

TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUY NHƠN
QUY NHON UNIVERSITY

TẠP CHÍ KHOA HỌC
JOURNAL OF SCIENCE

CHUYÊN SAN KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ KỸ THUẬT
ISSUE: NATURAL SCIENCES AND ENGINEERING

13 (5)

2019

BÌNH ĐỊNH, 10/2019

MỤC LỤC

1. Ước lượng trạng thái vận hành lưới điện tỉnh Bình Định
Nguyễn Xuân Thâm, Lê Tuấn Hộ6
2. Ước lượng trạng thái vận hành lưới điện sử dụng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát
Lê Tuấn Hộ18
3. Dáng điệu tiệm cận của tập đạt được trong hệ điều khiển nhiều kì dị
Nguyễn Ngọc Quốc Thương28
4. Một kỹ thuật xây dựng tập dữ liệu huấn luyện dựa trên tiếp cận gom cụm
Lê Thị Kim Nga, Đinh Thị Mỹ Cảnh41
5. Một số đặc điểm sinh học của cá bóng trứng (*Eleotris melanosoma*) phân bố tại đầm Thị Nại, tỉnh Bình Định
Đỗ Thị Xuân Trừ, Võ Văn Chí50
6. Bước đầu nghiên cứu ảnh hưởng của lá cây lược vàng *Callisia fragrans* bổ sung trong khẩu phần ăn đến khả năng sinh trưởng của thỏ trắng New Zealand nuôi nhốt tại thành phố Quảng Ngãi, tỉnh Quảng Ngãi
Lê Thị Lương Vân, Trần Thanh Sơn58
7. Đánh giá tiềm năng sinh khối tại Bình Định
Đinh Quốc Việt, Huỳnh Văn Nam, Trương Thanh Tâm, Văn Đình Sơn Thọ67
8. Nghiên cứu ảnh hưởng của nhóm thế đến tương tác và độ bền của phức giữa CO_2 và CH_3OCHX_2 ($X = H, F, Cl, Br, CH_3$)
Phạm Thị Hòa, Phan Đặng Cẩm Tú, Nguyễn Tiến Trung75
9. Nghiên cứu lý thuyết sự hấp phụ các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen lên bề mặt rutile- TiO_2 (110) sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ
Huỳnh Thị Mỹ Phúc, Nguyễn Ngọc Trí, Nguyễn Tiến Trung86

10. Ảnh hưởng của phân hữu cơ vi sinh đến một số chỉ tiêu sinh hóa, năng suất và phẩm chất của cây bí ngòi Hàn Quốc (Korean zucchini) trồng tại thành phố Kon Tum
Võ Minh Thứ, Nguyễn Thị Y Thanh, Nguyễn Thọ Đức.....96

State estimation of Binh Dinh power system

Nguyen Xuan Tham¹, Le Tuan Ho^{1,*}

¹*Faculty of Engineering and Technology, Quy Nhon University*

Received: 03/07/2019; Accepted: 03/08/2019

ABSTRACT

Nowadays, SCADA/EMS is integrated into modern power systems in order to supervise, measure, collect data and control the remote devices at the automation stations. However, these collected state data from measurement devices always have some specific errors. Therefore, the main purpose of this paper is to implement the power system state estimation algorithm by using weighted least square method. This algorithm was proposed to estimate the operating status parameter of Binh Dinh transmission power system by using Matlab software. The final results were compared with the practical parameter collected data from SCADA/EMS system.

Keywords: *Binh Dinh power system, weighted least square method, state estimation.*

*Corresponding author.

Email: tuanhole@qnu.edu.vn

Ước lượng trạng thái vận hành lưới điện tỉnh Bình Định

Nguyễn Xuân Thâm¹, Lê Tuấn Hộ^{1,*}

¹Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 03/07/2019; Ngày nhận đăng: 03/08/2019

TÓM TẮT

Ngày nay, hầu hết các hệ thống điện hiện đại sử dụng hệ thống tích hợp SCADA/EMS để giám sát, đo đạc, thu thập dữ liệu và điều khiển các thiết bị tại các trạm không có người trực. Tuy nhiên, các thông số trạng thái vận hành thu thập được tại các trung tâm này từ các thiết bị đo luôn có những sai số nhất định. Vì vậy, mục tiêu của bài báo này là nghiên cứu và xây dựng thuật toán ước lượng trạng thái hệ thống điện sử dụng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số. Thuật toán này được áp dụng để ước lượng các thông số trạng thái vận hành của lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định bằng cách sử dụng phần mềm Matlab. Các kết quả ước lượng của mô đun và góc pha điện áp được so sánh với các thông số thực tế thu thập được từ hệ thống SCADA/EMS.

Từ khóa: Lưới điện tỉnh Bình Định, phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số, ước lượng trạng thái.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hệ thống điện đóng một vai trò rất quan trọng trong sự phát triển của nền kinh tế và đảm bảo an ninh của Quốc gia. Vì vậy, đảm bảo chất lượng điện năng là một việc được chú trọng trong công tác vận hành hệ thống điện, đặc biệt là hệ thống truyền tải điện. Trung tâm điều khiển từ xa là nơi thực hiện các chức năng như giám sát, đo đạc, thu thập các dữ liệu và điều khiển các thiết bị tại các trạm không có người trực. Do đó, thu thập các thông số của trạng thái vận hành yêu cầu phải có độ chính xác cao đảm bảo độ tin cậy và an toàn trong suốt quá trình vận hành.

Các thông tin này được đo đạc thông qua hệ thống SCADA tại các trung tâm điều khiển từ xa theo quy trình như Hình 1. Trong đó, CT (current transformer) là máy biến dòng điện, IED (Intelligent electronic device), và EMS (energy management system) là hệ thống quản lý năng lượng. Hệ thống SCADA thường được

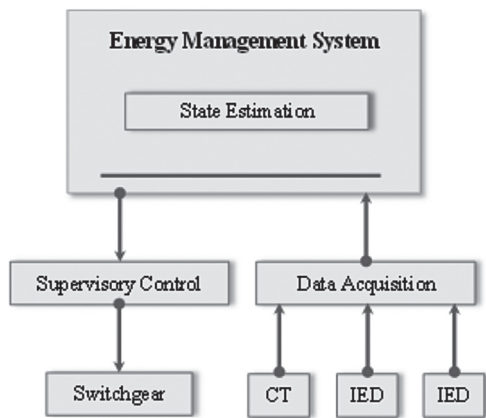
sử dụng để thu thập các dữ liệu vận hành và điều khiển, giám sát hệ thống từ xa. Hệ thống EMS được định nghĩa là một hệ thống gồm tất cả các công cụ sử dụng máy tính trong việc theo dõi, kiểm soát tối ưu hóa và hiệu suất của việc phát và/hoặc hệ thống truyền tải. Các dữ liệu thu thập được từ các thiết bị điện thông minh, các máy biến dòng đưa đến hệ thống EMS để ước lượng trạng thái vận hành của hệ thống điện; từ đó, đưa đến các thiết bị chuyển mạch thông qua bộ điều khiển giám sát. Tuy nhiên, số liệu thu thập được tại các Trung tâm này từ các máy đo luôn có những sai số nhất định. Những sai số này bao gồm có 2 yếu tố chính: sai số của máy đo và sai số do đường truyền. Chính vì những điều này cần phải ước lượng các thông số vận hành của lưới điện để phát hiện ra những dữ liệu xấu và loại bỏ chúng ra khỏi quá trình tính toán. Khi đó việc ước lượng thông số trạng thái các dữ liệu thu thập được (sau khi loại bỏ dữ liệu xấu) giúp cho các điều độ viên có những thông tin đúng

*Tác giả liên hệ chính.

Email: tuanhole@qnu.edu.vn

đến về trạng thái các thiết bị đang vận hành trong hệ thống điện; từ đó, có thể đưa ra các quyết định trong việc điều chỉnh công suất của lưới, tái cấu trúc lưới điện, và vận hành kinh tế lưới điện. Các phương pháp ước lượng dựa trên các thuật toán khác nhau được khảo sát trong các nghiên cứu trước đây.¹⁻³ Trạng thái vận hành của các hệ thống điện có phối hợp với các thiết bị điều khiển khác nhau cũng được ước lượng và trình bày qua các nghiên cứu trước đây.⁴⁻⁶ Một số ví dụ điển hình về ước lượng trạng thái vận hành của các nước Trung Quốc và Cameroon được trình bày trong các nghiên cứu trước đây.^{7,8} Ngoài ra, một số ví dụ về ước lượng trạng thái vận hành của một số phần của hệ thống điện Việt Nam được nghiên cứu trong các tài liệu trước đây.^{9,10}

Tuy nhiên, hiện tại chưa có công trình khoa học nào được thực hiện để ước lượng thông số trạng thái vận hành của lưới điện Bình Định. Do đó, mục tiêu của bài báo này là xây dựng thuật toán ước lượng trạng thái vận hành lưới điện truyền tải Bình Định dựa trên phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số. Các kết quả ước lượng từ thuật toán được so sánh với các kết quả đo đạc từ thực tế vận hành của lưới điện truyền tải Bình Định.



Hình 1. Sơ đồ hệ thống SCADA/EMS

2. ỨNG DỤNG PHƯƠNG PHÁP BÌNH PHƯƠNG CỰC TIỂU CÓ TRỌNG SỐ TRONG ƯỚC LƯỢNG TRẠNG THÁI LƯỚI ĐIỆN TRUYỀN TẢI BÌNH ĐỊNH

2.1. Tổng quan về phương pháp

Phương pháp này được trình bày trong các tài liệu tham khảo^{11,12} và được mô tả lại như sau:

Gọi \mathbf{x} là vector gồm n trạng thái cần ước lượng ($x_1, \dots, x_p, \dots, x_n$), \mathbf{z} là vector gồm m các đại lượng đo được ($z_1, \dots, z_p, \dots, z_m$). Khi đo \mathbf{z} , ta thường gặp phải các sai số \mathbf{e} ($e_1, \dots, e_p, \dots, e_m$) nào đó và ta biểu diễn số đo nhận được qua phương trình:

$$\mathbf{z} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{e} \quad (1)$$

trong đó: $\mathbf{h} = [h_1, \dots, h_p, \dots, h_m]$; sai số của các phép đo \mathbf{e} là một đại lượng ngẫu nhiên và trong tính toán thường giả thiết các sai số này là độc lập nhau và tuân theo hàm phân phối chuẩn với giá trị trung bình bằng không và có phương sai là hằng số $e_i \sim N(0, \sigma_i^2)$. Vì các phương sai này độc lập nhau nên ma trận hiệp phương sai chỉ gồm các thành phần nằm trên đường chéo chính (các thành phần nằm ngoài đường chéo chính bằng không) và được biểu diễn $\mathbf{R} = \text{diag}\{\sigma_1^2, \dots, \sigma_i^2, \dots, \sigma_m^2\}$. Để ước lượng các biến trạng thái $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p, \dots, x_n]$, phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số thường được sử dụng dùng để cực tiểu hóa hàm mục tiêu sau:

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{(z_i - h_i(\mathbf{x}))^2}{\sigma_i^2} = \frac{1}{2} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x})]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x})] \quad (2)$$

Bài toán cực tiểu hóa hàm mục tiêu dẫn đến:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \frac{\partial J(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{H}(\mathbf{x})^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x})] = 0 \quad (3)$$

trong đó ma trận Jacobian $\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$

Bỏ qua các thành phần bậc cao trong khai triển chuỗi Taylor sẽ dẫn đến phương trình lặp tại bước lặp k :

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}^k) \Delta \mathbf{x}^k = \mathbf{G}(\mathbf{x}^k) (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = \mathbf{H}(\mathbf{x}^k)^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x}^k)] \quad (4)$$

trong đó ma trận độ lợi:

$\mathbf{G}(\mathbf{x}^k) = \mathbf{H}(\mathbf{x}^k)^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{x}^k)$ và ma trận trọng số $\mathbf{W} = \mathbf{R}^{-1}$. Phương trình (4) được gọi là phương trình chuẩn của bài toán ước lượng trạng thái bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số.

2.2. Ứng dụng phương pháp vào hệ thống điện áp

Trong hệ thống điện, các thiết bị đo đếm xa RTU thường đo các thông số công suất tác dụng và công suất phản kháng nút (P_i và Q_i), dòng công suất tác dụng và công suất phản kháng trên các nhánh (P_{ij} và Q_{ij}), môđun và góc pha điện áp các nút (V_i và δ_i). Các phương trình dòng công suất được biểu diễn như sau:

$$P_i = |V_i|^2 G_{ii} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |V_i| |V_k| |Y_{ik}| \cos(\theta_{ik} + \delta_k - \delta_i) \quad (5)$$

$$Q_i = - \left\{ |V_i|^2 B_{ii} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |V_i| |V_k| |Y_{ik}| \sin(\theta_{ik} + \delta_k - \delta_i) \right\} \quad (6)$$

$$P_{ij} = -|V_i|^2 G_{ij} + |V_i| |V_j| |Y_{ij}| \cos(\theta_{ij} + \delta_j - \delta_i) \quad (7)$$

$$Q_{ij} = - \left\{ |V_i|^2 \left(\frac{B'_{ij}}{2} - B_{ij} \right) + |V_i| |V_j| |Y_{ij}| \sin(\theta_{ij} + \delta_j - \delta_i) \right\} \quad (8)$$

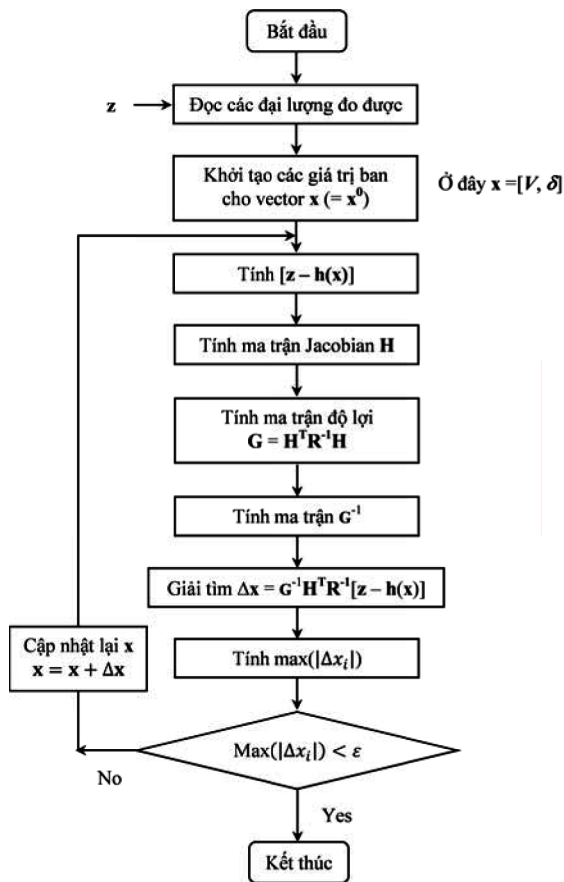
trong đó: G_{ii} và B_{ii} lần lượt là phần thực và phần ảo của tổng dẫn nút i ; G_{ij} và B'_{ij} lần lượt là phần thực và phần ảo của tổng dẫn nhánh ij ; Y_{ik} là tổng dẫn của nhánh ik ; và θ_{ik} là góc ban đầu của nhánh ik .

Ma trận Jacobian trong công thức (3) ứng dụng cho hệ thống điện được biểu diễn như sau:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial P_i}{\partial \delta} & \frac{\partial P_i}{\partial V} \\ \frac{\partial P_{ij}}{\partial \delta} & \frac{\partial P_{ij}}{\partial V} \\ \frac{\partial Q_i}{\partial \delta} & \frac{\partial Q_i}{\partial V} \\ \frac{\partial Q_{ij}}{\partial \delta} & \frac{\partial Q_{ij}}{\partial V} \\ \frac{\partial V}{\partial \delta} & \frac{\partial V}{\partial V} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Ứng dụng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số để ước lượng trạng thái hệ thống

điện, ta có thuật toán được trình bày trên Hình 2 như sau:



Hình 2. Thuật toán bình phương cực tiểu có trọng số

2.3. Lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định

Bài báo này khảo sát lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định tính đến tháng 05 năm 2019 được mô tả ở Hình 3. Lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định bao gồm các nhà máy điện, trạm biến áp, đường dây,... vận hành ở cấp điện áp 220kV và 110kV, trong đó có 2 nút có cấp điện áp 220kV làm nhiệm vụ chuyển tải công suất đó là trạm 220kV Quy Nhơn vận hành năm 1994 và trạm 220kV Phù Mỹ vận hành năm 2017. Riêng đối với trạm 220kV Phước An thực hiện nhiệm vụ như là một trạm cắt nên không xét trong trường hợp này. Ngoài ra, trong lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định còn có 17 nút có cấp điện áp 110kV. Các thông số đường dây, khoảng cách giữa các pha, vị trí các trạm cũng được minh họa như trên Hình 3.

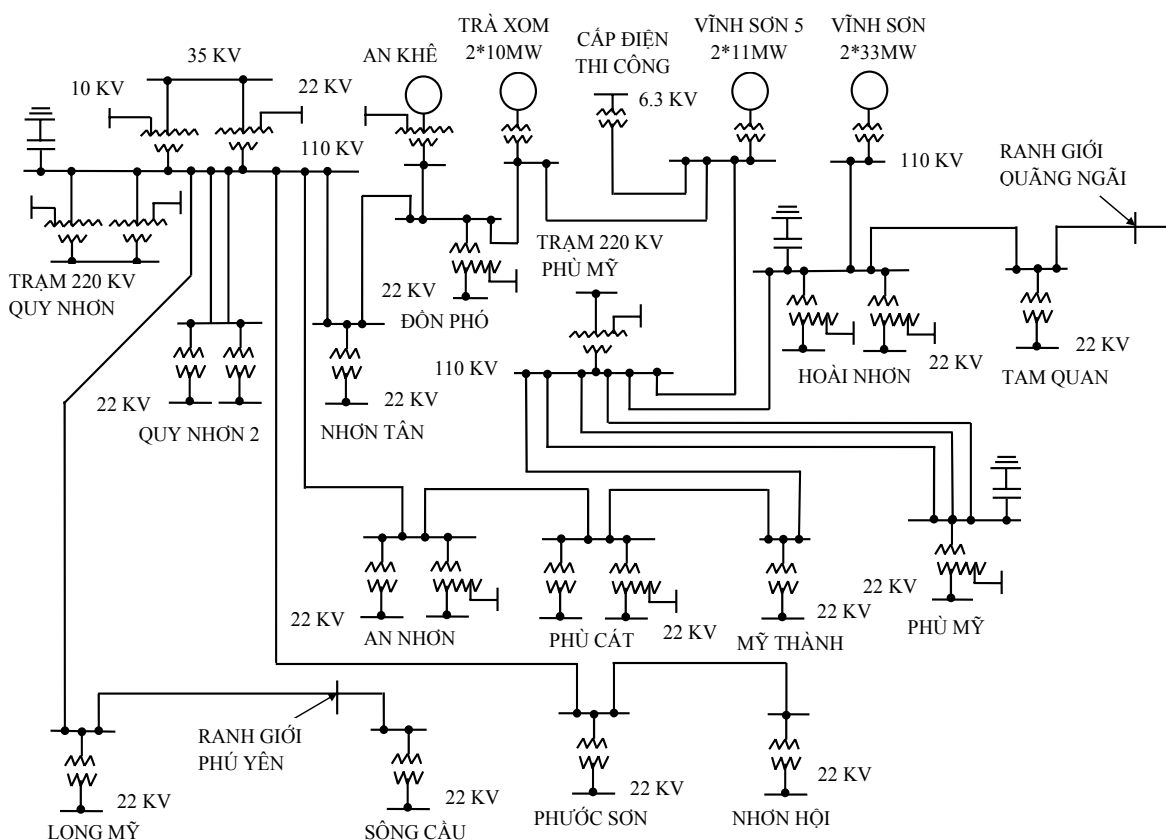
3. KẾT QUẢ

Các thông số của lưới điện truyền tải Bình Định bao gồm thông số của các nhánh và công suất tác dụng, công suất phản kháng tại các nút; công suất tác dụng, công suất phản kháng truyền tải trên các nhánh, điện áp và góc pha của các nút đều được thu thập từ các thiết bị đo đếm xa RTU. Để thực hiện ước lượng các thông số trạng thái vận hành thì tất cả các thông số của lưới điện truyền tải Bình Định đều được tính toán theo phương pháp tính toán trong hệ đơn vị tương đối (pu) gần đúng. Kết quả về dữ liệu về các nhánh được trình bày ở Bảng 1. Bảng 1 chỉ liên kết từ nút này đến nút kia và các thông số R, X, B/2 tương ứng của nhánh đó.

Bảng 2 mô tả dữ liệu tại các nút. Trong

Bảng 2, nút loại 1, 2, 3 lần lượt ký hiệu cho các loại nút chuẩn (slack bus), nút phụ tải (nút PQ), và nút máy phát (PV). Bảng 3 mô tả các dữ liệu đo được của lưới truyền tải Bình Định. Trong Bảng 3, loại đo được 1, 2, 3, 4 và 5 lần lượt ký hiệu cho điện áp, công suất tác dụng bơm vào nút, công suất phản kháng bơm vào nút, dòng công suất tác dụng và dòng công suất phản kháng.

Chương trình ước lượng thông số trạng thái lưới điện truyền tải Bình Định sử dụng phần mềm Matlab được minh họa trên Hình 4. Kết quả tính toán ước lượng trạng thái lưới điện truyền tải Bình Định bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số như đã trình bày được mô tả trong Bảng 4.



Hình 3. Lưới điện truyền tải tỉnh Bình Định

Bảng 1. Dữ liệu về các nhánh

| STT | Từ nút | Đến nút | R (pu) | X (pu) | B/2 (pu) | Tỷ số biến áp (a) |
|-----|---------------------------|---------------------------|--------|--------|----------|-------------------|
| 1 | Trà Xom | Đồn Phó | 0.0681 | 0.1511 | 1.2223 | 1 |
| 2 | Trà Xom | Vĩnh Sơn 5 | 0.0154 | 0.0342 | 0.2767 | 1 |
| 3 | Vĩnh Sơn 5 | Vĩnh Sơn | 0.0090 | 0.0200 | 0.1614 | 1 |
| 4 | Vĩnh Sơn 5 | Trạm 220 KV Phù Mỹ -110KV | 0.1712 | 0.1458 | 1.2699 | 1 |
| 5 | Vĩnh Sơn | Hoài Nhơn | 0.0591 | 0.1311 | 1.0609 | 1 |
| 6 | Hoài Nhơn | Tam Quan | 0.0129 | 0.0285 | 0.2306 | 1 |
| 7 | Hoài Nhơn | Trạm 220 KV Phù Mỹ -110KV | 0.0315 | 0.0698 | 0.5650 | 1 |
| 8 | Trạm 220 KV Phù Mỹ-110KV | Phù Mỹ | 0.0005 | 0.0004 | 0.0141 | 1 |
| 9 | Trạm 220 KV Phù Mỹ-110KV | Mỹ Thành | 0.0672 | 0.0572 | 0.4985 | 1 |
| 10 | Mỹ Thành | Phù Cát | 0.0416 | 0.0924 | 0.7472 | 1 |
| 11 | Phù Cát | An Nhơn | 0.0176 | 0.0391 | 0.3160 | 1 |
| 12 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | An Nhơn | 0.0186 | 0.0413 | 0.3344 | 1 |
| 13 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | Nhơn Tân | 0.0180 | 0.0399 | 0.3229 | 1 |
| 14 | Đồn Phó | Nhơn Tân | 0.0360 | 0.0798 | 0.6457 | 1 |
| 15 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | Phước Sơn | 0.0190 | 0.0162 | 0.1411 | 1 |
| 16 | Phước Sơn | Nhơn Hội | 0.0539 | 0.0459 | 0.3998 | 1 |
| 17 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | Quy Nhơn 2 | 0.0159 | 0.0135 | 0.4703 | 1 |
| 18 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | Long Mỹ | 0.0090 | 0.0200 | 0.1614 | 1 |
| 19 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | Trạm 220KV Quy Nhơn-220KV | 0.0000 | 0.0470 | 0.0000 | 1 |
| 20 | Trạm 220 KV Phù Mỹ -110KV | Trạm 220 KV Phù Mỹ -220KV | 0.0000 | 0.0940 | 0.0000 | 1 |

Bảng 2. Dữ liệu các nút

| STT | Nút | Loại nút | V (pu) | Theta | P (máy phát) MW | Q (máy phát) Mvar | P (phụ tải) MW | Q (phụ tải) Mvar | Qmin Mvar | Qmax Mvar |
|-----|---------------------------|----------|--------|-------|-----------------|-------------------|----------------|------------------|-----------|-----------|
| 1 | Trà Xom | 3 | 1.0565 | 0 | 19.6935 | -1.8269 | 0 | 0 | -1.877 | 0 |
| 2 | Vĩnh Sơn 5 | 3 | 1.0479 | 0 | 21.1018 | -3.7009 | 0 | 0 | -4 | 1 |
| 3 | Vĩnh Sơn | 3 | 1.0505 | 0 | 39.1524 | 16.9423 | 0 | 0 | 0 | 17 |
| 4 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | 3 | 1.0332 | 0 | 10.8643 | -18.7134 | 0 | 0 | -35.498 | 0 |
| 5 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | 3 | 1.0280 | 0 | 39.0869 | -39.1968 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | 1 | 1.0329 | 0 | 343.4955 | 44.4344 | 0 | 0 | 0 | 44.5 |
| 7 | Trạm 220KV Quy Nhơn-220KV | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 134.6372 | 6.2278 | 0 | 0 |
| 8 | An Nhơn | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 26.3245 | 7.7576 | 0 | 0 |
| 9 | Đồn Phó | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 5.9599 | 3.0011 | 0 | 0 |

| | | | | | | | | | | |
|----|------------|---|--------|---|---------|----------|---------|---------|---------|---|
| 10 | Hoài Nhơn | 2 | 1.0304 | 0 | -0.1944 | -16.6337 | 16.9083 | 13.3736 | -16.634 | 0 |
| 11 | Long Mỹ | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 18.8843 | -1.0742 | 0 | 0 |
| 12 | Mỹ Thành | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 11.1248 | -3.3423 | 0 | 0 |
| 13 | Nhơn Hội | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 30.7861 | 9.2590 | 0 | 0 |
| 14 | Nhơn Tân | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 18.0976 | 1.8483 | 0 | 0 |
| 15 | Phù Cát | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 20.8282 | 0.9888 | 0 | 0 |
| 16 | Phù Mỹ | 2 | 1.0314 | 0 | -0.2107 | -18.1281 | 15.3706 | 15.9918 | -18.128 | 0 |
| 17 | Phước Sơn | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 11.2183 | 2.3926 | 0 | 0 |
| 18 | Quy Nhơn 2 | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 52.4487 | 10.4468 | 0 | 0 |
| 19 | Tam Quan | 2 | 1.0000 | 0 | 0 | 0 | 8.5938 | 0.9888 | 0 | 0 |

Bảng 3. Dữ liệu đo được của lưới điện truyền tải Bình Định

| STT | Loại nút | Giá trị (pu) | Từ nút | Đến nút |
|-----|----------|--------------|---------------------------|---------|
| 1 | 1 | 1.0329 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | 0 |
| 2 | 2 | 0.1969 | Trà Xom | 0 |
| 3 | 2 | 0.2110 | Vĩnh Sơn 5 | 0 |
| 4 | 2 | 0.3915 | Vĩnh Sơn | 0 |
| 5 | 2 | -1.3464 | Trạm 220KV Quy Nhơn-220KV | 0 |
| 6 | 2 | 0.3909 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | 0 |
| 7 | 2 | 0.1086 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | 0 |
| 8 | 2 | -0.2632 | An Nhơn | 0 |
| 9 | 2 | -0.0596 | Đồn Phó | 0 |
| 10 | 2 | -0.1710 | Hoài Nhơn | 0 |
| 11 | 2 | -0.1888 | Long Mỹ | 0 |
| 12 | 2 | -0.1112 | Mỹ Thành | 0 |
| 13 | 2 | -0.3079 | Nhơn Hội | 0 |
| 14 | 2 | -0.1810 | Nhơn Tân | 0 |
| 15 | 2 | -0.2083 | Phù Cát | 0 |
| 16 | 2 | -0.1558 | Phù Mỹ | 0 |
| 17 | 2 | -0.1122 | Phước Sơn | 0 |
| 18 | 2 | -0.5245 | Quy Nhơn 2 | 0 |
| 19 | 2 | -0.0859 | Tam Quan | 0 |
| 20 | 3 | -0.0183 | Trà Xom | 0 |
| 21 | 3 | -0.0370 | Vĩnh Sơn 5 | 0 |
| 22 | 3 | 0.1694 | Vĩnh Sơn | 0 |
| 23 | 3 | -0.0623 | Trạm 220KV Quy Nhơn-220KV | 0 |
| 24 | 3 | -0.3920 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | 0 |

| | | | | |
|----|---|---------|----------------------------|----------------------------|
| 25 | 3 | -0.1871 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | 0 |
| 26 | 3 | -0.0776 | An Nhơn | 0 |
| 27 | 3 | -0.0300 | Đồn Phó | 0 |
| 28 | 3 | 0.3001 | Hoài Nhơn | 0 |
| 29 | 3 | 0.0107 | Long Mỹ | 0 |
| 30 | 3 | 0.0334 | Mỹ Thành | 0 |
| 31 | 3 | -0.0926 | Nhơn Hội | 0 |
| 32 | 3 | -0.0185 | Nhơn Tân | 0 |
| 33 | 3 | -0.0099 | Phù Cát | 0 |
| 34 | 3 | 0.3412 | Phù Mỹ | 0 |
| 35 | 3 | -0.0239 | Phước Sơn | 0 |
| 36 | 3 | -0.1045 | Quy Nhơn 2 | 0 |
| 37 | 3 | -0.0099 | Tam Quan | 0 |
| 38 | 4 | 2.0886 | Trạm 220KV Quy Nhơn -220KV | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV |
| 39 | 4 | -3.2540 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Nhơn Tân |
| 40 | 4 | -3.1717 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | An Nhơn |
| 41 | 4 | -2.9105 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Quy Nhơn 2 |
| 42 | 4 | -3.2461 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Long Mỹ |
| 43 | 4 | -3.3228 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Phước Sơn |
| 44 | 4 | -0.1214 | Nhơn Tân | Đồn Phó |
| 45 | 4 | 0.1373 | Đồn Phó | Trà Xom |
| 46 | 4 | 0.0141 | Trà Xom | Vĩnh Sơn 5 |
| 47 | 4 | 0.1805 | Vĩnh Sơn 5 | Vĩnh Sơn |
| 48 | 4 | -0.2205 | Vĩnh Sơn | Hoài Nhơn |
| 49 | 4 | -0.0851 | Hoài Nhơn | Tam Quan |
| 50 | 4 | 0.2822 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV |
| 51 | 4 | -0.2198 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Hoài Nhơn |
| 52 | 4 | -0.2351 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Phù Mỹ |
| 53 | 4 | -0.2796 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Mỹ Thành |
| 54 | 4 | 0.0970 | Mỹ Thành | Phù Cát |
| 55 | 4 | 0.0550 | Phù Cát | An Nhơn |
| 56 | 4 | 0.1957 | Phước Sơn | Nhơn Hội |
| 57 | 5 | 0.3821 | Trạm 220KV Quy Nhơn -220KV | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV |
| 58 | 5 | -0.4259 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Nhơn Tân |
| 59 | 5 | -0.3668 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | An Nhơn |
| 60 | 5 | -0.3399 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Quy Nhơn 2 |

| | | | | |
|----|---|---------|----------------------------|-------------------------|
| 61 | 5 | -0.4551 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Long Mỹ |
| 62 | 5 | -0.4204 | Trạm 220KV Quy Nhơn -110KV | Phước Sơn |
| 63 | 5 | 0.0115 | Nhơn Tân | Đồn Phó |
| 64 | 5 | -0.0483 | Đồn Phó | Trà Xom |
| 65 | 5 | -0.0187 | Trà Xom | Vĩnh Sơn 5 |
| 66 | 5 | 0.2064 | Vĩnh Sơn 5 | Vĩnh Sơn |
| 67 | 5 | 0.1306 | Vĩnh Sơn | Hoài Nhơn |
| 68 | 5 | -0.2902 | Hoài Nhơn | Tam Quan |
| 69 | 5 | -0.2048 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV |
| 70 | 5 | 0.6920 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Hoài Nhơn |
| 71 | 5 | 0.7332 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Phù Mỹ |
| 72 | 5 | 0.3585 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | Mỹ Thành |
| 73 | 5 | 0.0433 | Mỹ Thành | Phù Cát |
| 74 | 5 | 0.0677 | Phù Cát | An Nhơn |
| 75 | 5 | 0.0687 | Phước Sơn | Nhơn Hội |

```

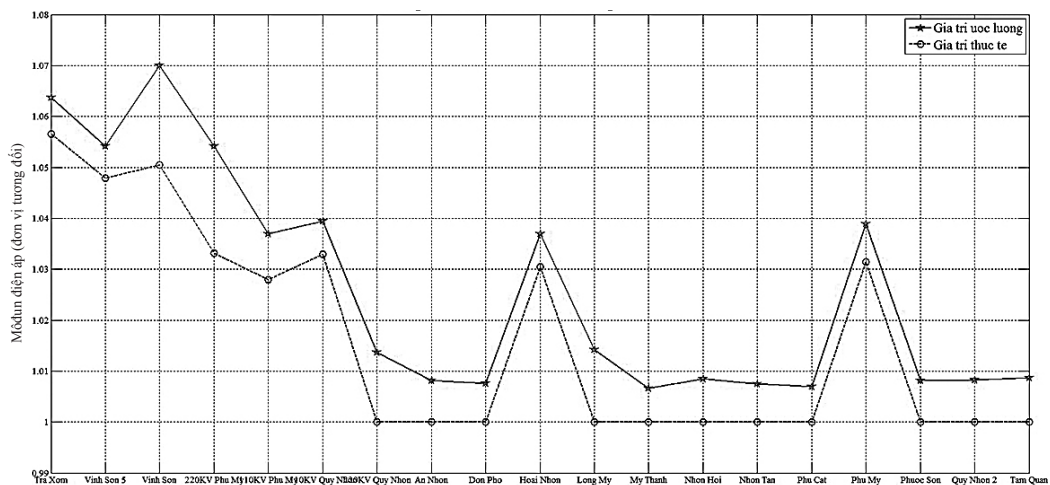
1 % ƯỚC LƯỢNG TRẠNG THÁI LƯỚI ĐIỆN TRUYỀN TẢI ĐIỆN BÌNH ĐỊNH
2 % SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP BÌNH PHƯƠNG CỤC TIỂU CÓ TRỌNG SỐ
3 clc; clear all;
4 num = 19;
5 ybus = ybusppg(num);
6 zdata = zdatas(num);
7 bpq = bbusppg(num);
8 nbus = max(max(zdata(:,4)),max(zdata(:,5)));
9 type = zdata(:,2);
10 z = zdata(:,3);
11 fbus = zdata(:,4);
12 tbus = zdata(:,5);
13 Ri = diag(zdata(:,6));
14 V = ones(nbus,1);
15 del = zeros(nbus,1);
16 E = [del(2:end); V];
17 G = real(ybus);
18 B = imag(ybus);
19
20 vi = find(type == 1);
21 ppi = find(type == 2);
22 qi = find(type == 3);
23 pf = find(type == 4);
24 qf = find(type == 5);
25
26 nvi = length(vi);
27 npi = length(ppi);
28 nqi = length(qi);
29 npf = length(pf);
30 nqf = length(qf);
31
    
```

Hình 4. Chương trình Matlab dùng cho ước lượng thông số lưới điện truyền tải Bình Định

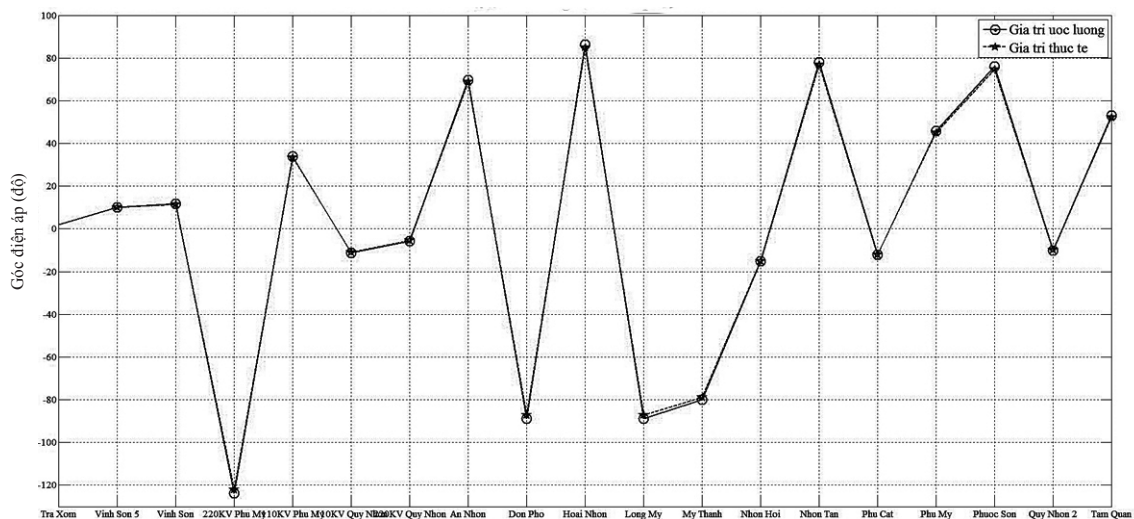
Bảng 4. Kết quả ước lượng môđun và góc điện áp bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số

| STT | Nút | V (pu) | V-ước lượng (pu) | Sai số (%) | θ (độ) | θ -ước lượng (độ) | Sai số (%) |
|-----|---------------------------|--------|------------------|------------|---------------|--------------------------|------------|
| 1 | Trà Xom | 1.0565 | 1.0637 | 0.68 | 1.9939 | 2.0264 | 1.63 |
| 2 | Vĩnh Sơn 5 | 1.0479 | 1.0542 | 0.60 | 10.0003 | 10.1623 | 1.62 |
| 3 | Vĩnh Sơn | 1.0505 | 1.0700 | 1.86 | 11.5001 | 11.6956 | 1.70 |
| 4 | Trạm 220KV Phù Mỹ-220KV | 1.0332 | 1.0542 | 2.03 | -122.000 | -123.8300 | 1.50 |
| 5 | Trạm 220KV Phù Mỹ-110KV | 1.0280 | 1.0369 | 0.87 | 33.2707 | 33.8263 | 1.67 |
| 6 | Trạm 220KV Quy Nhơn-110KV | 1.0329 | 1.0394 | 0.63 | -11.0673 | -11.2056 | 1.25 |
| 7 | Trạm 220KV Quy Nhơn-220KV | 1.0000 | 1.0137 | 1.37 | -5.4942 | -5.5794 | 1.55 |
| 8 | An Nhơn | 1.0000 | 1.0081 | 0.81 | 68.8430 | 69.7861 | 1.37 |
| 9 | Đồn Phó | 1.0000 | 1.0076 | 0.76 | -87.2801 | -88.7115 | 1.64 |
| 10 | Hoài Nhơn | 1.0304 | 1.0370 | 0.64 | 84.8031 | 86.2193 | 1.67 |
| 11 | Long Mỹ | 1.0000 | 1.0142 | 1.42 | -87.2801 | -88.7464 | 1.68 |
| 12 | Mỹ Thành | 1.0000 | 1.0066 | 0.66 | -78.7797 | -80.0874 | 1.66 |
| 13 | Nhơn Hội | 1.0000 | 1.0085 | 0.85 | -15.0000 | -15.2325 | 1.55 |
| 14 | Nhơn Tân | 1.0000 | 1.0075 | 0.75 | 76.8576 | 77.9105 | 1.37 |
| 15 | Phù Cát | 1.0000 | 1.0070 | 0.70 | -12.0375 | -12.2265 | 1.57 |
| 16 | Phù Mỹ | 1.0314 | 1.0389 | 0.73 | 44.9811 | 45.8177 | 1.86 |
| 17 | Phước Sơn | 1.0000 | 1.0081 | 0.81 | 74.6008 | 76.0331 | 1.92 |
| 18 | Quy Nhơn 2 | 1.0000 | 1.0082 | 0.82 | -10.0000 | -10.1880 | 1.88 |
| 19 | Tam Quan | 1.0000 | 1.0087 | 0.87 | 52.0868 | 52.9462 | 1.65 |

Để thuận tiện cho việc minh họa cho sự sai khác, môđun và góc pha điện áp thực tế và môđun và góc pha điện áp được ước lượng bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số của tất cả các nút trong lưới điện truyền tải Bình Định được trình bày trên các Hình 5 và 6.



Hình 5. Kết quả so sánh độ lớn điện áp nút



Hình 6. Kết quả so sánh góc pha điện áp nút

Trên các Hình 5 và 6, đường nét liền để chỉ các giá trị ước lượng từ thuật toán bình phương cực tiểu có trọng số và đường nét đứt để chỉ các giá trị đo đạc từ thực tế. Trên Hình 5, ta có thể thấy rõ được 2 đường biểu diễn giữa giá trị ước lượng và giá trị thực tế của điện áp là 2 đường riêng biệt vì có sự sai khác kết quả và thang giá trị tương đối nhỏ. Trong khi đó, các đường biểu diễn giá trị ước lượng và giá trị thực tế của góc điện áp cũng không trùng nhau. Lấy mô đun và góc pha điện áp tại các nút làm chuẩn, qua bảng so sánh ta thấy chương trình xây dựng trên cơ sở phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số cho kết quả chính xác. Về độ lớn điện áp, sai số lớn nhất là 2,03% và sai số nhỏ nhất là 0,60%. Về góc pha điện áp, sai số lớn nhất là 1,92% và sai số nhỏ nhất là 1,25%.

