học và Công nghệ*, tập 51, số 4A.
10. Hamlet, J. Hunter (1987), "A Representation of Time for Medical Expert Systems", *Lecture Notes in Medical Informatics*, Vol. 33, pp.112-119.
11. K.-P. Adlassnig and W. Horak (1995), "Development and retrospective evaluation of HEPAXPERT-I: a routinely-used expert system for interpretive analysis of hepatitis A and B serological findings", *Artificial Intelligence in Medicine* 7 (1995) 1–24.

THE POSSIBILITY TEMPORAL INTERVALS NETWORK AND IT'S APPLICATION IN DIAGNOSIS

Abstract: *Dealing with temporal information is applied in many areas of artificial intelligence. As a specific case, the temporal model-based diagnosis plays an important role in the applications to medical domains and is interested by many researchers ([2], [4], [7], [10]). Instead of the probabilistic approach is presented in [7], this paper presents an approach basing on the possibility theory for representing and reasoning on uncertain relations between temporal intervals as introduced in [8], [9] and it's application for resolving the diagnosis problems through the possibility temporal intervals network.*

Keywords: *Temporal diagnostics, temporal scenario, temporal relations, uncertainty, possibility.*

DECAYS OF HIGGS IN RANDALL - SUNDRUM MODEL

Dang Van Soa¹⁽¹⁾, Dao Thi Le Thuy², Bui Thi Ha Giang²

¹Hanoi Metropolitan University

²Hanoi National University of Education

Abstract: In this paper, the decay widths of the Higgs under different channels in Randall - Sundrum model are studied in detail. The results showed that the decay width depends strongly on the mass of radion. This suggests that the existence of radion in the Randall - Sundrum model is necessary.

Keywords: Higgs boson, Randall-Sundrum model, decay width.

1. INTRODUCTION

In 1999, Randall and Sundrum proposed a 5-dimensional model for solving the gauge hierarchy problem [1,2]. The Randall – Sundrum (RS) model allows for a natural generation of Planck-weak and fermion mass hierarchies [3]. Goldberger and Wise have proposed an attractive mechanism to stabilize the distance between two branes introducing a bulk scalar field which has scalar potentials on both branes [2]. In RS model, the extra dimension is assumed to be located on a S^1 / Z_2 orbifold, which has two fixed points, $\phi = 0$ and $\phi = \pi$. They correspond to the high energy brane and the brane we live on, respectively. Graviton is the only particle propagating through the bulk between these two branes [4]. The space-time metric is given by:

$$ds^2 = e^{-2ky} \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - dy^2, \quad (1)$$

where x^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$), y and k denote the coordinate of 4D space-time, that of a fifth dimension, and the AdS_5 curvature, respectively. The Minkowski metric is $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ and e^{-2ky} is called a warp factor [1,2]. In four dimensional effective theory of RS model, there are two new particles beyond the Standard model. One

⁽¹⁾ Nhận bài ngày 8.8.2016; gửi phản biện và duyệt đăng ngày 15.9.2016
Liên hệ tác giả: Đặng Văn Soa; Email: dvsoa@daihocthudo.edu.vn

is a spin-2 graviton and a scalar-field radion ϕ which is metric fluctuation along the extra dimension.

Having determined the vacuum structure of the model, we discuss the possibility of mixing between gravity and electroweak sector. The gravity-scalar mixing is described by the following action [5, 6, 7]

$$S_\xi = -\xi \int d^4x \sqrt{-g_{\text{vis}}} R(g_{\text{vis}}) \hat{H}^+ \hat{H}, \quad (2)$$

Where $R(g_{\text{vis}})$ is the Ricci scalar for the metric induced on the visible brane, $g_{\text{vis}}^{\mu\nu} = \Omega_b^2(x)(\eta^{\mu\nu} + \varepsilon h^{\mu\nu})$. \hat{H} is the Higgs field in the 5D context before rescaling to canonical normalization on the brane. The parameter ξ denotes the size of the mixing term [1-10]. With $\xi \neq 0$, neither a pure Higgs boson nor pure radion mass eigenstate.

We define the mixing angle θ by:

$$\tan 2\theta = 12\gamma\xi Z \frac{m_{h_0}^2}{m_{\phi_0}^2 - m_{h_0}^2 (Z^2 - 36\xi^2\gamma^2)}. \quad (3)$$

Where:

$$Z^2 \equiv 1 + 6\xi\gamma^2(1 - 6\xi) \equiv \beta - 36\xi^2\gamma^2, \gamma = v_0 / \Lambda_\phi. \quad (4)$$