4. KẾT LUẬN

Bài báo đã nghiên cứu và xây dựng chương trình ước lượng trạng thái hệ thống điện sử dụng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số để ước lượng mô đun và góc pha điện áp các nút. Chương trình này được tính toán và mô phỏng trên nền tảng Matlab. Từ đó, nhóm tác giả đã áp dụng chương trình để phân tích, ước lượng và mô phỏng trạng thái lưới điện truyền tải Bình Định. Các kết quả thu được từ chương trình có độ chính xác cao so với các số liệu đo đạc trong thực tế từ hệ thống SCADA/EMS. Đây được xem là cơ sở để thực hiện các

nghiên cứu việc xác định số lượng và các vị trí đo tối ưu, phát hiện lỗi dữ liệu và lỗi cấu trúc. Chương trình này có thể được áp dụng cho các lưới điện của các tỉnh khác trong việc ước lượng trạng thái vận hành. Đồng thời trong thời gian tới, nhóm tác giả sẽ tiến hành nghiên cứu và xây dựng chương trình ước lượng trạng thái hệ thống điện bằng cách áp dụng phương pháp ước lượng M tổng quát hóa tăng cường nhằm nâng cao độ chính xác của chương trình ước lượng trạng thái hệ thống điện.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. I. Dzaifc, I. Huseinagic. Real time distribution system state estimation based on interior point method, *Southeast Europe Journal of Soft Computing*, **2014**, 3 (1).
2. H. Zhu, G. B. Giannakis. Power system nonlinear state estimation using distributed semi-definite programming, *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, **2014**, 8 (6), 1039-1050.
3. E. Caro, A. J. Conejo, R. Minguez. Power system state estimation considering measurement dependencies, *IEEE Transactions on Power Systems*, **2009**, 24 (4), 1875-1885.
4. B. Mounika, S. V. N. L. Lalitha, M. Ramamoorthy. Performance analysis of static and dynamic state estimation incorporating synchro phasor measurements, *Indian Journal of Science and Technology*, **2016**, 9 (26).

5. L. Hu, Z. Wang, I. Rahman, X. Liu. A constrained optimization approach to dynamic state estimation for power systems including PMU and missing measurements, *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, **2016**, 24 (2), 703-710.
6. A. Zamora-Cárdenas, C. R. Fuerte-Esquivel. State estimation of power systems containing facts controllers, *Electric Power Systems Research*, **2011**, 81 (4), 995-1002.
7. E. Tanyi, E. Mbinkar. Real-time state estimation in the Cameroon power system, *ISRN Power Engineering*, **2013**.
8. G. Qu, M. H. Ge, D. X. Wang, Z. Q. Ge, H. B. Sun, L. Wang. Experimental construction and operation analysis of two-level distributed state estimation for east China power grid, *East China electric power*, **2012**, 40 (4), 0626-0628.
9. Nguyễn Trọng Hiếu. *Đánh giá thông số vận hành trạm 500 kV Tân Định, 220 kV Trảng Bàng và 220 kV Mỹ Phước*, Luận văn thạc sĩ kỹ thuật điện, trường Đại học Sư phạm kỹ thuật thành phố Hồ Chí Minh, 2015.
10. Hoàng Xuân Hùng. *Tính toán ước lượng thông số trạng thái một hệ thống điện với dữ liệu đầu vào cho bởi định dạng CDF*, Luận văn thạc sĩ kỹ thuật điện, trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, 2014.
11. T. P. Vishnu, V. Viswan, A. M. Vipin. *Power system state estimation and bad data analysis using weighted least square method*, 2015 International Conference on Power, Instrumentation, Control and Computing (PICC), Thrissur, 2015.
12. Ali Abur, Antonio Gómez Expósito. *Power System State Estimation: Theory and Implementation*, Marcel Dekker, Inc., 2004.

Power system state estimation by using a generalized maximum likelihood method

Le Tuan Ho^{1,*}

¹*Faculty of Engineering and Technology, Quy Nhon University*

Received: 14/07/2019; Accepted: 14/08/2019

ABSTRACT

In the operation of modern power systems, the state parameters of the system in real time need to be calculated and measured with high accuracy in order to provide the data needed for assessment and control the safety of the power supply and the economics of the system. This requirement can be implemented by using power system state estimation methods and it is a main task of the electricity system control centers. Therefore, the main purpose of this paper is to study and implement the power system state estimation algorithm by using a generalized maximum likelihood estimation method. In addition, the conventional weighted least square method is applied in power system state estimation problem. Both estimation methods are utilized to estimate the operation parameters of the IEEE 57-bus system. The estimated values of voltage and bus angle by using two proposed methods were compared with the state parameters of the IEEE 57-bus system.

Keywords: *Generalized maximum likelihood method, weighted least square method, IEEE 57-bus system.*

*Corresponding author:

Email: tuanhole@qnu.edu.vn

Ước lượng trạng thái vận hành lưới điện sử dụng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát

Lê Tuấn Hộ^{1,*}

¹Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 14/07/2019; Ngày nhận đăng: 14/08/2019

TÓM TẮT

Trong vận hành các hệ thống điện hiện đại, các thông số trạng thái của hệ thống trong thời gian thực cần phải được tính toán, đo đạc với độ chính xác cao nhằm tạo nên một cơ sở dữ liệu cần thiết cho việc đánh giá và điều khiển độ an toàn cung cấp điện cũng như tính kinh tế của hệ thống. Yêu cầu này được thực hiện bởi bài toán ước lượng trạng thái của hệ thống điện, và là một nhiệm vụ chính của các trung tâm điều độ, điều khiển hệ thống điện. Vì vậy, mục tiêu của bài báo này là nghiên cứu và xây dựng bài toán ước lượng trạng thái hệ thống điện dựa trên phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát. Ngoài ra, bài báo cũng sử dụng phương pháp truyền thống thường được dùng để ước lượng trạng thái hệ thống điện là phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số. Cả hai phương pháp ước lượng được ứng dụng để ước lượng các thông số vận hành của lưới điện chuẩn IEEE 57 nút. Các kết quả ước lượng của điện áp và góc pha điện áp từ hai phương pháp được so sánh với các thông số trạng thái của lưới điện chuẩn IEEE 57 nút.

Từ khóa: Phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát, phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số, lưới điện chuẩn IEEE 57 nút.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Theo quan điểm ước lượng trạng thái, hệ thống điện là một lưới truyền tải cao áp rộng lớn bao gồm các đường dây và các máy biến áp nối đến các nút. Các máy phát điện đồng bộ sẽ cung cấp một lượng công suất cho các nút này hoặc từ các nút này sẽ cung cấp một lượng công suất cho phụ tải tiêu thụ thông qua lưới điện phân phối. Hệ thống này sẽ được giám sát bởi các trung tâm điều khiển và cung cấp các thông tin thu thập được trong thời gian thực cho người vận hành. Các thông tin này có thể là tình trạng của máy cắt và một tập hợp các thông tin đo đếm được. Trạng thái của tất cả các máy cắt sẽ mô tả hiện trạng của lưới điện đang vận hành. Đối với các thông tin đo đếm, chúng thường được thu thập theo chu

kỳ từ 1 đến 10 giây. Các thông tin này phải đầy đủ để đảm bảo khả năng quan sát được của hệ thống. Những thông tin này sẽ được xử lý thông qua chức năng ước lượng trạng thái và gửi đến người vận hành để giúp đưa ra các phương thức điều khiển cho các nhà máy điện và trạm biến áp.

Tuy nhiên, ở đây gặp phải vấn đề là các thông số đo đếm này không hoàn thiện: chúng không chính xác, thậm chí sai, hoặc thiếu (thiếu điểm đo hoặc hư hỏng hệ thống đo và truyền số liệu). Sai số của các phép đo là không thể tránh khỏi và do nhiều nguyên nhân như:

- ✓ Sai số của thiết bị đo và máy biến áp/dòng đo lường,
- ✓ Sai số của khâu biến đổi tương tự - số (dữ liệu thường được truyền bằng tín hiệu số;

*Tác giả liên hệ chính.

Email: tuanhole@qnu.edu.vn

nếu truyền bằng tín hiệu tương tự sai số còn cao hơn nhiều),

✓ Nhiều trong kênh truyền,

✓ Bộ dữ liệu không đồng nhất về thời điểm đo. Do hằng số thời gian của thiết bị đo, của việc truyền số liệu và do phương pháp hỏi - đáp tuần tự giữa trung tâm điều khiển và các RTU, mà độ lệch thời gian này thường tới vài giây. Sai lệch còn nặng hơn trong trường hợp nhiều hệ thống thu thập dữ liệu tham gia đóng góp cho một cơ sở dữ liệu của hệ thống điện hợp nhất.

Vì vậy, các phương pháp ước lượng trạng thái hệ thống điện đã được nghiên cứu và phát triển. Mục tiêu chính của bài toán ước lượng trạng thái hệ thống điện là sử dụng các công cụ toán học và xác suất thống kê để ước lượng hai thông số trạng thái hệ thống cơ bản là môđun điện áp và góc pha điện áp của tất cả các nút dựa trên cơ sở dữ liệu về các thông số cấu trúc và các thông số trạng thái đo. Phương pháp cơ bản nhất thường được sử dụng để ước lượng trạng thái hệ thống điện là phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số (weighted least square hay WLS) và được trình bày trong nhiều công trình nghiên cứu.²⁻⁴ Phương pháp này được sử dụng dựa trên các giả thiết sai số phép đo trên hệ thống độc lập nhau và tuân theo hàm phân phối chuẩn. Phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số có đặc điểm là sử dụng quy luật chiếu dữ liệu xấu dựa trên phần dư có trọng số (weighted residuals) hoặc phần dư được chuẩn hóa (normailized residuals). Tuy nhiên, đặc tính của nó bị suy giảm nhiều khi các dữ liệu xấu xuất hiện hoặc khi không biết ma trận hiệp phương sai của sai số do các hỏng hóc của dụng cụ, nhiễu loạn xung thông tin, tính bất định của mô hình.⁵ Do đó, để hạn chế những nhược điểm này của phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số các phương pháp khác đã được nghiên cứu và phát triển. Trong thống kê, phương pháp có thể xử lý nhiều trường hợp khác nhau của dữ liệu xấu mà vẫn đảm bảo tốt hiệu quả ước lượng thống kê khi không biết sai số/nhiều đo lường đó là phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng

quát. Phương pháp này có ưu điểm là hạn chế sự ảnh hưởng của các điểm đòn bẩy xấu (leverage point) bằng cách giới hạn cả sự ảnh hưởng của phần dư và của cả vị trí. Do đó, bài báo này tập trung vào việc xây dựng chương trình ước lượng trạng thái hệ thống điện dựa trên phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát. Từ đó, bài báo phân tích kết quả ước lượng đạt được từ phương pháp đề xuất so với kết quả đạt được từ phương pháp hay được sử dụng là bình phương cực tiểu có trọng số và so với kết quả thực của các nút để thấy được hiệu quả của phương pháp.

2. PHƯƠNG PHÁP ƯỚC LƯỢNG BÌNH PHƯƠNG CỰC TIỂU CÓ TRỌNG SỐ

Giả thiết cơ bản của phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số [6], [7] là vector sai số \mathbf{e} bao gồm nhiều biến ngẫu nhiên độc lập tuân theo phân bố Gaussian, e_i , có giá trị trung bình bằng không:

$$\mathbf{e} \sim N(0, \mathbf{R}) \quad (1)$$

và ma trận hiệp phương sai đã biết

$$\mathbf{R} = \text{diag}(\sigma_i^2). \quad (2)$$

Sử dụng giả thiết này, mục tiêu của bài toán là ước lượng vector trạng thái \mathbf{x} bao gồm điện áp V và góc pha θ tại tất cả các nút gọi trừ nút quy chiếu. Nút này được gọi là nút chuẩn và thường được đặt bằng 0. Do đó, vector trạng thái \mathbf{x} có n chiều thường được biểu diễn như sau:

$$\mathbf{x} = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}, V_1, V_2, \dots, V_N]^T, \quad (3)$$

ở đây N là số nút của hệ thống và $n = 2N - 1$. Vector \mathbf{x} liên quan đến vector đo lường m chiều \mathbf{z} thông qua mô hình phi tuyến.

$$\mathbf{z} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{e} \quad (4)$$

ở đây $\mathbf{h}(\square)$ là một hàm phi tuyến.

Đặt $\mathbf{H} = \partial \mathbf{h}(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x}$ là ma trận Jacobian có kích thước $(m \times n)$ và

$$\mathbf{l}_i = [\mathbf{l}_{i1}, \dots, \mathbf{l}_{im}]^T \quad (5)$$

là cột thứ i của $(\mathbf{R}^{-1/2} \mathbf{H})$. Mỗi vector \mathbf{l}_i tương ứng với một phép đo riêng và xác định điểm không gian nhân tử của ước lượng trạng thái.

Hampel [8] đã chỉ ra rằng hàm ảnh hưởng tổng \mathbf{IT} của một hồi quy $\hat{\mathbf{x}}$ tại F bằng tích của hàm ảnh hưởng vô hướng của phần dư, \mathbf{IR} , và ảnh hưởng giá trị vectơ trong không gian nhân tử, \mathbf{IP} . Lưu ý rằng \mathbf{IR} giống với \mathbf{IF} trong trường hợp một chiều. Hàm này biểu diễn như sau:

$$\mathbf{IT}(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{x}}, F, \mathbf{I}, \Lambda) = \mathbf{IT}(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{x}}, F) \mathbf{IP}(\mathbf{I}, \Lambda) \quad (6)$$

ở đây

$$\mathbf{IP}(\mathbf{I}, \Lambda) = \left(\mathbb{E} \left[\mathbf{I} \times \mathbf{I}^T \right] \right)^{-1} \mathbf{I} \quad (7)$$

và ở đây $\mathbb{E} \left[\mathbf{I} \times \mathbf{I}^T \right]$ là ma trận hiệp phương sai của vectơ \mathbf{I} , giả thiết nó có giá trị trung bình bằng không. Rõ ràng rằng các điểm đo không những ảnh hưởng đến các điểm đo khác ở xa theo chiều \mathbf{z} (giá trị ngoại lệ dọc trục) mà còn ảnh hưởng đến các khoảng cách khác trong không gian nhân tử, thường hay được gọi là điểm đòn bẩy. Các điểm đòn bẩy trong ước lượng trạng thái hệ thống điện bởi các phép đo lường trong các trường hợp sau:⁹

✓ Dòng trên các nhánh và công suất bơm vào các nút tương ứng với nhánh tương đối nhỏ so với các nút khác;

✓ Công suất bơm vào các nút mà có số lượng lớn các nhánh.

Toàn bộ ma trận Jacobian liên quan đến các phép đo như vậy trở nên lớn hơn. Kết quả là chúng ta có thể xác nhận rằng bất cứ mô hình hệ thống điện thực tế nào cũng có nhiều điểm đòn bẩy, thường trong 1 mẫu nhóm.

Mục tiêu của phương pháp ước lượng bình phương cực tiểu có trọng số là tối thiểu hóa tổng bình phương của các phần dư có trọng số, $r_{wi} = r_i / \sigma_i$, và có được biểu thức:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m r_{wi}^2 = [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x})]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x})]. \quad (8)$$

Điều kiện cần để $\mathbf{J}(\hat{\mathbf{x}})$ đạt giá trị cực tiểu là đạo hàm công thức (8) theo $\hat{\mathbf{x}}$ và cho bằng không:

$$\mathbf{H}^T(\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})] = \mathbf{H}^T(\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r} = \mathbf{0}, \quad (9)$$

ở đây

$$\mathbf{r} = \mathbf{z} - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}), \quad (10)$$

là vectơ phần dư. Phương trình (9) thường được giải bằng phương pháp lặp Gauss-Newton và có được kết quả

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{H}^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})], \quad (11)$$

ở đây \mathbf{x}_k là giá trị của \mathbf{x} tại phép lặp thứ k , và

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{H}^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{x}_k) \quad (12)$$

là ma trận thông tin. Tuyến tính hóa $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ tại $\hat{\mathbf{x}}$ có được

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}). \quad (13)$$

Thay các phương trình (4), (13) và các phương trình (9), (10), ta được:

$$\mathbf{r} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{e} - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}) \quad (14)$$

$$\mathbf{H}^T(\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})] = \mathbf{0}. \quad (15)$$

Do đó,

$$\mathbf{r} = \mathbf{W} \mathbf{e}, \quad (16)$$

ở đây

$$\mathbf{W} = \mathbf{I} - \mathbf{H}(\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \quad (17)$$

là ma trận độ nhạy phần dư có kích thước $(m \times m)$.

Dưới giả thiết tuân theo hàm phân phối Gauss, vectơ phần dư có giá trị trung bình bằng không

$$\mathbb{E}[\mathbf{r}] = \mathbf{W} \mathbb{E}[\mathbf{e}] = \mathbf{0}, \quad (18)$$

và ma trận hiệp phương sai

$$\text{Cov}[\mathbf{r}] = \mathbb{E}[\mathbf{r} \mathbf{r}^T] = \mathbf{W} \mathbf{R}. \quad (19)$$

3. PHƯƠNG PHÁP ƯỚC LƯỢNG ĐỀ XUẤT

3.1. Phương pháp ước lượng hợp lý cực đại

Phương pháp ước lượng hợp lý cực đại được nghiên cứu và đề xuất trong tài liệu tham khảo.¹⁰ Thay vì sử dụng phương trình (8), phương pháp này dùng để tối thiểu hóa tiêu chuẩn:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^m \rho \left(\frac{z_i - h_i(\mathbf{x})}{\sigma_i} \right) = \sum_{i=1}^m \rho(r_{wi}), \quad (20)$$

ở đây ρ là một hàm riêng của phần dư. Để có được giá trị của \mathbf{x} , ta lấy đạo hàm phương trình (20) theo \mathbf{x} và cho bằng 0, ta có:

$$\sum_{i=1}^m \psi(r_{wi}) \mathbf{I}_i = \mathbf{0}. \quad (21)$$

Các dạng hàm của ρ và ψ được định nghĩa và phân loại trong tài liệu tham khảo.¹¹

3.2. Phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát

Đã có rất nhiều nghiên cứu được tiến hành để tìm ra phương pháp tăng cường hiệu quả của các phương pháp ước lượng hợp lý cực đại khi xuất hiện các điểm đòn bẩy xấu; đó là phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát (hay ước lượng hồi quy ảnh hưởng giới hạn). Dạng phương trình ước lượng (21) có thể được viết lại dưới dạng sau:

$$\sum_{i=1}^m u(I_i) \psi(r_{w_i} v(I_i)) I_i = 0. \quad (22)$$

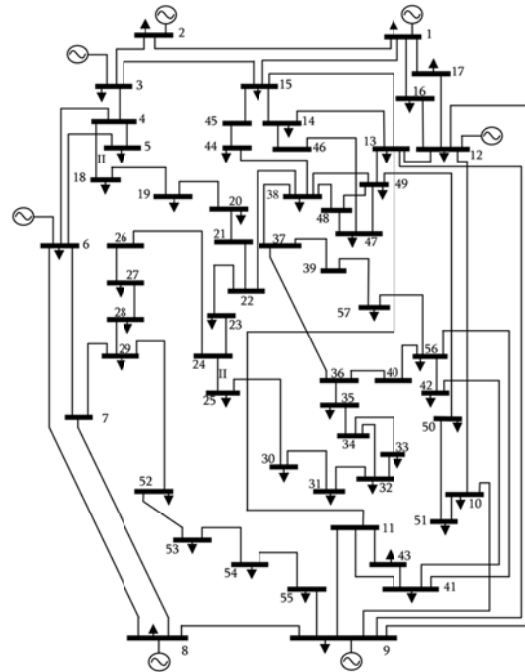
ở đây $u(I_i)$ và $v(I_i)$ là các hàm trọng số mà vai trò của nó là giảm sự ảnh hưởng của các điểm đòn bẩy đến kết quả hồi quy. Trong hệ thống điện, ý tưởng không chọn các hằng số chuyển cố định giống nhau cho tất cả các phần dư có trọng số nhưng chọn một hằng số chuyển $b\sqrt{W_{ii}}$, giá trị của hằng số này thay đổi theo độ lệch chuẩn của chúng theo phương trình (17). Dem so sánh phần dư được chuẩn hóa này với b , mỗi tương quan này có thể được thiết lập như sau:

$$v(I_i) = \frac{1}{u(I_i)} = \frac{1}{\sqrt{W_{ii}}}. \quad (23)$$

4. TRƯỜNG HỢP NGHIÊN CỨU

Trường hợp dùng để nghiên cứu hiệu quả của phương pháp đề xuất là lưới điện tiêu chuẩn IEEE 57 nút.¹² Lưới điện này có 57 nút trong đó có 7 máy phát, 42 phụ tải, 17 máy biến áp và 63 đường dây nối giữa các nút. Sơ đồ lưới điện IEEE 57 nút được trình bày ở Hình 1. Dữ liệu về các thông số tổng trở, tổng dẫn của các nhánh và dữ liệu về điện áp, công suất tác dụng và phản kháng của các máy phát, công suất tác dụng và phản kháng của các phụ tải có thể tìm thấy trong tài liệu tham khảo.¹² Dữ liệu về điện áp, công suất đi vào nút và công suất giữa các nhánh được mô tả trong Bảng 1, trong đó các loại nút được đánh số 1, 2, 3, 4, 5 lần lượt ký hiệu cho loại nút điện áp, công suất tác dụng bơm vào nút, công suất phản kháng bơm vào nút, dòng công suất tác

dụng và dòng công suất phản kháng. Các giá trị được cho trong đơn vị tương đối (pu).



Hình 1. Sơ đồ lưới điện chuẩn IEEE 57 nút

Bảng 1. Dữ liệu đo được của lưới IEEE 57 nút

| STT | Loại nút | Giá trị (pu) | Từ nút | Đến nút |
|-----|----------|--------------|--------|---------|
| 1 | 1 | 1.0400 | 1 | 0 |
| 2 | 2 | 422.832/100 | 1 | 0 |
| 3 | 2 | -3.000/100 | 2 | 0 |
| 4 | 2 | -1.000/100 | 3 | 0 |
| 5 | 2 | -75.000/100 | 6 | 0 |
| 6 | 2 | 300.000/100 | 8 | 0 |
| 7 | 2 | -121.000/100 | 9 | 0 |
| 8 | 2 | -67.000/100 | 12 | 0 |
| 9 | 3 | 46.411/100 | 1 | 0 |
| 10 | 3 | -76.553/100 | 2 | 0 |
| 11 | 3 | 28.337/100 | 3 | 0 |
| 12 | 3 | -20.240/100 | 6 | 0 |
| 13 | 3 | 112.568/100 | 8 | 0 |
| 14 | 3 | -38.270/100 | 9 | 0 |
| 15 | 3 | 82.457/100 | 12 | 0 |
| 16 | 4 | 102.007/100 | 1 | 2 |
| 17 | 4 | 149.733/100 | 1 | 15 |
| 18 | 4 | 78.505/100 | 1 | 16 |
| 19 | 4 | 92.586/100 | 1 | 17 |
| 20 | 4 | 98.052/100 | 2 | 3 |
| 21 | 4 | 60.542/100 | 3 | 4 |
| 22 | 4 | 33.596/100 | 3 | 15 |

| | | | | |
|----|---|-------------|----|----|
| 23 | 4 | 13.988/100 | 4 | 5 |
| 24 | 4 | 14.702/100 | 4 | 6 |
| 25 | 4 | 31.454/100 | 4 | 18 |
| 26 | 4 | 0.855/100 | 5 | 6 |
| 27 | 4 | -17.375/100 | 6 | 7 |
| 28 | 4 | -42.184/100 | 6 | 8 |
| 29 | 4 | -78.180/100 | 7 | 8 |
| 30 | 4 | 60.728/100 | 7 | 29 |
| 31 | 4 | 178.029/100 | 8 | 9 |
| 32 | 4 | 17.088/100 | 9 | 10 |
| 33 | 4 | 13.117/100 | 9 | 11 |
| 34 | 4 | 2.315/100 | 9 | 12 |
| 35 | 4 | 2.479/100 | 9 | 13 |
| 36 | 4 | 18.829/100 | 9 | 55 |
| 37 | 4 | -17.582/100 | 10 | 12 |
| 38 | 4 | 29.565/100 | 10 | 51 |
| 39 | 4 | -9.700/100 | 11 | 13 |
| 40 | 4 | 9.173/100 | 11 | 41 |
| 41 | 4 | 13.575/100 | 11 | 43 |
| 42 | 4 | -1.956/100 | 12 | 13 |
| 43 | 4 | -32.704/100 | 12 | 16 |
| 44 | 4 | -47.753/100 | 12 | 17 |
| 45 | 4 | -10.695/100 | 13 | 14 |
| 46 | 4 | -49.353/100 | 13 | 15 |
| 47 | 4 | 32.415/100 | 13 | 49 |
| 48 | 4 | -69.313/100 | 14 | 15 |
| 49 | 4 | 48.032/100 | 14 | 16 |
| 50 | 4 | 37.218/100 | 15 | 45 |
| 51 | 4 | 4.254/100 | 18 | 19 |
| 52 | 4 | 0.868/100 | 19 | 20 |
| 53 | 4 | -1.434/100 | 20 | 21 |
| 54 | 4 | -1.434/100 | 21 | 22 |
| 55 | 4 | 8.937/100 | 22 | 23 |
| 56 | 4 | -10.373/100 | 22 | 38 |
| 57 | 4 | 2.628/100 | 23 | 24 |
| 58 | 4 | 13.515/100 | 24 | 25 |
| 59 | 4 | -10.907/100 | 24 | 26 |
| 60 | 4 | 7.215/100 | 25 | 30 |
| 61 | 4 | -10.907/100 | 26 | 27 |
| 62 | 4 | -20.464/100 | 27 | 28 |
| 63 | 4 | -25.341/100 | 28 | 29 |
| 64 | 4 | 18.102/100 | 29 | 52 |
| 65 | 4 | 3.524/100 | 30 | 31 |
| 66 | 4 | -2.329/100 | 31 | 32 |
| 67 | 4 | 3.808/100 | 32 | 33 |
| 68 | 4 | -7.778/100 | 32 | 34 |
| 69 | 4 | -7.778/100 | 34 | 35 |

| | | | | |
|-----|---|--------------|----|----|
| 70 | 4 | -13.823/100 | 35 | 36 |
| 71 | 4 | -17.421/100 | 36 | 37 |
| 72 | 4 | 3.487/100 | 36 | 40 |
| 73 | 4 | -21.390/100 | 37 | 38 |
| 74 | 4 | 3.843/100 | 37 | 39 |
| 75 | 4 | -24.274/100 | 38 | 44 |
| 76 | 4 | -17.302/100 | 38 | 48 |
| 77 | 4 | -4.634/100 | 38 | 49 |
| 78 | 4 | 3.837/100 | 39 | 57 |
| 79 | 4 | 3.479/100 | 40 | 56 |
| 80 | 4 | 8.842/100 | 41 | 42 |
| 81 | 4 | -11.575/100 | 41 | 43 |
| 82 | 4 | 5.606/100 | 41 | 56 |
| 83 | 4 | 1.567/100 | 42 | 56 |
| 84 | 4 | -36.441/100 | 44 | 45 |
| 85 | 4 | 48.032/100 | 46 | 47 |
| 86 | 4 | 17.739/100 | 47 | 48 |
| 87 | 4 | 0.144/100 | 48 | 49 |
| 88 | 4 | 9.731/100 | 49 | 50 |
| 89 | 4 | -11.351/100 | 50 | 51 |
| 90 | 4 | 12.709/100 | 52 | 53 |
| 91 | 4 | -7.424/100 | 53 | 54 |
| 92 | 4 | -11.701/100 | 54 | 55 |
| 93 | 4 | 2.877/100 | 56 | 57 |
| 94 | 5 | 45.085/100 | 1 | 2 |
| 95 | 5 | 17.698/100 | 1 | 15 |
| 96 | 5 | -1.472/100 | 1 | 16 |
| 97 | 5 | 1.919/100 | 1 | 17 |
| 98 | 5 | -23.722/100 | 2 | 3 |
| 99 | 5 | 0.058/100 | 3 | 4 |
| 100 | 5 | 5.215/100 | 3 | 15 |
| 101 | 5 | -4.455/100 | 4 | 5 |
| 102 | 5 | -5.080/100 | 4 | 6 |
| 103 | 5 | 2.021/100 | 4 | 18 |
| 104 | 5 | -6.802/100 | 5 | 6 |
| 105 | 5 | -9.516/100 | 6 | 7 |
| 106 | 5 | -16.776/100 | 6 | 8 |
| 107 | 5 | -28.739/100 | 7 | 8 |
| 108 | 5 | -35.723/100 | 7 | 29 |
| 109 | 5 | 65.584/100 | 8 | 9 |
| 110 | 5 | -0.631/100 | 9 | 10 |
| 111 | 5 | 10.150/100 | 9 | 11 |
| 112 | 5 | -5.626/100 | 9 | 12 |
| 113 | 5 | 7.078/100 | 9 | 13 |
| 114 | 5 | -45.314/100 | 9 | 55 |
| 115 | 5 | -11.764/100 | 10 | 12 |
| 116 | 5 | -102.328/100 | 10 | 51 |

| | | | | |
|-----|---|--------------|----|----|
| 117 | 5 | 3.565/100 | 11 | 13 |
| 118 | 5 | -3.022/100 | 11 | 41 |
| 119 | 5 | -24.963/100 | 11 | 43 |
| 120 | 5 | 48.845/100 | 12 | 13 |
| 121 | 5 | 13.207/100 | 12 | 16 |
| 122 | 5 | 14.936/100 | 12 | 17 |
| 123 | 5 | 23.076/100 | 13 | 14 |
| 124 | 5 | 5.723/100 | 13 | 15 |
| 125 | 5 | -33.761/100 | 13 | 49 |
| 126 | 5 | -9.490/100 | 14 | 15 |
| 127 | 5 | -136.098/100 | 14 | 46 |
| 128 | 5 | -48.804/100 | 15 | 45 |
| 129 | 5 | 0.860/100 | 18 | 19 |
| 130 | 5 | 0.133/100 | 19 | 20 |
| 131 | 5 | -5.952/100 | 20 | 21 |
| 132 | 5 | -0.893/100 | 21 | 22 |
| 133 | 5 | 4.032/100 | 22 | 23 |
| 134 | 5 | -4.929/100 | 22 | 38 |
| 135 | 5 | 2.363/100 | 23 | 24 |
| 136 | 5 | 8.153/100 | 24 | 25 |
| 137 | 5 | 81.254/100 | 24 | 26 |
| 138 | 5 | 3.505/100 | 25 | 30 |
| 139 | 5 | -5.459/100 | 26 | 27 |
| 140 | 5 | -6.353/100 | 27 | 28 |
| 141 | 5 | -9.081/100 | 28 | 29 |
| 142 | 5 | 6.813/100 | 29 | 52 |
| 143 | 5 | 1.567/100 | 30 | 31 |
| 144 | 5 | -1.313/100 | 31 | 32 |
| 145 | 5 | 1.907/100 | 32 | 33 |
| 146 | 5 | -1.607/100 | 32 | 34 |
| 147 | 5 | -4.729/100 | 34 | 35 |
| 148 | 5 | -7.563/100 | 35 | 36 |
| 149 | 5 | -11.396/100 | 36 | 37 |
| 150 | 5 | 3.775/100 | 36 | 40 |
| 151 | 5 | -14.113/100 | 37 | 38 |
| 152 | 5 | 2.658/100 | 37 | 39 |
| 153 | 5 | 5.220/100 | 38 | 44 |
| 154 | 5 | -20.638/100 | 38 | 48 |
| 155 | 5 | -10.942/100 | 38 | 49 |
| 156 | 5 | 1.103/100 | 39 | 57 |
| 157 | 5 | -0.013/100 | 40 | 56 |
| 158 | 5 | 3.196/100 | 41 | 42 |
| 159 | 5 | -2.982/100 | 41 | 43 |
| 160 | 5 | -0.336/100 | 41 | 56 |
| 161 | 5 | -1.102/100 | 42 | 56 |
| 162 | 5 | 3.405/100 | 44 | 45 |
| 163 | 5 | 26.544/100 | 46 | 47 |

| | | | | |
|-----|---|------------|----|----|
| 164 | 5 | 13.368/100 | 47 | 48 |
| 165 | 5 | -7.438/100 | 48 | 49 |
| 166 | 5 | 4.366/100 | 49 | 50 |
| 167 | 5 | -6.265/100 | 50 | 51 |
| 168 | 5 | 3.973/100 | 52 | 53 |
| 169 | 5 | -6.199/100 | 53 | 54 |
| 170 | 5 | -7.818/100 | 54 | 55 |
| 171 | 5 | -0.347/100 | 56 | 57 |

Kết quả tính toán ước lượng trạng thái hệ thống điện IEEE 57 nút (điện áp và góc pha) bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số (WLS) và phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát (GMM) sử dụng phần mềm Matlab được trình bày trên các Bảng 2 và 3. Ngoài ra, sự sai khác về điện áp và góc pha giữa giá trị thực tế và giá trị ước lượng bằng 2 phương pháp đã sử dụng cũng được minh họa trên các Hình 2 và 3.

Bảng 2. Kết quả ước lượng điện áp tại các nút

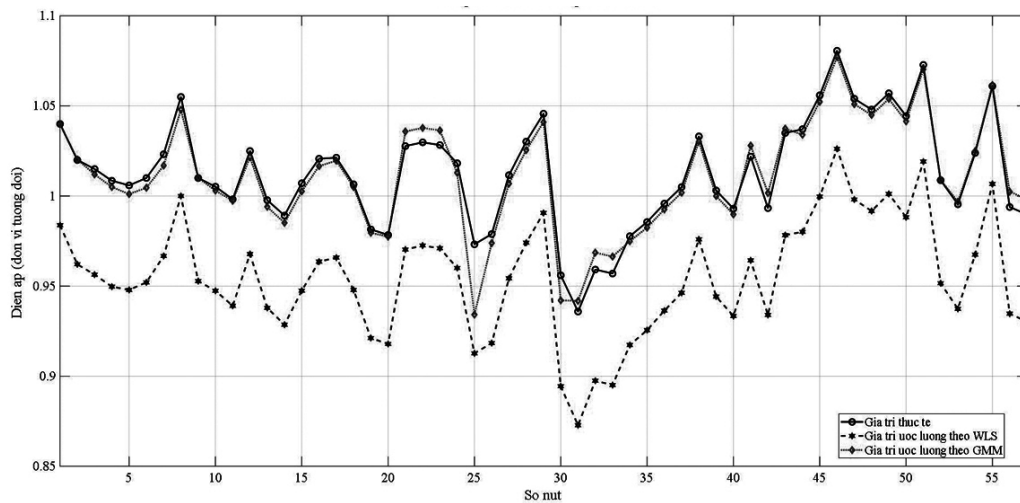
| Nút | V (pu) | V-WLS (pu) | Sai số (%) | V-GMM (pu) | Sai số (%) |
|-----|--------|------------|------------|------------|------------|
| 1 | 1.040 | 0.9838 | 5.4069 | 1.0399 | 0.0095 |
| 2 | 1.0200 | 0.9621 | 5.6760 | 1.0203 | 0.0341 |
| 3 | 1.0150 | 0.9564 | 5.7719 | 1.0120 | 0.2992 |
| 4 | 1.0085 | 0.9497 | 5.8291 | 1.0050 | 0.3506 |
| 5 | 1.0059 | 0.9479 | 5.7703 | 1.0011 | 0.4802 |
| 6 | 1.0100 | 0.9521 | 5.7310 | 1.0046 | 0.5307 |
| 7 | 1.0232 | 0.9667 | 5.5207 | 1.0169 | 0.6116 |
| 8 | 1.0550 | 1.0000 | 5.2108 | 1.0479 | 0.6703 |
| 9 | 1.0100 | 0.9528 | 5.6666 | 1.0101 | 0.0075 |
| 10 | 1.0052 | 0.9474 | 5.7455 | 1.0030 | 0.2158 |
| 11 | 0.9982 | 0.9391 | 5.9241 | 0.9974 | 0.0841 |
| 12 | 1.0250 | 0.9678 | 5.5816 | 1.0216 | 0.3342 |
| 13 | 0.9977 | 0.9379 | 5.9934 | 0.9940 | 0.3758 |
| 14 | 0.9892 | 0.9286 | 6.1234 | 0.9851 | 0.4168 |
| 15 | 1.0071 | 0.9475 | 5.9161 | 1.0026 | 0.4485 |
| 16 | 1.0207 | 0.9636 | 5.5944 | 1.0166 | 0.4065 |
| 17 | 1.0213 | 0.9658 | 5.4365 | 1.0196 | 0.1676 |
| 18 | 1.0065 | 0.9479 | 5.8213 | 1.0050 | 0.1467 |
| 19 | 0.9815 | 0.9212 | 6.1404 | 0.9796 | 0.1897 |
| 20 | 0.9784 | 0.9179 | 6.1855 | 0.9775 | 0.0958 |
| 21 | 1.0277 | 0.9703 | 5.5823 | 1.0358 | 0.7843 |
| 22 | 1.0298 | 0.9725 | 5.5650 | 1.0378 | 0.7766 |
| 23 | 1.0283 | 0.9710 | 5.5767 | 1.0364 | 0.7916 |
| 24 | 1.0182 | 0.9601 | 5.7077 | 1.0129 | 0.5168 |
| 25 | 0.9732 | 0.9127 | 6.2125 | 0.9342 | 4.0043 |
| 26 | 0.9789 | 0.9184 | 6.1832 | 0.9739 | 0.5083 |

| | | | | | |
|----|--------|--------|--------|--------|--------|
| 27 | 1.0116 | 0.9543 | 5.6669 | 1.0069 | 0.4695 |
| 28 | 1.0302 | 0.9741 | 5.4413 | 1.0255 | 0.4569 |
| 29 | 1.0457 | 0.9906 | 5.2687 | 1.0410 | 0.4479 |
| 30 | 0.9560 | 0.8944 | 6.4479 | 0.9421 | 1.4561 |
| 31 | 0.9359 | 0.8728 | 6.7419 | 0.9418 | 0.6257 |
| 32 | 0.9592 | 0.8975 | 6.4340 | 0.9686 | 0.9786 |
| 33 | 0.9570 | 0.8951 | 6.4726 | 0.9664 | 0.9790 |
| 34 | 0.9777 | 0.9173 | 6.1756 | 0.9749 | 0.2849 |
| 35 | 0.9856 | 0.9256 | 6.0834 | 0.9825 | 0.3165 |
| 36 | 0.9958 | 0.9364 | 5.9630 | 0.9926 | 0.3217 |
| 37 | 1.0050 | 0.9463 | 5.8434 | 1.0019 | 0.3052 |
| 38 | 1.0331 | 0.9760 | 5.5247 | 1.0302 | 0.2821 |
| 39 | 1.0031 | 0.9442 | 5.8679 | 1.0000 | 0.3055 |
| 40 | 0.9930 | 0.9334 | 5.9995 | 0.9898 | 0.3256 |
| 41 | 1.0219 | 0.9643 | 5.6322 | 1.0280 | 0.5994 |
| 42 | 0.9933 | 0.9340 | 5.9661 | 1.0017 | 0.8438 |
| 43 | 1.0350 | 0.9783 | 5.4814 | 1.0374 | 0.2340 |
| 44 | 1.0371 | 0.9801 | 5.4959 | 1.0340 | 0.3016 |
| 45 | 1.0559 | 0.9997 | 5.3249 | 1.0523 | 0.3430 |
| 46 | 1.0806 | 1.0262 | 5.0355 | 1.0772 | 0.3153 |
| 47 | 1.0540 | 0.9981 | 5.3040 | 1.0510 | 0.2888 |
| 48 | 1.0480 | 0.9917 | 5.3674 | 1.0450 | 0.2848 |
| 49 | 1.0570 | 1.0012 | 5.2769 | 1.0539 | 0.2925 |
| 50 | 1.0444 | 0.9882 | 5.3819 | 1.0415 | 0.2759 |
| 51 | 1.0728 | 1.0191 | 5.0049 | 1.0703 | 0.2289 |
| 52 | 1.0088 | 0.9516 | 5.6680 | 1.0090 | 0.0214 |
| 53 | 0.9954 | 0.9374 | 5.8303 | 0.9968 | 0.1425 |
| 54 | 1.0239 | 0.9675 | 5.5129 | 1.0249 | 0.0957 |
| 55 | 1.0610 | 1.0067 | 5.1214 | 1.0616 | 0.0562 |
| 56 | 0.9939 | 0.9347 | 5.9582 | 1.0024 | 0.8588 |
| 57 | 0.9898 | 0.9303 | 6.0084 | 0.9982 | 0.8470 |

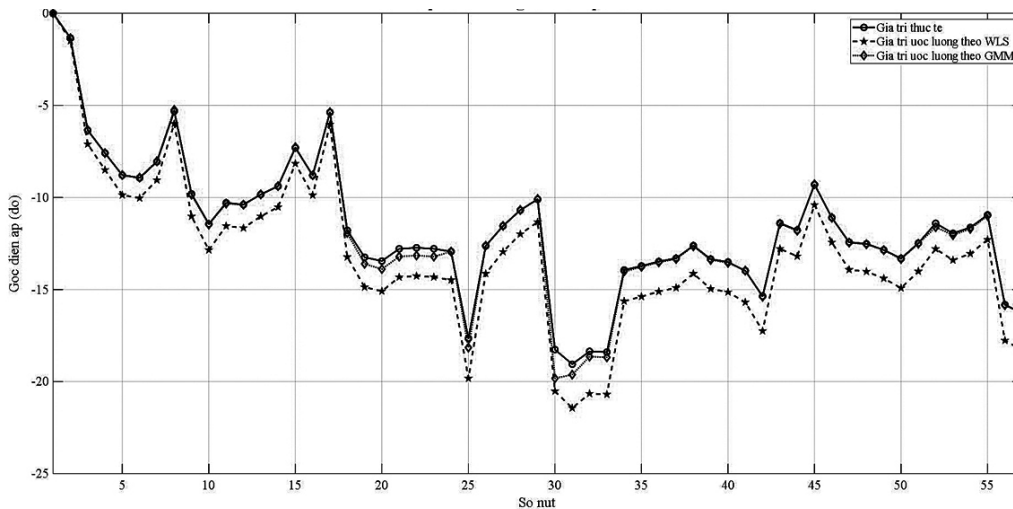
| | | | | | |
|----|----------|----------|---------|----------|--------|
| 12 | -10.3864 | -11.6567 | 12.2303 | -10.3900 | 0.0347 |
| 13 | -9.8357 | -11.0253 | 12.0951 | -9.8300 | 0.0580 |
| 14 | -9.3894 | -10.5222 | 12.0644 | -9.3800 | 0.1001 |
| 15 | -7.3015 | -8.1587 | 11.7403 | -7.2700 | 0.4314 |
| 16 | -8.7998 | -9.8749 | 12.2176 | -8.7900 | 0.1114 |
| 17 | -5.3771 | -6.0308 | 12.1563 | -5.3700 | 0.1320 |
| 18 | -11.7862 | -13.2325 | 12.2708 | -11.9300 | 1.2201 |
| 19 | -13.2463 | -14.8667 | 12.2327 | -13.6000 | 2.6702 |
| 20 | -13.4487 | -15.0891 | 12.1971 | -13.8900 | 3.2814 |
| 21 | -12.7866 | -14.3256 | 12.0361 | -13.2100 | 3.3113 |
| 22 | -12.7314 | -14.2632 | 12.0318 | -13.1500 | 3.2879 |
| 23 | -12.7833 | -14.3215 | 12.0332 | -13.2100 | 3.3379 |
| 24 | -12.9367 | -14.4845 | 11.9647 | -12.9400 | 0.0255 |
| 25 | -17.6522 | -19.8237 | 12.3015 | -18.1500 | 2.8200 |
| 26 | -12.6274 | -14.1357 | 11.9449 | -12.6200 | 0.0586 |
| 27 | -11.5454 | -12.9450 | 12.1227 | -11.5400 | 0.0468 |
| 28 | -10.6879 | -11.9877 | 12.1612 | -10.6800 | 0.0739 |
| 29 | -10.0987 | -11.3313 | 12.2059 | -10.0800 | 0.1852 |
| 30 | -18.2584 | -20.5156 | 12.3626 | -19.8200 | 8.5528 |
| 31 | -19.0527 | -21.4332 | 12.4942 | -19.6200 | 2.9775 |
| 32 | -18.3553 | -20.6506 | 12.5049 | -18.6400 | 1.5511 |
| 33 | -18.3942 | -20.6951 | 12.5087 | -18.6800 | 1.5538 |
| 34 | -13.9354 | -15.6319 | 12.1738 | -14.0200 | 0.6071 |
| 35 | -13.7208 | -15.3839 | 12.1207 | -13.7700 | 0.3586 |
| 36 | -13.4773 | -15.1063 | 12.0869 | -13.5200 | 0.3168 |
| 37 | -13.3015 | -14.9077 | 12.0755 | -13.3400 | 0.2894 |
| 38 | -12.6175 | -14.1352 | 12.0286 | -12.6500 | 0.2576 |
| 39 | -13.3482 | -14.9604 | 12.0780 | -13.3900 | 0.3132 |
| 40 | -13.5059 | -15.1386 | 12.0887 | -13.5500 | 0.3265 |
| 41 | -13.9778 | -15.6893 | 12.2444 | -13.9700 | 0.0558 |
| 42 | -15.3613 | -17.2470 | 12.2754 | -15.3900 | 0.1868 |
| 43 | -11.3936 | -12.7897 | 12.2530 | -11.4300 | 0.3195 |
| 44 | -11.7775 | -13.1908 | 12.0001 | -11.8000 | 0.1910 |
| 45 | -9.2975 | -10.4043 | 11.9045 | -9.2800 | 0.1882 |
| 46 | -11.0928 | -12.4363 | 12.1111 | -11.1000 | 0.0649 |
| 47 | -12.4288 | -13.9233 | 12.0241 | -12.4500 | 0.1706 |
| 48 | -12.5170 | -14.0223 | 12.0259 | -12.5400 | 0.1838 |
| 49 | -12.8474 | -14.3930 | 12.0305 | -12.8600 | 0.0981 |
| 50 | -13.3123 | -14.9194 | 12.0722 | -13.3400 | 0.2081 |
| 51 | -12.4793 | -14.0131 | 12.2908 | -12.5100 | 0.2460 |
| 52 | -11.4038 | -12.7935 | 12.1860 | -11.6100 | 1.8082 |
| 53 | -11.9446 | -13.4028 | 12.2082 | -12.0400 | 0.7987 |
| 54 | -11.6307 | -13.0533 | 12.2311 | -11.7000 | 0.5958 |
| 55 | -10.9470 | -12.2932 | 12.2975 | -11.0000 | 0.4842 |
| 56 | -15.8191 | -17.7631 | 12.2889 | -15.8500 | 0.1953 |
| 57 | -16.2899 | -18.2952 | 12.3101 | -16.3000 | 0.0620 |

Bảng 3. Kết quả ước lượng góc pha điện áp tại các nút

| Nút | theta (độ) | theta-WLS (độ) | Sai số (%) | theta-GMM (độ) | Sai số (%) |
|-----|------------|----------------|------------|----------------|------------|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | -1.3407 | -1.4929 | 11.3552 | -1.3500 | 0.6937 |
| 3 | -6.3508 | -7.1043 | 11.8644 | -6.3300 | 0.3275 |
| 4 | -7.5907 | -8.5020 | 12.0050 | -7.5900 | 0.0092 |
| 5 | -8.7908 | -9.8691 | 12.2661 | -8.7800 | 0.1229 |
| 6 | -8.9376 | -10.0331 | 12.2568 | -8.9200 | 0.1969 |
| 7 | -8.0605 | -9.0551 | 12.3398 | -8.0300 | 0.3784 |
| 8 | -5.3169 | -5.9942 | 12.7385 | -5.2400 | 1.4463 |
| 9 | -9.8066 | -11.0229 | 12.4027 | -9.8500 | 0.4426 |
| 10 | -11.4391 | -12.8529 | 12.3594 | -11.4700 | 0.2701 |
| 11 | -10.2900 | -11.5483 | 12.2280 | -10.3300 | 0.3887 |



Hình 2. Kết quả so sánh độ lớn điện áp nút



Hình 3. Kết quả so sánh góc pha điện áp nút

Trên các Hình 2 và 3, đường nét liền (màu đen) để chỉ các giá trị điện áp và góc pha thực tế; các đường nét gạch (màu xanh) để chỉ các giá trị điện áp và góc pha ước lượng được từ phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số và các đường nét chấm (màu đỏ) để chỉ các giá trị điện áp và góc pha ước lượng được từ phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát. Trên Hình 2, ta có thể thấy rõ ràng rằng các giá trị ước lượng bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số lệch xa với đường giá trị thực tế, trong khi đó đường ước lượng bằng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát rất gần với đường giá trị thực tế. Tương tự như vậy đối với Hình 3, đường biểu diễn giá trị ước lượng

góc pha bằng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số lệch xa so với đường biểu diễn giá trị thực tế trong khi đó đường biểu diễn giá trị ước lượng bằng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát rất gần với giá trị thực tế. Điều này chứng tỏ rằng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát thể hiện khả năng ước lượng tốt hơn so với phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số trong trường hợp này.

Ngoài ra, thông qua các Bảng 2 và 3, ta có thể thấy khi sử dụng phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số, điện áp sai khác lớn nhất 6,7419% và sai số nhỏ nhất là 5,0049%; góc pha sai khác lớn nhất 12,7385% và khi sử dụng phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng

quát, điện áp sai khác lớn nhất 4,0043% và sai số nhỏ nhất là 0,0075%; góc pha sai khác lớn nhất 8,5528%. Điều này càng chứng tỏ hiệu quả ước lượng trạng thái hệ thống điện của phương pháp ước lượng hợp lý cực đại tổng quát.

5. KẾT LUẬN

Bài báo đã nghiên cứu và xây dựng chương trình ước lượng trạng thái hệ thống điện sử dụng phương pháp bình ước lượng hợp lý cực đại tổng quát để ước lượng môđun và góc pha điện áp các nút. Chương trình này được tính toán và mô phỏng trên nền tảng phần mềm Matlab. Phương pháp được đề xuất trong bài báo này đã cho kết quả tốt hơn phương pháp thường được sử dụng để ước lượng trạng thái hệ thống điện đó là phương pháp bình phương cực tiểu có trọng số. Trong tương lai, bài báo có thể mở rộng hướng nghiên cứu theo hướng phân tích các hàm phân phối của dữ liệu cho nhiều trường hợp nghiên cứu để có thể chỉ ra các dữ liệu xấu (outlier) và đề xuất biện pháp khắc phục các dữ liệu xấu này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Đỗ Xuân Khôi. *Tính toán phân tích hệ thống điện*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 2001.
2. T. P. Vishnu, V. Viswan, A. M. Vipin. *Power system state estimation and bad data analysis using weighted least square method*. 2015 International Conference on Power, Instrumentation, Control and Computing (PICC), Thrissur, 2015.
3. Ali Abur, Antonio Gómez Expósito. *Power System State Estimation: Theory and Implementation*. Marcel Dekker, Inc., 2004.
4. F. Tanyi, E. Mbinkar. Real-time state estimation in the Cameroon power system. *ISRN Power Engineering*, 2013.
5. J. Zhao, G. Zhang, M. La Scala. *A two-stage robust power system state estimation method with unknown measurement noise*. IEEE Power and Energy Society General Meeting (PESGM), 2016, (1-5).
6. T. P. Vishnu, V. Viswan, A. M. Vipin. *Power system state estimation and bad data analysis using weighted least square method*. 2015 International Conference on Power, Instrumentation, Control and Computing (PICC), Thrissur, 2015.
7. Ali Abur, Antonio Gómez Expósito. *Power System State Estimation: Theory and Implementation*. Marcel Dekker, Inc., 2004.
8. F. R. Hampel. *Optimally bounding the gross-error-sensitivity and the influence of position in factor space*. Proceedings of the ASA statistical computing section, 1978, 59-64.
9. L. Mili, V. Phaniraj, P. J. Rousseeuw. Least median of squares estimation in electric power systems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 1991, 6 (2), 511-523.
10. P. J. Huber. Robust regression: asymptotics, conjectures and Monte Carlo. *The Annals of Statistics*, 1973, 1 (5), 799-821.
11. L. Mili, V. Phaniraj, P. J. Rousseeuw. Robust estimation theory for bad data diagnostics in electric power systems. *Control and Dynamic Systems*, 1990, 37, 271-325.
12. R. Anand, V. Balaji. Power Flow Analysis of Simulink IEEE 57 Bus Test System Model using PSAT. *Indian Journal of Science and Technology*, 2015, 8 (23).

Asymptotic behaviour of reachable sets in the singularly perturbed control systems

Nguyen Ngoc Quoc Thuong^{1,*}

¹*Faculty of Mathematics and Statistics, Quy Nhon University*

Received: 06/07/2019; Accepted: 15/10/2019

ABSTRACT

In this article, the asymptotic behavior of the reachable set of the singularly perturbed control system is investigated. The level-set method is proposed to characterize the reachable set and also its limit. The viscosity solution characteristic of the limit value function associated to the limit control problem is also given.

Keywords: *Asymptotic behavior, reachable sets, level-set method.*

*Corresponding author:
Email: nguyenngocquocthuong@qnu.edu.vn

Dáng điệu tiệm cận của tập đạt được trong hệ điều khiển nhiều kì dị

Nguyễn Ngọc Quốc Thương^{1,*}

¹Khoa Toán và Thống kê, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 06/07/2019; Ngày nhận đăng: 15/10/2019

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu dáng điệu tiệm cận của tập đạt được của hệ điều khiển nhiều kì dị. Phương pháp tập mức được sử dụng để đặc trưng tập đạt được và giới hạn của nó. Đặc trưng nghiệm nhớt của hàm giá trị tối ưu giới hạn liên kết với bài toán điều khiển tối ưu giới hạn cũng được đưa ra.

Từ khóa: Dáng điệu tiệm cận, tập đạt được, phương pháp tập mức.

1. GIỚI THIỆU

Xét hệ điều khiển nhiều kì dị có dạng

$$\begin{cases} y'(s) = f(y(s), z(s), \alpha(s)), & s > 0 \\ z'(s) = \frac{1}{\varepsilon} g(y(s), z(s), \alpha(s)), & s > 0 \\ y(0) = x, z(0) = \zeta. \end{cases} \quad (1.1)$$

trong đó $\alpha : [0, +\infty) \rightarrow A$ là hàm đo được, $A \subset \mathbb{R}^k$ là tập con compact; $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times A \rightarrow \mathbb{R}^n$ và $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times A \rightarrow \mathbb{R}^m$ là trường vectơ; $x \in \mathbb{R}^n, \zeta \in \mathbb{R}^m$ là các vị trí ban đầu; $\varepsilon > 0$ là tham số nhỏ. Ký hiệu \mathcal{A} là tập các hàm điều khiển

$$\mathcal{A} = \{ \alpha : [0, +\infty) \rightarrow A \mid \alpha(\cdot) \text{ đo được} \}.$$

Hệ điều khiển nhiều kì dị có dạng (1.1) nhận được nhiều sự quan tâm nghiên cứu của các nhà toán học theo cách tiếp cận hệ động lực (xem tài liệu tham khảo)^{4,5,9-13} cũng như cách tiếp

cận phương trình đạo hàm riêng (xem tài liệu tham khảo).^{1-3,14,15} Lấy ý tưởng từ kết quả về tập đạt được cho hệ điều khiển phi tuyến trong bài báo,⁷ chúng tôi đề xuất nghiên cứu dáng điệu tiệm cận cho tập đạt được liên kết với hệ điều khiển nhiều kì dị (1.1). Phương pháp tập mức và một số kết quả gần đây trong hệ điều khiển nhiều kì dị cũng như kỹ thuật nghiệm nhớt được sử dụng để khảo sát dáng điệu tiệm cận của tập đạt được nhiều kì dị.

Kết quả chính của bài báo được trình bày ở phần 3 của bài báo, đó là các Định lý 3.1, 3.2, 3.3.

Sau đây là một số giả thiết cơ bản đặt lên trên dữ kiện của hệ:

(A1) $f(y, z, a), g(y, z, a)$ liên tục trên $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times A$;

(A2) $f(y, z, a), g(y, z, a)$ liên tục Lipschitz

*Tác giả liên hệ chính:

Email: nguyenngocquocthuong@qnu.edu.vn

theo biến (y, z) và đều theo a ;

(A3) với mỗi $x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$ và $\varepsilon > 0$, tập sau đây là lồi

$$\mathcal{V}^\varepsilon(x, y, A) = \left\{ \left(f(x, y, a), \frac{1}{\varepsilon} g(x, y, a) \right) : a \in A \right\}.$$

Với các giả thiết (A1)-(A2), với mỗi $\varepsilon > 0, x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m$ và $\alpha \in \mathcal{A}$ cho trước, hệ điều khiển (1.1) có nghiệm duy nhất với mọi $s \geq 0$. Nghiệm này được kí hiệu bởi $(y_{x,\zeta}^\varepsilon(s; \alpha), z_{x,\zeta}^\varepsilon(s; \alpha))$, hoặc ngắn gọn bởi $(y^\varepsilon(s), z^\varepsilon(s))$. Các thành phần $y^\varepsilon(\cdot)$ và $z^\varepsilon(\cdot)$ trong bộ $(y^\varepsilon(\cdot), z^\varepsilon(\cdot))$ được gọi tương ứng là quỹ đạo chậm và quỹ đạo nhanh của hệ (1.1).

Nhận xét 1.1. Cố định $\varepsilon > 0$ và lấy $T > 0$. Với mọi $r > 0$, tồn tại $R > 0$ sao cho với mọi hàm điều khiển $\alpha : [0, T] \rightarrow A$ và mọi $(x, \zeta) \in B_r(0) \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$, quỹ đạo $(y_{x,\zeta}^\varepsilon(s; \alpha), z_{x,\zeta}^\varepsilon(s; \alpha))$ của hệ (1.1) được chứa trong $B_R(0) \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ với mọi $s \in [0, T]$. Rõ ràng, khi đó quỹ đạo chậm $y_{x,\zeta}^\varepsilon(s; \alpha)$ cũng được chứa trong một tập compact nào đó trong \mathbb{R}^n , kí hiệu là Y , với mọi $s \in [0, T]$.

Nhận xét 1.2. Kí hiệu $\mathcal{S}_{[0,T]}^\varepsilon$ là tập tất cả các quỹ đạo $(y^\varepsilon(\cdot), z^\varepsilon(\cdot))$ của hệ (1.1) xác định trên $[0, T]$ với điều kiện ban đầu $y^\varepsilon(0) = x, z^\varepsilon(0) = \zeta$. Với giả thiết (A3) và nhận xét ở trên, ta biết rằng tập $\mathcal{S}_{[0,T]}^\varepsilon$ là compact trong $AC([0, T]; \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$ theo tôpô của $C([0, T]; \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m)$. Kí hiệu $\mathcal{T}_{[0,T]}^\varepsilon$ là tập các quỹ đạo chậm từ cặp quỹ đạo trong $\mathcal{S}_{[0,T]}^\varepsilon$, nghĩa là,

$$\mathcal{T}_{[0,T]}^\varepsilon = \{ y^\varepsilon(s) : (y^\varepsilon(s), z^\varepsilon(s)) \in \mathcal{S}_{[0,T]}^\varepsilon, s \in [0, T] \}.$$

Khi đó, $\mathcal{T}_{[0,T]}^\varepsilon$ là tập compact trong $AC([0, T]; \mathbb{R}^n)$ theo tôpô của $C([0, T]; \mathbb{R}^n)$.

Tiếp theo ta định nghĩa tập đạt được (reachable set) cho hệ (1.1). Cho trước các tập con compact $Y_0 \subset \mathbb{R}^n, Z_0 \subset \mathbb{R}^m$ và tập con đóng khác rỗng $\mathcal{C} \subset Y_0$. Với mỗi $t \geq 0$, xét tập đạt được được xác định bởi

$$\mathcal{R}_\mathcal{C}^\varepsilon(t) = \{ x \in Y_0 \mid \exists \alpha \in \mathcal{A}, \zeta \in Z_0 : y_{x,\zeta}^\varepsilon(t; \alpha) \in \mathcal{C} \} \quad (1.2)$$

Đây là tập tất cả các vị trí ban đầu của quỹ đạo chậm sao cho xuất phát từ đó quỹ đạo tương ứng của hệ có thể tiến đến mục tiêu \mathcal{C} tại đúng thời điểm t ứng với hàm điều khiển và vị trí ban đầu của quỹ đạo nhanh thích hợp.

Nhận xét 1.3. Ta biết rằng với giả thiết (A3), $\mathcal{R}_\mathcal{C}^\varepsilon(t)$ là tập con compact trong \mathbb{R}^n với mọi $t \in [0, T]$. Đặc biệt là $\mathcal{R}_\mathcal{C}^\varepsilon(0) \equiv \mathcal{C}$.

2. XẤP XỈ QUỸ ĐẠO CHẬM

Mục tiêu chính của bài báo là nghiên cứu giới hạn, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, của tập đạt được $\mathcal{R}_\mathcal{C}^\varepsilon(t)$. Vì tập đạt được chỉ liên quan đến quỹ đạo chậm nên ý tưởng tự nhiên là khảo sát đáng điệu tiệm cận của quỹ đạo chậm, sau đó mô tả giới hạn của tập $\mathcal{R}_\mathcal{C}^\varepsilon(t)$ thông qua giới hạn của quỹ đạo chậm.

Có một số cách xấp xỉ quỹ đạo chậm của hệ điều khiển nhiễu kì dị. Cách đầu tiên là mô hình giảm cấp cổ điển (classical reduced order model) dựa trên định lý nổi tiếng của Tikhonov. Cách thứ hai là dựa trên kĩ thuật trung bình theo biến thời gian của Gaitsgory⁹ và Grammel.¹³ Cách thứ ba là kĩ thuật trung bình theo biến trạng thái bằng cách sử dụng độ đo phân bố (occupational measures) được phát triển gần đây bởi Gaitsgory và Leizarowitz.¹¹ Trong bài báo này chúng tôi sử dụng cách thứ ba để xấp xỉ quỹ đạo chậm, sau đó dùng kết quả xấp xỉ này để nghiên cứu đáng điệu tiệm cận của tập đạt được.

Xét hệ liên kết của hệ (1.1) như sau

$$\begin{cases} z'(\tau) = g(y, z(\tau), \alpha(\tau)), & \tau > 0 \\ z(0) = \zeta, \end{cases} \quad (2.1)$$

trong đó $y \in \mathbb{R}^n$ là hằng số.

Ý tưởng cơ bản của việc xét hệ liên kết (2.1) là khi ε rất nhỏ (và tiến tới không), quỹ đạo $z(\cdot)$ chuyển động nhanh hơn rất nhiều so với quỹ đạo $y(\cdot)$ do đó ta có thể xem quỹ đạo $y(\cdot)$ "đứng im". Nói cách khác, ta có thể xem y như là tham số cố định trong khi đó biến trạng thái z thay đổi theo thời gian.

Dưới các giả thiết (A1)-(A2), với tham số cố định $y \in \mathbb{R}^n$, với mỗi điều khiển $\alpha \in \mathcal{A}$ và vị trí ban đầu $\zeta \in \mathbb{R}^m$, hệ (2.1) có nghiệm duy nhất $z_\zeta(\tau; \alpha, y)$ xác định trên $[0, \infty)$.

Bây giờ ta trình bày kỹ thuật trung bình theo biến trạng thái thông qua độ đo phân bố (occupational measures) được phát triển bởi Gaitsgory và Leizarowitz.¹¹ Một số bài báo liên quan theo cách tiếp cận này có thể xem trong [4], [10], [12].

Theo Nhận xét I.1, cho trước các tập compact $Y_0 \subset \mathbb{R}^M$, $Z_0 \subset \mathbb{R}^n$ và $T > 0$, tồn tại các tập compact $Y \subset \mathbb{R}^M$, $Z_1 \subset \mathbb{R}^n$ với $Y_0 \subset Y$, $Z_0 \subset Z_1$ sao cho với mọi $(x, \zeta) \in Y_0 \times Z_0$, và với mọi $\alpha : [0, T] \rightarrow A$, nghiệm của hệ (1.1) thỏa mãn ràng buộc

$$y^\varepsilon(s, \alpha) \in Y, \quad z^\varepsilon(s, \alpha) \in Z_1, \quad \forall s \in [0, T].$$

Để xấp xỉ quỹ đạo chậm thông qua kỹ thuật trung bình, ta cần tính bị chặn của nghiệm của hệ liên kết (2.1):

(A4) Cố định $y \in Y$. Với mọi $\zeta \in Z_1$, và mọi $\alpha : [0, +\infty) \rightarrow A$, tồn tại tập compact $Z \subset \mathbb{R}^n$ với $Z_1 \subset Z$ sao cho nghiệm của hệ (2.1) thỏa mãn

$$z_\zeta(\tau; \alpha, y) \in Z, \quad \forall \tau \geq 0.$$

Hệ liên kết (2.1) cũng được giả thiết thỏa mãn tính điều khiển được địa phương (local bounded-time controllability), như sau:

Định nghĩa 2.1. Hệ (2.1) được gọi là thỏa mãn tính điều khiển được địa phương nếu, với $y \in Y$ cố định, cho trước tập compact $K \subset \mathbb{R}^M$, với mọi $\zeta, \xi \in K$, tồn tại $T = T_K > 0$ và $\bar{\alpha} \in \mathcal{A}$ sao cho $z_\zeta(\bar{t}; \bar{\alpha}, y) = \xi$, với $\bar{t} \leq T$.

Nhận xét 2.1. Lưu ý rằng, với giả thiết điều khiển được địa phương, tập Z là bất biến đối với nghiệm của hệ (2.1) với mọi $y \in Y$. Thật vậy, với mọi $\zeta \in Z$, ta có thể nối nó đến điểm ζ_1 trong Z_1 , để cho bất kỳ điểm nào trên quỹ đạo với vị trí ban đầu ζ cũng là một điểm của quỹ đạo với vị trí ban đầu ζ_1 , và do đó theo giả thiết (A4), quỹ đạo của hệ (2.1) chứa trong Z .

Bây giờ ta trình bày phương pháp trung bình để xấp xỉ quỹ đạo chậm bằng cách lấy trung bình trường véctơ chậm f theo một độ đo đặc biệt, gọi là độ đo phân bố giới hạn *limit occupational measure*, sinh bởi nghiệm của hệ liên kết (2.1). Trước tiên ta nhắc lại một số khái niệm cơ bản trong lý thuyết độ đo.

Ký hiệu $\mathcal{B}(Z \times A)$ là σ -đại số các tập con Borel của $Z \times A$, và $\mathcal{P}(Z \times A)$ là tập các độ đo xác suất xác định trên $\mathcal{B}(Z \times A)$.

Định nghĩa 2.2. Dãy $\mu_n \in \mathcal{P}(Z \times A)$ được gọi là hội tụ yếu đến $\mu \in \mathcal{P}(Z \times A)$ nếu

$$\int_{Z \times A} \varphi(y, a) d\mu_n(y, a) \rightarrow \int_{Z \times A} \varphi(y, a) d\mu(y, a),$$

khi $n \rightarrow +\infty$, với mọi $\varphi \in C(Z \times A)$.

Ta trang bị mêtric Prokhorov ρ trên không gian $\mathcal{P}(Z \times A)$ như sau

$$\rho(\mu, \nu) := \inf \{ \varepsilon > 0 \mid \mu(Q) \leq \nu(Q^\varepsilon) + \varepsilon \},$$

trong đó infimum được lấy trên mọi tập đo được $Q \subset Z \times A$, và $Q^\varepsilon = Q + \varepsilon B$ là ε -lân cận của Q , B là quả cầu đơn vị trong $Z \times A$.

Metric như trên tương thích với tôpô yếu, theo nghĩa rằng $\mu_n \in \mathcal{P}(Z \times A)$ hội tụ yếu đến $\mu \in \mathcal{P}(Z \times A)$ nếu $\rho(\mu_n, \mu) \rightarrow 0$, khi $n \rightarrow +\infty$. Không gian $\mathcal{P}(Z \times A)$, với metric ρ , là một không gian metric compact. Hơn nữa, bằng cách sử dụng metric Prokhorov, ta có thể định nghĩa khoảng cách $\rho(\mu, \Gamma)$ giữa $\mu \in \mathcal{P}(Z \times A)$ và $\Gamma \subset \mathcal{P}(Z \times A)$, và metric Hausdorff $\rho_H(\Gamma_1, \Gamma_2)$ giữa $\Gamma_1 \subset \mathcal{P}(Z \times A)$ và $\Gamma_2 \subset \mathcal{P}(Z \times A)$, như sau

$$\begin{aligned} \rho(\mu, \Gamma) &:= \inf_{\nu \in \Gamma} \rho(\mu, \nu), \\ \rho_H(\Gamma_1, \Gamma_2) &:= \\ \max \left\{ \sup_{\mu \in \Gamma_2} \rho(\mu, \Gamma_1), \sup_{\mu \in \Gamma_1} \rho(\mu, \Gamma_2) \right\}. \end{aligned}$$

Cổ định $y \in Y$. Một cặp $(z(\cdot), \alpha(\cdot))$ được gọi là chấp nhận được (admissible) của hệ (2.1) nếu $z(\cdot)$ là một nghiệm của hệ (2.1) với hàm điều khiển $\alpha \in \mathcal{A}$ và vị trí ban đầu $\zeta \in Z_1 \subset \mathbb{R}^m$ nào đó. Để ý rằng, với giả thiết (A4), với mọi $y \in Y, \zeta \in Z_1$, bất kỳ cặp chấp nhận được $(z(\cdot), \alpha(\cdot))$ của (2.1) đều thỏa mãn ràng buộc

$$(z(s), \alpha(s)) \in Z \times A, \quad \forall s \geq 0.$$

Định nghĩa 2.3. Cổ định $y \in Y$. Cho $(z(\cdot), \alpha(\cdot))$ là cặp chấp nhận được của hệ (2.1) xác định trên đoạn $[0, S]$, trong đó $S > 0$. Độ đo phân bố (occupational measure) $\mu_S := \mu_S^{(\alpha, \zeta, y)}$ sinh bởi $(z(\cdot), \alpha(\cdot))$ trên $[0, S]$ là độ đo xác suất trên $Z \times A$ xác định bởi

$$\mu_S := \frac{1}{S} \int_0^S \delta_{(z(s), \alpha(s))} ds, \quad S > 0,$$

trong đó $\delta_{(z(s), \alpha(s))}$ là độ đo Dirac tại điểm $(z(s), \alpha(s)) \in Z \times A$.

Cho tập con Borel $Q \subset Z \times A$, ta có

$$\mu_T(Q) = \frac{1}{S} \left| \left\{ s \in [0, S] : (z(s), \alpha(s)) \in Q \right\} \right|,$$

trong đó $|E|$ là độ đo Lebesgue của tập $E \subset \mathbb{R}$.

Nhận xét 2.2. Độ đo phân bố $\mu_S := \mu_S^{(\alpha, \zeta, y)}$ phụ thuộc vào hàm điều khiển $\alpha \in \mathcal{A}$, vị trí ban đầu $\zeta \in Z_1$, và tham số $y \in Y$.

Ký hiệu $\mathcal{M}(S; \zeta, y)$ là họ tất cả các độ đo phân bố ứng với tất cả hàm điều khiển $\alpha \in \mathcal{A}$

$$\mathcal{M}(S, \zeta, y) := \bigcup_{\alpha \in \mathcal{A}} \{ \mu_S^{(\alpha, \zeta, y)} \} \subset \mathcal{P}(Z \times A).$$

Ta muốn chuyển qua giới hạn khi $S \rightarrow +\infty$. Sự tồn tại giới hạn của tập $\mathcal{M}(S, \zeta, y)$, khi $S \rightarrow +\infty$ được phát biểu trong mệnh đề sau. Kết quả này là của Gaitsgory và Leizarowitz [11].

Mệnh đề 2.1 ([11]). Giả sử (A1), (A2), (A4) được thỏa mãn và hệ (2.1) là điều khiển được địa phương. Khi đó tồn tại giới hạn theo metric Hausdorff

$$\lim_{S \rightarrow +\infty} \mathcal{M}(S, \zeta, y) := \mathcal{M}(y), \quad (2.2)$$

tập giới hạn $\mathcal{M}(y)$ là lồi, compact (theo tôpô yếu) trong $\mathcal{P}(Z \times A)$, và nó không phụ thuộc vào vị trí ban đầu ζ in Z_1 . Sự hội tụ trong (2.2) là đều đối với (ζ, y) trong $Z_1 \times Y$, tức là

$$\rho_H(\mathcal{M}(S, \zeta, y), \mathcal{M}(y)) \leq \gamma(S),$$

với $\gamma(S) \rightarrow 0$, khi $S \rightarrow +\infty$.

Định nghĩa 2.4. Tập giới hạn $\mathcal{M}(y)$ trong định lý trên được gọi là tập độ đo phân bố giới hạn (limit occupational measures set) của hệ (2.1), và phần tử $\mu \in \mathcal{M}(y)$ được gọi là độ đo phân bố giới hạn (limit occupational measure).

Bây giờ ta giới thiệu trường vectơ suy rộng bằng cách lấy trung bình trường vectơ f thông qua độ đo phân bố giới hạn bởi công thức

$$f^r(y, \mu) := \int_{Z \times A} f(y, z, a) d\mu(z, a), \quad \mu \in \mathcal{M}(y).$$

Ta xét ánh xạ giá trị tập hợp $F : \mathbb{R}^n \rightsquigarrow \mathbb{R}^n$, được cho bởi

$$F(y) := \{ f^r(y, \mu) : \mu \in \mathcal{M}(y) \} \subset \mathbb{R}^n.$$

Bổ đề 2.1. Với các giả thiết như ở Mệnh đề 2.1, với mọi $y \in Y \subset \mathbb{R}^n$, $F(y)$ là tập con lồi, compact của \mathbb{R}^n .

Chứng minh. Cố định $y \in Y$. Lấy $v_1, v_2 \in F(y)$ và $\lambda \in [0, 1]$. Tồn tại $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}(y)$ sao cho

$$v_1 = f^r(y, \mu_1), \quad v_2 = f^r(y, \mu_2).$$

Lưu ý rằng, ánh xạ $\mu \mapsto f^r(y, \mu)$ là tuyến tính, và theo tính chất lồi của $\mathcal{M}(y)$, ta nhận được

$$\begin{aligned} \lambda v_1 + (1 - \lambda)v_2 &= \\ \lambda f^r(y, \mu_1) + (1 - \lambda)f^r(y, \mu_2) &= \\ f^r(y, \lambda\mu_1) + f^r(y, (1 - \lambda)\mu_2) &= \\ f^r(y, \lambda\mu_1 + (1 - \lambda)\mu_2) &\in F(y). \end{aligned}$$

Do đó, $F(y)$ là lồi trong \mathbb{R}^n .

Lấy dãy $v_n \in F(y)$ và giả sử $v_n \rightarrow v$, khi $n \rightarrow \infty$. Ta sẽ chứng minh rằng $v \in F(y)$. Thật vậy, vì $v_n \in F(y)$ nên tồn tại dãy $\mu_n \in \mathcal{M}(y)$ sao cho $v_n = f^r(y, \mu_n)$. Bởi tính compact của tập $\mathcal{M}(y)$ trong $\mathcal{P}(Z \times A)$, tồn tại dãy con của μ_n (để cho đơn giản, ta giữ nguyên kí hiệu), sao cho

$$\mu_n \rightarrow \mu \in \mathcal{M}(y) \quad \text{hội tụ yếu, khi } n \rightarrow \infty.$$

Vì $f \in C(Z \times A)$, và bởi định nghĩa hội tụ yếu, ta được

$$\begin{aligned} v &= \lim_{n \rightarrow \infty} v_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{Z \times A} f(y, z, a) d\mu_n(z, a) \\ &= \int_{Z \times A} f(y, z, a) d\mu(z, a) \in F(y). \end{aligned}$$

Do vậy, $F(y)$ là đóng trong \mathbb{R}^n .

Với mọi $y \in \mathbb{R}^n$, $z \in Z \subset \mathbb{R}^m$, và $a \in A$, theo giả thiết (A1)-(A2), dễ dàng kiểm tra được

$$|f(y, z, a)| \leq C(|y| + 1), \quad \text{với hằng số } C > 0.$$

Với mọi $v \in F(y)$, tồn tại $\mu \in \mathcal{M}(y)$ sao cho $v = f^r(y, \mu)$, và ta có đánh giá

$$\begin{aligned} |v| &= |f^r(y, \mu)| = \left| \int_{Z \times A} f(y, z, a) d\mu(z, a) \right| \\ &\leq \int_{Z \times A} |f(y, z, a)| d\mu(z, a) \\ &\leq C(|y| + 1). \end{aligned}$$

Do đó, $F(y)$ bị chặn trong \mathbb{R}^n với mọi $y \in Y$. \square

Tiếp theo ta xét bao hàm thức vi phân

$$\begin{cases} y'(s) \in F(y(s)), & s > 0 \\ y(0) = x. \end{cases} \quad (2.3)$$

Nghiệm của (2.3) được ký hiệu bởi $y(s) := y_x(s)$, $s > 0$.

Ánh xạ giá trị tập hợp $F(\cdot)$ được giả sử thỏa mãn điều kiện liên tục Lipschitz địa phương trên \mathbb{R}^n , cụ thể là,

(A5) với mọi $R > 0$, tồn tại $L := L_R > 0$ sao cho

$$d_H(F(y), F(y')) \leq L|y - y'|, \quad \forall y, y' \in B(0, R).$$

Nhận xét 2.3. Điều kiện liên tục Lipschitz địa phương của ánh xạ $F(\cdot)$ là giả thiết tiêu chuẩn trong cách tiếp cận của lý thuyết bao hàm thức vi phân.

Nhận xét 2.4. Ta kí hiệu $\mathcal{S}_{[0, T]}(x)$ là tập tất cả các nghiệm liên tục tuyệt đối của bao hàm thức vi phân (2.3) xác định trên $[0, T]$,

$$\mathcal{S}_{[0, T]}(x) :=$$

$$\{y_x(s) : y_x(s) \text{ nghiệm (2.3), } s \in [0, T]\}.$$

Ta biết rằng, với giả thiết (A1), (A2), (A4), (A5) và tính điều khiển địa phương, với bất kỳ $x \in Y$, $\mathcal{S}_{[0, T]}(x)$ là tập compact trong $AC(\mathbb{R}^n)$ theo tôpô của $C(\mathbb{R}^n)$.

Quỹ đạo chậm $y^\varepsilon(\cdot)$ của hệ điều khiển nhiều kì dị (1.1) được xấp xỉ bởi nghiệm $y(\cdot)$ của bao hàm thức vi phân (2.3), như sau:

Mệnh đề 2.2 ([11]). *Giả sử (A1), (A2), (A4), (A5) được thỏa mãn và hệ (2.1) là điều khiển được địa phương. Khi đó, với mỗi nghiệm $(y^\varepsilon(\cdot), z^\varepsilon(\cdot))$ của hệ (1.1), tồn tại một nghiệm $y(\cdot)$ của (2.3) sao cho*

$$\max_{s \in [0, T]} |y^\varepsilon(s) - y(s)| \leq \omega(\varepsilon), \quad (2.4)$$

với $\omega(\varepsilon) \rightarrow 0$, khi $\varepsilon \rightarrow 0$. Ngược lại, với mỗi nghiệm của (2.3), tồn tại một nghiệm của hệ (1.1) sao cho đánh giá (2.4) được thỏa mãn.

3. DÁNG ĐIỀU TIỆM CẬN CỦA TẬP ĐẠT ĐƯỢC

Cố định $\varepsilon > 0$ và $T > 0$. Với mỗi $(x, \zeta, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times [0, T]$, xét bài toán tối ưu hóa dạng Mayer

$$v^\varepsilon(x, \zeta, t) := \inf_\alpha \varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)), \quad (3.1)$$

trong đó $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ liên tục Lipschitz và thỏa mãn

$$\varphi(x) \leq 0 \iff x \in \mathcal{C}. \quad (3.2)$$

Hàm φ như trên luôn tồn tại, chẳng hạn ta có thể chọn

$$\varphi(x) = d_{\mathcal{C}}(x) := d(x, \mathcal{C}) - d(x, \mathbb{R}^n \setminus \mathcal{C}),$$

trong đó $d(x, \mathcal{C})$ là khoảng cách từ điểm x đến tập \mathcal{C} , và $d_{\mathcal{C}}(x)$ được biết đến là hàm khoảng cách có dấu (signed distance function) của tập \mathcal{C} . Chúng ta có thể kiểm tra được hàm $\varphi(x) = d_{\mathcal{C}}(x)$ là liên tục Lipschitz trong \mathbb{R}^n .

Hàm số $v^\varepsilon(x, \zeta, t)$ được gọi là hàm giá trị tối ưu của bài toán điều khiển tối ưu liên kết với hệ (1.1).

Kết quả đầu tiên của bài báo là mối liên hệ giữa tập đạt được $\mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t)$ và bài toán điều khiển tối ưu. Cụ thể là, tập đạt được $\mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t)$ có thể được mô tả như là tập mức của hàm giá trị tối ưu của bài toán điều khiển tối ưu nhiều kì dị.

Định lý 3.1. *Giả sử (A1)-(A3) được thỏa mãn. Cho trước $\varepsilon > 0$ và $T > 0$. Khi đó, với mọi $t \in [0, T]$, ta có*

$$\mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t) = \{x \in Y_0 : \exists \zeta \in Z_0 \text{ sao cho } v^\varepsilon(x, \zeta, t) \leq 0\}. \quad (3.3)$$

Chứng minh. Cố định $\varepsilon > 0$, $T > 0$ và lấy $t \in [0, T]$. Giả sử $x \in Y_0$ sao cho $v^\varepsilon(x, \zeta, t) \leq 0$, với $\zeta \in Z_0$. Ta sẽ chứng minh rằng $x \in \mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t)$. Thật vậy, theo tính chất compact của tập các quỹ đạo chậm (Nhận xét 1.2), và bởi tính liên tục của φ , tồn tại điều khiển $\bar{\alpha} \in \mathcal{A}$ sao cho

$$v^\varepsilon(x, \zeta, t) = \varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \bar{\alpha})) \leq 0.$$

Tính chất của φ suy ra $y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \bar{\alpha}) \in \mathcal{C}$, và do vậy $x \in \mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t)$.

Ngược lại, giả sử $x \in \mathcal{R}_\varepsilon^\mathcal{C}(t)$, khi đó tồn tại $\alpha \in \mathcal{A}$ và $\zeta \in Z_0$ sao cho $y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha) \in \mathcal{C}$. Do đó,

$$v^\varepsilon(x, \zeta, t) \leq \varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)) \leq 0.$$

Phép chứng minh hoàn tất. □

Với mỗi $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times [0, T]$, ta xét bài toán tối ưu hóa liên kết với bao hàm thức vi phân (2.3):

$$v(x, t) := \inf \varphi(y_x(t)), \quad (3.4)$$

trong đó infimum lấy theo tất cả các nghiệm $y_x(\cdot)$ của (2.3).

Bài toán (2.3)-(3.4) được gọi là bài toán điều khiển tối ưu giới hạn của bài toán điều khiển tối ưu nhiều kì dị (1.1)-(3.1).

Trong Mệnh đề 2.2, ta biết rằng quỹ đạo chậm của (1.1) được xấp xỉ bởi quỹ đạo của bao hàm thức vi phân (2.3) theo sự hội tụ đều. Kết quả xấp xỉ này đạt được bằng cách lấy trung

biên trường véctor f theo độ đo phân bố giới hạn sinh bởi nghiệm của hệ liên kết (2.1). Dựa theo kết quả xấp xỉ này, ta có thể chứng minh sự hội tụ của hàm giá trị tối ưu v^ε đến hàm v , khi $\varepsilon \rightarrow 0$. Hơn nữa, hàm v là nghiệm nhót duy nhất của phương trình Hamilton-Jacobi equation, mà ta gọi là *phương trình giới hạn*, trong đó *Hamilton giới hạn* được biểu diễn như là toán tử Bellman, trong đó độ đo phân bố giới hạn đóng vai trò là biến điều khiển mới.