In terms of these quantities, the new fields h and ϕ are the states that diagonalize the kinetic energy and have canonical normalization with:

$$h_0 = \left(\cos\theta - \frac{6\xi\gamma}{Z} \sin\theta\right)h + \left(\sin\theta + \frac{6\xi\gamma}{Z} \cos\theta\right)\phi \equiv dh + c\phi, \quad (5)$$

$$\phi_0 = -\cos\theta \frac{\phi}{Z} + \sin\theta \frac{h}{Z} \equiv a\phi + bh. \quad (6)$$

The corresponding mass-squared eigenvalues are [11]

$$m_{h,\phi}^2 = \frac{1}{2Z^2} \left(m_{\phi_0}^2 + \beta m_{h_0}^2 \pm \sqrt{[m_{\phi_0}^2 + \beta m_{h_0}^2]^2 - 4Z^2 m_{\phi_0}^2 m_{h_0}^2} \right). \quad (7)$$

When $\xi \neq 0$, there are four independent parameters that must be specified to fix the state mixing parameters a, b, c, d of Eqs. (5) and (6) defining the mass eigenstates

$$\Lambda_\phi, m_h, m_\phi, \xi. \quad (8)$$

We consider the case of $\Lambda_\phi = 5\text{TeV}$ and $\frac{m_0}{M_P} = 0.1$, which makes the radion stabilization model most natural [12].

The search experiments of the Higgs boson at the LHC give stringent constraints on the parameters of the radion (a radion mass m_ϕ and a scale parameter Λ_ϕ). The recently discovered 125 GeV scalar at the LHC Run-I [13, 14], behaves like the SM Higgs boson and this fixes the last free parameter of the SM Lagrangian [15].

In this paper, we study the decay channels of Higgs. This paper is organised as follows. In Sec.II, we briefly review the interactions of Higgs to SM fields. In Sec.III, the widths of the Higgs decay channels and our numerical results are shown. Sec.IV is devoted to summary and discussion.

2. INTERACTIONS

We turn to the important interactions of the h , ϕ and $h_{\mu\nu}^n$. We begin with the gg couplings of the h and ϕ . The h_0 has standard gg or fermionic coupling and the ϕ_0 has ZZ or fermionic coupling from interaction $-\frac{\phi_0}{\Lambda_\phi} T_\mu^\mu$ using the Yukawa interaction contributions of T_μ^μ . The results are obtained by:

$$\bar{g}_{ggh} = C_g \delta^{ab} [(k_1 k_2) \eta^{\mu\nu} - k_1^\nu k_2^\mu], \quad (9)$$

$$\bar{g}_{\gamma\gamma h} = C_\gamma [(k_1 k_2) \eta^{\mu\nu} - k_1^\nu k_2^\mu], \quad (10)$$

$$\bar{g}_{eeh} = -\frac{g}{2} \frac{m_e}{m_W} (d + \gamma b), \quad (11)$$

where g and c_W denote the SU(2) gauge coupling and cosine of the Weinberg angle, respectively. There,

$$C_g = -\frac{\alpha_s}{4\pi v} [(d + \gamma b) \sum_i F_{1/2}(\tau_i) - 2b_3 \gamma a],$$

$$C_\gamma = -\frac{\alpha_s}{2\pi v} [(d + \gamma b) \sum_i e_i^2 N_c^i F_1(\tau_i) - (b_2 + bY) \gamma a]$$

3. DECAY OF HIGGS

We calculate the decay widths of the Higgs to the SM particles as follows:

$$\Gamma(h \rightarrow gg) = \frac{1}{32\pi} \frac{(-\alpha_s^2)}{(4\pi v_0)^2} m_h^3 (-2b_3 \gamma b)^2, \quad (12)$$

$$\Gamma(h \rightarrow \gamma\gamma) = \frac{1}{32\pi} \frac{(\alpha^2)}{(2\pi v_0)^2} m_h^3 (b_2 + b_Y)^2 (\gamma b)^2, \quad (13)$$

$$\Gamma(h \rightarrow e^+e^-) = \frac{m_e^2}{32\pi m_W^2} \frac{g^2}{m_h} (d + \gamma b)^2 (m_h^2 - 4m_e^2), \quad (14)$$

$$\Gamma(h \rightarrow \mu^+\mu^-) = \frac{m_\mu^2}{32\pi m_W^2} \frac{g^2}{m_h} (d + \gamma b)^2 (m_h^2 - 4m_\mu^2), \quad (15)$$

$$\Gamma(h \rightarrow b\bar{b}) = \frac{m_b^2}{32\pi m_W^2} \frac{g^2}{m_h} (d + \gamma b)^2 (m_h^2 - 4m_b^2). \quad (16)$$

Using the parameters shown in Section I, we evaluate the widths of the Higgs decay channels dependence on the mass radion m_ϕ in Fig.1. The mass range is chosen as $10\text{GeV} \leq m_\phi \leq 100\text{GeV}$. The dominant decay mode is $h \rightarrow b\bar{b}$. The widths of the decay in $h \rightarrow gg$ and $h \rightarrow \gamma\gamma$ channel increase when the mass radion increases. The widths of decay in $h \rightarrow b\bar{b}$, $h \rightarrow e^+e^-$, $h \rightarrow \mu^+\mu^-$ channels change slowly when the mass radion increases.