Định lý 3.2. *Giả sử (A1), (A2), (A4), (A5) được thỏa mãn và (2.1) là điều khiển được địa phương. Khi đó các khẳng định sau đúng:*

- (i) $v^\varepsilon(x, \zeta, t)$ hội tụ đều, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, đến $v(x, t)$ với $x \in Y_0, \zeta \in Z_0, t \in [0, T]$. Hơn nữa, v liên tục Lipschitz trong $Y_0 \times [0, T]$.
- (ii) $v(x, t)$ là nghiệm nhót duy nhất trong lớp UC ($\mathbb{R}^n \times [0, T]$) của bài toán

$$\begin{cases} v_t + \bar{H}(x, Dv) = 0, \\ v(x, 0) = \varphi(x), \end{cases} \quad (3.5)$$

trong đó $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, T)$ và

$$\begin{aligned} \bar{H}(x, p) &= \max_{v \in F(x)} \{-p \cdot v\} \\ &= \max_{\mu \in \mathcal{M}(x)} \{-p \cdot f^r(x, \mu)\}. \end{aligned}$$

Nhận xét 3.1. Một kết quả nổi tiếng đã biết (xem tài liệu),⁶ bằng cách sử dụng nguyên lý quy hoạch động (dynamic programming principle), v^ε là nghiệm nhót duy nhất của phương trình Hamilton-Jacobi-Bellman

$$\begin{cases} v_t^\varepsilon + H(x, \zeta, D_x v, \frac{D_\zeta v}{\varepsilon}) = 0, \\ v^\varepsilon(x, \zeta, 0) = \varphi(x), \end{cases}$$

trong đó $(x, \zeta, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times (0; T)$ và

$$H(x, \zeta, p, q) :=$$

$$= \max_{a \in A} \{-p \cdot f(x, \zeta, a) - q \cdot g(x, \zeta, a)\}.$$

Tuy nhiên để chứng minh v là nghiệm nhót của (3.5), chúng ta không thể áp dụng lập luận nghiệm nhót như thông thường vì hệ điều khiển giới hạn được mô tả bởi bao hàm thức vi phân, trong đó biến điều khiển mới μ nằm trong tập điều khiển phụ thuộc vào trạng thái $\mathcal{M}(x)$. Phép chứng minh do vậy được thừa hưởng từ kết quả của Frankowska.⁸

Chứng minh. (Định lý 3.2)

(i) Cố định $(x, \zeta, t) \in Y_0 \times Z_0 \times [0, T]$. Với mọi $\varepsilon > 0$, theo tính chất của infimum, tồn tại quỹ đạo chậm $y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)$ sao cho

$$\varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)) \leq v^\varepsilon(x, \zeta, t) + \varepsilon.$$

Theo Mệnh đề 2.2, tồn tại nghiệm $y_x(\cdot)$ của (2.3) sao cho $y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)$ hội tụ đều đến $y_x(t)$, as $\varepsilon \rightarrow 0$, trong $[0, T]$. Các lập luận này cùng với tính liên tục của φ , ta được

$$\begin{aligned} v(x, t) &\leq \varphi(y_x(t)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t; \alpha)) \quad (3.6) \\ &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} v^\varepsilon(x, \zeta, t). \quad (3.7) \end{aligned}$$

Mặt khác, theo tính chất compact của tập $\mathcal{S}_{[0, T]}(x)$, tồn tại nghiệm $y_x(\cdot)$ của (2.3) sao cho

$$v(x, t) = \varphi(y_x(t)).$$

Một lần nữa, bởi Mệnh đề Proposition 2.2, tồn tại quỹ đạo $(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t, \alpha), z_{x, \zeta}^\varepsilon(t, \alpha))$ của (1.1) sao cho $y_{x, \zeta}^\varepsilon(t, \alpha)$ hội tụ đều đến $y_x(t)$, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, trong $[0, T]$. Do đó

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} v^\varepsilon(x, \zeta, t) &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varphi(y_{x, \zeta}^\varepsilon(t, \alpha)) \quad (3.8) \\ &= \varphi(y_x(t)) = v(x, t). \quad (3.9) \end{aligned}$$

Vì (3.6) và (3.8) đúng với mọi $(x, \zeta, t) \in Y_0 \times Z_0 \times [0, T]$, ta kết luận được

$v^\varepsilon(x, \zeta, t) \rightarrow v(x, t)$ đều trong $Y_0 \times Z_0 \times [0, T]$,

khi $\varepsilon \rightarrow 0$.

Để chứng minh v liên tục Lipschitz trong $Y_0 \times [0, T]$, ta chỉ cần chứng minh rằng, với bất kỳ $t \in [0, T]$ cố định, $x \mapsto v(x, t)$ là liên tục Lipschitz trong Y_0 , và với bất kỳ $x \in Y_0$ cố định, $t \mapsto v(x, t)$ là liên tục Lipschitz trong $[0, T]$. Thật vậy, cố định $t \in [0, T]$, và lấy $x, \bar{x} \in Y_0$. Theo tính chất compact của tập $\mathcal{S}_{[0, T]}(\bar{x})$, tồn tại nghiệm $\bar{y}(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(\bar{x})$ sao cho

$$v(\bar{x}, t) = \varphi(\bar{y}(t)).$$

Theo tính chất liên tục Lipschitz của φ , ta có

$$\begin{aligned} v(x, t) - v(\bar{x}, t) &= \inf_{y(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)} \varphi(y(t)) - \varphi(\bar{y}(t)) \\ &\leq \varphi(y(t)) - \varphi(\bar{y}(t)) \\ &\leq L_\varphi |y(t) - \bar{y}(t)|, \end{aligned}$$

với mọi $y(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)$, trong đó L_φ là hằng số Lipschitz của φ .

Hơn nữa, bằng cách áp dụng định lý của Filippov, tồn tại nghiệm $z(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)$ sao cho

$$|z(t) - \bar{y}(t)| \leq e^{kT} |x - \bar{x}|, \quad \forall t \in [0, T],$$

trong đó $k := k_F$ là hằng số Lipschitz của F . Từ đó suy ra

$$v(x, t) - v(\bar{x}, t) \leq L_\varphi |z(t) - \bar{y}(t)| \leq C |x - \bar{x}|,$$

trong đó $C := L_\varphi e^{kT}$.

Bằng cách thay đổi vai trò của x và \bar{x} , ta được

$$v(\bar{x}, t) - v(x, t) \leq C |\bar{x} - x|, \quad C := L_\varphi e^{kT},$$

và do vậy

$$|v(x, t) - v(\bar{x}, t)| \leq C |x - \bar{x}|, \quad C := L_\varphi e^{kT}.$$

Cố định $x \in Y_0$ và lấy $0 \leq t < \bar{t} \leq T$. Ta biết rằng hàm $v(x, \bar{t})$ thỏa mãn nguyên lý quy hoạch động, cụ thể là, với mọi $0 < \tau \leq \bar{t}$, ta có

$$v(x, \bar{t}) = \inf \{v(y(\tau), \bar{t} - \tau) : y(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)\}.$$

Do đó, tồn tại nghiệm $z(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)$ sao cho

$$v(z(\tau), \bar{t} - \tau) \leq v(x, \bar{t}) + |\bar{t} - t|.$$

Ta có

$$\begin{aligned} |v(x, t) - v(x, \bar{t})| &\leq |v(x, t) - v(z(\tau), \bar{t} - \tau)| \\ &\quad + |v(z(\tau), \bar{t} - \tau) - v(x, \bar{t})| \\ &\leq |v(x, t) - v(z(\tau), \bar{t} - \tau)| \\ &\quad + |\bar{t} - t| \\ &= |v(x, t) - v(z(\bar{t} - t), t)| \\ &\quad + |\bar{t} - t|, \end{aligned}$$

trong đó $\tau := \bar{t} - t \in (0, \bar{t}]$. Theo chứng minh trên, tồn tại $C > 0$ sao cho

$$\begin{aligned} |v(x, t) - v(z(\bar{t} - t), t)| &\leq C |x - z(\bar{t} - t)| \\ &= C |z(0) - z(\bar{t} - t)|. \end{aligned}$$

Hơn nữa, với mọi $x \in Y_0$, nghiệm liên tục tuyệt đối $z(\cdot) \in \mathcal{S}_{[0, T]}(x)$ có đạo hàm bị chặn trên $[0, T]$ (xem trong phần (ii) của phép chứng minh), nên $z(\cdot)$ liên tục Lipschitz trên $[0, T]$, nghĩa là, tồn tại hằng số $L > 0$ sao cho

$$|z(0) - z(\bar{t} - t)| \leq L |\bar{t} - t|.$$

Từ đánh giá trên, ta nhận được

$$|v(x, t) - v(x, \bar{t})| \leq (CL + 1) |\bar{t} - t|.$$

(ii) Như đã đề cập ở nhận xét phía trên, ta sẽ áp dụng kết quả trong [8] để khẳng định rằng v là nghiệm nhất của bài toán (3.5). Trước tiên ta kiểm tra một số giả thiết cơ bản mà ánh xạ đa trị $F(\cdot)$ được thỏa mãn:

Rõ ràng, $F(\cdot)$ là liên tục Lipschitz địa phương và nhận giá trị lồi, compact (Bổ đề 2.1).

Hơn nữa, với mọi $x \in \mathbb{R}^n$, $z \in Z \subset \mathbb{R}^m$, và $a \in A$, theo giả thiết (A1)-(A2), ta dễ dàng kiểm tra được

$$|f(x, z, a)| \leq C_f(|x| + 1), \text{ với hằng số } C_f > 0.$$

Với mọi $v \in F(x)$, tồn tại $\mu \in \mathcal{M}(x)$ sao cho $v = f^r(x, \mu)$, và ta có đánh giá

$$\begin{aligned} |v| &= |f^r(x, \mu)| = \left| \int_{Z \times A} f(x, z, a) d\mu(z, a) \right| \\ &\leq \int_{Z \times A} |f(x, z, a)| d\mu(z, a) \leq C_f(|x| + 1). \end{aligned}$$

Do đó

$$\sup_{v \in F(x)} |v| \leq C_f(|x| + 1), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Bằng cách áp dụng Định lý 2.3 trong tài liệu tham khảo,⁸ ta có thể kết luận được v là nghiệm nhất của bài toán (3.5).

Để khẳng định v là nghiệm duy nhất của bài toán (3.5), ta chỉ cần kiểm tra rằng Hamilton giới hạn $\bar{H}(x, p)$ thỏa mãn nguyên lý so sánh trong lý thuyết nghiệm nhất, cụ thể là điều kiện liên tục Lipschitz. Thật vậy, với mọi $x, p, q \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} |\bar{H}(x, p) - \bar{H}(x, q)| &\leq \sup_{v \in F(x)} |v \cdot (p - q)| \\ &\leq |p - q| \sup_{v \in F(x)} |v| \\ &\leq C_f(|x| + 1)|p - q|. \end{aligned}$$

Với mọi $R > 0$, $p \in \mathbb{R}^n$ và $x, y \in B(0, R)$, vì $F(x)$ là tập compact nên tồn tại $v \in F(x)$ sao cho

$$\bar{H}(x, p) = -p \cdot v.$$

Hơn nữa, vì $F(\cdot)$ liên tục trong $B(0, R)$, tồn tại $w \in F(y)$ sao cho

$$|v - w| \leq L|x - y|.$$

Ta có,

$$\bar{H}(x, p) - p \cdot w \leq -p \cdot v + \bar{H}(y, p).$$

Điều này suy ra

$$\bar{H}(x, p) - \bar{H}(y, p) \leq p \cdot (w - v)$$

$$\begin{aligned} &\leq |p||w - v| \\ &\leq L|p||x - y|. \end{aligned}$$

Một cách tương tự, bằng cách đổi vai trò của x và y , ta được

$$\bar{H}(y, p) - \bar{H}(x, p) \leq L|p||y - x|.$$

Do đó

$$\begin{aligned} |\bar{H}(x, p) - \bar{H}(y, p)| &\leq L|p||x - y| \\ &\leq L|x - y|(|p| + 1). \end{aligned}$$

Bằng cách áp dụng Định lý III.3.15 trong tài liệu,⁶ v là nghiệm nhất duy nhất của bài toán (3.5). \square

Như đã đề cập ở phần trước, ý tưởng tự nhiên để khảo sát dáng điệu giới hạn của tập đạt được $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$ là sử dụng kết quả xấp xỉ quỹ đạo chậm, xem Mệnh đề 2.2. Từ định nghĩa của tập $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$, giới hạn của $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$ có dạng

$$\mathcal{R}_C(t) =$$

$$\left\{ x \in Y_0 \mid \exists y_x(\cdot) \text{ nghiệm (2.3) : } y_x(t) \in C \right\}.$$

Tuy nhiên cách định nghĩa này có thể gây khó khăn trong phép chứng minh do tính trừu tượng của bao hàm thức vi phân (2.3), sự thiếu hụt thông tin và sự phức tạp của công thức metric Hausdorff. Để vượt qua các trở ngại này, theo tinh thần của Định lý 3.1, ta đề xuất sử dụng cách tiếp cận tập mức để mô tả giới hạn của tập đạt được $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$ như là vùng âm của hàm giá trị tối ưu v , nghĩa là giới hạn của tập $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$ có thể được mô tả bởi

$$\tilde{\mathcal{R}}_C(t) := \{x \in Y_0 : v(x, t) \leq 0\}.$$

Định lý sau đây khẳng định tập $\mathcal{R}_C^\varepsilon(t)$ hội tụ đều đến $\tilde{\mathcal{R}}_C(t)$ trong $[0, T]$, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, và hơn nữa tập $\tilde{\mathcal{R}}_C(t)$ trùng với tập $\mathcal{R}_C(t)$ với mọi $t \in [0, T]$.

Định lý 3.3. Giả sử (A1)-(A5) được thỏa mãn và (2.1) là điều kiện được địa phương. Khi đó, tập đạt được $\mathcal{R}_c^\varepsilon(t)$ hội tụ đều, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, đến tập $\tilde{\mathcal{R}}_c(t)$ trên $[0, T]$, trong đó $0 < T < +\infty$. Sự hội tụ được hiểu theo nghĩa của metric Hausdorff,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} d_H(\mathcal{R}_c^\varepsilon(t), \tilde{\mathcal{R}}_c(t)) = 0, \quad \forall t \in [0, T].$$

Hơn nữa,

$$\tilde{\mathcal{R}}_c(t) = \mathcal{R}_c(t), \quad \forall t \in [0, T].$$

Chứng minh. Để cho đơn giản, ta dùng các kí hiệu \mathcal{R}^ε , \mathcal{R} và $\tilde{\mathcal{R}}$ thay thế cho, một cách tương ứng, $\mathcal{R}_c^\varepsilon(t)$, $\mathcal{R}_c(t)$ và $\tilde{\mathcal{R}}_c(t)$ với mọi $t \in [0, T]$. Nhắc lại rằng, khoảng cách Hausdorff giữa hai tập \mathcal{R}^ε và $\tilde{\mathcal{R}}$ được xác định bởi

$$d_H(\mathcal{R}^\varepsilon, \tilde{\mathcal{R}}) = \max \left\{ \sup_{x_\varepsilon \in \mathcal{R}^\varepsilon} d(x_\varepsilon, \tilde{\mathcal{R}}), \sup_{x \in \tilde{\mathcal{R}}} d(x, \mathcal{R}^\varepsilon) \right\}.$$

Lấy dãy $\{\varepsilon_n\}_{n \geq 1}$ sao cho $\varepsilon_n \rightarrow 0$, khi $n \rightarrow \infty$. Ta sẽ chứng minh rằng

$$d_H(\mathcal{R}^{\varepsilon_n}, \tilde{\mathcal{R}}) \rightarrow 0, \quad \text{khi } n \rightarrow \infty.$$

Lấy $x_{\varepsilon_n} \in \mathcal{R}^{\varepsilon_n}$. Trước tiên ta chứng minh sự tồn tại của phần tử $x \in \tilde{\mathcal{R}}$ sao cho

$$|x_{\varepsilon_n} - x| \rightarrow 0, \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

Thật vậy, vì $x_{\varepsilon_n} \in Y_0, \forall n \geq 1$, tồn tại dãy con (để đơn giản, ta giữ nguyên kí hiệu) sao cho

$$x_{\varepsilon_n} \rightarrow x \in Y_0, \quad \text{khi } n \rightarrow \infty.$$

Vì $x_{\varepsilon_n} \in \mathcal{R}^{\varepsilon_n}$, theo Định lý 3.1, ta có

$$v^{\varepsilon_n}(x_{\varepsilon_n}, \zeta_{\varepsilon_n}, t) \leq 0, \quad \text{với } \zeta_{\varepsilon_n} \in Z_0.$$

Cho $n \rightarrow \infty$, và bởi sự hội tụ đều của v^ε đến v trong $Y_0 \times Z_0 \times [0, T]$, khi $\varepsilon \rightarrow 0$, ta nhận được

$$v(x, t) \leq 0.$$

Do vậy, $x \in \tilde{\mathcal{R}}$. Tức là ta đã chứng minh được

$$\sup_{x_{\varepsilon_n} \in \mathcal{R}^{\varepsilon_n}} d(x_{\varepsilon_n}, \tilde{\mathcal{R}}) \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Tiếp theo, lấy $x \in \tilde{\mathcal{R}}$. Vì $x \in Y_0$, và Y_0 là tập compact, tồn tại dãy con trong Y_0 , kí hiệu là x_{ε_n} , $x_{\varepsilon_n} \neq x, \forall n \geq 1$ sao cho

$$x_{\varepsilon_n} \rightarrow x, \quad \text{khi } n \rightarrow \infty.$$

Ta sẽ chứng minh rằng $x_{\varepsilon_n} \in \mathcal{R}^{\varepsilon_n}$. Thật vậy, bởi kết quả hội tụ đều, với mọi $\zeta \in Z_0$, và bất kì $\delta > 0$, tồn tại $n_0 > 0$ sao cho với mọi $n \geq n_0$,

$$v^{\varepsilon_n}(x_{\varepsilon_n}, \zeta, t) \leq v(x_{\varepsilon_n}, t) + \delta.$$

Vì $x \in \tilde{\mathcal{R}}$, nên $v(x, t) \leq 0$. Bởi tính chất liên tục của v , ta được $v(x_{\varepsilon_n}, t) \leq 0$ với n đủ lớn. Hơn nữa, vì $\delta > 0$ có thể được chọn bé tùy ý, cho $\delta \rightarrow 0$, ta được

$$v^{\varepsilon_n}(x_{\varepsilon_n}, \zeta, t) \leq 0, \quad \text{với } n \text{ đủ lớn.}$$

Do vậy, $x_{\varepsilon_n} \in \mathcal{R}^{\varepsilon_n}$ với n đủ lớn, và do đó

$$\sup_{x \in \tilde{\mathcal{R}}} d(x, \mathcal{R}^{\varepsilon_n}) \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Vậy,

$$d_H(\mathcal{R}^{\varepsilon_n}, \tilde{\mathcal{R}}) \rightarrow 0,$$

với mọi dãy $\varepsilon_n \rightarrow 0$, khi $n \rightarrow \infty$. Do đó,

$$d_H(\mathcal{R}^\varepsilon, \tilde{\mathcal{R}}) \rightarrow 0, \quad \text{khi } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Bây giờ ta chứng minh phần thứ hai của định lý. Lấy $x \in \tilde{\mathcal{R}}$, khi đó

$$v(x, t) \leq 0.$$

Theo tính chất compact của tập các nghiệm của bao hàm thức vi phân (2.3) (Xem Nhận xét 2.4), tồn tại nghiệm $\bar{y}_x(\cdot)$ of (2.3) sao cho

$$v(x, t) = \varphi(\bar{y}_x(t)) \leq 0.$$

Do đó, $\bar{y}_x(t) \in \mathcal{C}$, và do vậy $x \in \mathcal{R}$.

Ngược lại, giả sử $x \in \mathcal{R}$. Tồn tại nghiệm $\bar{y}_x(\cdot)$ của (2.3) sao cho $\bar{y}_x(t) \in \mathcal{C}$, do đó $\varphi(\bar{y}_x(t)) \leq 0$. Điều này suy ra

$$v(x, t) := \inf \varphi(y_x(t)) \leq \varphi(\bar{y}_x(t)) \leq 0.$$

Do vậy, $x \in \tilde{\mathcal{R}}$. □

Nhận xét 3.2. Với các giả thiết (A1), (A2), (A4), (A5) và tính điều khiển được địa phương, ta dễ dàng kiểm tra được các tập $\tilde{\mathcal{R}}_{\mathcal{C}}(t)$ và $\mathcal{R}_{\mathcal{C}}(t)$ là đóng, và do đó compact trong \mathbb{R}^n với mọi $t \in [0, T]$. Trong khi đó giả thiết (A3) là cần thiết để đảm bảo tính chất đóng của tập $\mathcal{R}_{\mathcal{C}}^{\varepsilon}(t)$, với $t \in [0, T]$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. O. Alvarez, M. Bardi. Viscosity solutions methods for singular perturbations in deterministic and stochastic control. *SIAM J. Control Optim.*, **2001**, 40 (4), 1159-1188.
2. O. Alvarez, M. Bardi. Singular perturbations of nonlinear degenerate parabolic PDEs: a general convergence result. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **2003**, 170 (1), 17-61.
3. O. Alvarez, M. Bardi. Ergodicity, stabilization, and singular perturbations for Bellman-Isaacs equations, *Mem. Amer. Math. Soc.*, **2010**, 204 (960), 1-77.
4. Z. Artstein, V. Gaitsgory. The value function of singularly perturbed control systems, *Appl. Math. Optim.*, **2000**, 41 (3), 425-445.
5. Z. Artstein. On the value function of singularly perturbed optimal control systems, *43rd IEEE Conference on Decision and Control*, **2004**, December 14-17, Atlantis, Paradise Island, Bahamas.
6. M. Bardi, I. Capuzzo Dolcetta. *Optimal control and viscosity solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman equations*, Birkäuser, Boston, 1997.
7. O. Bokanowski, N. Forcadel, H. Zidani. Reachability and minimum times for state constrained nonlinear problems without any controllability assumption, *SIAM J. Control Optim.*, **2010**, 48 (7), 4292-4316.
8. H. Frankowska. Lower semicontinuous solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman equations, *SIAM J. Control Optim.*, **1993**, 31(1), 257-272.
9. V. Gaitsgory. Suboptimization of singularly perturbed control systems, *SIAM J. Control Optim.*, **1992**, 30 (5), 1228-1249.
10. V. Gaitsgory. On representation of the limit occupational measures set of a control systems with applications to singularly perturbed control systems, *SIAM J. Control and Optimization*, **2004**, 43 (1), 325-340.
11. V. Gaitsgory, A. Leizarowitz. Limit occupational measures set for a control system and averaging of singularly perturbed control system, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **1999**, 233, 461-475.
12. V. Gaitsgory, M.T. Nguyen. Multiscale singularly perturbed control systems: Limit occupational measures sets and averaging, *SIAM J. Control and Optimization*, **2002**, 41 (3), 954-974.

13. G. Grammel. Averaging of singularly perturbed systems, *Nonlinear Anal. Theory*, **1997**, 28 (11) 1851-1865.
14. T. Nguyen, A. Siconolfi. Singularly perturbed control systems with noncompact fast variable, *J. Differential Equations*, **2016**, 261 (8), 4593-4630.
15. Nguyen Ngoc Quoc Thuong. Asymptotic behaviour of singularly perturbed control systems in the non-periodic setting, *PhD thesis, University of Rome "La Sapienza", Rome, Italy*, **2015**.

Một kỹ thuật xây dựng tập dữ liệu huấn luyện dựa trên tiếp cận gom cụm

Lê Thị Kim Nga^{1,*}, Đinh Thị Mỹ Cảnh¹

¹Khoa Công nghệ thông tin, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 27/03/2019; Ngày nhận đăng: 16/07/2019

TÓM TẮT

Đi cùng với quá trình phát triển các hệ thống nhận dạng đó là việc xây dựng những bộ dữ liệu huấn luyện không những cần thể hiện tốt về đối tượng được quan tâm mà còn cần hiệu quả, phù hợp với mô hình học máy được lựa chọn. Bài báo này trình bày một kỹ thuật xử lý lựa chọn tập dữ liệu theo tiếp cận gom cụm nhằm loại bỏ bớt những mẫu rất giống nhau. Kỹ thuật được cài đặt thử nghiệm để xây dựng tập dữ liệu đầu vào cho mô hình K-láng giềng gần nhất và đã chứng tỏ sự hiệu quả với nhiều bộ dữ liệu, cụ thể là dữ liệu sinh ngẫu nhiên theo phân phối chuẩn, bộ dữ liệu chữ số viết tay MNIST và bộ dữ liệu mặt YawDD.

Từ khóa: Xây dựng mẫu huấn luyện, Thuật toán K-láng giềng gần nhất, Thuật toán K-means, nhận diện khuôn mặt, phát hiện khuôn mặt.

*Tác giả liên hệ chính.

Email: kimnga78@gmail.com

A Technique For Training Data Selection Based On Clustering

Le Thi Kim Nga^{1,*}, Dinh Thi My Canh

¹Faculty of Information Technology, Quy Nhon University

Received: 27/03/2019; Accepted: 16/07/2019

ABSTRACT

Along with the development of recognition systems, buiding training data sets not only needs to express well on the object of interest but also needs to be effective, consistent with the selected machine learning model. This article presents a processing technique for selecting data sets basing on clustering approach to reduce the very similar samples. This technology was installed, tested on trial to select input data for K-nearest neighbors model and proved its effectiveness with many data sets, namely the data generated randomly in standard distribution, MNIST database- data sets of handwritten digits and YawDD face data sets.

Keywords: *Training sample selection, K_Nearest Neighbors, K means, Face recognition, Face Detection.*

1. INTRODUCTION

The training data sets always play a vital role in every recognition system. For each system, the quality of recognition not only depends on the classification method and the parameter selection but also depends directly on the quality of the training data sets. Basically, learning of classification model is the corrective process of the model that is the best fit for input training data. The quality of the training data sets can be decreased because of many reasons such as the errors in data labeling, the imbalance of quantity and the diversity of observed patterns.³

For example, the implementation of the data collection for a face recognition system may appear many problems and challenges that result in the imbalance of the data sets. In general, the diversity of variants of the face image data depends on many factors including lighting, pose, individuals, facial expressions. In other

words, personal factors are only a part of the face recognition system. In fact, two images of two people taken at the same time are more similar than that of a person taken at two different times.² Concern with this difference, when collecting a person's data at the same time, the face patterns are often very similar. Hence, a person can have the images of multiple faces but a lot of them are very similar. Multiple classifiers based on statistics, many patterns group similar can affect adversely learning result. For example, learning process based on minimum objective function is calculated by mean error of the samples, or case of K nearest neighbors algorithm, when the result was effected base of majority statistics, any sample is near to the similar group, then the high probability classification result will belong to that sample group. Other way, in some cases, a lot of similar samples have influence to the processing time and storage memory. Besides, because the conditions of meeting each one are

*Corresponding author:

Email: kimnga78@gmail.com

different that can lead to less data or more data of people.⁵

One way to handle data problems with similarity multiple data sets is to select a subset of patterns to learn. This can directly reduce the effect of the similar patterns. The approach to selecting this subset of data is also applied by some research groups in their specific problems. In a recent study, the authors analyze the effect of selecting data from the classifier Random Forest on remote sensing data on peat.³ Abe author group used the Mahalanobis distance to estimate the boundary points to speed up the training of vector support machines by just learning these data.¹ Jigang Wang author group proposed two methods of data selection also serve for SVM learning⁶. The first method is based on similarity measure calculating by erecting (construct) spheres around the samples; the second method is based on Hausdorff distance, according that will use the minimum distance from the sample set to samples that belong to other class and use it as criteria for selected samples near boundary.

This paper presents the method for data processing that is based on clustering. The patterns with the same role will form a cluster that has a represented pattern. The design of the specific technique should be based on the method of recognition used since the nature of clustering is to create the data sets for identification. We applied the clustering technique that is based on K means algorithm. However, the distance thresholds for clustering have been used rather than the cluster numbers. The obtained results were tested with the K Nearest Neighbors method.

2. SOME RELATED RESEARCH

2.1. K_means

K_means is an important algorithm and used popular in cluster approach.⁷ The main idea of the K_means algorithm is to classify objects that was put down into k cluster (K is the number of clusters that is predefined, K is a positive integer) so that the sum of the squares

distance between objects and the group centroid is minimal.

The K means algorithm is described in the following figure:

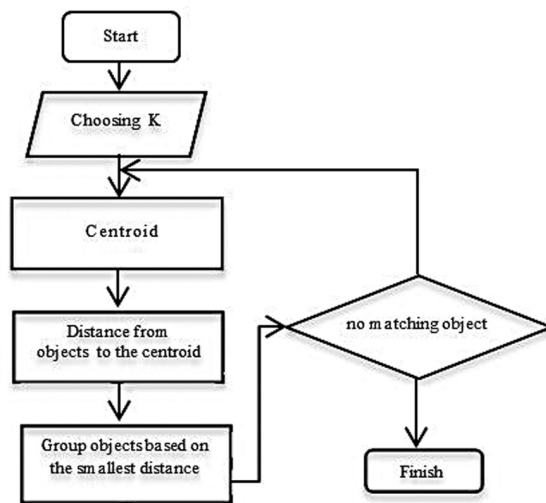


Fig 1. Describe the K means algorithm

The K means algorithm is implemented through the following steps:

- 1) Random selection K centroid for K cluster. Each centroid defines one of the cluster;
- 2) To calculate the distance between the objects and K centroid (often use Euclidean distance);
- 3) Group the objects into the nearest group;
- 4) Update the new centroid for the groups;
- 5) Repeat step 2 until there are no group changes of objects.

The K means algorithm is applied in WeKa tool software (Waikato Environment for Knowledge Analysis), that is a machine learning software, developed by the University of Waikato New Zealand.

2.2. K_Nearest Neighbors

K_Nearest Neighbors (K_NN) is used common in the Data Mining. K_NN is a method for clustering objects based on the nearest distance between the objects need to be classified and all object in the training data set.

Each object is clustered based on its neighbors K. K is positive integer and prechosen when the algorithm is executed. User usually use Euclidean distance to calculate distance between objects.

The K_NN algorithm is described below:

6) Initial estimates for the K centroids (the number of Nearest Neighbors);

7) Calculate the distance between the object to be classified (Query Point) and all object in the training data set (often use Euclidean distance);

8) Sort the distance in ascending order and identify K-Nearest Neighbors to Query Point;

9) Takes all classes of K_Nearest Neighbors defined;

10) Based on the most class of K_Nearest Neighbors to determine the class for Query Point.

In the figure below, the training data set is represented by a plus sign (+) and a minus sign (-), the object needs to be defined for it (the Query Point) is a black circle. Our task is to estimate (or predict) the class of Query Point based on the selection number of the nearest neighbor to it. In other words, we want to know whether Query Point will be assigned to the class (+) or class (-):

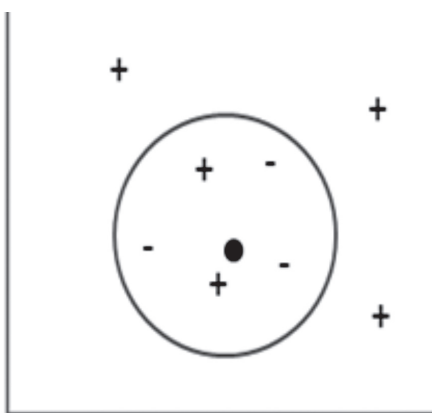


Fig 2. For example, the training data set

We see that:

1 Nearest Neighbors: The result is + (Query Point is assigned into class plus sign (+));

2 Nearest Neighbors: No class defined for Query Point because the number of the Nearest Neighbors of it is two, in that 1 is plus class and 1 is minus class (no class has more objects than the other);

5 Nearest Neighbors: Result is - (the Query Point is assigned into minus sign class because in 5 Nearest Neighbors of it, there are 3 objects belong to minus sign class, 2 object belong to plus sign class, the minus sign has more class than the plus sign).

3. ALGORITHM

Our method use to process local for each class in data set. Accordingly, each class of data will be clustered. Each cluster will be extracted a representative sample that was used to the result set. Thus, the data use to learn for each class will have the same number as clusters that is representative samples of classes. This method also toward the possibility of adding up online sample to the data set and serve the actual requirement is the samples may need to be gradually incorporated into the system data. Such as, input data set has many classes, we process each class with multiple clusters, and each cluster is a set of sample with a certain similarity to each other.

3.1. Construct each cluster

A cluster include a set of samples belong to a class. For the convenience in calculation 1 cluster, we construct set M. This set is described below:

- 1) If the cluster has 1 sample, M is empty.
- 2) If the cluster has 2 sample, $M = \{\{m_{10}\}\}$.
- 3) If the cluster has 3 sample, $M = \{\{m_{10}\}, \{m_{20}, m_{21}\}\}$.
- 4) If the cluster has 4 sample, $M = \{\{m_{10}\}, \{m_{20}, m_{21}\}, \{m_{30}, m_{31}, m_{32}\}\}$.

In there, m_{ij} is the distance between sample i and sample j.

InnerMetrics set allows to be constructed sequentially when it is incremented the sample

into cluster, and cluster also to be constructed by incremented each sample. The cluster is represented by couple $\langle U, M \rangle$, U is the sample set of cluster. The incremental sample process is described below:

Sign: enroll ($s, \langle U, M \rangle$)

Input: sample s , cluster $\langle U, M \rangle$

Output: new cluster $\langle U, M \rangle$

Process:

1. size = $|U|$
2. $U \leftarrow s$
3. if size > 0 then
4. $V = \text{empty}$
5. foreach i in $[0, \text{size})$
6. $V \leftarrow \text{distance}(s, u_i)$
7. endfor
8. $M \leftarrow V$
9. endif

The representative sample of the cluster was chosen which have total distance to the remaining samples is minimal. The function calculates the total distance of a sample to the remaining samples as follows:

Sign: sumInner($\text{idx}, \langle U, M \rangle$)

Input: idx order of the sample, $\langle U, M \rangle$ cluster

Output: total distance value

Process:

1. sum = 0
2. foreach i in $[0, \text{idx})$
3. sum = sum + $M[\text{idx} - 1][i]$;
4. endfor
5. foreach i in $[\text{idx}, |M|)$
6. sum = sum + $M[i][\text{idx}]$;
7. endfor
8. return sum

3.2. Building class

Essentially of construct a class is create its clusters. The construction is also designed

according to the criteria to incremented each sample into the class. New sample will be considered for put into the cluster already in the class. If we can't find it, we set up a new cluster with the only element that is the current sample. A sample is considered belong to the cluster if the sample is the most nearest to the cluster and the distance is less than a given threshold. The distance between the sample and the cluster is the distance of that sample to the representative of the cluster.

Sign $C = \{ \langle U_0, M_0 \rangle, \langle U_1, M_1 \rangle, \dots, \langle U_{m-1}, M_{m-1} \rangle \}$ is current class and had m cluster.

The new admissions are described below:

Sign: enroll (s, C)

Input: sample s , class C

Output: new class C

Process:

1. clusID = - 1
2. minMetric = - 1
3. if $|C| > 0$ then
4. clusID = 0
5. minMetric = distance ($\langle U_0, M_0 \rangle, s$)
6. foreach i in $[1, |C|)$
7. $d = \text{distance}(\langle U_i, M_i \rangle, s)$
8. if $d < \text{minMetric}$ then
9. minMetric = d
10. clusID = i
11. endif
12. endfor
13. endif
14. if clusID = - 1 OR
minMetric $>$ clusterThreshold
- then
15. init ($\langle U_m, M_m \rangle$)
16. $C \leftarrow \langle U_m, M_m \rangle$
17. clusID = m
18. endif
19. enroll ($s, \langle U_m, M_m \rangle$)

4. TESTING

The algorithm was tested to the data processing to make learning data for K_Nearest Neighbors classifier. The testing is also performed with threshold levels different cluster that will be get different levels of data selection. On the basis of conducting with many levels, we can compare the variance of the quality of classification, the test time corresponds to the sample rate used for training. The algorithm was tested in the different data set. That is randomized data, album of handwritten digits and YawDD surface video data set.

4.1. Randomized data

We were tested in randomized data based on standard distribution, the value on each dimension is created in [0,1]. Whereby, we were prechosen the dimension number of sample, the number of class will test and the sample number of each class. The data set generated that will be tested by cross-validation.

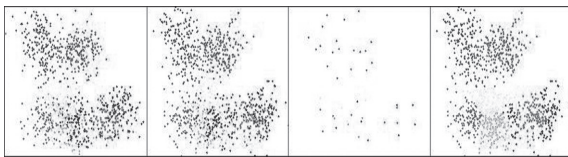


Fig 3. For test example, from left to right: the training data, the testing data, the sample set from the clusters, the result.

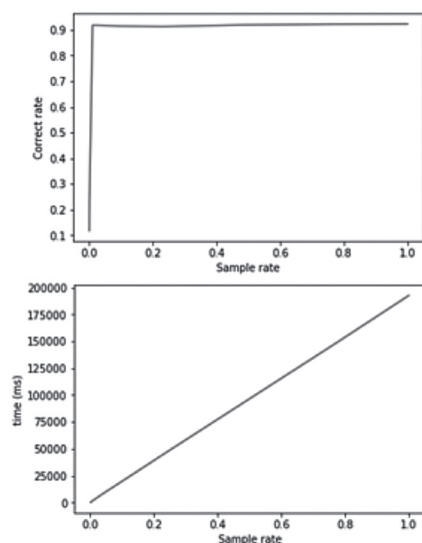


Fig 4. The testing in randomized data: cross-validation 2 fold, data generate 100 classes, each class has 2000 sample, characteristic length 4, K-Nearest Neighbors with $k=9$.

The experiment was carried out in a way of cross-validation 2 folds, 100 classes of data and 2000 samples per class. Both charts in accurately represent the prediction results by the suggested method (Fig 4). Because the implementation will need to calculate the distance to the samples in the data set, the processing time will increase linearly with the number of samples and more importantly, the idea of the algorithm has been confirmed when the accuracy increases very fast in a range of sample rates which closes to 0 and stable after that interval to 1. That is, we can use a small number of samples to produce quality equivalent to a large samples. In that case, time advantage will be evident on the time chart.

4.2. MNIST

MNIST is a database of handwritten digits that contains a training set of 60,000 examples and a test set of 10,000 examples³. The MNIST database is commonly used for testing handwritten digits identification system, especially, classification technique use deep learning. In this test scope, techniques in the paper will be applied to the training data set and this result will be used to learning in K Nearest Neighbors. Thence, we evaluate the change of accuracy and testing time (Fig 5).

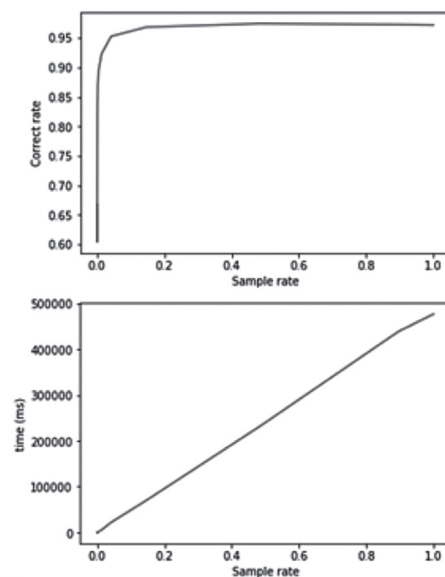


Fig 5. Testing with MNIST: K_Nearest Neighbors with $k=3$

The idea of the algorithm is also clearly shown with the experiment on MNIST and is similar to random data. Accuracy increases rapidly and reaches the highest level in a small range of sample rates while processing time still increases linearly with the sample rate. This test has also proved the judgment of the idea in the article.

4.3. YawDD

YawDD (Yawning Detection Dataset) is a video database that contains two data sets mirror and dash, capture face data of the driver with different facial features⁴. Capture data consisting of both male and female drivers, with and without glasses, from different ethnicities, mouth conditions such as normal, talking/singing, and yawning while driving. The video are taken in varying illumination conditions. This data set includes 349 video of 57 men and 50 woman, resolution of 640×480, 30 frames per second, AVI format without audio. Testing is done on the mirror data set, consisting of 47 man and 43 women, the total is 320 video. For each video, we extract each facial image region in the frames and regroup to make the testing data. The face was detected by Haar Adaboost technique and then the face data regions were extracted based on AAM technique^{2,5}. Later, we have a data set of 90 people with 65595 samples, a length of each sample is 4573. That data set was tested with the K Nearest Neighbors technique based on cross-validation. Thus, techniques in the paper will also be applied to the training data set and its result used to learning data for the K Nearest Neighbors, on that basis, we evaluate the change of a accuracy and testing time.

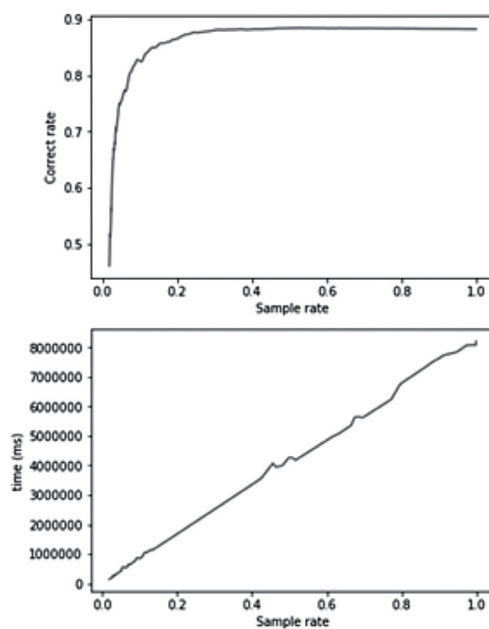


Fig 6. Testing with YawDD: cross-validation 2 fold, the K_Nearest Neighbors with k=3

In Fig 6, it is easy to see the similarity of the two charts in the experiment with YawDD with previous tests. This also once again demonstrates the idea of the algorithm. By these tests, we have absolutely the basis to build an identifier with a small enough sample number but still achieve the same accuracy with a large data set with reasonable sample selection. This will create a discrete time advantage for the identification system.

From the tests, it can be seen that the test time always varies with the sample rate used for the training. It is true that the nearest K neighbor technique is performed on the basis of a comparison of each sample and the nearest statistic. In addition, in the diagrams depicting the correlation between the precision and the sample rate used. It can be seen that even with many levels of sample usage, there is no significant change in accuracy when compared to using full data to learn. Thus, with the tried-and-tested data sets, according to the approach of the proposed technique and the optimum sampling rate, we can significantly reduce the test time as well as the memory used for storage.

5. CONCLUSION

In fact, building a recognition system involves many steps in which building a training data set is one of the decisive steps. Building a training data set not only needs to well representation observed variants of the object of interest but also needs to avoid duplication and needs to be consistent with the machine learning method used. This paper presents the method for data processing based on clustering. This method was designed to be able to add online patterns to a data set, serving the actual demand of gradually adding patterns to the system data. The technique has been tested and demonstrated to be effective with the K_Nearest Neighbors model.

REFERENCES

1. Abe, S., & Inoue, T. *Fast training of support vector machines by extracting boundary data*, In International Conference on Artificial Neural Networks, Springer, Berlin, Heidelberg, 2001, 308-313.
2. Cootes, T. F., Edwards, G. J., & Taylor, C. J. Active appearance models, *IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence*, **2001**, 23(6), 681-685.
3. Millard, K., & Richardson, M. On the importance of training data sample selection in random forest image classification: A case study in peatland ecosystem mapping, *Remote sensing*, **2015**, 7(7), 8489-8515.
4. S. Abtahi, M. Omidyeganeh, S. Shirmohammadi, and B. Hariri. "YawDD: A Yawning Detection Dataset", *Proc. ACM Multimedia Systems, Singapore*, **2014**, 24-28.
5. Viola, P., & Jones, M. Rapid object detection using a boosted cascade of simple features, In Computer Vision and Pattern Recognition, *Proceedings of the 2001 IEEE Computer Society Conference*, **2001**, 1, I-I.
6. Wang, J., Neskovic, P., & Cooper, L. N. *Training data selection for support vector machines*, In International Conference on Natural Computation, Springer, Berlin, Heidelberg, **2005**, 554-564.
7. Y. LeCun, L. Bottou, Y. Bengio, and P. Haffner. "Gradient-based learning applied to document recognition", *Proceedings of the IEEE*, **November 1998**, 86(11), 2278-2324.

Some biological characteristics of broadhead sleeper (*Eleotris melanosoma*) distributed in Thi Nai lagoon, Binh Dinh province

Do Thi Xuan Tru¹, Vo Van Chi^{1,*}

¹Faculty of Natural Sciences, Quy Nhon University

Received: 22/06/2019; Accepted: 14/08/2019

ABSTRACT

Broadhead sleeper (*Eleotris melanosoma*) is one of goby species inhabited in Thi Nai lagoon - Binh Dinh province which is seriously affected by the exploitation, however there is no study conducted on this species. Some biological characteristics of broadhead sleeper were examined from August 2018 to January 2019. Fish samples were collected once a month and their characteristics on feeding, growth and reproduction were examined. The results showed that morphological characteristics of digestive system of fish such as sharp teeth, clear stomach or short intestine indicated carnivorous feeding of this fish. The relative length of the gut (RLG) of fish was from 0.8 to 0.81. The composition of natural food of this fish included mollusc, crustacean and fish, with the occurrence frequency of 95.17%, 4.83% and 1.86% respectively. There was a high correlation between length and weight of gobies, with $R^2 = 0.9447$, and the relationship between these two parameters was expressed by the equation $W = 0.0054L^{3.3223}$. The spawning season of this goby species could be from October to December that was based on GSI and HSI recorded. From the analysis results of Gonadosomatic index (GSI) and Hepatosomatic index (HSI), it can be said that the spawning season of this goby species is from October to December. In general, the results collected from this study indicate that broadhead sleeper is carnivorous fish species and their spawning season in Thi Nai lagoon is concentrated in rainy months.

Keywords: Broadhead sleeper, *Eleotris melanosoma*, feeding habit, reproduction.

*Corresponding author.

Email: vovanchi@qnu.edu.vn or chiqnu@gmail.com

Một số đặc điểm sinh học của cá bống trướng (*Eleotris melanosoma*) phân bố tại đầm Thị Nại, tỉnh Bình Định

Đỗ Thị Xuân Trừ¹, Võ Văn Chí^{1,*}

¹Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 22/06/2019; Ngày nhận đăng: 14/08/2019

TÓM TẮT

Cá bống trướng (*Eleotris melanosoma*) là một trong những loài cá bống sinh sống ở đầm Thị Nại tỉnh Bình Định đang chịu tác động lớn từ việc khai thác, tuy nhiên chưa có nghiên cứu nào được tiến hành trên loài cá này. Một số đặc điểm sinh học của cá bống trướng được khảo sát từ tháng 8 năm 2018 đến tháng 1 năm 2019. Mẫu cá được thu mỗi tháng một lần và các đặc điểm về dinh dưỡng, sinh trưởng và sinh sản của cá được khảo sát. Những kết quả cho thấy rằng, hình thái cấu tạo của hệ tiêu hóa của cá thể hiện tính ăn động vật như cá có răng sắc nhọn, có dạ dày, ruột ngắn,...Chỉ số sinh trắc ruột (RLG) của cá dao động từ 0,8 đến 0,81. Thành phần thức ăn tự nhiên của cá gồm 3 nhóm là động vật thân mềm, giáp xác và cá, với tần số xuất hiện lần lượt là 95,17%, 4,83%, và 1,86%. Chiều dài và khối lượng của cá bống trướng có mối tương quan rất chặt, với $R^2 = 0,9447$ và mối quan hệ giữa khối lượng và chiều dài cá được biểu thị theo phương trình hồi qui $W = 0,0054L^{3,3223}$. Từ kết quả phân tích hệ số thành thực (GSI) và hệ số tích lũy năng lượng (HSI) có thể dự đoán rằng cá bống trướng có mùa vụ sinh sản từ tháng 10 đến tháng 12. Nhìn chung, những kết quả nghiên cứu cho thấy rằng, cá bống trướng là loài ăn động vật điển hình và mùa vụ sinh sản của cá ở đầm Thị Nại tập trung ở các tháng mùa mưa.

Từ khóa: Cá bống trướng, *Eleotris melanosoma*, đặc điểm dinh dưỡng, sinh sản.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Đầm Thị Nại là một đầm nước mặn lớn nhất Bình Định, có diện tích khoảng 5060 ha. Lượng nước ngọt hằng năm đổ vào đầm mang theo nguồn dinh dưỡng của đồng bằng đã tạo ra môi trường thuận lợi cho nhiều loài thủy sản nói chung và cá nói riêng sinh sống. Trong các loài cá xuất hiện ở đầm thì cá bống có thành phần loài tương đối phong phú. Theo Mai Đình Yên và cộng sự (1992),⁷ các loài cá bống xuất hiện ở nước ta thuộc 5 họ (Eleotridae, Gobiidae, Periophthalmidae, Apocrypteidae và Gobioididae). Cá bống trướng là một loài thuộc họ cá bống đen (Eleotridae) và là một trong những loài cá bống phổ biến ở hệ sinh thái đầm

Thị Nại. Cá bống trướng sống cả môi trường nước mặn, lợ và ngọt. Cá có kích thước nhỏ, thịt ngon (Nguyễn Minh Tuấn, 2016).⁶ Loài cá này trước đây chưa được xem là loài có giá trị kinh tế (Mai Đình Yên và cộng sự, 1992; Trương Thủ Khoa và Trần Thị Thu Hương, 1993; Nguyễn Văn Hào, 2005)^{1,2,7} nhưng gần đây giá trị của loài này dần được cải thiện. Hiện nay, cá bống trướng chủ yếu được khai thác từ tự nhiên, vì vậy nguồn lợi loài cá này đang có nguy cơ bị đe dọa. Mặc dù vậy, cho đến nay chưa có công trình nghiên cứu nào về đặc điểm sinh học của loài cá này ở đầm Thị Nại. Xuất phát từ thực tiễn như vậy, việc nghiên cứu một số đặc điểm sinh học của cá bống trướng (*Eleotris melanosoma*) phân bố tại đầm Thị Nại tỉnh Bình Định là cần thiết để làm cơ sở cho việc

*Tác giả liên hệ chính.

Email: vovanchi@qnu.edu.vn hoặc chiquan@gmail.com

bảo vệ nguồn lợi loài cá này nói riêng và nguồn lợi thủy sản trong đầm nói chung, đồng thời có thể hướng đến nuôi thương phẩm cá bống trứng trong tương lai.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Cá bống trứng (*Eleotris melanosoma*) phân bố ở đầm Thị Nại tỉnh Bình Định.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Thu và xử lý mẫu cá

Cá bống trứng được thu định kỳ hàng tháng ở đầm Thị Nại từ tháng 8/2018 đến tháng 1/2019, lưới lồng bắt quai là ngư cụ chính để bắt cá. Sau khi thu, cá sẽ được ướp lạnh và đem về phòng thí nghiệm Khoa học vật nuôi, khoa Sinh - KTNN, Trường Đại học Quy Nhơn để phân tích trong ngày hoặc cố định trong dung dịch formol 10% để phân tích sau.

269 cá thể cá được sử dụng để khảo sát tương quan chiều dài và khối lượng cũng như chỉ số sinh trắc ruột. 144 cá thể (có thức ăn trong ống tiêu hóa) được sử dụng để phân tích thức ăn tự nhiên của cá. 136 cá thể được sử dụng để phân tích các chỉ tiêu khác như hệ số thành thực, hệ số tích lũy năng lượng.

2.2.2. Khảo sát hệ tiêu hóa và xác định tập tính ăn của cá

- Mô tả đặc điểm của hệ tiêu hóa (tập trung vào các cơ quan như miệng, lược mang, và ruột) bằng việc kết hợp quan sát các đặc điểm bên ngoài và giải phẫu.

- Tập tính ăn của cá được xác định dựa vào mối tương quan giữa chiều dài ruột và chiều dài thân cá qua chỉ số sinh trắc ruột RLG (relative length of the gut) theo Al-Hussainy (1949).⁸

RLG được tính theo công thức sau:

$$RLG = \frac{Li}{L}$$

Trong đó: Li: Chiều dài ruột cá (cm);
L: Chiều dài toàn thân cá (cm)

2.2.3. Phân tích thức ăn tự nhiên của cá

- Giải phẫu cá để phân tích thức ăn tự nhiên trong dạ dày/ruột cá. Sử dụng kính hiển vi soi nổi và kính hiển vi quang học để phân tích và nhận dạng con mồi. Sử dụng các tài liệu phân loại của Kent và Volker (1998) và một số tài liệu hỗ trợ khác để định danh con mồi đến cấp phân loại thấp nhất có thể¹⁴.

- Xác định tần số xuất hiện (%O) của mỗi loại thức ăn bằng công thức sau (Hyslop, 1980)¹¹:

$$\%O_i = \left(\frac{\text{số lượng dạ dày cá chứa con mồi } i}{\text{tổng số dạ dày cá được khảo sát}} \right) \times 100$$

2.2.4. Tương quan giữa chiều dài và khối lượng thân cá

Quan hệ giữa chiều dài và khối lượng thân cá được xác lập dựa trên số mẫu cá thu được qua các tháng (269 mẫu) theo phương trình sau (Jennings và cộng sự, 2001)¹²:

$$W = a.L^b$$

Trong đó: W: là khối lượng thân cá (g),
L: chiều dài tổng của cá (cm), a: hằng số,
b: số mũ của mối quan hệ giữa chiều dài và khối lượng.

Mối tương quan giữa chiều dài và khối lượng thân cá được xác định thông qua hệ số R²

2.2.5. Hệ số thành thực (Gonadosomatic index - GSI)

Hệ số thành thực (GSI) được tính theo công thức sau (Josep và Hans-Joachim, 2000)¹³:

$$GSI (\%) = GW * 100 / W_n$$

Trong đó: GSI: Hệ số thành thực (%);
GW: Khối lượng tuyến sinh dục (g); Wn: Khối lượng cơ thể không nội quan (g).

2.2.6. Hệ số tích lũy năng lượng (Hepatosomatic index - HSI)

Hệ số tích lũy năng lượng (HSI) được tính theo công thức (Josep và Hans-Joachim, 2000):¹³

$$HSI = W_{gan} * 100 / W_n$$

Trong đó: HSI: Hệ số tích lũy năng lượng (%); W gan: Khối lượng gan (g); Wn: Khối lượng cơ thể không nội quan (g).

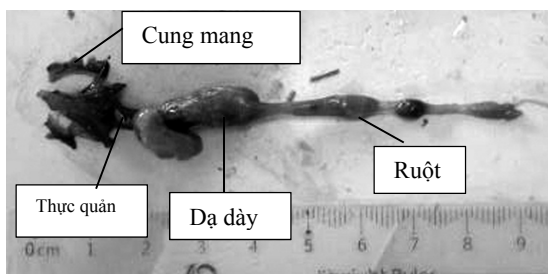
3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN

3.1. Hệ tiêu hóa và tập tính ăn của cá

Kết quả quan sát cơ quan tiêu hóa của cá bống trứng cho thấy: cá bống trứng có miệng trên, rộng, răng nhỏ, nhọn và phân bố đều ở hai hàm. Cá bống trứng có lưỡi phát triển, hình dẹp bằng và có đầu lưỡi tròn (Hình 1). Lược mang ngắn, mảnh, thưa và xếp thành hàng trên cung mang hướng vào trong xoang miệng. Thực quản dạng ống to, ngắn và có thể co giãn. Dạ dày có hình túi, vách dày, bên trong có nhiều nếp gấp. Ruột ngắn và có nhiều gấp khúc (Hình 2).



Hình 1. Hình thái miệng của cá bống trứng



Hình 2. Hình thái ống tiêu hóa cá bống trứng

Một chỉ số quan trọng để dự đoán tập tính ăn của cá là chỉ số sinh trắc ruột (RLG). Kết quả khảo sát được thể hiện ở Bảng 1.

Bảng 1. Chỉ số RLG của cá bống trứng

| Nhóm kích thước cá (cm) | Chiều dài thân L (cm) | Chiều dài ruột Li (cm) | RLG |
|-------------------------|-----------------------|------------------------|------|
| < 8 | 7,11 ± 0,62 | 5,72 ± 1,07 | 0,80 |
| 8 - 10 | 8,93 ± 0,58 | 7,18 ± 1,04 | 0,80 |
| > 10 | 10,87 ± 0,71 | 8,78 ± 1,3 | 0,81 |

Cá bống trứng có chỉ số RLG tương đối thấp và gần như không có sự khác biệt giữa 3 nhóm kích thước cá. Chỉ số RLG của 3 nhóm cá dao động từ 0,8 đến 0,81 (Bảng 1). Theo Nikolsky (1963),¹⁵ những loài cá ăn động vật thường có RLG ≤ 1. Như vậy, có thể nhận định rằng cá bống trứng thuộc nhóm cá ăn động vật.

Từ những đặc điểm về hình dạng, cấu tạo của cơ quan tiêu hóa và chỉ số RLG có thể thấy rằng, cá bống trứng là loài có tính ăn thiên về động vật. Tuy nhiên, để có những nhận định chính xác hơn, chúng tôi đã tiến hành phân tích thành phần thức ăn thực ăn tự nhiên của cá. Kết quả được thể hiện ở phần sau.

3.2. Thức ăn tự nhiên của cá

Kết quả phân tích thành phần thức ăn tự nhiên trong ruột cá bống trứng được thể hiện ở Bảng 2.

Bảng 2. Thức ăn tự nhiên của cá bống trứng

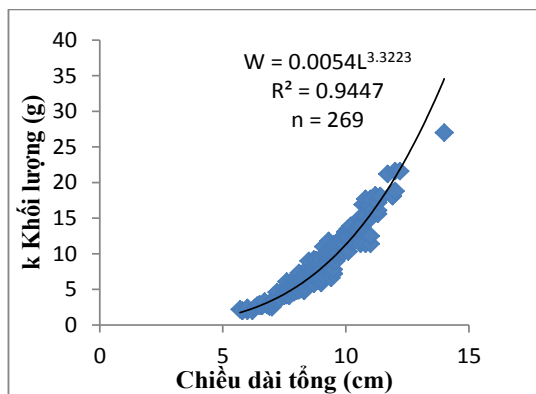
| Loại thức ăn | Số lần bắt gặp | Tần số xuất hiện (%O) |
|--------------------------------|----------------|-----------------------|
| Thân mềm | 136 | 94,44 |
| <i>Clea helena</i> | 26 | 18,06 |
| <i>Clithon oualaniense</i> | 97 | 67,36 |
| <i>Littoraria sp.</i> | 3 | 2,08 |
| <i>Neritina coromandeliana</i> | 2 | 1,39 |
| <i>Neripteron taitense</i> | 4 | 2,78 |
| <i>Neripteron violaceum</i> | 2 | 1,39 |
| <i>Clithon dispar</i> | 4 | 2,78 |
| <i>Clithon retropictus</i> | 1 | 0,69 |
| <i>Cyllene desnoyersi</i> | 2 | 1,39 |
| <i>Cerithidea cingulata</i> | 15 | 10,42 |
| <i>Cerithidea obtusa</i> | 1 | 0,69 |
| Giáp xác | 13 | 9,03 |
| Cá con | 5 | 3,47 |

Qua kết quả ở Bảng 2 chúng tôi thấy rằng thức ăn tự nhiên của cá bống trứng gồm 3 nhóm chính là động vật thân mềm, cá và giáp xác. Trong đó, động vật thân mềm có tần số xuất hiện cao nhất (94,44%), cá con xuất hiện với tần số thấp nhất (3,47%). Trong số những con mồi là động vật thân mềm thì *Clithon oualaniense* có

tần số xuất hiện cao nhất (67,36%), tiếp đến là *Clea helena* (18,06%). Như vậy, kết hợp kết quả phân tích thức ăn và hình thái giải phẫu hệ tiêu hóa có thể nhận định cá bống trứng là loài cá ăn động vật.

3.3. Tương quan chiều dài và khối lượng của cá bống trứng

Kết quả biểu thị mối tương quan giữa chiều dài và khối lượng của cá bống trứng được thể hiện ở Hình 3.



Hình 3. Tương quan giữa chiều dài tổng và khối lượng của cá bống trứng

Phương trình hồi qui biểu thị mối quan hệ giữa chiều dài tổng và khối lượng của cá bống trứng là $W = 0,0054L^{3,3223}$.

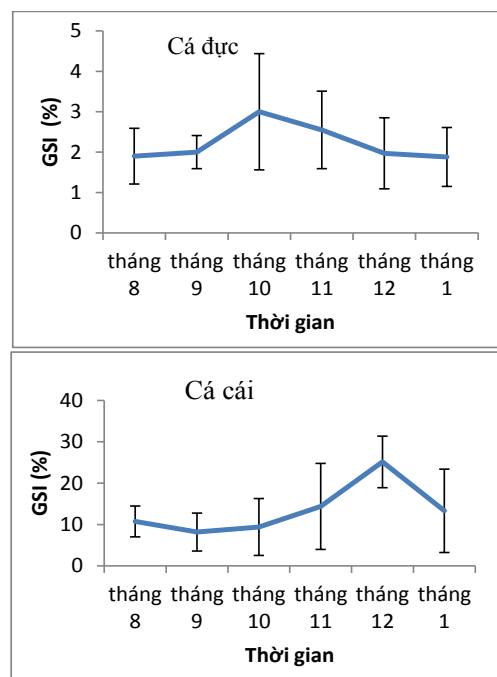
Với $R^2 = 0,9447$ đã cho thấy mối tương quan thuận rất chặt giữa chiều dài và khối lượng thân cá. Điều này cho thấy khi chiều dài của cá tăng lên thì khối lượng cá cũng tăng theo. Tuy nhiên, có thể thấy rằng chiều dài của cá tăng nhanh ở giai đoạn cá còn nhỏ, khi cá đạt chiều dài lớn hơn 8 cm thì khối lượng cá tăng nhanh hơn, điều này có thể liên quan đến việc tích lũy chất dinh dưỡng để đạt được trạng thái thành thực sinh dục và tham gia sinh sản.

3.4. Hệ số thành thực sinh dục (GSI) và hệ số tích lũy năng lượng (HSI)

Hệ số thành thực (GSI) và hệ số tích lũy năng lượng (HSI) là những hệ số quan trọng để dự đoán mùa vụ sinh sản của cá (Phạm Thanh Liêm và Trần Đắc Định, 2004)³. Trong nghiên cứu này, GSI và HSI của cá bống trứng được xác

định trong khoảng thời gian từ tháng 8/2018 đến tháng 1/2019 và có sự biến động qua các tháng.

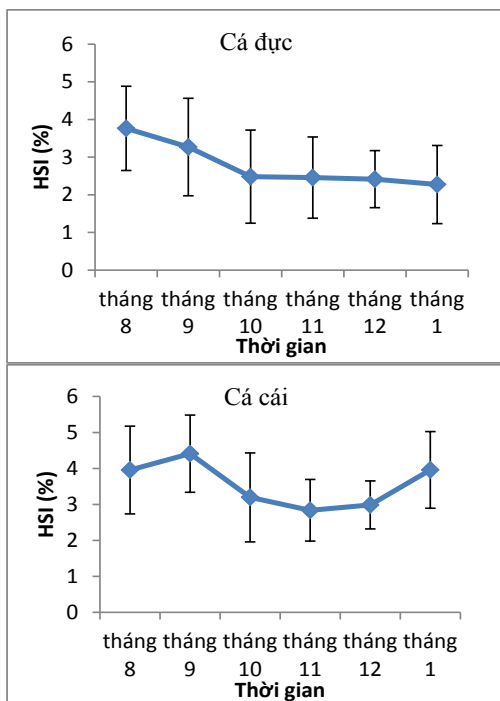
Hệ số thành thực sinh dục trung bình của cá đực là 2,22% (dao động từ 1,88 - 3,00%), ở cá cái là 15,53% (dao động từ 8,19 - 25,14%) (Hình 4). Trong khi đó, hệ số tích lũy năng lượng của cá đực đạt trung bình là 2,78% (dao động từ 2,27 - 3,76%) và ở cá cái là 3,56% (dao động từ 2,84 - 4,41%) (Hình 5). So sánh với kết quả nghiên cứu của Võ Thành Toàn và Trần Đắc Định (2014) thì hệ số thành thực (GSI) và hệ số tích lũy năng lượng (HSI) của cá bống trứng trong nghiên cứu của chúng tôi cao hơn. Sự sai khác này có thể là do chúng tôi sử dụng khối lượng cá không có nội quan để tính các chỉ số này, trong khi đó hai tác giả trên sử dụng khối lượng toàn thân của cá để tính toán. Việc sử dụng khối lượng thân không nội quan trong nghiên cứu của chúng tôi là hợp lý, vì nếu sử dụng khối lượng toàn thân của cá để tính toán thì sẽ bị ảnh hưởng bởi khối lượng thức ăn trong ống tiêu hóa của mỗi cá thể.



Hình 4. Hệ số thành thực sinh dục (GSI) của cá bống trứng đực và cái

Qua kết quả thể hiện ở Hình 4 ta thấy hệ số GSI của cá cái cao hơn nhiều so với cá đực. Điều này là do khối lượng tuyến sinh dục của cá cái đã thành thực lớn hơn nhiều lần so với

khối lượng tuyến sinh dục cá đực trong cùng giai đoạn phát triển (Phạm Minh Thành và Nguyễn Văn Kiêm, 2009). Tuy nhiên, đáng chú ý là hệ số thành thực của cá đực và cá cái có sự biến động khác nhau theo thời gian khảo sát. Cụ thể, GSI của cá đực đạt giá trị cao vào tháng 10 và 11 (cao nhất trong tháng 10), trong khi đó ở cá cái GSI đạt giá trị cao ở tháng 11, 12 và tháng 1 (cao nhất trong tháng 12).



Hình 5. Hệ số tích lũy năng lượng (HSI) của cá bống trứng đực và cái

Hệ số HSI biến động ngược lại với GSI (Hình 5). Giá trị của HSI ở cá đực đạt giá trị cao trong tháng 8 và tháng 9 và thấp trong các tháng 10 đến tháng 1; ở cá cái HSI đạt giá trị cao nhất ở tháng 8 và tháng 9 và thấp nhất ở tháng 11 và tháng 12. Hoar và cộng sự (1979)¹⁰ và Hirshfield (1980)⁹ cho rằng, trong suốt mùa vụ sinh sản, các loài động vật sử dụng 1 lượng lớn năng lượng cho sự phát triển tuyến sinh dục, nếu nguồn thức ăn bị hạn chế thì quá trình phát triển tuyến sinh dục sẽ sử dụng nguồn năng lượng được dự trữ ở gan và đây là nguyên nhân làm cho giá trị hệ số HSI giảm.

Như vậy, trong khoảng thời gian khảo sát (từ tháng 8 năm trước đến tháng 1 năm sau), dựa

vào hệ số GSI và HSI chúng tôi dự đoán mùa vụ sinh sản của cá bống trứng là khoảng từ tháng 10 đến tháng 12, đây là thời điểm rơi vào mùa mưa ở Bình Định. Một nghiên cứu tương tự trên cá bống trứng phân bố ở sông Hậu (An Giang, Cần Thơ và Sóc Trăng) được thực hiện bởi Võ Thành Toàn và Trần Đắc Định (2014)⁵ cho thấy mùa vụ sinh sản của cá là quanh năm và tập trung chủ yếu từ tháng 4 đến tháng 6 (mùa mưa ở khu vực phía Nam). Như vậy, có thể thấy rằng mặc dù thời điểm cá sinh sản trong nghiên cứu của chúng tôi và nghiên cứu của hai tác giả này rơi vào các tháng khác nhau nhưng vẫn là các tháng mùa mưa. Tuy nhiên, do chúng tôi chỉ khảo sát trong vòng 6 tháng nên chưa đánh giá được tổng thể mùa vụ sinh sản của cá bống trứng trong chu kỳ một năm. Vì vậy, những nghiên cứu tiếp theo cần khảo đặc điểm sinh sản của cá ở các tháng còn lại trong năm.

VI. KẾT LUẬN

Cá bống trứng là loài ăn động vật do có miệng rộng, răng nhỏ và nhọn, lược mang ngắn, xếp thưa, dạ dày có nhiều nếp gấp, ruột ngắn, chỉ số RLG < 1. Thành phần thức ăn tự nhiên chủ yếu là thân mềm (với tần số xuất hiện lên đến 95,17%), bên cạnh đó còn có cá con và giáp xác. Những kết quả này cho thấy cá bống trứng là loài cá ăn động vật điển hình.

Chiều dài và khối lượng của cá bống trứng có mối tương quan rất chặt chẽ (với $R^2 = 0,9447$), mối quan hệ giữa chiều dài và khối lượng cá thể hiện qua phương trình $W = 0,0054L^{3,3223}$.

Mùa vụ sinh sản của cá bống trứng phân bố ở đầm Thị Nại tập trung từ tháng 10 đến tháng 12 trong năm, trùng với các tháng mùa mưa ở Bình Định.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Văn Hào. *Cá nước ngọt Việt Nam*, Nxb Nông nghiệp, Hà Nội, 2005.
2. Trương Thủ Khoa, Trần Thị Thu Hương. *Định loại cá nước ngọt vùng Đồng bằng sông Cửu Long*, Tủ sách Đại học Cần Thơ, Cần Thơ, 1993.

3. Phạm Thanh Liêm và Trần Đắc Định. *Phương pháp nghiên cứu sinh học cá*, Khoa Thủy Sản, Trường Đại học Cần Thơ, 2004.
4. Phạm Minh Thành và Nguyễn Văn Kiểm. *Cơ sở khoa học và kỹ thuật sản xuất cá giống*, Nxb Nông nghiệp, 2009.
5. Võ Thành Toàn và Trần Đắc Định. Một số đặc điểm sinh học sinh sản của cá bống trướng (*Eleotris melanosoma*) phân bố dọc theo sông Hậu, *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ*, **2014**, 1, 115-122.
6. Nguyễn Minh Tuấn. Thành phần loài và đặc điểm sinh học của một số loài cá kinh tế của hai họ cá bống Gobiidae và Eleotridae phân bố ở vùng ven biển tỉnh Bến Tre, Luận án tiến sĩ, Ngành Nuôi trồng thủy sản, Trường Đại học Cần Thơ, 2016.
7. Mai Đình Yên, Nguyễn Văn Trọng, Nguyễn Văn Thiện, Lê Hoàng Yến, Hứa Bạch Loan. *Định loại cá nước ngọt Nam bộ*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 1992.
8. Al-Hussainy, A.H. On the functional morphology of the alimentary tract of some fishes in relation to differences in their feeding habits, *Quarterly Journal of Microscopical Science*, **1949**, 9(2), 190-240.
9. Hirshfield, M. F. An experimental analysis of reproductive effort and cost in the Japanese Medaka, *Ecology*, **1980**, 61, 282 - 292.
10. Hoar, W. S., D. J. Randall, j. R. Brett (Eds). *Fish physiology VIII: bioenergetics and growth*, Academic Press, London, 1979.
11. Hyslop E.J. Stomach contents analysis: a review of methods and their application, *Journal of Fish Biology*, **1980**, 17, 411-429.
12. Jennings, S., Kaise, Michel J., Reynolds, John D. *Marine fisheries Ecology*, Blackwell Publishing, Australia, 2001.
13. Josep Lloret and Hans-Joachim Ratz. Condition of cod (*Gadus morhua*) of Greenland during 1982-1998. *Fisheries Research*, **2000**, 48, 79-86.
14. Kent E. Carpenter and Volker H. Niem. *FAO species identification guide for fishery purposes. The living marine resources of the western central pacific, volume 1: Seaweeds, corals, bivalves and gastropods*. Rome, 1998.
15. Nikolsky.G.V. *Ecology of fishes*. Academic press, London, 1963.

Initial research on the impact of *Callisia fragrans* in additional diet for New Zealand white rabbit cultivated in Quang Ngai city, Quang Ngai province

Le Thi Luong Van¹, Tran Thanh Son^{2,*}

¹*Graduate student, experimental biology class, course 18, Quy Nhon University*

²*Faculty of Natural Science, Quy Nhon University*

Received: 28/02/2019; Accepted: 30/05/2019

ABSTRACT

To study the effect of *Callisia fragrans* leaves in the diet on the growth ability of white New Zealand rabbits raised and kept in Quang Ngai city, Quang Ngai province, 100 white New Zealand rabbits (50 males and 50 females) which are four weeks old were divided randomly into two lots and fed with different diets. While the first group was fed with only bran and green grass, the second group had an additional *Callisia fragrans* leaves in their diets. The results showed that *Callisia fragrans* leaves in the diet not only increased the growth rate of rabbits at the age of 8-11 weeks but it also affects significantly the nutrition ingredients of rabbit meat. Especially, adding *Callisia fragrans* leaves in the diet reduced significantly some intestinal diseases. While rabbits in the second group grew without intestinal diseases, rabbits in the first group could frequently get intestinal problems and they were difficult to cure and even died. As a consequence, the rabbit survival rate of second groups is better than the first. As a result of this study, *Callisia fragrans* leaves can be used to be an additional green food in rabbit's diet and to minimize intestinal disease in rabbits.

Keywords: *Callisia fragrans, growth, New Zealand white rabbit.*

**Corresponding author.*

Email: tranthanhson@qnu.edu.vn

Bước đầu nghiên cứu ảnh hưởng của lá cây lược vàng (*Callisia fragrans*) bổ sung trong khẩu phần ăn đến khả năng sinh trưởng của thỏ trắng New Zealand nuôi nhốt tại thành phố Quảng Ngãi, tỉnh Quảng Ngãi

Lê Thị Lương Vân¹, Trần Thanh Sơn^{2,*}

¹Học viên cao học, lớp Sinh học thực nghiệm khóa 18, Trường Đại học Quy Nhơn

²Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 28/02/2019; Ngày nhận đăng: 30/05/2019

TÓM TẮT

Nhằm nghiên cứu ảnh hưởng của lá cây lược vàng bổ sung trong khẩu phần ăn đến khả năng sinh trưởng của thỏ trắng New Zealand nuôi nhốt ở thành phố Quảng Ngãi, tỉnh Quảng Ngãi, 100 con thỏ trắng New Zealand (50 con đực và 50 con cái) 4 tuần tuổi được phân ngẫu nhiên đều thành 2 lô để cho ăn các khẩu phần ăn khác nhau: cám + cỏ xanh; cám + cỏ xanh + lá cây lược vàng. Kết quả cho thấy lá cây lược vàng bổ sung trong khẩu phần ăn không chỉ làm tăng tốc độ sinh trưởng của thỏ ở giai đoạn từ 8 - 11 tuần tuổi mà còn ảnh hưởng rõ rệt lên thành phần dinh dưỡng của thịt thỏ. Đặc biệt, khi bổ sung lá cây lược vàng trong khẩu phần ăn đã làm giảm thiểu đáng kể các bệnh đường ruột ở thỏ, lô thí nghiệm thỏ không bị mắc các bệnh về đường ruột, lô đối chứng thỏ bị mắc các bệnh đường ruột, một số thỏ mắc bệnh đường ruột mặc dù được điều trị bằng thuốc nhưng không khỏi và đã chết. Vì vậy, tỉ lệ sống của lô thí nghiệm cao hơn lô đối chứng. Từ kết quả nghiên cứu trên, có thể sử dụng lá cây lược vàng vừa làm nguồn thức ăn xanh bổ sung trong khẩu phần của thỏ vừa giúp giảm thiểu bệnh đường ruột ở thỏ.

Từ khóa: Lá cây lược vàng, sinh trưởng, thỏ trắng New Zealand.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Khi nền kinh tế phát triển, nhu cầu của người tiêu dùng về những sản phẩm có chất lượng, có giá trị dinh dưỡng cao ngày càng tăng. Để đáp ứng nhu cầu này, trong những năm gần đây, ngành chăn nuôi nước ta đã có những bước phát triển vượt bậc về số lượng, chất lượng đàn vật nuôi và chăn nuôi thỏ là một trong những hướng đi mới nhằm giải quyết những đòi hỏi đó.

Thịt thỏ là loại thực phẩm dễ tiêu hóa, thơm ngon, giàu và cân đối chất dinh dưỡng hơn các loại thịt gia súc khác. Bên cạnh đó, chăn nuôi thỏ vốn đầu tư ban đầu thấp, quay vòng vốn

nhanh, làm chuồng trại có thể tận dụng vật liệu sẵn có, rẻ tiền, vốn mua con giống ban đầu ít hơn so với các gia súc khác. Thỏ có khả năng sử dụng nhiều thức ăn thô xanh trong khẩu phần, tận dụng các nguồn sản phẩm phụ nông nghiệp như rau, lá, cỏ tự nhiên.

Tại Quảng Ngãi, trong những năm gần đây nghề chăn nuôi thỏ cũng đã phát triển khá mạnh và đã đem lại hiệu quả kinh tế cao, góp phần tăng thu nhập, phát triển kinh tế gia đình cho nhiều hộ dân. Trong các mô hình nuôi thỏ ở Quảng Ngãi thì giống thỏ trắng New Zealand được lựa chọn nhiều nhất.

*Tác giả liên hệ chính.

Email: tranthanhsong@qnu.edu.vn

Tuy nhiên, trong quá trình nuôi, thỏ thường mắc bệnh. Khi mắc bệnh thỏ dễ chết, có khi chết hàng loạt. Một trong những bệnh gây chết ở thỏ nuôi nhiều nhất là bệnh về đường ruột. Khi thỏ bị bệnh, người chăn nuôi thường sử dụng thuốc kháng sinh để điều trị cho thỏ, hiệu quả điều trị cao nhưng khi dùng thuốc một thời gian dài, không đúng liều lượng, đường cấp, không đúng liệu trình điều trị... tạo điều kiện cho vi khuẩn nhờn và kháng với nhiều loại kháng sinh. Mặt khác, sự tồn dư kháng sinh có trong thực phẩm không chỉ ảnh hưởng trước tiên đến vật nuôi mà còn gây nguy hại cho sức khỏe người tiêu dùng khi tiêu thụ thực phẩm. Để hạn chế tới mức thấp nhất việc sử dụng kháng sinh gây ảnh hưởng tới sức khỏe con người, những năm gần đây, người chăn nuôi có xu hướng sử dụng thảo dược tự nhiên để làm thức ăn cho thỏ nhằm tạo sức đề kháng cho thỏ, tạo ra những sản phẩm sạch, an toàn, không hormon sinh trưởng, không chất kháng sinh.

Cây lược vàng (*Callisia fragrans*) đã được sử dụng rất rộng rãi ở Nga, Việt Nam trong hỗ trợ và chữa trị nhiều bệnh như ung thư, bỏng, viêm nhiễm, lao phổi, bệnh tim mạch; nhưng tác dụng dược lý của cây này chưa được nghiên cứu nhiều.¹⁰ Gần đây, Viện Dược liệu chứng minh cây lược vàng có khả năng kháng vi khuẩn *Staphylococcus aureus*. Tuy nhiên những nghiên cứu này chưa được phổ biến và hầu như chưa được sử dụng rộng rãi trong chăn nuôi. Thí nghiệm này nhằm tìm hiểu tác dụng của lá cây lược vàng trong chăn nuôi thỏ trắng New Zealand, làm dẫn liệu bước đầu cho việc sử dụng lá loài cây này trong chăn nuôi giúp hạn chế sử dụng thuốc kháng sinh theo xu hướng chăn nuôi sạch, đảm bảo an toàn hiện nay.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Khẩu phần ăn có bổ sung lá cây lược vàng và khả năng sinh trưởng của thỏ trắng New Zealand.

2.2. Thời gian và địa điểm nghiên cứu

Thời gian: Từ tháng 11 năm 2016 đến tháng 01 năm 2017.

Địa điểm: Trang trại nuôi thỏ của ông Phạm Thanh Hùng, thành phố Quảng Ngãi, tỉnh Quảng Ngãi.

2.3. Phương pháp nghiên cứu

2.3.1. Bố trí thí nghiệm

Thí nghiệm được bố trí theo phương pháp phân lô so sánh, theo thiết kế hoàn toàn ngẫu nhiên. 100 con thỏ trắng New Zealand sau cai sữa được chia đều trong 2 lô thí nghiệm, mỗi lô 50 con (25 đực và 25 cái). Thỏ ở hai lô thí nghiệm được nuôi nhốt, tương đối đồng đều về giống, tuổi, khối lượng, điều kiện chăm sóc và quy trình vệ sinh thú y... và được đánh số ở tai riêng từng cá thể.

Sự khác nhau giữa các lô thí nghiệm là trong khẩu phần thức ăn: Lô đối chứng: Cám hỗn hợp dạng viên cho thỏ thịt (Sản phẩm của tập đoàn INVIVO NSA-Pháp) (90%) + cỏ xanh (10%); lô thí nghiệm: Cám hỗn hợp dạng viên cho thỏ thịt (90%) + cỏ xanh (5%) + lá cây lược vàng tươi (5%).

2.3.2. Phương pháp thu thập và xác định chỉ tiêu nghiên cứu

Thỏ được cân khối lượng vào đầu thí nghiệm và sau đó mỗi tuần cân 1 lần để xác định các chỉ tiêu: Sinh trưởng tích lũy, sinh trưởng tuyệt đối, tốc độ sinh trưởng tương đối.

$$\text{- Sinh trưởng tuyệt đối: } A = \frac{P_2 - P_1}{t}$$

Trong đó:

A: Sinh trưởng tuyệt đối (g/tuần)

P₁: Khối lượng đầu kỳ (g)

P₂: Khối lượng cuối kỳ (g)

t: Khoảng thời gian giữa 2 lần đo (tuần)

Tốc độ sinh trưởng tương đối (R, đơn vị: %)

$$R(\%) = \frac{P_2 - P_1}{(P_2 + P_1)/2} \times 100$$

Trong đó:

R: Sinh trưởng tương đối (%)

P_1 : Khối lượng đầu kỳ (g)

P_2 : Khối lượng cuối kỳ (g)

Định kỳ 2 tuần đo các kích thước: chiều dài thân, chiều dài đầu, kích thước vòng ngực, chiều dài chân trước, chiều dài chân sau, chiều dài tai, chiều dài đuôi.

Lượng thức ăn thu nhận được xác định bằng cách cân lượng thức ăn trước và sau khi cho ăn hàng tuần để xác định chỉ số chuyển hóa thức ăn.

Tình hình bệnh tật được xác định bằng phương pháp quan sát, ghi chép hàng ngày.

Xác định tỷ lệ nuôi sống qua các giai đoạn tuổi bằng phương pháp theo dõi, thống kê số lượng cá thể chết.

2.3.3. Phương pháp xác định khả năng cho thịt

Kết thúc thí nghiệm tiến hành mổ khảo sát để xác định tỉ lệ các phần thịt của thỏ thí nghiệm. Mổ mỗi lô 4 con, trong đó mổ 2 con đực và 2 con cái.

Cân khối lượng thịt sống, thịt móc hàm, thịt xẻ, thịt đùi, thịt nạc, mỡ bụng sau đó tính tỷ lệ từng loại một.

Cân và đo các phần nội tạng khi mổ khảo sát: khối lượng tim, khối lượng gan, khối lượng dạ dày, chiều dài ruột non, chiều dài ruột già (kết tràng), chiều dài manh tràng.

Phân tích thành phần dinh dưỡng của thịt thỏ: hàm lượng vật chất khô, protein thô, mỡ thô, tro tổng số theo tiêu chuẩn quốc gia TCVN 8134:2009 tại Trung tâm phân tích, kiểm nghiệm thuộc Sở Khoa học và Công nghệ Bình Định.

2.3.4. Phương pháp xử lý số liệu

Số liệu thu thập được xử lý theo phương pháp thống kê sinh học thông qua phần mềm MS Excel 2010.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Một số chỉ tiêu về sinh trưởng của thỏ trắng New Zealand

3.1.1. Sinh trưởng tích lũy

Kết quả theo dõi khả năng sinh trưởng tích lũy được xác định bằng chỉ tiêu khối lượng qua các giai đoạn tuổi được trình bày ở bảng 1.

Bảng 1. Sinh trưởng tích lũy của thỏ thí nghiệm (g/con/tuần)

| Thời điểm cân (Tuần tuổi) | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|---------------------------|-----------------------------|-------|-----------------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) |
| Tuần 4 | 612,68±14,97 | 17,28 | 610,52±15,89 | 18,41 |
| Tuần 5 | 718,02±14,06 | 13,85 | 713,20±15,95 | 15,81 |
| Tuần 6 | 866,42±12,71 | 10,38 | 864,50±15,88 | 12,98 |
| Tuần 7 | 1068,30±14,17 | 9,38 | 1069,70±14,92 | 9,66 |
| Tuần 8 | 1278,84±14,51 | 8,03 | 1279,68±16,65 | 8,63 |
| Tuần 9 | 1518,78±14,75 | 6,87 | 1494,04±15,06 | 6,68 |
| Tuần 10 | 1752,44 ^a ±14,69 | 5,92 | 1678,42 ^b ±16,34 | 6,31 |
| Tuần 11 | 2001,28 ^a ±14,53 | 5,06 | 1914,7 ^b ±16,09 | 5,31 |
| Tuần 12 | 2184,02 ^a ±13,96 | 4,64 | 2094,02 ^b ±15,26 | 4,55 |
| Tuần 13 | 2291,74 ^a ±14,19 | 4,37 | 2206,67 ^b ±14,10 | 3,99 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê

Kết quả cho thấy: khối lượng thỏ ở lô thí nghiệm và lô đối chứng đều tăng trọng lượng theo các giai đoạn tuổi từ 4 tuần đến 13 tuần, điều này phù hợp với quy luật sinh trưởng của thỏ.

Phân tích thống kê cho thấy rằng: khối lượng thỏ thay đổi theo các giai đoạn từ 4 tuần tuổi đến 9 tuần tuổi là không có sự sai khác giữa lô thí nghiệm và lô đối chứng. Từ 10 tuần tuổi đến 13 tuần tuổi, khối lượng thỏ thay đổi có sự khác nhau giữa lô thí nghiệm và đối chứng. Kết quả khối lượng trung bình của thỏ lúc 13 tuần tuổi ở lô thí nghiệm là 2291g, trong khi đó ở lô đối chứng, khối lượng trung bình của thỏ lúc 13 tuần tuổi là 2206,67g. Như vậy, trong khẩu phần ăn có bổ sung lá cây lược vàng giúp thỏ tăng trọng tốt hơn so với sử dụng khẩu phần ăn chỉ có cỏ xanh.

3.1.2. Sinh trưởng tuyệt đối

Khả năng sinh trưởng tuyệt đối của thỏ thịt New Zealand được trình bày ở bảng 2.

Bảng 2. Sinh trưởng tuyệt đối của thỏ thí nghiệm (g/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|------------|---------------------------|-------|---------------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) |
| Tuần 4-5 | 105,34±2,00 | 13,42 | 102,68±1,93 | 13,29 |
| Tuần 5-6 | 148,4±3,80 | 18,12 | 151,30±2,86 | 13,10 |
| Tuần 6-7 | 201,88±4,00 | 14,02 | 200,02±3,76 | 13,03 |
| Tuần 7-8 | 210,54±1,39 | 4,66 | 200,72±6,87 | 22,48 |
| Tuần 8-9 | 239,94±0,74 | 2,18 | 214,36 ^b ±5,27 | 16,30 |
| Tuần 9-10 | 233,66 ^a ±0,27 | 0,83 | 182,71 ^b ±4,34 | 15,40 |
| Tuần 10-11 | 248,84 ^a ±0,67 | 1,91 | 234,10 ^b ±3,19 | 8,63 |
| Tuần 11-12 | 178,74±2,20 | 10,38 | 178,69±3,96 | 13,87 |
| Tuần 12-13 | 111,72±2,32 | 14,72 | 112,64±3,29 | 18,23 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê.