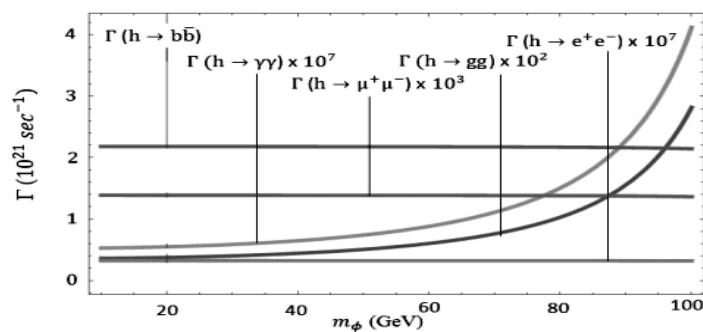


Figure 1. The widths of the Higgs decay channels as the function of the mass radion m_ϕ

4. CONCLUSION

We have studied the decay channels of Higgs. The result shows that the $h \rightarrow b\bar{b}$ mode dominates over the other channels. The decay width depends strongly on the mass of radion, in which interactions are similar.

REFERENCES

1. L. Randall and R. Sundrum (1999), *Phys. Rev. Lett.* 83, 3370, arxiv: hep-ph/9905221.
2. L. Randall and R. Sundrum (1999), *Phys. Rev. Lett.* 83, 4690, arxiv: hep-ph/9906064.
3. W. D. Goldberger and M. B. Wise (1999), *Phys. Rev. Lett.* 83, 4962, arxiv: hep-ph/9907447.
4. S. A. Li, C. S. Li, H. T. Li and J. Gao (2015), "Constraints on Randall-Sundrum model from the events of dijet production with QCD next-to-leading order accuracy at the LHC", [arXiv:1408.2762v2 [hep-ph]].
5. J.J. Van der Bij (1994), *Acta Phys. Podon*, B 25, 827.
6. R. Raczka, M. Pawlowski (1994), *Found. Phys.* 24, 1305.
7. G. F. Giudice, R. Rattazzi and J. D. Wells (2001), "Graviscalars from higher dimensional metrics and curvature Higgs mixing", *Nucl. Phys. B* 595, 250 [hep-ph/0002178].
8. D. V. Soa, D. T. L. Thuy, N. H. Thao and T. D. Tham (2012), *Mod. Phys. Lett. A*, Vol.27, N₀.2, 1250126.
9. M. Chaichain, A. Datta, K Huitu and Z. Yu (2002), *Phys. Lett. B* 524, 161.
10. K. Cheung, C. S. Kim and J. -h. Song, (2003), "A Probe of the radion Higgs mixing in the Randall-Sundrum model at $e^+ e^-$ colliders," *Phys. Rev. D* 67, 075017, [hep-ph/0301002].
11. T. Han, G. D. Kribs and B. McElrath, (2001), *Phys. Rev. D* 63, 076003.
12. H. Davoudiasl, J. L. Hewett and T. G. Rizzo (2001), *Phys. Rev. D* 63, 075004.
13. ATLAS Collaboration, G. Aad et al (2012), *Phys. Lett. B* 716, 1-29, arxiv: hep-ph/1207.7214.
14. CMS Collaboration, S. Chatrchyan et. Al (2012), *Phys. Lett. B* 716, 30-31, arxiv: hep-ph/1207.7235.
15. Goutam Das, Prakash Mathews (2015), *Phys. Rev. D* 92, 094034.

QUÁ TRÌNH PHÂN RÃ HIGGS TRONG MÔ HÌNH RANDALL - SUNDRUM

Tóm tắt: Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu chi tiết quá trình rã Higgs boson thành các cặp $gg, \gamma\gamma, e^+e^-, \mu^+\mu^-, b\bar{b}$. Cụ thể, chúng tôi đã tính được biểu thức giải tích của độ rộng phân rã và sau đó khảo sát sự phụ thuộc độ rộng phân rã theo khối lượng của radion. Kết quả thu được cho thấy, đối với quá trình rã Higgs thành $gg, \gamma\gamma$ thì độ rộng phân rã tăng khi khối lượng radion tăng. Còn đối với quá trình rã Higgs thành $e^+e^-, \mu^+\mu^-, b\bar{b}$ thì độ rộng thay đổi không đáng kể khi khối lượng radion thay đổi. Độ rộng phân rã thu được là lớn nhất đối với quá trình rã $h \rightarrow b\bar{b}$.

Từ khoá: Higgs boson, mô hình Randall-Sundrum, độ rộng phân rã.

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.
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 phần 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 odelling 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