Kết quả sinh trưởng tuyệt đối của thỏ thí nghiệm ở bảng 2 cho thấy: Thỏ ở cả lô thí nghiệm và lô đối chứng đều tăng khối lượng qua các tuần tuổi trong thời gian thí nghiệm. Ở tuần sau cai sữa thỏ cả hai lô đều tăng trọng chậm do chưa thích nghi, sau đó tăng nhanh và thỏ ở lô thí nghiệm có tốc độ sinh trưởng cao hơn lô đối chứng ở tuần tuổi 8 - 11, từ tuần tuổi 12 trở đi tăng trọng giảm dần. Khối lượng tăng trung bình ở lô thí nghiệm với 163,17 g/con/tuần, tương ứng khối lượng tăng trung bình 23,30 g/con/ngày. Kết quả này cao hơn các nghiên cứu của Nguyễn Xuân Trạch và cộng sự (2012) khi nghiên cứu thay thế cỏ voi bằng rau muống trong khẩu phần thì tăng trọng cao nhất là 20,8 g/con/ngày;⁸ của Đinh Văn Bình và cộng sự (2008) với sinh trưởng tuyệt đối của thỏ New Zealand giai đoạn 30 - 90 ngày tuổi là từ 15 - 20 g/con/ngày.¹ Có được kết quả này là do trong thành phần của lá cây lược vàng có chứa nhiều vitamin, acid hữu cơ, acid béo, polysaccharide, đường tự do và các khoáng chất chứa sắt, đồng, crom [6], những chất này có tác dụng quan trọng đối với hoạt động sống của cơ thể.

3.1.3. Tốc độ sinh trưởng tương đối

Tốc độ sinh trưởng tương đối của thỏ New Zealand nuôi trong điều kiện thí nghiệm được trình bày ở bảng 3.

Bảng 3. Sinh trưởng tương đối của thỏ thí nghiệm (%)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|------------|--------------------------|-------|--------------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) | $\bar{X} \pm SE$ | Cv(%) |
| Tuần 4-5 | 16,41±0,62 | 26,85 | 15,89±0,43 | 19,51 |
| Tuần 5-6 | 19,14±0,64 | 23,98 | 19,56±0,55 | 20,15 |
| Tuần 6-7 | 20,97±0,4 | 13,49 | 20,93±0,57 | 19,05 |
| Tuần 7-8 | 18,06±0,23 | 9,34 | 17,28±0,58 | 22,49 |
| Tuần 8-9 | 17,24 ^a ±0,17 | 7,33 | 15,59 ^b ±0,44 | 18,83 |
| Tuần 9-10 | 14,34 ^a ±0,13 | 6,71 | 11,54 ^b ±0,27 | 15,56 |
| Tuần 10-11 | 13,30±0,11 | 6,33 | 13,08±0,25 | 11,99 |
| Tuần 11-12 | 8,57±0,14 | 12,32 | 8,72±0,32 | 23,17 |
| Tuần 12-13 | 5,00±0,10 | 14,87 | 5,12±0,21 | 25,80 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê.

Qua số liệu ở bảng 3 cho thấy: tốc độ sinh trưởng tương đối trung bình của thỏ trong thời gian thí nghiệm ở lô thí nghiệm cao hơn so với lô đối chứng ở tuần 8-9, 9-10 lần lượt là 1,65% và 2,8%. Tuy nhiên ở lô thí nghiệm, hệ số biến động về tốc độ sinh trưởng ở các giai đoạn tuổi 4-6 tuần tương đối cao, lần lượt là 26,85% và 23,98%.

3.1.4. Các chỉ tiêu sinh trưởng cơ thể thỏ

Đặc điểm sinh trưởng các chỉ tiêu đo được trình bày lần lượt ở các bảng: 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10.

Bảng 4. Sinh trưởng chiều dài thân của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm (mm) | | Đối chứng (mm) | |
|-----------|------------------|------|------------------|------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 270±2,70 | 7,21 | 271±2,13 | 7,30 |
| Tuần 6 | 285±2,68 | 6,97 | 284±2,14 | 6,89 |
| Tuần 8 | 310±2,40 | 6,20 | 305±2,40 | 5,46 |
| Tuần 10 | 340±2,70 | 5,39 | 335±2,40 | 5,67 |
| Tuần 12 | 380±2,80 | 4,86 | 370±2,13 | 4,20 |
| Tuần 13 | 400±2,47 | 4,04 | 395±2,15 | 4,57 |

Bảng 5. Sinh trưởng chiều dài đầu của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm (mm) | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|-------|------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 80±1,30 | 10,05 | 80±0,88 | 11,3 |
| Tuần 6 | 85±1,23 | 9,8 | 86±1,40 | 10,20 |
| Tuần 8 | 97±1,34 | 9,44 | 96±1,25 | 9,22 |
| Tuần 10 | 105±1,30 | 8,76 | 100±0,80 | 8,78 |
| Tuần 12 | 118±1,1 | 8,12 | 116±1,12 | 8,00 |
| Tuần 13 | 121±1,02 | 7,74 | 120±0,78 | 7,90 |

Bảng 6. Sinh trưởng chiều dài tai của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm (mm) | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|-------|------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 80±1,67 | 15,02 | 80±1,82 | 14,15 |
| Tuần 6 | 85±1,56 | 13,39 | 86±1,80 | 12,60 |
| Tuần 8 | 97±1,54 | 12,00 | 96±1,30 | 11,45 |
| Tuần 10 | 105±1,44 | 10,80 | 100±0,86 | 10,43 |
| Tuần 12 | 118±1,34 | 9,92 | 116±1,11 | 9,98 |
| Tuần 13 | 121±1,20 | 9,80 | 120±1,45 | 9,70 |

Bảng 7. Sinh trưởng kích thước vòng ngực của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|------|------------------|------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 150±1,74 | 7,34 | 152±1,57 | 6,70 |
| Tuần 6 | 155±1,60 | 6,20 | 157±1,56 | 5,79 |
| Tuần 8 | 170±1,62 | 5,34 | 171±1,30 | 5,43 |
| Tuần 10 | 185±1,57 | 4,70 | 182±2,00 | 4,80 |
| Tuần 12 | 200±1,56 | 4,60 | 198±1,20 | 4,29 |
| Tuần 13 | 202±1,60 | 3,98 | 200±1,05 | 3,90 |

Bảng 8. Sinh trưởng chiều dài chi trước của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|-------|------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 80±1,64 | 15,64 | 81±1,57 | 13,63 |
| Tuần 6 | 85±1,63 | 12,42 | 85±0,89 | 10,65 |
| Tuần 8 | 90±1,55 | 10,65 | 90±1,50 | 9,80 |
| Tuần 10 | 100±1,60 | 9,20 | 101±1,46 | 8,24 |
| Tuần 12 | 118±1,45 | 8,24 | 115±1,60 | 8,20 |
| Tuần 13 | 120±1,35 | 7,70 | 116±2,01 | 7,60 |

Bảng 9. Sinh trưởng chiều dài chi sau của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|-------|------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 150±1,51 | 12,00 | 152±2,44 | 10,78 |
| Tuần 6 | 165±1,42 | 9,65 | 163±1,46 | 10,27 |
| Tuần 8 | 170±1,00 | 8,67 | 171±2,04 | 8,79 |
| Tuần 10 | 180±1,36 | 7,65 | 180±1,20 | 7,66 |
| Tuần 12 | 195±1,46 | 5,78 | 190±1,40 | 6,20 |
| Tuần 13 | 200±1,35 | 5,20 | 195±2,00 | 5,00 |

Bảng 10. Sinh trưởng chiều dài đuôi của thỏ thí nghiệm (mm/con)

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|-----------|------------------|-------|------------------|-------|
| | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Tuần 4 | 60±1,32 | 15,78 | 60±1,17 | 14,60 |
| Tuần 6 | 60±1,32 | 15,78 | 60±1,17 | 14,60 |
| Tuần 8 | 61±1,03 | 9,80 | 61±1,00 | 9,70 |
| Tuần 10 | 61±1,03 | 9,80 | 61±0,90 | 9,70 |
| Tuần 12 | 63±1,00 | 5,84 | 62±0,90 | 6,85 |
| Tuần 13 | 63±1,00 | 5,84 | 62±1,25 | 6,85 |

Qua các bảng 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 cho thấy cùng với sự sinh trưởng về cân nặng là sự sinh trưởng về chiều dài của các bộ phận của thỏ: chiều dài thân, chiều dài đầu, chiều dài tai, kích thước vòng ngực, chiều dài chi trước, chi sau và đuôi. Trong đó chiều dài thân có tốc độ sinh trưởng tương đối nhanh, chiều dài chi trước, chi sau, tai và kích thước vòng ngực có tốc độ sinh trưởng tương đương nhau, chiều dài đuôi có tốc độ sinh trưởng rất chậm, có giai đoạn hầu như không tăng kích thước.

3.1.5. Chỉ số chuyển hóa thức ăn

Hiệu quả sử dụng thức ăn được trình bày ở bảng 11.

Bảng 11. Chỉ số chuyển hóa thức ăn của thỏ thí nghiệm

| Tuần tuổi | Thí nghiệm | Đối chứng |
|------------|------------|-----------|
| Tuần 4-5 | 2,5 | 2,4 |
| Tuần 5-6 | 3,30 | 3,44 |
| Tuần 6-7 | 3,50 | 3,52 |
| Tuần 7-8 | 3,80 | 3,95 |
| Tuần 8-9 | 4,02 | 4,02 |
| Tuần 9-10 | 4,50 | 4,50 |
| Tuần 10-11 | 4,70 | 4,75 |
| Tuần 11-12 | 5,00 | 5,02 |
| Tuần 12-13 | 7,30 | 7,06 |

Số liệu ở bảng 11 cho thấy chỉ số chuyển hóa thức ăn của thỏ ở lô thí nghiệm và lô đối chứng không có sự sai khác nhiều và đều tăng dần theo tuần, theo quy luật sinh trưởng của giống. Kết quả này tương đương với nghiên cứu của Nguyễn Xuân Trạch và cộng sự (2011)⁷ khi nghiên cứu ảnh hưởng của việc thay thế thức ăn dạng viên bằng rau muống có chỉ số chuyển hóa thức ăn là 3,4 - 6,4 nhưng lại không bằng kết quả nghiên cứu của Nguyễn Thị Kim Đông (2009), (2016) khi nghiên cứu ảnh hưởng của Địa cúc thay thế Cỏ lông tây và bổ sung phụ phẩm khoai lang kết hợp dầu dừa trong khẩu phần ăn, chỉ số chuyển hóa thức ăn trong khoảng từ 3,09 đến 3,27.^{4,5} Ở giai đoạn cuối trong thời gian thí nghiệm, thỏ tiêu tốn lượng thức ăn nhiều hơn nhưng tăng trưởng chậm lại, tuần 13 chỉ số chuyển hóa thức ăn của lô đối chứng cao hơn lô thí nghiệm.

3.2. Kết quả mổ khảo sát

Kết quả mổ khảo sát thỏ thí nghiệm được trình bày ở các bảng 12, 13, 14.

Bảng 12. Một số chỉ tiêu về khả năng sản xuất thịt tại thời điểm mổ khảo sát

| | ĐVT | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|---------------------------|-----|------------------|------|------------------|------|
| | | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Khối lượng sống | g | 2075±47,87 | 4,00 | 2075±47,87 | 4,00 |
| Khối lượng thịt móm hàm | g | 1500±35,35 | 4,08 | 1487,5±42,69 | 4,97 |
| Tỷ lệ thịt móm hàm | % | 72,29±1,23 | 2,95 | 71,69±0,62 | 1,50 |
| Khối lượng thịt xẻ | g | 1270±12,90 | 1,76 | 1250±17,79 | 2,46 |
| Tỷ lệ thịt xẻ | % | 61,20±1,71 | 4,83 | 60,24±1,17 | 3,38 |
| Khối lượng thịt đùi trước | g | 260±4,08 | 2,71 | 250±9,12 | 6,32 |
| Tỷ lệ thịt đùi trước | % | 17,33±0,43 | 4,37 | 16,81±0,47 | 4,92 |

| | | | | | |
|-------------------------|---|------------------------|------|------------------------|------|
| Khối lượng thịt đùi sau | g | 420 ^a ±4,08 | 1,94 | 413 ^b ±4,34 | 2,14 |
| Tỷ lệ thịt đùi sau | % | 28,00±0,66 | 4,74 | 27,56±0,62 | 4,48 |
| Mỡ bụng | g | 15 ^a ±0,40 | 5,44 | 19 ^b ±0,40 | 4,29 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê.

Qua số liệu ở bảng 12 ta thấy khối lượng thịt móm hàm, khối lượng thịt xẻ, khối lượng thịt đùi trước trong thân thịt thỏ lại không chịu ảnh hưởng đáng kể của hai loại thức ăn bổ sung này trong khẩu phần. Tỷ lệ thịt móm hàm và tỷ lệ thịt xẻ đều cao hơn kết quả nghiên cứu của Nguyễn Xuân Trạch và cộng sự (2011, 2012) khi nghiên cứu ảnh hưởng của mức thay thế thức ăn viên hỗn hợp bằng rau muống, hay khi nghiên cứu ảnh hưởng của mức thay thế cỏ voi bằng rau muống, tỷ lệ thịt móm hàm dao động từ 53,9 - 60,66%; tỷ lệ thịt xẻ dao động từ 47,6 - 53,37%.^{7,8} Tỷ lệ thịt đùi trước tương đương với kết quả của các nghiên cứu trên nhưng tỷ lệ thịt đùi sau lại thấp hơn từ 3 - 5%.

Số liệu thu được ở trên cũng cho thấy rõ lượng mỡ bụng trung bình của thỏ ở lô thí nghiệm thấp hơn ở lô đối chứng.

Bảng 13. Cân nặng, kích thước các phần nội tạng của thỏ thí nghiệm

| | ĐVT | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|--------------------|-----|-------------------------|------|--------------------------|------|
| | | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| Khối lượng tim | g | 6,25 ^a ±0,14 | 4,00 | 7,05 ^b ±0,21 | 5,16 |
| Khối lượng gan | g | 62,5 ^a ±1,44 | 4,00 | 71,75 ^b ±1,18 | 2,85 |
| Khối lượng dạ dày | g | 80 ^a ±0,81 | 1,76 | 85 ^b ±0,81 | 1,66 |
| Chiều dài ruột non | cm | 320 ^a ±2,04 | 1,10 | 328 ^b ±1,08 | 0,57 |

| | | | | | |
|--------------------------------|----|-----------------------------|------|-----------------------------|------|
| Chiều dài ruột già (kết tràng) | cm | 51,5 ^{a±} 0,96 | 3,22 | 54,75 ^{b±} 0,47 | 1,51 |
| Chiều dài manh tràng | cm | 42,25 ^{a±} 1,10 | 4,54 | 44,5 ^{b±} 0,95 | 3,72 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê

Số liệu ở bảng 13 cho thấy kết quả đáng chú ý là khối lượng tim, gan, dạ dày, chiều dài ruột non, ruột già (phần kết tràng) của thỏ trong lô thí nghiệm thấp hơn so với lô đối chứng. Như vậy, khi sử dụng bổ sung lá cây lược vàng trong khẩu phần ăn tỷ lệ nội tạng có xu hướng thấp hơn. Kết quả này tương tự nghiên cứu của Nguyễn Xuân Trạch và cộng sự (2015) về ảnh hưởng của tỷ lệ cỏ lông Para và lá Chè đại trong khẩu phần, tỷ lệ nội tạng (cả chất chứa) giảm xuống rõ rệt khi tăng tỷ lệ lá Chè đại, là do hàm lượng chất xơ giảm và tỷ lệ tiêu hóa tăng.⁹

Bảng 14. Thành phần dinh dưỡng của thịt thỏ thí nghiệm

| TT | Chỉ tiêu thử nghiệm | Đơn vị | Thí nghiệm | | Đối chứng | |
|----|---------------------|--------|-----------------------------|------|-----------------------------|------|
| | | | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% | $\bar{X} \pm SE$ | Cv% |
| 1 | Chất khô | %kl | 28,80 ^{a±} 0,12 | 0,74 | 29,62 ^{b±} 0,22 | 1,31 |
| 2 | Protein | | 20,63 ^{a±} 0,23 | 2,01 | 19,08 ^{b±} 0,16 | 3,04 |
| 3 | Lipit | | 7,94 ^{a±} 0,03 | 0,77 | 10,18 ^{b±} 0,03 | 2,81 |
| 4 | Tro tổng số | | 1,07 ^{a±} 0,05 | 7,94 | 1,02 ^{b±} 0,21 | 4,59 |

Ghi chú: Các giá trị trung bình mang chữ cái a, b trên cùng một hàng là khác biệt có ý nghĩa thống kê.

Qua bảng ta thấy: Tỷ lệ trung bình vật chất khô và tro tổng số của thỏ ở lô thí nghiệm thấp hơn lô đối chứng nhưng không có ý nghĩa về mặt thống kê.

Tỷ lệ protein trung bình của thỏ ở lô thí nghiệm cao hơn so với lô đối chứng là 1,55%; tỷ lệ lipit trung bình của thỏ ở lô thí nghiệm thấp hơn so với lô đối chứng là 2,24% có thể do trong

lá cây lược vàng còn chứa beta-sitosterol có tác dụng giảm lượng cholesterol.²

Các tỷ lệ thành phần dinh dưỡng của thịt thỏ thí nghiệm tương đương với số liệu của Đinh Văn Bình và cộng sự (2008).¹ Điều này chứng tỏ lá cây lược vàng bổ sung trong khẩu phần ăn không ảnh hưởng đến chất lượng thịt thỏ mà còn làm tăng hàm lượng dinh dưỡng trong thịt thỏ: tăng hàm lượng protein, giảm hàm lượng lipit, tốt cho sức khỏe và phù hợp với thị hiếu người tiêu dùng.

3.3. Tình hình bệnh tật

Trong quá trình nuôi, thỏ ở hai lô thí nghiệm đã được tiêm phòng các loại vaccin: Vimectin phòng bệnh ghê, Penstrep + Penicilyn phòng viêm mũi, nhưng không tiêm phòng vaccin phòng bệnh đường ruột.

Kết quả theo dõi tình hình bệnh tật của thỏ ở hai lô cho thấy:

Lô thí nghiệm: thỏ không bị bệnh. Lô đối chứng thỏ bị mắc bệnh tiêu chảy ở các tuần nuôi: tuần thứ 3 nuôi (lúc thỏ ở tuần tuổi 6-7): 2 con, tuần thứ 4 nuôi (lúc thỏ ở tuần tuổi 7-8): 6 con, tuần thứ 6 nuôi (lúc thỏ ở tuần tuổi 9-10): 3 con, tuần thứ 7 nuôi (lúc thỏ ở tuần tuổi 10-11): 2 con, tuần thứ 8 nuôi (lúc thỏ ở tuần tuổi 11-12): 2 con. Như vậy, khi bổ sung lá lược vàng trong khẩu phần ăn đã làm giảm thiểu bệnh tiêu chảy ở thỏ do trong thành phần hóa học của lá lược vàng có chứa các hoạt chất có tính năng kháng khuẩn. Chemenko *et al.* (2007) và Olemikov *et al.* (2008) tìm thấy hợp chất isoorientin trong cây lược vàng, và isoorientin thể hiện hoạt tính kháng khuẩn ở nồng độ 100 - 200 µg/ml.^{10, 11} Theo Đỗ Xuân Cẩm (2009) và Nguyễn Thị Ngọc Dung và Vĩnh Định (2011), cây lược vàng chứa flavonoid có hoạt tính kháng khuẩn.^{2, 3} Hợp chất flavonoid gồm 2 thành phần: quercetin dùng điều trị viêm thận, viêm khớp hay chống nhiễm trùng và kaempferol có thể điều trị các bệnh nhiễm khuẩn.

3.4. Tỷ lệ nuôi sống

Đàn thỏ thí nghiệm được theo dõi, kiểm tra hàng ngày. Kết quả theo dõi tỷ lệ nuôi sống được thể hiện ở bảng 15.

Bảng 15. Tỷ lệ nuôi sống của thỏ thí nghiệm qua các giai đoạn tuổi (%)

| Giai đoạn sinh trưởng (Tuần tuổi) | Tỷ lệ nuôi sống (%) | |
|-----------------------------------|---------------------|------------|
| | Đối chứng | Thí nghiệm |
| Tuần 4 - 5 | 100 | 100 |
| Tuần 5 - 6 | 100 | 100 |
| Tuần 6 - 7 | 96 | 100 |
| Tuần 7 - 8 | 91,67 | 100 |
| Tuần 8 - 9 | 100 | 100 |
| Tuần 9 - 10 | 95,45 | 100 |
| Tuần 10 - 11 | 95,24 | 100 |

4. KẾT LUẬN

Từ những kết quả nghiên cứu trên, chúng tôi rút ra các kết luận sau:

- Lá cây lược vàng có thể dùng làm thức ăn xanh bổ sung trong khẩu phần của thỏ.

- Kết quả cho thấy lá cây lược vàng bổ sung trong khẩu phần ăn làm tăng tốc độ sinh trưởng của thỏ ở giai đoạn từ 8 - 11 tuần tuổi.

- Khả năng sinh trưởng kích thước các chiều đo cơ thể của thỏ cũng tăng dần theo sự sinh trưởng khối lượng. Cụ thể: lô thí nghiệm thì sinh trưởng chiều dài thân, chiều dài đầu, chiều dài tai, kích thước vòng ngực, chiều dài chi trước, chiều dài chi sau đều cao hơn sinh trưởng về kích thước các chiều đo của lô đối chứng ở giai đoạn sau của thời gian thí nghiệm (từ tuần 10 đến tuần 13).

- Không có sự khác biệt nhiều về chỉ số chuyển hóa thức ăn giữa hai lô thí nghiệm (từ tuần 13, lô thí nghiệm có chỉ số chuyển hóa thức ăn cao hơn lô đối chứng).

- Bổ sung lá cây lược vàng trong khẩu phần ăn ảnh hưởng rõ rệt lên thành phần dinh dưỡng của thịt thỏ: hàm lượng protein trung bình của thỏ ở lô thí nghiệm là 20,63%, cao hơn hàm lượng protein trung bình của thỏ ở lô đối chứng 1,55%; hàm lượng lipid trung bình của lô thí nghiệm là 7,34%, thấp hơn hàm lượng lipid ở lô đối chứng là 2,84%.

- Tỷ lệ các bộ phận nội tạng của thỏ ở lô thí nghiệm thấp hơn so với lô đối chứng.

- Đặc biệt khi bổ sung lá cây lược vàng trong khẩu phần ăn đã làm giảm thiểu đáng kể các bệnh đường ruột ở thỏ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

A. Tài liệu tiếng Việt

- Đình Văn Bình, Khúc Thị Huệ, Lý Thị Luyến, Nguyễn Duy Lý. *Đánh giá khả năng sản xuất của giống thỏ New Zealand white, Califocnia và Pannon nhập nội nuôi tại Trung tâm Nghiên cứu Dê và Thỏ Sơn Tây*, Kỷ yếu Hội thảo quốc tế Chăn nuôi thỏ tại Cần Thơ, Việt Nam, 2008.
- Đỗ Xuân Cẩm. Một vài dẫn liệu sinh học về cây Lược Vàng, *Tạp chí Nghiên cứu và Phát triển*, **2009**, 3(74), 55-58.
- Nguyễn Thị Ngọc Dung và Vĩnh Định. Khảo sát thành phần hóa học của cây Lược Vàng (*Callisai fragrans* Lind L.), *Tạp chí Y học thành phố Hồ Chí Minh*, **2011**, 15(1), 391-394.
- Nguyễn Thị Kim Đông. Ảnh hưởng của địa cúc (*Wedelia trilobata*) thay thế cỏ lông tây (*Brachiaria mutica*) trong khẩu phần lên tăng trưởng, tiêu hóa đường chất và hiệu quả kinh tế của thỏ lai, *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ*, Số chuyên đề: Nông nghiệp (Tập 2), **2009**, 115-122.
- Nguyễn Thị Kim Đông và Nguyễn Văn Thu. Ảnh hưởng của sự bổ sung phụ phẩm khoai lang kết hợp khô dầu dừa lên tăng trọng, chất lượng thân thịt và tỷ lệ tiêu hóa đường chất của thỏ lai, *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ*, **2016**, 11, 113-119.
- Trịnh Thị Điệp, Đỗ Thị Phương, Nguyễn Kim Phương, Nguyễn Minh Khởi. Bước đầu nghiên cứu về thành phần hóa học và tác dụng sinh học của cây lược vàng *Callisia fragrans* (Lindl.) Woods, *Tạp chí Dược liệu*, **2008**, 13(6), 276-279.
- Nguyễn Xuân Trạch, Nguyễn Thị Dương Huyền, Nguyễn Ngọc Bằng, Mai Thị Thơm. Ảnh hưởng của mức thay thế thức ăn viên hỗn hợp bằng rau muống (*Ipomoea aquatica*) trong khẩu phần đến hiệu quả sử dụng thức ăn và năng suất của thỏ

- thịt New Zealand, *Tạp chí Khoa học và Phát triển*, **2011**, 10(1), 158 - 164.
8. Nguyễn Xuân Trạch, Nguyễn Thị Dương Huyền, Nguyễn Ngọc Bằng, Mai Thị Thơm. Ảnh hưởng của tỷ lệ cỏ voi (*Pennisetum purpureum*) và rau muống (*Ipomoea aquatica*) trong khẩu phần đến hiệu quả sử dụng thức ăn và năng suất của thịt thỏ New Zealand, *Tạp chí Khoa học và Phát triển*, **2012**, 10(2), 325 - 329.
 9. Nguyễn Xuân Trạch, Nguyễn Thị Dương Huyền, Nguyễn Văn Đạt, Nguyễn Ngọc Bằng. Ảnh hưởng của tỷ lệ cỏ lông Para (*Brachiaria mutica*) và lá Chè đại (*Trichanthera gigantea*) trong khẩu phần đến hiệu quả sử dụng thức ăn và sinh trưởng của thỏ thịt New Zealand, *Tạp chí Khoa học và Phát triển*, **2015**, 13(4), 573-579.
- B. Tài liệu tiếng Anh**
10. Chemenko, T.V., Ulchenko, N.T., Glushenkova, A.T., Redzhepov, D. *Chemical investigation of Callisia fragrans*. *Chemistry of Natural Compounds*, **2007**, 43, 253-255.
 11. Olemikov, D.N., Ibragimov, T.A., Zilfikarov, I.N., Chelombitko, V.A. Chemical composition of *Callisia fragrans* wood, juice and its antioxidative activity (in vitro), *Chemistry Natural Compositon*, **2008**, 44, 776-777.

Đánh giá tiềm năng sinh khối tại Bình Định

Đình Quốc Việt^{1,*}, Huỳnh Văn Nam¹, Trương Thanh Tâm¹, Văn Đình Sơn Thọ^{2,3}

¹*Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn*

²*Viện Kỹ thuật Hóa học, Trường Đại học Bách khoa Hà Nội*

³*Viện Khoa học và Công nghệ Quốc tế Việt Nam - Nhật Bản, Trường Đại học Bách khoa Hà Nội*

Ngày nhận bài: 22/04/2019; Ngày nhận đăng: 05/08/2019

TÓM TẮT

Việt Nam là quốc gia đang phát triển và có tiềm năng sinh khối rất lớn để sản xuất năng lượng, nhiên liệu, hóa chất. Nguồn sinh khối đa dạng từ mía, ngô, lúa, sắn, ... Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phần mềm GsT (Geospatial Toolkit) để đánh giá và ước lượng tiềm năng sinh khối ở mỗi vùng cũng như ở tỉnh Bình Định. Phần mềm GsT tập trung đánh giá nguồn sinh khối trong nông nghiệp và được chia ra làm 5 loại: cây mía, cây lạc, cây sắn, cây lúa và ngô. Tiềm năng năng lượng điện được sản xuất từ phụ phẩm từ cây lúa và cây ngô là 61850.72 and 51892.97 MWh. Công suất thiết kế cho nhà máy với tổng công suất trong sản xuất năng lượng là 8.83 và 7.4 MW cho phụ phẩm từ cây lúa và cây ngô. Ngoài ra, đặc tính nhiệt của trấu, rơm, cùi ngô cho mục đích sản xuất năng lượng cũng được phân tích và thảo luận. Trong quá trình phân nhiệt phân của cả ba loại sinh khối là trấu, rơm rạ và cùi ngô xảy ra được ghi nhận ở khoảng nhiệt độ từ 200°C đến 380°C. Giai đoạn phân hủy nhiệt xảy ra chậm hơn trong khoảng nhiệt độ lớn hơn 400°C và khối lượng mẫu còn lại từ quá trình nhiệt phân của trấu và rơm rạ lớn hơn so với cùi ngô. Kết quả này có ý nghĩa rất lớn trong việc sử dụng nguồn sinh khối cho sản xuất điện, năng lượng và hóa chất.

Từ khóa: Sinh khối, tiềm năng sinh khối, nguồn sinh khối, phân tích nhiệt.

*Tác giả liên hệ chính

Email: dinhquocviet@qnu.edu.vn

Evaluation of biomass potential in Binh Dinh province

Dinh Quoc Viet^{1,*}, Huynh Van Nam¹, Truong Thanh Tam¹, Van Dinh Son Tho^{2,3}

¹Faculty of Natural Sciences, QuyNhon University

²School of Chemical Engineering, Hanoi University of Science and Technology

³Vietnam Japan International Institute of Science and Technology, Hanoi University of Science and Technology

Received: 22/04/2019; Accepted: 05/08/2019

ABSTRACTS

Vietnam is a developing country and has large biomass potential to produce energy, fuels and chemicals. As an agricultural country, Vietnam has diversified biomass resource from rice crop, corn cob, cassava crop sugarcane bagasse and peanuts crop residues, ...etc. In this approach, we used Geospatial Toolkit software (GsT) to evaluate and estimate the potential of biomass in each region as well as Binh Dinh province. GsT focused on agricultural biomass residue and was divided into 5 categories: sugarcane crop, peanut crop, cassava crop, rice crop and corn crop residues. The potential of electric power produced from rice crop residues and corn crop residues is 61850.72 and 51892.97 MWh respectively. Design capacity with draw materials of rice crop residues and corn crop residues can be used for power generation is 8.83 and 7.4 MW. In addition, we also analysed thermal gravimetric of rice husk, rice straw and corn cob for energy generation. The initial decomposition of biomass in inert environment was noticed between 200÷380°C. The second decomposition of biomass in inert environment continuously occurred above 400°C and the residue weight from pyrolysis of rice husk and rice straw were higher than of corncob. These results have large significants in production electric, power and chemical from biomass.

Keywords: *Biomass, biomass potential, biomass resources, thermal gravimetric.*

1. INTRODUCTION

In the last decades, large study was dedicated world-wide to the getting back of energy from renewable fuels. Biomass is an alternative and renewable energy source, abundantly available worldwide. The biomass resources of Vietnam is very large. As an agricultural country, Vietnam has the potential of biomass energy. Agricultural residues are the most abundant in the Mekong Delta, with about 50% of the country's and the Red River Delta with 15%.¹ The crop residues can be identified into two categories – agricultural

residues and agricultural products. The total biomass production in Vietnam in 2010 was approximately 104.4 million tons.² The main source of crop residues include rice straw (37.6 million tons), rice husk (7.5 million tons), trash corn (15.0 million tons) and bagasse (7.2 million tons)³ so Vietnam has set a target of 500 MWe capacity biomass in 2020, was raised to 2000 MWe in 2030.⁴ According to above statistics, it was found that the biomass resources in Vietnam is regarded as good source, but we have no way to accurately assess the biomass resource at this time. While some traditional methods encounter many problems and the data is not regularly

*Corresponding author:

Email: dinhquocviet@qnu.edu.vn

updated as well as more than errors. In this approach, we used geospatial toolkit software to support the assessment of biomass resources in remote areas, the data is updated regularly with reliable results by taking into account the peculiarities of climate and terrain as well as the ability to exploit potential resources in the fact.⁴ By using geospatial software, we have evaluated exactly a residue of some agricultural sources such as rice, cassava, sugar cane, and the residue of the seeds in each region. The software also provides data on renewable energy sources on the basis of information on geography, population, boundaries, infrastructure, transportation.⁴

Biomass includes three main components such as hemicellulose, cellulose and lignin with traces of minerals and extractive, which exist in the range of 19-25%, 32-45% and 14-26% (by weight), respectively.¹ The percentage of these constituents varies from biomass to biomass. The difference in thermal response exhibited by biomass is due to the varying proportion of these components. Pyrolysis is the thermal decomposition of biomass occurring in the absence of oxygen and is the first step in any thermochemical conversion process, as gasification or combustion. Thermal behavior of biomass can be investigated applying thermogravimetric analysis (TGA). TGA is the thermal analysis technique which is now being widely used to evaluate the thermal behavior of solid fuels such as biomass, polymers, coal.^{5,6} In this paper, we also determined the properties related to thermochemical conversions of rice husk, rice straw and corn cob in nitrogen atmosphere using thermogravimetric technique.

2. EXPERIMENT

2.1. Evaluation a potential of biomass utilization in Binh Dinh

Geospatial is displayed mapping tools, developed by National Renewable Energy Laboratory (NERL). This tool helps energy planners, project developers and researchers to identify a region of the country has the potential

for renewable energy projects. This tool also provides data and information on renewable energy sources with information about geography, concentrated residential location, borders, infrastructure, transport and energy. Moreover, this tool is integrated with HOMER software, a simulation model to optimize the electrical system, originally developed by NREL and now owned by Homer energy LLC. Homer software integrated with this tools can automatically receive data input, using weather data to help analytically. This tool also shows the results without the need to run HOMER model. In addition, this tool has the ability to calculate potential electricity power to set up project building power plants from renewable energy sources with different scales.

2.2. Thermogravimetric study on biomass agricultural residues

The agricultural residues were collected from field and dried for a period of 2-3 weeks. The samples were kept in closed polyethylene bags to avoid contamination prior to carrying out the tests. The samples were milled to powder and sieved to a particle size less than 1 mm before carrying out the tests. Moisture content was determined using the ASTM E871 standard. The proximate analysis was used to determine the volatile matter, fixed carbon and ash content. Volatile matter was measured by following procedures described in ASTM standard E872. The heating value of the samples was calculated from equation:⁷

$$HHV = 19.2880 - 0.2135 \times VM/FC + 0.0234 \times FC/ASH - 1.9584 \times ASH/VM.$$

The ash of biomass was prepared according to ASTM 1755, biomass samples were burned in the oven at 575°C until the weight unchanged. Thermogravimetric analysis (TG/DTA) with PerkinElmer PYRIS Diamond model was used for both pyrolysis analysis. 10 mg sample was loaded into an alumina crucible and heated at programmed temperature by the rate of 5 °C/min in nitrogen environment. Fuel properties

of biomass can be conveniently grouped into physical, chemical, thermal properties. Important chemical properties of biomass relate to proximate analysis, heating value. Proximate analysis of a biomass fuel sample involves the determination of moisture, volatile matter, ash and fixed carbon content.

3. THE RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Potentials of electric energy produced from rice residue in Binh Dinh

Geospatial software that can display a diagram of biological fuels in Vietnam. This number can show us any area of biomass residues from rice, cassava, sugarcane and grains. In addition, this software is capable of identifying a specific reserve biomass of a district, a province or any area. Based on the map of biomass reserves, we see all kinds of biomass reserves in each region are very different. However, Geospatial Software has provided specifically numbers for each area of the province, each

volumn of biomass in that province. We can see in central provinces of Vietnam have abundant biomass from sugarcane, peanut, cassava, corn cob, rice husk and rice straw from Quang Ngai, Binh Dinh, Phu Yen. It can be seen that the main biomass residues in Vietnam are agricultural waste and wood fuels. The most important agricultural wastes are rice husk, rice straw, cassava, sugarcane bagasse and trash, corn, maize, sugarcane and grains. The account for about 57% of the total biomass and 93% of agricultural biomass capacities in Vietnam.

By using this GsT, we can evaluate and assess biomass reserves of the province and surrounding area to choose plant location, scale production of material resources. According to Figure 1, the potential biomass of Binh Dinh province is very abundant, especially, with products from Rice because Binh Dinh is one of the largest rice growing provinces in Vietnam so we can utilize rice husk and rice straw for gasification process to produce energy.

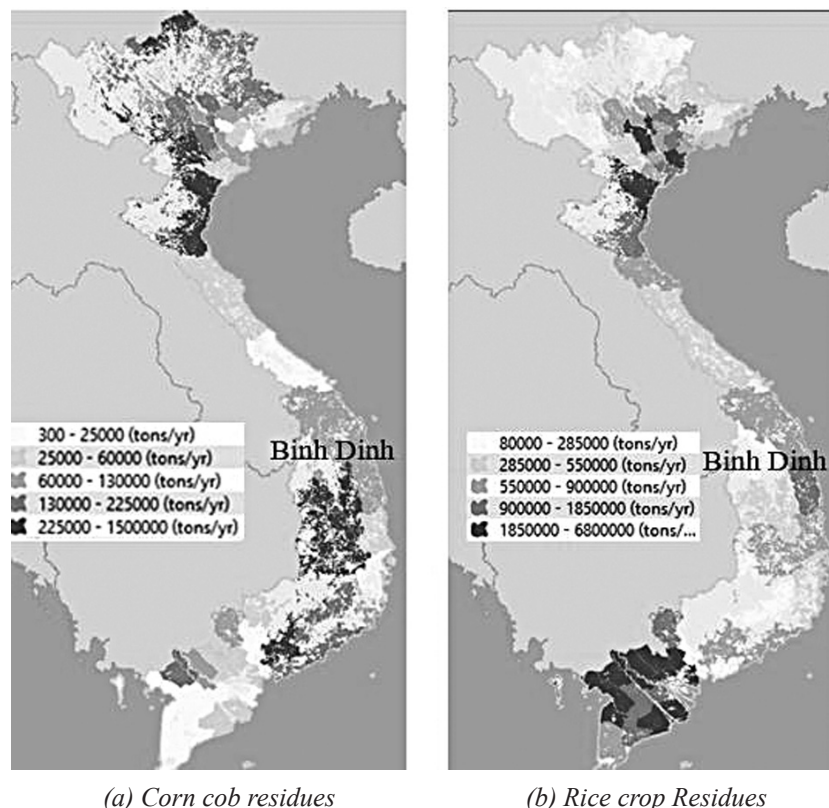


Figure 1. Geographical distribution of residue of corn cob (a), residue of rice (b)

Table 1. Proximate analyses of Binh Dinh agriculture residues

| Characteristics | Rice husk | Rice straw | Corn cob |
|---------------------------|-----------|------------|----------|
| Proximate analysis | | | |
| Moisture (%) | 3.67 | 12.03 | 8.45 |
| Volatile matter (%) | 62.15 | 58.74 | 74.67 |
| Ash (%) | 18.01 | 14.56 | 2.45 |
| Fixed carbon (%) | 16.17 | 14.67 | 14.43 |
| HHV (MJ/kg) | 17.92 | 17.97 | 18.26 |

The input parameters include buffer distance (km), obtainable (%), energy content of rice husk, rice straw and corn cob (MJ/kg), heat rate (MJ/kWh), then Geospatial Software will calculate the potential power production. After performing Run Query, Geospatial Software will outsome parameters such as Gross Potential

3.2. The proximate analysis, ultimate analysis and LHV of biomass samples

The proximate analysis, ultimate analysis and LHV of biomass samples were shown in table 1. In air dry condition, the moisture of rice straw was 12.03% and it higher than rice husk 3.67% and corn cob 8.45%. The rice straw and

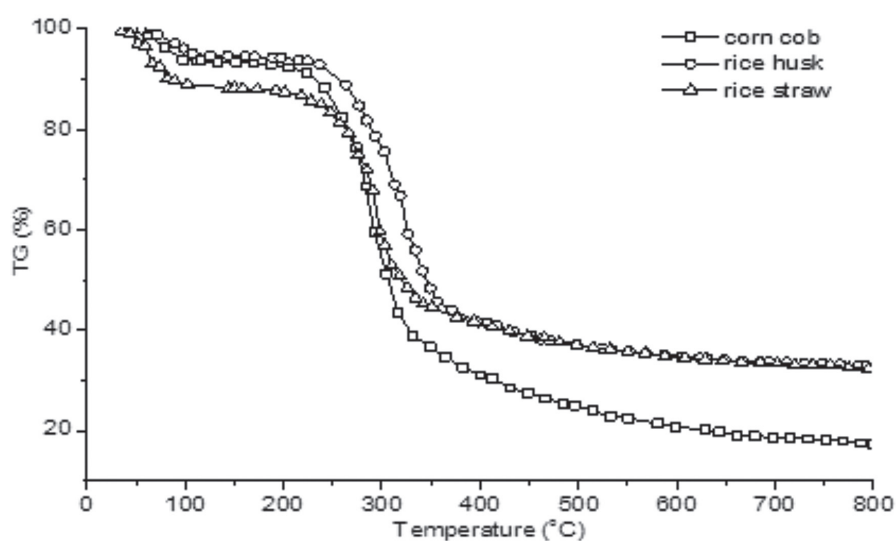


Figure 2. TG curves of biomass samples at heating rate by 5°Cmin⁻¹ in nitrogen environment.

Energy, Net Potential Energy, MWh potential, MW potential. From the results calculated by Geospatial Toolkit, electrical potential energy for rice crop residues and corn crop residues is 61850.72 and 51892.97 MWh/year. Design capacity with draw materials of rice crop residues and corn crop residues can be used for power generation is 8.83 and 7.4 MW, we only need to use 50÷60% of total output from rice crop and corn crop residues for electricity generation, the amount of electricity produced is very large.

rice husk has high ash content and it value in a range of 14÷18%. The volatile of rice husk was 62.15% and of rice straw was 58.74%. Fixed carbon of both samples was approximately 15%. The proximate analysis of rice husk was similar to that reported by S.J. Yoon.⁸ The corn cob had volatile matter approximately 74.67% and very low ash content. The fixed carbon of corn cob was 14.43%. There weren't significant differences in calorific energy in the different biomass. For the rice husk and rice straw, calorific energy varied

Table 2. Thermal degradation of biomass in nitrogen environment

| First decomposition | | Second decomposition | | Residual weight (%) |
|------------------------|-----------------|------------------------|-----------------|---------------------|
| Temperature range (°C) | Weight loss (%) | Temperature range (°C) | Weight loss (%) | |
| 218-357 | 47.9 | 357-800 | 12.9 | 32.9 |
| 207-339 | 41.7 | 339-800 | 13.4 | 32.2 |
| 192-329 | 53.9 | 329-800 | 22.1 | 17.1 |

between 17.92÷17.97 MJ/kg. The high heating value of corn cob (18.26 MJ/kg) is higher than two kind of biomass. The results of calorific energy analysis of biomass in Binh Dinh could be helpful to turn crop and forage residues into power.

3.3. The thermal degradation of three agricultural residues in the inert atmosphere

The non-isothermal weight loss (TG) curves for threes biomass samples at 5°C/min under nitrogen atmosphere was showed Figure 2. It could be said that their thermal behavior was similar to each other. Three distinct weight loss stages could be identified and it is agreement with other research. The weight loss of each stage was mentioned in Table 2. The first stage corresponding to the demoiurization of biomass. In the second stage (first decomposition), it is a rapidly devolatilisation in a narrow temperature range (approximately 200÷400°C) of biomass. The devolatilisation of biomass started at 218°C, 207°C and 192°C for rice husk, rice straw and corn cob, respectively. There was 47.9% weight loss for rice husk, 41,7% for rice straw and 53.8% for corn cob. Hemicellulose, cellulose and lignin are the major component of this temperature range. Hemicellulose decomposition take place in the range of 200÷350°C, cellulose is decomposed in the range of 350÷500°C and partial of lignin also decomposed in this temperature range.⁹ For third stages in the range of 400÷800°C (second decomposition), all biomass samples had a much lower weight loss in comparison to the second stage. The weight loss for corn cob was 22.1%. While for rice husk and rice straw, the weight

loss was 12.9% and 13.4%, respectively. For this stage, Sonebe at al reported that the char consists of the residue of lignin and some cross-linking of cellulose with lignin continues to further exothermic polymerization stage of char.¹⁰ The explanation assumes that at the higher temperature, the polymerization of biomass char continuously occurred and the polymerization reaction is depended on the unique properties of biomass char.

4. CONCLUSION

This paper evaluated and estimated the biomass potential of Vietnam as well as Binh Dinh province through the use of Geospatial Software. The results of electrical potential energy for rice crop residues and corn crop residues is 61850.72 and 51892.97 MWh/year, respectively. Design capacity with draw materials of rice crop residues and corn crop residues can be used for power generation is 8.83 and 7.4 MW. This tool helps energy planners, project developers and researchers to identify a region of the country has the potential for renewable energy projects. Proximate and ultimate analyses also showed that all biomass agricultural residues are appropriated for gasification for energy and heating demand. Thermogravimetric analysis (TGA) on three biomass samples (rice husk, rice straw and corn cob) was conduct at heating rate of 5°C/min in an inert atmosphere. The moisture removal occurred below 120°C. The initial decomposition of biomass in inert environment was noticed between 200÷380°C. The second decomposition of biomass in inert environment continuously occurred above 380°C

and char from pyrolysis of rice husk and rice straw were higher than of corncob. The tested biofuels the most intensive process should take place in temperature range around 218÷350°C, 207÷339°C and 192÷329°C for rice husk, rice straw and corn cob, respectively. As a result of pyrolysis for this temperature range for tested biomass, a high conversion level of solid fuel into gas and volatilization was obtained.

ACKNOWLEDGEMENTS

The Quy Nhon University, QNU, is acknowledged for financial support through project No. T2018.561.10

REFERENCES

1. D. Tu, O. Saito, Y. Yamamoto, and A. Tokai. Scenarios for sustainable biomass use in the Mekong Delta, Vietnam, *Journal of Sustainable Energy & Environment*, **2013**, 1, 137–148.
2. A. M. V. Taylor, Roy J, Tran Quoc Quan. Vietnam grain and feed annual, *Spring*, **2011**, 1–23.
3. A. Leinonen and N. D. Cuong. Development of biomass fuel chains in Vietnam Introduction, **2013**.
4. Van Dinh Son Tho, Nguyen Tien Cuong, Pham Hoang Luong, Le Tuan Linh. Evaluation a potential of biomass for combination biomass gasification - electric generation in Vietnam using Geospatial Software, *Int. J. Renew. Energy Environ. Eng.*, **2014**, 2(2), 109–115.
5. Y. Wu and D. Dollimore. Kinetic studies of thermal degradation of natural cellulosic materials, *Thermochim. Acta*, **1998**, 324(1–2), 49–57.
6. F. Yao, Q. Wu, Y. Lei, W. Guo, and Y. Xu. Thermal decomposition kinetics of natural fibers: Activation energy with dynamic thermogravimetric analysis, *Polym. Degrad. Stab.*, **2008**, 93(1), 90–98.
7. D. R. Nhuchhen and P. A. Salam. Estimation of higher heating value of biomass from proximate analysis: A new approach. **2012**, 55–63.
8. S. J. Yoon, Y.-I. Son, Y.-K. Kim, and J.-G. Lee. Gasification and power generation characteristics of rice husk and rice husk pellet using a downdraft fixed-bed gasifier. Elsevier, **2012**, 163–167.
9. A. Gani and I. Naruse. Effect of cellulose and lignin content on pyrolysis and combustion characteristics for several types of biomass, *Renew. Energy*, **2007**, 32(4), 649–661.
10. T. Sonobe, S. Pipatmanomai, and N. Worasuwannarak. *Pyrolysis Characteristics of Thai-agricultural Residues of Rice Straw, Rice Husk, and Corncob by TG-MS Technique and Kinetic Analysis*, The 2nd Joint International Conference on Sustainable Energy and Environment (SEE 2006), Bangkok, Thailand, 2006.

Nghiên cứu ảnh hưởng của nhóm thế đến tương tác và độ bền của phức giữa CO_2 và CH_3OCHX_2 ($\text{X} = \text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{CH}_3$)

Phạm Thị Hòa¹, Phan Đặng Cẩm Tú¹, Nguyễn Tiến Trung^{1,*}

¹Phòng thí nghiệm Hóa học tính toán và Mô phỏng, Khoa Khoa học tự nhiên,
Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 13/08/2019; Ngày nhận đăng: 14/09/2019

TÓM TẮT

Cấu trúc, độ bền và ảnh hưởng của nhóm thế đến phức giữa CH_3OCHX_2 và CO_2 được nghiên cứu bằng phương pháp tính từ đầu *ab initio*. Năng lượng tương tác hiệu chỉnh ZPE và BSSE tại mức lý thuyết MP2/aug-cc-pVTZ//MP2/6-311++G(2d,2p) của các phức có giá trị khoảng từ $-2,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ đến $-15,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Đáng chú ý, sự thế 2 nguyên tử H bằng 2 nguyên tử halogen làm giảm độ bền của phức khoảng $1,4\text{-}2,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, trong khi đó, sự thế 2 nhóm $-\text{CH}_3$ làm tăng độ bền của phức khoảng $1,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Độ bền của các phức thế halogen $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots \text{CO}_2$ có xu hướng tăng khi nhóm thế thay đổi từ F, đến Cl và đến Br. Kết quả phân tích AIM và NBO cho thấy các tương tác hình thành đều là tương tác yếu không cộng hóa trị, trong đó liên kết tetrel $\text{C} \cdots \text{O}$ đóng vai trò quyết định đến sự làm bền phức. Ngoài ra, kết quả phân tích SAPT2+ cho thấy sự đóng góp đáng kể của năng lượng tương tác tĩnh điện so với các hợp phần phân tán và cảm ứng khi hình thành phức.

Từ khóa: Dimethyl ether, carbon dioxide, liên kết tetrel, liên kết hydro.

*Tác giả liên hệ chính.

Email: nguyentientrung@qnu.edu.vn

Effects of substituents on intermolecular interaction and stability of complexes of CO₂ and CH₃OCHX₂ (X = H, F, Cl, Br, CH₃)

Pham Thi Hoa¹, Phan Dang Cam Tu¹, Nguyen Tien Trung^{1,*}

¹Laboratory of Computational Chemistry and Modelling,
Faculty of Science, Quy Nhon University

Received: 13/08/2019; Accepted: 14/09/2019

ABSTRACT

The structures, stability and effect of substituents on the complexes of CH₃OCHX₂ with CO₂ were examined by *ab initio* quantum calculations. The interaction energies corrected both ZPE and BSSE at MP2/aug-cc-pVTZ//MP2/6-311++G(2d,2p) range from -2.8 kJ.mol⁻¹ to -15.1 kJ.mol⁻¹. It is remarkable that the substitution of two H atoms by di-halogen ones leads to a decrease of 1.4-2.6 kJ.mol⁻¹ in energy while that by two methyl groups induces a stabilization enhancement of 1.8 kJ.mol⁻¹. The stability of CH₃OCHX₂...CO₂ di-halogenated derivatives tends to increase from X = F *via* Cl and to Br. AIM and NBO results indicate that intermolecular interactions are weakly noncovalent interactions, and the C...O tetrel bond plays the crucial role in stabilizing complexes. In addition, SAPT2+ analysis shows a significant contribution of the attractive electrostatic component as compared to the dispersion and induction one in complex stabilization.

Keywords: Dimethyl ether, carbon dioxide, tetrel bond, hydrogen bond.

1. INTRODUCTION

Nowadays, supercritical carbon dioxide (scCO₂) is used in many fields including the separation and extraction processes, synthesis of nano-oxide, polymer and copolymer and even cosmetic and pharmaceutical industries.¹⁻⁴ These applications are developed relying on the preeminent physicochemical properties of scCO₂ such as low cost, non-toxic and environmentally friendly.⁵⁻⁷ Although scCO₂ provides great economic efficiency, it exists limitations in the ability to solvate polar compounds and high-molecular-weight ones. Many efforts have been done to find the enhancing applicability of scCO₂ through the use of "CO₂-philes".⁸⁻¹⁰ Therefore, in order to improve the efficiency of using scCO₂

solvents and find the CO₂-philic materials, it is necessary to elucidate the factors affecting the solubility of organic compounds in scCO₂ solvent as well as understand the nature of intermolecular interactions. Recently, series of computational studies on the interactions between CO₂ and simple organic compounds such as CH₃OCH₃, CH₃OH, C₂H₅OH, CH₃SOCH₃, CH₃SSCH₃, CH₃COCHX₂, CHX=CHX, XCHZ (X = CH₃, H, F, Cl, Br; Z = O, S) have been investigated.¹¹⁻¹⁶ In which, these complexes are mainly stabilized by C...O tetrel bond and an additional role of C-H...O hydrogen bond.

Dimethyl ether (DME) is known as a low cost, popular solvent and has been used in variety of fuel applications.¹⁷ Some experimental

*Corresponding author:

Email: nguyentien trung@qnu.edu.vn

and theoretical studies on structure and characteristic of intermolecular interactions of DME...CO₂ complexes were carried out.^{11,13,18,19} The previous study showed that the weak hydrogen bond contributes a considerable amount of stabilization energy of DME...CO₂ complexes.¹⁹ However, according to the result reported by Trung *et al.*,¹³ there is no hydrogen bond in DME...CO₂ system. Therefore, the presence of hydrogen bond in complex of DME with CO₂ has not revealed yet. Besides, the effects of halogenated- and methyl- substitution on the stability and characteristics of complexes between CO₂ and CH₃COCHX₂ and CH₃SZCHX₂ (Z=O, S; X=H, F, Cl, Br, CH₃) were examined,^{14,15} but these influences on DME...CO₂ complexes have not been investigated yet. Thus, in this work, we set out the quantum calculations on the complexes of CH₃OCHX₂ (X=H, F, Cl, Br, CH₃) with CO₂ at the molecular level to investigate the geometrical structures, the properties and role of intermolecular interactions in complex stabilization.

2. COMPUTATIONAL METHODS

The optimized calculations for CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes and isolated monomers were carried out using the second-order Moller-Plesset perturbation (MP2) in conjunction with 6-311++G(2d,2p) basis set. The vibrational frequency was calculated at the same level of theory to find the local minimum on the potential energy surface, and to estimate the zero-point energy (ZPE). The total electronic energies and basis set superposition error (BSSE) were calculated at MP2/aug-cc-pVTZ with geometries obtained at MP2/6-311++G(2d,2p). The interaction energies were quantitatively determined following the supramolecular method²⁰ as shown:

$$\Delta E = E_{\text{complex}} - \sum E_{\text{monomer}}$$

The properties of intermolecular interactions are characterized through selected parameters at bond critical point (BCP) such as electron density ($\rho(\text{rc})$), Laplacian ($\nabla^2\rho(\text{rc})$),

and total electron energy density ($H(\text{rc})$) using atoms in molecules theory (AIM). The AIM calculations were performed at MP2/6-311++G(2d,2p) using AIM2000 software.²¹ NBO analysis using NBO 5.G software was carried out to analyze electron density transfer and second order perturbation energy ($E^{(2)}$).²² Proton affinity (PA) at O of CH₃OCHX₂ monomers and deprotonation enthalpy (DPE) of C-H bonds involving hydrogen bond were estimated at MP2/6-311++g(2d,2p) level of theory. All quantum calculations mentioned above were executed with the Gaussian 09 package.²³

SAPT2+ analysis were carried out by PSI4 software²⁴ to determine the contribution of energetic components into the stabilization energy. The interaction energy of the complexes is analyzed into physical components including exchange (E_{exch}), electrostatic (E_{elst}), induction (E_{ind}) and dispersion term (E_{disp}).

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Structure and stability

Stable structures formed by interactions of CH₃OCHX₂ (X = H, F, Cl, Br, CH₃) with CO₂ are presented in Figure 1, denoted by **D1-X** and **D2-X** where X = H, F, Cl, Br, CH₃. The intermolecular distances of studied complexes are listed in Table 1.

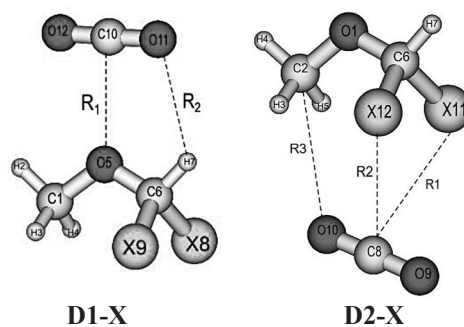


Figure 1. Stable structures of CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes

From Figure 1, CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes are stabilized by intermolecular contacts including C...O, C-H...O and X...O (X = F, Cl, Br) interactions. For **D1-X** complexes, all C...O distances are in the range of 2.66-

2.75 Å, considerably shorter than sum of van der Waals radii of two relevant atoms (3.22 Å). This gives the first evidence for the formation of C...O tetrel bond. The symmetry of **D2-H** is C_{2v} and consistent with result of previous study.¹¹ The O...H distances in **D1-Cl** and **D1-Br** are 2.69 Å and 2.72 Å, respectively, shorter than or very close to sum of van der Waals radii of relevant atoms (2.72 Å) while those in the remaining complexes are longer ranging from 2.78 Å to 2.96 Å. For **D2-X**, all C...X (F, Cl, Br) distances range from 3.00 to 3.60 Å, slightly shorter or close to the sum of van der Waals radii of two corresponding atoms (3.17-3.55 Å), indicating the formation of C...X (X=F, Cl, Br) interactions.

Table 1. Intermolecular distances (Å) of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes

| D1-X | | | | | |
|----------------|------|------|------|------|-----------------|
| X | H | F | Cl | Br | CH ₃ |
| R ₁ | 2.69 | 2.75 | 2.73 | 2.73 | 2.66 |
| R ₂ | 2.96 | 2.85 | 2.72 | 2.69 | 2.78 |
| D2-X | | | | | |
| X | H | F | Cl | Br | CH ₃ |
| R ₁ | 3.10 | 3.00 | 3.47 | 3.60 | - |
| R ₂ | 3.20 | 3.00 | 3.47 | 3.60 | - |
| R ₃ | 3.09 | 3.40 | 3.38 | 3.36 | - |

The interaction energies corrected ZPE and both ZPE+BSSE of studied complexes at MP2/aug-cc-pVTZ//MP2/6-311++G(2d,2p) are summarized in Table 2. The correlation in interaction energies **D1-X** and **D2-X** structures are described in Figure 2. In general, all values of the interaction energies are negative, indicating that the reactions between CH_3OCHX_2 and 1CO_2 are favorable thermodynamics. Indeed, the interaction energies range from -4.5 kJ.mol⁻¹ to -18.3 kJ.mol⁻¹ with only ZPE correction and from -2.8 kJ.mol⁻¹ to -15.1 kJ.mol⁻¹ with both ZPE and BSSE corrections (*cf.* Table 1). A similar trend for the interaction energies with and without BSSE correction is observed. Consequently,

only the interaction energies corrected ZPE+BSSE are used in the following discussions.

Table 2. Interaction energies corrected ZPE (ΔE) and ZPE+BSSE (ΔE^*)

| | ΔE | ΔE^* | | ΔE | ΔE^* |
|--------------------------|------------|--------------|--------------|------------|--------------|
| D1-H | -15.7 | -13.3 | D2-H | -4.5 | -2.8 |
| D1-F | -13.4 | -10.7 | D2-F | -10.8 | -8.1 |
| D1-Cl | -14.7 | -11.7 | D2-Cl | -12.7 | -9.8 |
| D1-Br | -16.4 | -11.9 | D2-Br | -16.1 | -10.4 |
| D1-CH₃ | -18.3 | -15.1 | | | |

All values are in kJ.mol⁻¹

With the same substituents, the interaction energies of **D1-X** complexes are more negative than those of **D2-X**, implying that the former geometries are energetic-favored than the later ones. Thus, CO_2 counterpart favors to locate around O atom of DME to form the stable structures. For **D1-X** system, ΔE^* has negative value ranging from -10.7 kJ.mol⁻¹ to -15.1 kJ.mol⁻¹ and its magnitude increases in order: **D1-F** < **D1-Cl** < **D1-Br** < **D1-H** < **D1-CH₃**, indicating that the strength of complexes also increases in this order. Furthermore, **D1-H** complex represents an interaction energy of -13.3 kJ.mol⁻¹, in well agreement with the value of -13.7 kJ.mol⁻¹ at CCSD(T)/aug-cc-pVTZ//MP2/aug-cc-pVTZ.¹³ Moreover, Ginderen *et al.*¹¹ also reported **D1-H** as the global minimum structure of $\text{CH}_3\text{OCH}_3 \cdots \text{CO}_2$ system with an interaction energy (without BSSE) of -15.58 kJ.mol⁻¹, completely consistent with the calculated value of -15.7 kJ.mol⁻¹ in this work (*cf.* Table 1). The substitution of two H atoms by two halogens leads to a decrease in the strength of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complex by 1.4-2.6 kJ.mol⁻¹ while that of two methyl groups leads to an enhancement of 1.8 kJ.mol⁻¹ in complexation energy. The effect of substituents on the complex stability is consistent with the results of halogenated- and methyl- substitutions on complexes of acetone and CO_2 .¹⁴

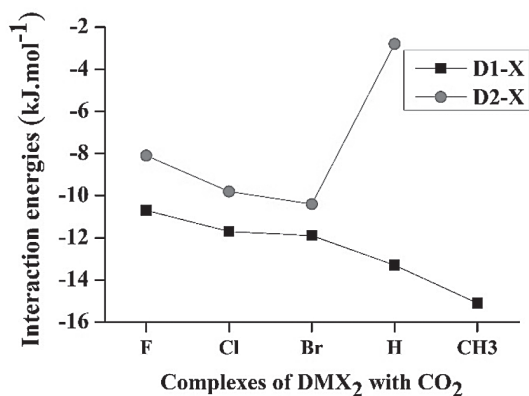


Figure 2. The difference in interaction energies (with ZPE and BSSE) of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes

For **D2-X** complexes, the stability of di-halogenated derivatives is significantly higher than that of DME which increases in order: **D2-H < D2-F < D2-Cl < D2-Br**. From geometric structure of **D2-X** complexes, they are stabilized by two $\text{C} \cdots \text{X}$ interactions and an additional cooperation of the $\text{C}-\text{H} \cdots \text{O}$ interactions, except **D2-H** with only two weak hydrogen bonds. The fact is that the electronegativity decreases from F *via* Cl to Br. Therefore, the $\text{C} \cdots \text{X}$ interactions ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) existed in **D2-X** complexes are predicted to be electrostatic in nature.

The interaction capacity of CO_2 with CH_3OCHX_2 are significantly stronger than that of C_2H_6 , C_2H_4 and CH_3SCH_3 by 7.7-12.1, 8.4-10.2 and 0.8-5.2 kJ.mol^{-1} ; respectively.^{12, 16, 25} Moreover, for the same halogenated-substitution, the complexes of CO_2 and CH_3OCHX_2 are also more stable than the corresponding $\text{XHC}=\text{CHX}$ ones by 4.1-4.5 kJ.mol^{-1} .¹² Therefore, CH_3OCHX_2 is predicted to be an effective functional group in aiming of CO_2 capture.

3.2. SAPT analysis

SAPT2+ analysis for **D1** complexes is performed to better understand the nature and role of each energetic component into the total stabilization energy of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes. The contribution percentages of different energetic components including electrostatic, induction and dispersion of **D1-X** energetic-favored complexes are described in Figure 3.

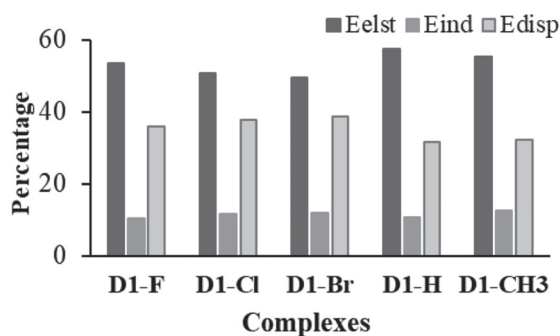


Figure 3. Contributions (%) of physical energetic terms

It is showed that the attractive electrostatic term mainly contributed to the stabilization of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ system as compared to dispersion and induction ones. In particularly, the contribution of electrostatic attraction component ranges from 49.5% to 57.4%, considerably larger than that of two remaining counterparts, which is roughly 31.8% - 38.6% for dispersion and 10.5% - 12.5% for induction one. For the halogenated-substituted derivatives, the percentage of attractive electrostatic term is decreased in going from -F *via* -Cl to -Br, while that of dispersion is slightly increased in this order. The interaction energies taken from SAPT2+ approach are estimated from -13.2 kJ.mol^{-1} to -18.0 kJ.mol^{-1} , which the magnitude increases in order $\text{F} < \text{Cl} < \text{Br} < \text{H} < \text{CH}_3$ and consistent with those derived from supramolecular theory.

For **D2-X** complexes, the contributions of electrostatic, induction and dispersion terms are about 18.4 - 42.1%, 8.3 - 19.1% and 41.6 - 62.4%, respectively. Going from **D1-X** to **D2-X**, there is a change of the main contribution component, which is going from electrostatic to dispersion one, respectively.

3.3. An AIM analysis

The molecular graphs of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes according to AIM approach are shown in Figure 4 (Red points denote the BCPs).

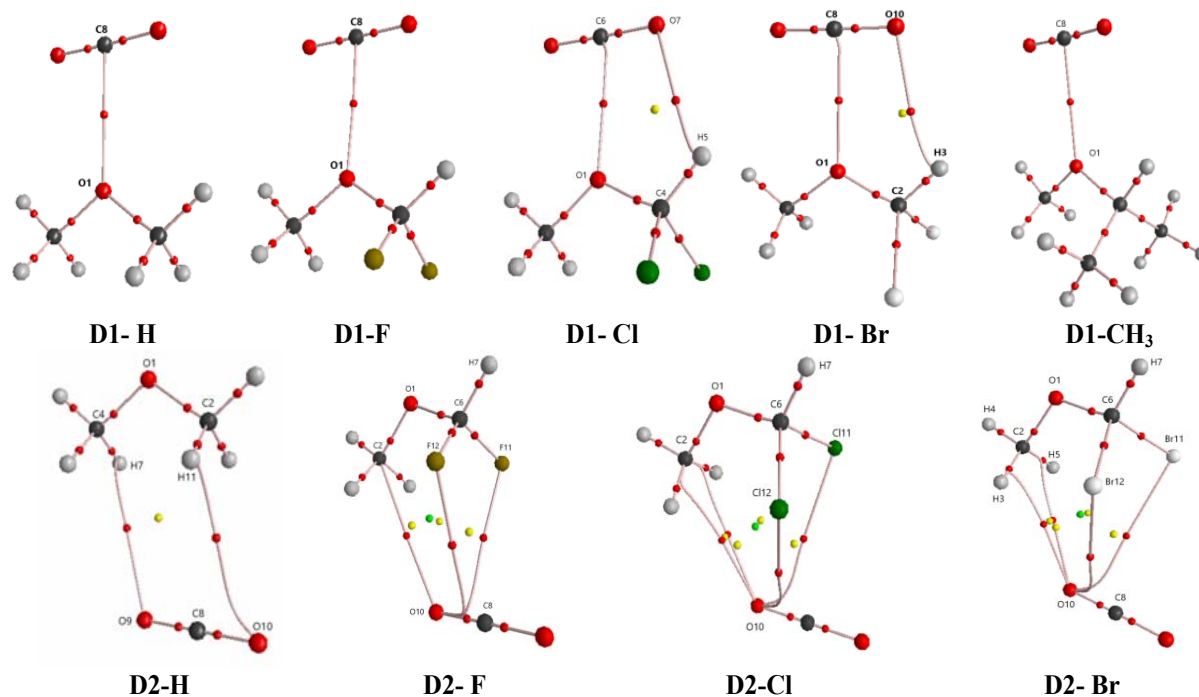


Figure 4. Topological of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes ($X = \text{H, F, Cl, Br, CH}_3$)

The existence of BCPs between the contacts of the two molecules, demonstrating the formation of intermolecular interactions (*cf.* Figure 4). The selected features at BCPs of intermolecular interactions are collected in Table 3 to investigate the properties of intermolecular interactions. In general, the electron density, Laplacian and total electron energy density at BCPs of all interactions formed are in the range

of 0.0032-0.0144 au, 0.0128-0.0589 au and 0.0007-0.0020 au, respectively; indicating that they are weakly non-covalent interactions.²⁶⁻²⁸

The proton affinity at O site and deprotonated enthalpy of the C–H involved C–H \cdots O hydrogen bond of isolated monomers are summarized in Table 4 to further investigate the effect of substituents.

Table 3. Selected parameters (au) of $\text{CH}_3\text{OCHX}_2 \cdots 1\text{CO}_2$ complexes ($X = \text{H, F, Cl, Br, CH}_3$)

| D1 | Contact | $\rho(\text{rc})$ | $\nabla^2\rho(\text{rc})$ | H(rc) | D2 | Contact | $\rho(\text{rc})$ | $\nabla^2\rho(\text{rc})$ | H(rc) |
|-----------------|--------------------|-------------------|---------------------------|--------|----|-----------------------|-------------------|---------------------------|--------|
| H | O1 \cdots C8 | 0.0135 | 0.0589 | 0.0020 | H | C2–H11 \cdots O10 | 0.0038 | 0.0155 | 0.0010 |
| F | O1 \cdots C8 | 0.0117 | 0.0527 | 0.0020 | | C4–H7 \cdots O9 | 0.0032 | 0.0128 | 0.0007 |
| Cl | O1 \cdots C6 | 0.0121 | 0.0540 | 0.0020 | F | F11(12) \cdots O10 | 0.0058 | 0.0306 | 0.0017 |
| | C4–H6 \cdots O7 | 0.0056 | 0.0247 | 0.0011 | | C2 \cdots O10 | 0.0042 | 0.0177 | 0.0010 |
| Br | O1 \cdots C8 | 0.0121 | 0.0538 | 0.0020 | Cl | Cl11(12) \cdots O10 | 0.0049 | 0.0183 | 0.0009 |
| | C2–H3 \cdots O10 | 0.0060 | 0.0255 | 0.0011 | | O10 \cdots C2 | 0.0045 | 0.0191 | 0.0011 |
| CH ₃ | O1 \cdots C8 | 0.0144 | 0.0614 | 0.0019 | Br | Br11(12) \cdots O10 | 0.0049 | 0.0169 | 0.0008 |
| | | | | | | C2–H3 \cdots O10 | 0.0046 | 0.0198 | 0.0011 |

For **D1-X** complexes, the $\rho(rc)$ values at BCPs of O...C tetrel bonds are enhanced in order of **D1-F** < **D1-Cl** \approx **D1-Br** < **D1-H** < **D1-CH₃**. This means that the O...C tetrel bond becomes stronger in **D1-CH₃** and weaker in halogenated derivatives, as compared to that in CH₃OCH₃...1CO₂ complex. This change is explained based on the gas phase basicity at the O site increases as followed: CH₃OCHF₂ < CH₃OCHCl₂ < CH₃OCHBr₂ < CH₃OCH₃ < CH₃OCH(CH₃)₂ (*cf.* Table 4). Furthermore, the DPE values of isolated monomers show that the polarization of the C–H bond increases in the sequence CH₃ \approx H < F < Cl < Br. This result is confirmed by the existence of C–H...O hydrogen bond in **D1-Cl** and **D1-Br** and no hydrogen bond formed in the remaining complexes. Taking into account the strength of C–H...O hydrogen bond, its $\rho(rc)$ value at BCP in **D1-Br** is slightly higher than that in **D1-Cl**. Combined AIM results and energetic parameters, CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes are mainly stabilized by the C...O tetrel bond and an additional role of C–H...O hydrogen bond. Regarding **D2-X** complexes, it is existed the O...X (F, Cl, Br) interactions in which are slightly reinforced from Br *via* Cl to F. These interactions are predicted to be electrostatic in nature due to the electronegativity of halogenated atoms also decreases in the same order.

The substitution of halogen and methyl group leads to a significant change in the strength of intermolecular interactions and stability of complexes. It is explained by the electron density withdrawing effect of halogenated groups, which causes a decrease electron density at O site and the largest decrement belongs to F-substituted derivative, followed by -Cl and finally, by -Br one. In contrast, the presence of -CH₃ groups instead of -H atoms results in a slight enhancement of the electron density at the O site as compared to CH₃OCH₃.

Table 4. PA at O atom and DPE of C-H bond of CH₃OCHX₂ (in kJ.mol⁻¹)

| Monomers | PA | DPE |
|--|-------|--------|
| CH ₃ OCH ₃ | 788.3 | 1728.9 |
| CH ₃ OCHF ₂ | 700.2 | 1694.1 |
| CH ₃ OCHCl ₂ | 714.8 | 1607.5 |
| CH ₃ OCHBr ₂ | 718.2 | 1576.5 |
| CH ₃ OCH(CH ₃) ₂ | 826.3 | 1725.8 |

3.4. An NBO analysis

The charge transfer and the formation of intermolecular orbital interactions upon complexation are examined at MP2/6-311++G(2d,2p). The electron density transfer (EDT, *me*) and second-order perturbation energy ($E^{(2)}$, kJ.mol⁻¹) are gathered in Table 5.

The existence of intermolecular interactions is confirmed by means of EDT from Lp(O) and $\sigma(C-H)$ orbitals to $\pi^*(C=O)$ and $\sigma^*(C-H)$ anti-bonding orbitals. The EDT values of CH₃OCHX₂ are positive in range of 0.4-6.0 *me*, implying that electron density transfers from DME and its derivatives to CO₂ monomer. The EDT value of the halogenated-substituted complexes is smaller than that of the remaining ones due to the electron withdrawing effect of halogen atoms.

Generally, the second-order energies of orbital interactions in **D1-X** complexes are considerably higher than those of in **D2-X** ones supporting that CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes favor **D1** geometry. The $E^{(2)}$ values of Lp(O)→ $\pi^*(C=O)$ delocalization in **D1-X** complexes range from -8.6 to -12.5 kJ.mol⁻¹, significantly larger than those of Lp(O)→ $\sigma^*(C-H)$ by 8.3-11.5 kJ.mol⁻¹. This result confirms the dominant role of the former interactions as compared to the later. For **D2-X** complexes, the $E^{(2)}$ of Lp(X)→ $\pi^*(C=O)$ (X = F, Cl, Br) is roughly 1.5–1.8 kJ.mol⁻¹, which is the main interactions of these complexes.

Table 5. EDT and E⁽²⁾ for CH₃OCHX₂...1CO₂ complexes

| | EDT* | Orbital interaction | E ⁽²⁾ |
|--------------------------|------|----------------------|------------------|
| D1-H | 6.0 | Lp(O1)→π*(C8=O9) | 11.3 |
| D1-F | 2.7 | Lp(O1)→π*(C8=O9) | 8.6 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H3) | 1.0 |
| D1-Cl | 2.3 | Lp(O1)→π*(C6=O8) | 8.8 |
| | | Lp(O7)→σ*(C4-H5) | 0.7 |
| D1-Br | 1.9 | Lp(O1)→π*(C8=O9) | 8.7 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H3) | 0.5 |
| D1-CH₃ | 4.5 | Lp(O1)→π*(C8=O10) | 12.5 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H3) | 0.3 |
| D2-H | 0.4 | σ(C2-H12)→π*(C8=O10) | 0.2 |
| D2-F | 3.1 | Lp(F11)→π*(C8=O9) | 1.8 |
| | | Lp(F12)→π*(C8=O9) | 1.8 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H4) | 0.3 |
| D2-Cl | 3.4 | Lp(Cl11)→π*(C8=O9) | 1.8 |
| | | Lp(Cl12)→π*(C8=O9) | 1.8 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H3) | 0.2 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H5) | 0.2 |
| D2-Br | 3.2 | Lp(Br11)→π*(C8=O9) | 1.7 |
| | | Lp(Br12)→π*(C8=O9) | 1.7 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H3) | 0.5 |
| | | Lp(O10)→σ*(C2-H5) | 0.3 |

* the EDT values of CH₃OCHX₂ monomers

4. CONCLUSIONS

The interactions of CO₂ with CH₃OCHX₂ (X = H, F, Cl, Br, CH₃) induce nine stable complexes on the potential surfaces with two geometries including **D1-X** and **D2-X** at MP2/6-311++G(2d,2p). The interaction energies with both ZPE and BSSE of these complexes range from -2.8 kJ.mol⁻¹ to -15.1 kJ.mol⁻¹ at MP2/aug-cc-pVTZ//MP2/6-311++G(2d,2p) level of theory. SAPT2+ results indicate that the attractive electrostatic energy is the main contribution overcoming dispersion and induction energetic components in stabilizing the complexes.

D1-X is found to be energetic-favored

structure as compared to **D2-X** one. The halogenated-substituted derivatives cause a decrease in the complex strength while methyl-substituted one leads to a stabilization enhancement, which is described in order F < Cl < Br < H < CH₃. The C...O tetrel bond plays the main contribution into the stability of complexes with the complement of C-H...O hydrogen bond, and all intermolecular interactions are weakly non-covalent interactions.

Acknowledgement

This research is funded by Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under grant number 104.06-2017.11.

REFERENCES

1. D. Rakhuba, G. Novik, E. S. Dey. Application of supercritical carbon dioxide (scCO₂) for the extraction of glycolipids from *Lactobacillus plantarum* B-01, *J. Supercrit. Fluids*, **2009**, *49*, 45–51.
2. L. Padrela, M. A. Rodrigues, A. Duarte, A. M. A. Dias, M. E. M. Braga, H. C. de Sousa. Supercritical carbon dioxide-based technologies for the production of drug nanoparticles/nanocrystals - A comprehensive review, *Adv. Drug Deliv. Rev.*, **2018**, *121*, 22-78.
3. Y. Ikushima. Supercritical fluids: An interesting medium for chemical and biochemical processes, *Adv. Colloid Interface Sci.*, **1997**, *71-72*, 259-280.
4. J. Jennings, M. Beija, A. P. Richez, S. D. Cooper, P. E. Mignot, K. J. Thurecht, K. S. Jack, S. M. Howdle. One-Pot synthesis of block copolymers in supercritical carbon dioxide: A simple versatile route to nanostructured microparticles, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, *134*, 4772–4781.
5. N. Budisa, D. Schulze-Makuch. Supercritical carbon dioxide and its potential as a life-sustaining solvent in a planetary environment, *Life*, **2014**, *4*, 331–340.
6. C. A. Eckert, B. L. Knutson, P. G. Debenedetti. Supercritical fluids as solvents for chemical and materials processing, *Nature*, **1996**, *383*, 313-318.

7. Y. Medina-Gonzalez, S. Camy, J. S. Condoret. ScCO₂/green solvents: Biphasic promising systems for cleaner chemicals manufacturing, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, **2014**, 2(12), 2623-2636.
8. J. M. DeSimone, Z. Guan, C. S. Elsbernd. Synthesis of Fluoropolymers in supercritical carbon dioxide. *Science*, **1992**, 257(5072), 945-947.
9. K. P. Johnston, K. L. Harrison, M. J. Clarke, S. M. Howdle, M. P. Heitz, F. V. Bright, C. Carlier, T. W. Randolph. Water-in-carbon dioxide microemulsions: An environment for hydrophiles including proteins, *Science*, **1996**, 271(5249), 624-626.
10. T. Sarbu, T. J. Styranc, E. J. Beckman. Design and synthesis of low cost, sustainable CO₂-philes *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2000**, 39, 4678-4683.
11. P. V. Ginderen, W. A. Herrebout, B. J. van der Veken. Van der Waals complex of dimethyl ether with carbon dioxide, *J. Phys. Chem. A*, **2003**, 107, 5391-5396.
12. N. T. Trung, N. T. T. Trang, V. T. Ngan, D. T. Quang, N. M. Tho. Complexes of carbon dioxide with dihalogenated ethylenes: structure, stability and interaction. *RSC Adv.*, **2016**, 6, 31401-31409.
13. N. T. Trung, N. M. Tho. Interactions of carbon dioxide with model organic molecules: A comparative theoretical study, *Chem. Phys. Lett.*, **2013**, 581, 10-15.
14. H. Q. Dai, N. N. Tri, N. T. T. Trang, N. T. Trung. Remarkable effects of substitution on stability of complexes and origin of the C-H...O(N) hydrogen bonds formed between acetone's derivative and CO₂, XCN (X = F, Cl, Br), *RSC Adv.*, **2014**, 4, 13901-13908.
15. V. T. Phuong, N. T. T. Trang, V. Vo, N. T. Trung. A comparative study on interaction capacity of CO₂ with the >S=O and >S=S groups in some doubly methylated and halogenated derivatives of CH₃SOCH₃ and CH₃SSCH₃. *Chem. Phys. Lett.*, **2014**, 598, 75-80.
16. D. Kajiya, K. Saitow. Significant difference in attractive energies of C₂H₆ and C₂H₅OH in scCO₂. *J. Supercrit. Fluids*, **2016**, 120(2), 328-334.
17. C. Arcoumanis, C. Bae, R. Crookes, E. Kinoshita. The potential of dimethyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: A review, *C. Arcoumanis al. / Fuel*, **2008**, 87, 1014-1030.
18. J. J. Newby, R. A. Peebles, S. A. Peebles. Structure of the dimethyl ether-CO₂ van der Waals complex from microwave spectroscopy, *J. Phys. Chem. A*, **2004**, 108, 11234-11240.
19. K. H. Kim, Y. Kim. Theoretical studies for Lewis acid-base interactions and C-H...O weak hydrogen bonding in various CO₂ complexes, *J. Phys. Chem. A*, **2008**, 112, 1596-1603.
20. S. F. Boys, F. Bernardi. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors, *Mol. Phys.*, **1970**, 19, 553-566.
21. F. B. J. S. F. und Technik, F. Bielefeld. AIM2000 - A Program to Analyze and Visualize Atoms in Molecules, *J. Comput. Chem.*, **2001**, 22(5), 545-559.
22. F. Weinhold, *et al* - GenNBO 5.G, Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin: *Madison, WI*, 2001.
23. M. J. Frisch, *et al* - Gaussian 09 (version A.02), Inc.: *Wallingford, CT*, **2009**.
24. R. M. Parrish *et al*. Psi4 1.1: An open-source electronic structure program emphasizing automation, advanced libraries, and interoperability, *J. Chem. Theory Comput.*, **2017**, 13, 3185-3197.
25. T. T. Trung, P. D. Cam-Tu, H. Q. Dai, N. P. Hung, N. T. Trung. Theoretical study on interaction and stability of complexes between dimethyl sulfide and carbon dioxide, *Quy Nhon University - Journal of Science*, **2019**, 13(1), 95-105.
26. G. R. Desiraju, T. Steiner. *The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology*, Oxford University Press, New York, **1999**.
27. G. R. Desiraju. C-H...O and other weak hydrogen bonds. From crystal engineering to virtual screening, *Chem. Commun.*, **2005**, 24, 2995-3001.
28. M. Ziolkowski, S. J. Grabowski, J. Leszczynski. Cooperativity in hydrogen-bonded interactions: Ab initio and 'atoms in molecules' analyses, *J. Phys. Chem. A*, **2006**, 110, 6514-6521.

Theoretical study on adsorption of organic molecules containing benzene ring onto rutile-TiO₂ (110) surface using density functional theory method

Huynh Thi My Phuc¹, Nguyen Ngoc Tri¹, Nguyen Tien Trung^{1,*}

¹Laboratory of Computational Chemistry and Modelling,
Faculty of Natural Science, Quy Nhon University

Received: 13/08/2019; Accepted: 15/09/2019

ABSTRACT

In this study, the adsorption of benzaldehyde, benzoic acid, aniline, phenol and benzenesulfonic acid molecules on the surface of rutile-TiO₂ (110) is investigated in detail by using the density function theory calculations. Interactions between the molecules and rutile surface are fully considered via quantum chemical analyses. These processes are evaluated as chemical adsorption with adsorption energies in the range of -12.9 to -31.1 kcal.mol⁻¹. The stability of investigated configurations is contributed by the Ti···O/N electrostatic interactions and the O/N/C-H···O hydrogen bonds. Calculated results indicate that the adsorption capacity of these molecules on rutile-TiO₂ (110) surface decreases in the order of -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH derivatives.

Keywords: Adsorption, organic molecules, material surface, rutile-TiO₂ (110), DFT.

*Corresponding author.

Email: nguyentien trung@qnu.edu.vn

Nghiên cứu lý thuyết sự hấp phụ các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen lên bề mặt rutile-TiO₂ (110) sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ

Huỳnh Thị Mỹ Phúc¹, Nguyễn Ngọc Trí¹, Nguyễn Tiên Trung^{1,*}

¹Phòng thí nghiệm Hóa học tính toán và Mô phỏng, Khoa Khoa học tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn

Ngày nhận bài: 13/08/2019; Ngày nhận đăng: 13/09/2019

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, sự hấp phụ các phân tử benzaldehyde, benzoic acid, aniline, phenol, benzenesulfonic acid lên bề mặt vật liệu rutile-TiO₂ (110) được nghiên cứu một cách chi tiết sử dụng các tính toán theo thuyết phiếm hàm mật độ. Sự tương tác giữa các phân tử và bề mặt rutile-TiO₂ (110) được xem xét đầy đủ thông qua các phương pháp hóa học lượng tử. Các quá trình này được đánh giá là hấp phụ hóa học với năng lượng hấp phụ trong khoảng -12,9 đến -31,1 kcal/mol. Độ bền các phức khảo sát được đóng góp bởi các tương tác tĩnh điện Ti···O/N và các liên kết hydro kiểu O/C-N-H···O. Kết quả tính toán cho thấy, khả năng hấp phụ các dẫn xuất thế benzen trên bề mặt rutile-TiO₂ (110) giảm theo thứ tự các dẫn xuất thế -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH.

Từ khóa: Sự hấp phụ, các phân tử hữu cơ, bề mặt vật liệu, rutile-TiO₂ (110), phương pháp DFT.

1. GIỚI THIỆU

Những thập kỷ gần đây, TiO₂ đã và đang được nghiên cứu và ứng dụng rộng rãi trong các lĩnh vực khoa học và công nghệ, như ứng dụng trong các thiết bị cảm biến khí, dùng làm vật liệu xúc tác quang, pin mặt trời,...¹⁻³ Các nghiên cứu cho thấy sự phân hủy của các phân tử hữu cơ trên bề mặt của chất xúc tác quang TiO₂ phụ thuộc vào hoạt tính xúc tác và khả năng hấp phụ của các dạng bề mặt vật liệu TiO₂.⁴ Trong số các dạng bề mặt TiO₂, bề mặt rutile-TiO₂ (110) (r-TiO₂) được đánh giá là bề mặt bền nhất dạng rutile và được quan tâm nghiên cứu nhiều.⁵ Sự hấp phụ của phân tử hữu cơ lên bề mặt r-TiO₂ đang được nhiều nhà khoa học quan tâm khảo sát. Một số kết quả cho thấy, các acid carboxylic như benzoic và terephthalic hấp phụ tốt trên bề mặt r-TiO₂.^{6,7} Gần đây nhất, Trung và cộng sự

đã nghiên cứu về sự hấp phụ các acid (formic, acetic, benzoic), phenol và nitrobenzen trên bề mặt rutile-TiO₂ (110) sử dụng các tính toán DFT.⁸ Kết quả thấy rằng đây là sự hấp phụ hóa học, và vai trò của các tương tác tĩnh điện Ti···O và các liên kết hydro O/C-H···O cũng được phân tích một cách chi tiết.

Quan trọng hơn, việc hiểu sự có mặt, vai trò các tương tác yếu cũng như ảnh hưởng của các nhóm chức hữu cơ gắn với vòng benzen đến sự hình thành các cấu trúc bền giúp chúng ta có cái nhìn sâu sắc hơn về quá trình hấp phụ diễn ra trên bề mặt vật liệu như r-TiO₂. Gần đây, tính toán mô phỏng ngày càng được chú trọng trong các nghiên cứu về môi trường, hóa học, y học, sinh học,...^{9,10} Sự tính toán hóa học lượng tử đã mang lại cái nhìn sâu sắc hơn về cơ chế phản ứng cũng như bản chất, tương tác giữa các phân tử.

*Tác giả liên hệ chính.

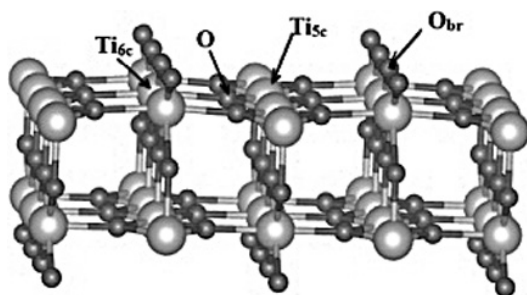
Email: nguyentientrung@qnu.edu.vn

Do đó, trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng các tính toán thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) để làm rõ bản chất vai trò của các tương tác, ảnh hưởng của các nhóm chức đến khả năng hấp phụ các dẫn xuất benzen trên bề mặt r-TiO₂ (110).

2. PHƯƠNG PHÁP TÍNH

Sử dụng chương trình tính toán VASP¹¹ để tối ưu các phân tử hữu cơ, bề mặt vật liệu r-TiO₂ (110) và các phức thu được. Bề mặt r-TiO₂ (110) được lựa chọn theo cách tương tự như các nghiên cứu trước đây⁶⁻⁸ và supercell được thiết lập với kích thước 3 x 2 x 2 với độ lớn các chiều: a = 13,24 Å; b = 9,10 Å; c = 25,00 Å, được minh họa ở hình 1. Trong tất cả các tính toán, phiếm hàm trao đổi tương quan PBE¹² trong sự gần đúng tổng quát (GGA) được lựa chọn sử dụng, với năng lượng E_{cutoff} = 500 eV. Các điểm k-points trong không gian mạng đảo được xem xét và tính tại trung tâm Gamma với tỷ lệ 2 x 2 x 1.

Năng lượng hấp phụ (E_{ads}) và năng lượng tương tác (E_{int}) của các phức được tính theo các biểu thức sau: E_{ads} = E_c - E_s - E_m; E_{int} = E_c - E_s* - E_m*. Trong đó: E_c, E_s, E_m là năng lượng cho các cấu trúc tối ưu của các phức, bề mặt, phân tử; E_s*, E_m* là năng lượng điểm đơn của các bề mặt và phân tử tương ứng được tách ra từ cấu trúc tối ưu của các phức và không tối ưu lại. Năng lượng biến dạng cho các phân tử và bề mặt sau quá trình hấp phụ (E_{D-mol}, E_{D-surf} tương ứng) được tính theo sự khác nhau giữa E_m* và E_m, E_s* và E_s tương ứng.



Hình 1. Cấu trúc bề mặt rutile-TiO₂ (110) sử dụng trong hệ nghiên cứu (các nguyên tử màu đỏ và xanh tương ứng cho O, Ti)

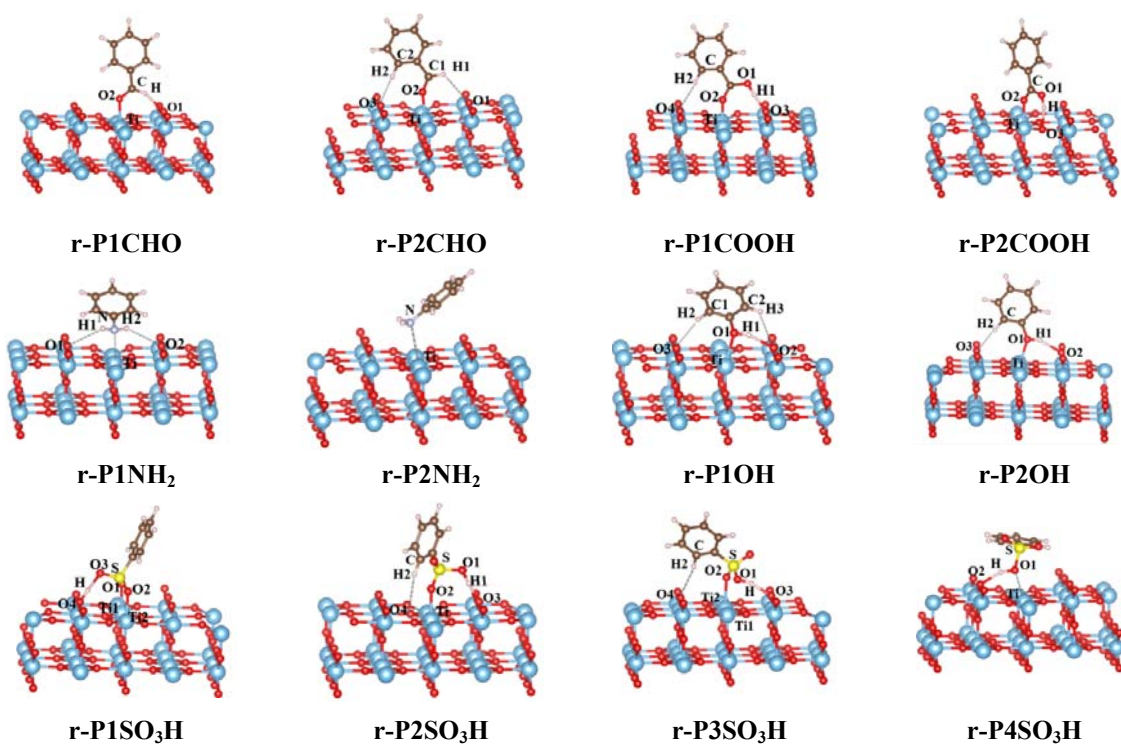
Thêm vào đó, để hiểu sâu hơn về bản chất tương tác giữa phân tử và bề mặt, sự hình thành và vai trò của các tương tác trong quá trình hấp phụ, chúng tôi thực hiện tính toán các đại lượng đặc trưng như ái lực proton (PA) tại các vị trí nguyên tử, năng lượng tách proton (DPE) tại các liên kết và giản đồ thế năng tĩnh điện (MEP) của các phân tử hữu cơ, phân tích hình học topo cho các phức theo thuyết nguyên tử trong phân tử (AIM)^{13,14} tại mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p). Các tính toán này được thực hiện bởi chương trình Gaussian 09.¹⁵ Ngoài ra, các tính toán mật độ electron (ρ(r)), Laplacian của mật độ electron (∇²(ρ(r))), mật độ năng lượng electron (H(r)) tại các điểm tới hạn liên kết (BCP) được thực hiện bằng chương trình AIM 2000.¹⁶

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1 Cấu trúc hình học

Thực hiện tối ưu hóa hình học, chúng tôi thu được 12 phức bền của sự tương tác giữa các dẫn xuất benzen C₆H₅CHO, C₆H₅COOH, C₆H₅NH₂, C₆H₅OH và C₆H₅SO₃H và bề mặt r-TiO₂ được ký hiệu r-PiX (i = 1-4, X = -CHO, -COOH, -NH₂, -OH, -SO₃H) như chỉ ra ở hình 2. Các thông số đặc trưng cho các cấu trúc tối ưu được tập hợp trong bảng 1.

Kết quả bảng 1 cho thấy, khoảng cách Ti...O/N và O/C/N-H...O trong các phức tính được trong khoảng 2,11-2,41 Å và 1,00-2,91 Å, tương ứng. Các giá trị này đều nhỏ hơn tổng bán kính Van der Waals của các nguyên tử tham gia tương tác (tổng bán kính các nguyên tử Ti và O; Ti và N; O và H tương ứng là 3,67 Å, 3,85 Å và 2,72 Å). Do đó, chúng tôi nhận định bước đầu có sự hình thành các tương tác Ti...O/N và O/C/N-H...O trong các phức khảo sát ở trên. Sự hình thành các phức bền chủ yếu tập trung ở tương tác giữa các nhóm chức với vị trí Ti phối trí 5 (Ti_{5c}) và O ở cầu nối (O_{br}) trên bề mặt r-TiO₂ (110).



Hình 2. Các cấu hình bền của sự hấp phụ của các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen trên bề mặt r-TiO₂ (110)

Bảng 1. Khoảng cách các tương tác (r, Å), góc liên kết (α , °) và sự thay đổi độ dài các liên kết (Δr , Å) trong quá trình hấp phụ

| Phức | r (Ti...O/N) | r(O/C/N-H...O) | α (Ti-O/N-C/S) | α (O/C/N-H-O) | Δr (Ti-O) | Δr (O/C/N-H) |
|-----------------------|--|----------------|--|----------------------|-------------------|----------------------|
| r-P1CHO | 2,22 | 2,03 | 128,1 | 156,1 | 0,02 | -0,01 |
| r-P2CHO | 2,17 | 2,91/2,33* | 153,4 | 153,4 | 0,02 | -0,01 |
| r-P1COOH | 2,11 | 1,56/2,50* | 152,3 | 174,4 | 0,05 | 0,05 |
| r-P2COOH | 2,19 | 1,73 | 136,4 | 136,4 | 0,02 | 0,03 |
| r-P1NH ₂ | 2,37 | 2,84 | 121,6 | 121,0 | 0,02 | 0,01 |
| r-P2NH ₂ | 2,38 | - | 122,3 | - | 0,02 | 0,01 |
| r-P1OH | 2,32 | 1,88/2,16* | 125,6 | 158,1 | 0,04 | 0,03 |
| r-P2OH | 2,30 | 1,90/2,47* | 145,7 | 153,3 | 0,04 | 0,03 |
| r-P1SO ₃ H | 2,18 ^{a)} /2,14 ^{b)} | 1,00 | 125,2 ^{a)} /127,8 ^{b)} | 158,1 | 0,14 | 0,75 |
| r-P2SO ₃ H | 2,17 | 1,46/2,72* | 158,3 | 174,3 | 0,05 | 0,08 |
| r-P3SO ₃ H | 2,28 | 1,66/2,24* | 137,7 | 137,7 | 0,05 | 0,05 |
| r-P4SO ₃ H | 2,41 | 1,74 | 146,6 | 157,6 | 0,04 | 0,03 |

^{a),b)} khoảng cách Ti...O (O1, O2 của nhóm -SO₃H với 2 nguyên tử Ti1, Ti2); * khoảng cách C-H trên vòng benzen với O của bề mặt

Bên cạnh đó, các góc tại các vị trí tương tác như α (Ti-O/N-C) trong khoảng từ 121,6 đến 158,3°, trong đó góc α (Ti-O-C) lớn hơn góc α (Ti-O-N). Các góc liên kết α (O/C/N-H-O) nằm trong khoảng 121,0 - 174,3°, trong đó giá trị lớn nhất ở phức **r-P2SO₃H** và giá trị nhỏ nhất tìm thấy ở phức **r-P1NH₂**. Độ lớn các góc này đều gần với các góc liên kết trong sự hình thành liên kết hydro O/C-H...O trong các nghiên cứu trước đây.^{12,16} Mặt khác, khi các phức hình thành, độ dài các liên kết Ti-O và O/C/N-H đều tăng lên trong khoảng 0,02-0,14 Å và khoảng 0,01-0,75 Å tương ứng. Đáng chú ý, sự thay đổi của khoảng cách O-H và Ti-O trong phức **r-P1SO₃H** lớn hơn nhiều so với các phức khác. Điều này được hiểu do nguyên tử H linh động trong nhóm -SO₃H có xu hướng dịch chuyển sang bề mặt r-TiO₂(110) mạnh hơn ở các nhóm thế khác để tạo hình thành liên kết hydro kiểu O-H...O bền. Xu hướng dịch chuyển nguyên tử H linh động trong các nhóm chức acid tương tự như trong các nghiên cứu trước đây.^{11,12} Như vậy, các phức được làm bền bởi các tương tác Ti...O và liên kết hydro O/N/C-H...O.

3.2. Năng lượng của quá trình hấp phụ

Để đánh giá quá trình hấp phụ các phân tử dẫn xuất benzen lên trên bề mặt r-TiO₂ (110) chúng tôi tiến hành tính các giá trị năng lượng và liệt kê ở bảng 2. Kết quả bảng 2 cho thấy, năng lượng hấp phụ của các phức đều âm khá lớn, trong khoảng từ -12,9 đến -31,1 kcal.mol⁻¹. Năng lượng hấp phụ của các phức tăng theo thứ tự các dẫn xuất thế: -SO₃H < -COOH < -NH₂ < -CHO < -OH, do đó khả năng hấp phụ các phân tử này trên bề mặt r-TiO₂ (110) giảm theo trình tự -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH. Điều này cho thấy các phân tử hữu cơ có nhóm chức acid (-SO₃H, -COOH) có khả năng hấp phụ mạnh hơn so với các nhóm chức khác trên bề mặt r-TiO₂ (110). Kết quả đạt được này tương đồng với các nghiên cứu về sự hấp phụ các phân tử hữu cơ trên bề mặt r-TiO₂.^{11,12}

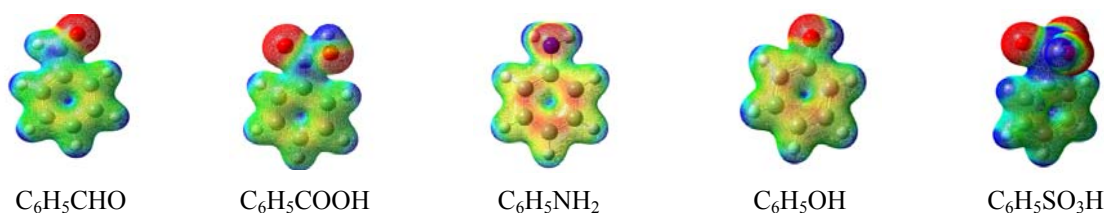
Mặt khác, năng lượng tương tác của các phức bền thu được có giá trị âm lớn, trong khoảng từ -16,4 đến -146,7 kcal.mol⁻¹. Do đó,

các tương tác Ti...O/N và C/N/O-H...O được đánh giá khá bền trong quá trình tạo phức. Như được chỉ ra trong bảng 2, năng lượng tương tác ở các phức tăng theo thứ tự các dẫn xuất thế: -SO₃H << -COOH < -NH₂ < -CHO < -OH, nên độ bền các phức thu được giảm theo trình tự dẫn xuất thế -SO₃H > -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH. Đáng chú ý, năng lượng tương tác ở phức **r-P1SO₃H** có giá trị âm hơn nhiều so với các phức còn lại. Kết quả này được giải thích do có sự dịch chuyển nguyên tử H ở liên kết OH trong nhóm -SO₃H sang bề mặt, hình thành liên kết hydro O-H...O_{br} bền hơn so với các phức khác.

Bảng 2. Năng lượng hấp phụ, tương tác và biến dạng (đơn vị kcal.mol⁻¹) của quá trình hấp phụ các dẫn xuất benzen trên bề mặt r-TiO₂ (110)

| Phức | E _{ads} | E _{int} | E _{D-surf} | E _{D-mol} |
|----------------------------|------------------|------------------|---------------------|--------------------|
| r-P1CHO | -18,0 | -22,8 | 3,8 | 1,0 |
| r-P2CHO | -17,2 | -21,8 | 3,7 | 0,9 |
| r-P1COOH | -24,2 | -35,0 | 6,4 | 4,4 |
| r-P2COOH | -18,0 | -25,5 | 5,2 | 2,3 |
| r-P1NH₂ | -19,0 | -23,0 | 2,9 | 1,0 |
| r-P2NH₂ | -15,2 | -19,7 | 3,3 | 1,2 |
| r-P1OH | -15,3 | -20,0 | 3,9 | 0,8 |
| r-P2OH | -14,0 | -18,9 | 4,0 | 0,9 |
| r-P1SO₃H | -31,1 | -146,7 | 25,2 | 90,3 |
| r-P2SO₃H | -20,5 | -33,2 | 5,8 | 6,9 |
| r-P3SO₃H | -18,6 | -28,8 | 6,7 | 3,5 |
| r-P4SO₃H | -12,9 | -16,4 | 3,4 | 0,0 |

Năng lượng biến dạng là một tham số quan trọng để đánh giá sự thay đổi cấu trúc phân tử hay bề mặt trong quá trình hấp phụ. Kết quả cho thấy, các giá trị năng lượng biến dạng đều tương đối nhỏ (ngoại trừ phức **r-P1SO₃H**), và năng lượng biến dạng của phân tử nhỏ hơn so với bề mặt. Do đó, trong quá trình tạo phức, cấu trúc phân tử ít biến đổi hơn so với bề mặt. Sự thay đổi cấu trúc phân tử mạnh nhất ở phức **r-P1SO₃H** được hiểu do sự tương tác mạnh và xu hướng dịch chuyển nguyên tử H từ nhóm -SO₃H sang bề mặt r-TiO₂ (110) trong quá trình hấp phụ. Hơn nữa, bảng 2 thấy rằng, chiều hướng biến đổi



Hình 3. Giản đồ MEP của các dẫn xuất benzen (isovalue = 0,02 au, điện tích được lấy trong vùng từ $2 \cdot 10^{-3}$ đến 0,15 e)

cấu trúc phân tử trong quá trình hấp phụ lên bề mặt r-TiO₂ (110) giảm theo thứ tự các dẫn xuất -SO₃H >> -COOH > -NH₂ > -CHO > -OH, tương tự như chiều hướng biến đổi năng lượng tương tác ở các phức. Do vậy, khả năng biến đổi cấu trúc và hình thành các phức bền trong quá trình hấp phụ ở dẫn xuất -SO₃H là mạnh nhất, đến dẫn xuất -COOH, -NH₂, -CHO và kém bền nhất là ở dẫn xuất -OH.

3.3. Sự hình thành và vai trò các tương tác trong quá trình hấp phụ

3.3.1. Giản đồ MEP của các phân tử

Để đánh giá khả năng tương tác tại các vị trí trong phân tử, chúng tôi tiến hành tính toán và phân tích giản đồ thế năng tĩnh điện (MEP) cho các phân tử dẫn xuất benzen, minh họa ở hình 3. Các màu sắc hiển thị trên giản đồ MEP đối với các phân tử hữu cơ ứng với các vùng mật độ điện tích biến đổi từ âm sang dương theo thứ tự: màu đỏ (âm nhất) < cam < vàng < xanh lá cây < xanh dương (dương nhất).

Như được hiển thị ở hình 3, điện tích dương tập trung đáng kể ở các nguyên tử H trong

các nhóm OH, CH, NH trong đó ở các nhóm OH cao nhất, đến NH và CH. Ngoài ra, mật độ điện tích dương còn xuất hiện ở các nguyên tử C (trong liên kết C-H vòng benzen và trong các nhóm thế -CHO, -COOH), ở nguyên tử S (trong nhóm -SO₃H). Mật độ điện tích âm tập trung chủ yếu tại các nguyên tử O, N trong các nhóm chức, trong đó, mật độ điện âm tại O cao hơn tại N. Do đó, khi tương tác với bề mặt vật liệu r-TiO₂ (110) chứa các vị trí Ti_{5c} và O_{br} trên bề mặt, các vị trí có mật độ điện tích âm hoặc dương lớn sẽ được ưu tiên hơn để hình thành các tương tác tĩnh điện Ti...O/N hay O/C/N-H...O. Theo đó, khả năng hình thành các tương tác bền ở dẫn xuất -SO₃H cao hơn -COOH và đến các dẫn xuất thế -NH₂, -CHO, -OH.

3.3.2. Năng lượng tách proton và ái lực proton tại các vị trí trong phân tử

Để làm rõ khả năng hình thành các tương tác trong các cấu hình phức thu được, các đại lượng nhiệt động đặc trưng như ái lực proton (PA) và năng lượng tách proton (DPE) được tính toán và liệt kê trong bảng 3.

Bảng 3. Ái lực proton (PA) tại các nguyên tử O và N và năng lượng tách proton (DPE) của các liên kết O-H và N-H trong các nhóm thế và các liên kết C-H ở vòng benzen của các dẫn xuất (đơn vị kcal mol⁻¹)

| Phân tử | PA | | DPE | | | |
|---|--------|---------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| | | | | | | |
| C ₆ H ₅ CHO | 203,2* | 199,3** | 404,3 ^{a)} | 397,4 ^{b)} | 401,8 ^{c)} | 400,2 ^{d)} |
| C ₆ H ₅ COOH | 195,7* | 196,2** | 356,4 ^{a)} | 407,2 ^{b)} | 405,2 ^{c)} | 402,9 ^{d)} |
| C ₆ H ₅ NH ₂ | 210,4* | 210,9** | 383,7 ^{a)} | 409,5 ^{b)} | 415,3 ^{c)} | 416,7 ^{d)} |
| C ₆ H ₅ OH | 178,8* | 195,5** | 362,5 ^{a)} | 409,5 ^{b)} | 412,1 ^{c)} | 413,0 ^{d)} |
| C ₆ H ₅ SO ₃ H | 192,2* | | 341,1 ^{a)} | 391,1 ^{b)} | 394,9 ^{c)} | 391,0 ^{d)} |

*cho các nguyên tử O/N ở các nhóm chức; ** giá trị thực nghiệm

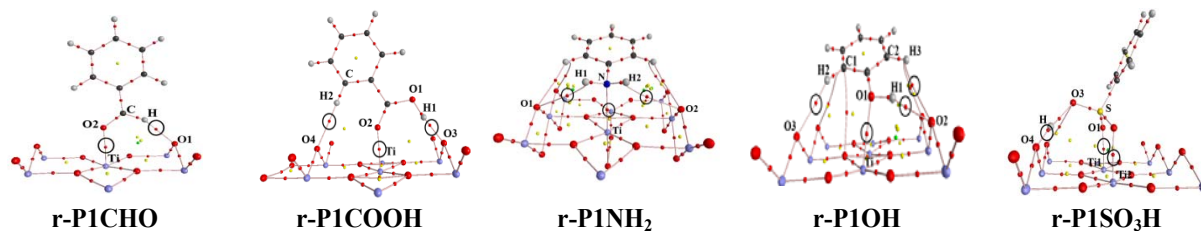
^{a)} cho liên kết C/O/N-H ở các nhóm chức, ^{b),c),d)} cho các liên kết C-H ở vòng benzen lần lượt ở các vị trí ortho-, meta- và para-

Bảng 3 cho thấy, các giá trị PA thu được tại mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p) gần với các giá trị thực nghiệm (sai số khoảng 0,2 - 8,5%). Do đó, mức lý thuyết được chọn cho kết quả khá tin cậy. Kết quả tính PA tại các nguyên tử O/N trong các nhóm chức biến đổi theo thứ tự: $-NH_2 > -CHO > -COOH > -SO_3H$ cho thấy khả năng tạo tương tác tĩnh điện ở $Ti_{5c} \cdots N$ mạnh hơn $Ti_{5c} \cdots O$. Trong đó, khả năng tạo tương tác $Ti_{5c} \cdots O$ ở các dẫn xuất $-CHO > -COOH > -SO_3H > -OH$. Mặt khác, năng lượng tách proton (DPE) tại các liên kết O/N/C-H trong các nhóm chức biến đổi theo thứ tự $-SO_3H > -COOH > -OH > -NH_2 > -CHO$. Điều này dẫn đến khả năng hình thành các liên kết hydro $O-H \cdots O_{br}$ bền hơn ở $N-H \cdots O_{br}$ và bền

hơn ở $C-H \cdots O_{br}$. Trong từng dẫn xuất, các giá trị DPE ở các liên kết O/C/N-H ở các nhóm chức đều nhỏ hơn so với DPE ở các liên kết C-H ở vòng benzen. Do đó, khả năng tạo liên kết hydro kiểu O/N/C-H... O_{br} ở vòng benzen kém bền hơn so với ở các nhóm chức.

3.3.3. Phân tích AIM cho các cấu trúc bền nhất lớp đầu tiên

Để hiểu rõ hơn bản chất, độ bền của các tương tác trong quá trình hấp phụ các dẫn xuất thế lên bề mặt $r-TiO_2$ (110), chúng tôi tiến hành phân tích AIM cho các cấu trúc bền nhất của các hệ phức với các dẫn xuất thế. Các thông số đặc trưng được đưa ra trong Bảng 4.



Hình 4. Hình học topo của các phức khảo sát

Bảng 4. Mật độ electron ($\rho(r)$), Laplacian ($\nabla^2\rho(r)$) và mật độ năng lượng electron ($H(r)$) (đơn vị au) tại các BCP trong các phức khảo sát

| Phức | Tương tác | $\rho(r)$ (au) | $\nabla^2\rho(r)$ (au) | $H(r)$ (au) |
|----------------------------|-------------|----------------|------------------------|-------------|
| r-P₁CHO | Ti...O2 | 0,0483 | 0,2318 | 0,0064 |
| | C-H...O1 | 0,0227 | 0,0675 | -0,0004 |
| r-P₁COOH | Ti...O2 | 0,0615 | 0,3188 | 0,0068 |
| | O1-H1...O3 | 0,0607 | 0,1604 | -0,0064 |
| | C2-H2...O4* | 0,0081 | 0,0269 | 0,0006 |
| r-P1NH₂ | Ti...N | 0,0439 | 0,0193 | 0,0010 |
| | N-H2...O2 | 0,0045 | 0,1668 | 0,0046 |
| | N- H1...O1 | 0,0044 | 0,0197 | 0,0011 |
| r-P1OH | Ti...O1 | 0,0382 | 0,1668 | 0,0046 |
| | O1-H1...O2 | 0,0281 | 0,0802 | -0,0005 |
| | C1-H2...O3* | 0,0091 | 0,0308 | 0,0007 |
| | C2-H3...O2* | 0,0058 | 0,0221 | 0,0011 |
| r-P1SO₃H | Ti1...O1 | 0,0529 | 0,2610 | 0,0060 |
| | Ti2...O2 | 0,0590 | 0,2869 | 0,0060 |
| | O3-H...O4 | 0,3085 | -1,7389 | -0,4995 |

* BCP của nhóm C-H ở vòng benzen với nguyên tử O của bề mặt

Phân tích hình học topo (hình 4) cho thấy, có sự xuất hiện các điểm tới hạn liên kết (BCP, điểm màu đỏ) giữa các tiếp xúc $Ti \cdots O$ và $O/C/NH \cdots O$ trong các phức khảo sát. Điều này minh chứng thêm cho sự hình thành các tương tác giữa các nhóm chức trong các phân tử hữu cơ với bề mặt $r-TiO_2$ (110) như nhận định ở các phần trên. Thêm vào đó, kết quả bảng 4 thấy rằng mật độ electron tại các BCP ở các sự tiếp xúc trên khá cao, trong khoảng 0,0044-0,0615 au, và Laplacian ($\nabla^2(\rho(r))$) trong khoảng 0,0193-0,3188 au (ngoại trừ ở liên kết $O-H \cdots O_{surf}$ ở phức **r- $PISO_3H$**). Tất cả các giá trị này đều nằm trong khoảng giá trị cho sự hình thành các tương tác không cộng hóa trị. Do đó, các tương tác $Ti \cdots O$ và $O/C/N-H \cdots O$ hình thành trong các phức khảo sát được đánh giá là các tương tác bền, không cộng hóa trị. Các liên kết hydro $C/O-H \cdots O$ ở các phức của các dẫn xuất thế $-CHO$, $-COOH$, $-OH$, $-SO_3H$ có giá trị $H(r)$ tại BCP âm khá nhỏ, cho thấy độ bền các liên kết này còn có sự đóng góp bởi một phần nhỏ yếu tố cộng hóa trị. Với phức **r- $PISO_3H$** , giá trị mật độ electron tại BCP ở liên kết hydro $O-H \cdots O_{surf}$ khá lớn, khoảng 0,3085 au và giá trị Laplacian của mật độ electron, mật độ năng lượng electron tại BCP này có giá trị âm lớn (-1,7389 au và -0,4995 au tương ứng), do đó đây là tương tác có sự đóng góp của yếu tố cộng hóa trị mạnh. Kết quả này minh chứng xu hướng dịch chuyển nguyên tử H linh động trong nhóm $-SO_3H$ đến bề mặt $r-TiO_2$ (110) để hình thành liên kết hydro $O-H \cdots O$ bền.

Bên cạnh đó, khi xét chiều hướng biến đổi mật độ electron tại các BCP thấy rằng, ở các tương tác $Ti \cdots O/N$, giá trị mật độ electron biến đổi theo thứ tự các dẫn xuất thế: $-COOH \approx -SO_3H > -CHO > -NH_2 > -OH$. Do đó, độ bền các tương tác $Ti \cdots O/N$ trong các phức theo phân tích AIM biến đổi theo cùng chiều hướng này. Đồng thời, tại các BCP của $O/C/N-H \cdots O$ giá trị mật độ electron biến đổi theo thứ tự $-SO_3H \gg -COOH > -OH > -CHO > -NH_2$. Kết quả này cho thấy, độ bền các liên kết hydro $O/C/N-H \cdots O$ trong các phức biến đổi theo thứ tự $-SO_3H \gg -COOH > -CHO > -NH_2 > -OH$. Do vậy, phức thu được ở

dẫn xuất $-SO_3H$ bền nhất đến phức của dẫn xuất $-COOH$, đến phức của các dẫn xuất $-CHO$, $-NH_2$ và kém bền nhất là phức của dẫn xuất $-OH$ do sự đóng góp đáng kể từ các liên kết hydro kiểu $O-H \cdots O$ và tương tác $Ti \cdots O/N$.

4. KẾT LUẬN

Nghiên cứu sự hấp phụ các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen trên bề mặt rutile- TiO_2 (110) chúng tôi thu được 12 cấu trúc bền. Năng lượng hấp phụ tính được trong khoảng -12,9 đến -31,1 kcal.mol⁻¹. Các quá trình này được đánh giá như là quá trình hấp phụ hóa học. Ngoài ra, năng lượng tương tác của các phức tính được âm khá lớn, trong khoảng -16,4 đến -146,7 kcal.mol⁻¹. Độ bền của các phức được đóng góp đáng kể bởi các tương tác tĩnh điện $Ti \cdots O/N$ và các liên kết hydro kiểu $O/C/N-H \cdots O$. Các phân tích DPE, PA, MEP và AIM cung cấp một sự hiểu biết rõ ràng hơn về bản chất và vai trò của các tương tác $Ti \cdots O/N$ và các liên kết hydro kiểu $O/C/N-H \cdots O$ trong việc làm bền phức. Các kết quả tính toán cho thấy, khả năng hấp phụ các phân tử trên bề mặt $r-TiO_2$ (110) giảm theo thứ tự các dẫn xuất thế: $-SO_3H > -COOH > -NH_2 > -CHO > -OH$.

Lời cảm ơn. Công trình được thực hiện dưới sự tài trợ kinh phí từ dự án TEAM (do VLIR tài trợ), mã số ZEIN2016PR431, triển khai tại Trường Đại học Quy Nhơn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. U. Diebold. Structure and Properties of TiO_2 Surfaces: A Brief Review. *Appl. Phys. A: Mater. Sci. & Proc.*, **2003**, 76, 681-687.
2. A. Fujishima, X. Zhang. and D. A. Tryk. TiO_2 Photocatalysis and Related Surface Phenomena, *Surf. Sci. Rep.*, **2008**, 63, 515-582.
3. M. A. Henderson. A Surface Science Perspective on TiO_2 Photocatalysis. *Surf. Sci. Rep.*, **2011**, 66, 185-297.
4. M. Shen and M. A. Henderson. Identification of the Active Species in Photochemical Hole Scavenging Reactions of Methanol on TiO_2 , *J. Phys. Chem. Lett.*, **2011**, 2, 2707-2710.

5. L. Pang, R. Lindsay, G. Thornton. Chemical reaction on rutile TiO₂ (110), *Chem. Soc. Rev.*, **2008**, *37*, 2328-2353.
6. Z. Xiang and R. B. David. DFT Studies of Adsorption of benzoic acid on the Rutile (110) Surface: Modes and Patterns, *J. Phys. Chem. C*, **2014**, *9*, 1- 25.
7. B. Maria, X. Mingchun, N. Heshmat. W. Peter, N. Alexei, F. Karin, W. Yuemin and W. Christof. Interaction of carboxylic acids with rutile TiO₂ (110): IR-investigations of terephthalic and axit benzoic adsorbed on a single crystal substrate, *Surf. Sci.*, **2016**, *643*, 117–123.
8. N. N. Tri, H. Q. Dai and N. T. Trung. Insights into the adsorption of organic molecules on rutile TiO₂ (110) surface: A theoretical study, *Viet. J. Chem.*, **2018**, *56*, 751-756.
9. A. R. Nicolaescu, O. Wiest, P. V. Kamat. Mechanistic pathways of the hydroxyl radical reactions of quinoline. 1. Identification, distribution, and yields of hydroxylated products, *J. Phys. Chem. A*, **2005**, *109*, 2822-2828.
10. W. A. Arnold, P. Winget and C. J. Cramer. Reductive dechlorination of 1,1,2,2- tetrachloro ethane. *Environ. Sci. Technol.*, **2002**, *36*, 4706–4706.
11. M. J. Frisch, G. W. Trucks and et al. *Gaussian 09 (Revision B.01)*, Wallingford, CT: Gaussian, 2010.
12. K. Ponmalai and V. Nirmala. Study of Proper and Improper Hydrogen Bonding Using Bader’s Atom in Molecules (AIM) Theory and NBO Analysis, *J. Mol. Struct.*, **2004**, *694*, 33–38.
13. J. Hafner. Ab-Initio simulations of materials using VASP. Density-Functional Theory and beyond, *J. Comput. Chem.*, **2008**, *29*, 2044-2078.
14. J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *77*, 3865-3868.
15. R. F. W. Bader. *Atoms in molecules: A quantum theory*, Oxford: Oxford University Press, 1990.
16. S. J. Grabowski, *Hydrogen Bonding-New Insights*, Springer, Dordrecht, The Netherlands, 2006.

The effect of microbial organic fertilizer on some biochemical indicators, on the productivity and quality of Korean zucchini (*Cucurbita pepo* L.) planted in soil of Kon Tum city

Vo Minh Thu^{1,*}, Nguyen Thi Y Thanh¹, Nguyen Tho Duc²

¹*Biology and Agricultural Engineering Department, Quy Nhon University*

²*Department of Education and Training, Kon Tum province*

Received: 08/06/2019; Accepted: 10/09/2019

ABSTRACT

The experiment was arranged in a completely random block design, consisting of 5 formulas, with level 0; 0.5; 1.0; 1.5; 2 tons/ha of microbial organic fertilizer. Experimental results showed that supplementing micro-organic fertilizer for Korean zucchini grown in soil of Kon Tum at 0.5 tons - 2.0 tons/ha increased the rate of fructification, number of fruits per tree, increased size and fruit weight. Fruit weight and fruit size increased the most at 1.5 tons/ha. The actual yield of fruit achieved in the formulas of adding more organic fertilizers increased from 1.49 tons to 4.62 tons/ha in comparison with that of the control, increasing the highest at 1.5 tons/ha (reaching 25.5 tons/ha). Applying microbial organic fertilizer also positively affects chlorophyll content in leaves, total sugar content and content of vitamin C in fruit. The highest increase is at the level of 1.5 tons/ha of micro-organic fertilizer. The content of calcium and fiber in fruits has little difference between the formulas of adding microbial organic fertilizer compared to the control.

Keywords: *Korean zucchini, yield, quality, biochemical indicators, microbial organic fertilizer.*

*Corresponding author.

Email: vominhthu@qnu.edu.vn

Ảnh hưởng của phân hữu cơ vi sinh đến một số chỉ tiêu sinh hóa, năng suất và phẩm chất của cây bí ngòi Hàn Quốc (Korean zucchini) trồng tại thành phố Kon Tum

Võ Minh Thứ^{1,*}, Nguyễn Thị Y Thanh¹, Nguyễn Thọ Đức²

¹Khoa Sinh - KTNN, Trường Đại học Quy Nhơn

²Sở Giáo dục Đào tạo tỉnh Kon Tum

Ngày nhận bài: 08/06/2019; Ngày nhận đăng: 10/09/2019

TÓM TẮT

Thí nghiệm được bố trí theo khối hoàn toàn ngẫu nhiên, gồm 5 công thức, với mức 0; 0,5; 1,0; 1,5; 2 tấn/ha) phân hữu cơ vi sinh (HCVS). Kết quả thí nghiệm cho thấy bổ sung phân HCVS cho cây bí ngòi trồng tại Kon Tum với mức 0,5 tấn - 2,0 tấn/ha làm tăng tỷ lệ đậu quả, số quả/cây, tăng kích thước và trọng lượng quả. Trọng lượng quả và kích thước quả tăng nhiều nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha. Năng suất thực thu ước đạt ở các công thức bón thêm phân HCVS tăng từ 1,49 tấn - 4,62 tấn/ha so với ĐC, tăng cao nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha (đạt 25,5 tấn/ha/). Bón phân HCVS còn ảnh hưởng tích cực đến hàm lượng diệp lục trong lá, hàm lượng đường tổng số và hàm lượng vitamin C trong quả bí, tăng nhiều nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha phân HCVS. Hàm lượng calci và chất xơ trong quả ít có sự sai khác giữa các công thức bón thêm phân HCVS so với đối chứng.

Từ khóa: Bí ngòi xanh Hàn Quốc, năng suất, phẩm chất, chỉ tiêu sinh hóa, phân hữu cơ vi sinh.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Bí ngòi hay bí ngòi (*Cucurbita pepo* L.) là cây rau quả quan trọng, đang được trồng phổ biến trên toàn thế giới và một số tỉnh, thành ở Việt Nam. Bí ngòi có giá trị dinh dưỡng cao và có lợi cho sức khỏe, vì vậy thường dùng trong bữa ăn hằng ngày của con người. Quả bí ngòi được có chứa nhiều vitamin C, B, K, carotenoid, các nguyên tố khoáng như magiê, mangan, kali, đồng, kẽm, calci, sắt... Trong 100g thịt quả bí có 0,4g protein; 2,4g các chất đường bột; 19 mg calci; 12 mg phospho; 0,3 mg sắt; 0,01 mg caroten; 16 mg vitamin C; 0,01 mg vitamin B₁; 0,02 mg vitamin B₂, 0,3 mg vitamin PP và nhiều acid folic.¹ Chính vì vậy, ăn bí ngòi làm giảm được cholesterol trong máu, giảm béo phì, điều hòa huyết áp và ngăn ngừa ung thư.⁷

Trong những năm gần đây, giống bí ngòi Hàn Quốc (Korean zucchini) đã được nhập nội vào Việt Nam. Tuy nhiên, năng suất chưa thể hiện hết tiềm năng của giống. Vì vậy, để tăng năng suất bí ngòi, ngoài việc chọn giống tốt, cho năng suất cao còn phải sử dụng phân bón một cách hợp lý. Trong đó, phân bón hữu cơ vi sinh là loại phân bón đóng vai trò quan trọng trong sản xuất nông nghiệp. Bởi vì, ngoài việc cung cấp dinh dưỡng cho cây trồng, phân hữu cơ vi sinh còn có tác động cải tạo đất, tạo sản phẩm nông nghiệp sạch.^{3,4} Hiện nay, ở Kon Tum chưa có công trình nào nghiên cứu cây bí ngòi. Do vậy, việc nghiên cứu bón thêm phân hữu cơ vi sinh nhằm làm tăng năng suất và phẩm chất của bí ngòi, đồng thời góp phần khuyến cáo người trồng bí cung cấp sản phẩm sạch cho người tiêu

*Tác giả liên hệ chính.

Email: vominhthu@qnu.edu.vn

dùng trên địa bàn tỉnh Kon Tum và các tỉnh lân cận là cần thiết.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu nghiên cứu

Giống bí ngòi xanh Hàn Quốc do Công ty trách nhiệm hữu hạn Trang Nông cung cấp, cây không dễ nhánh, mọc thẳng cao 50 - 55 cm, sinh trưởng mạnh và kháng sâu, bệnh tốt, trồng được trên đất cát khô, đất phù sa, sinh trưởng ngắn ngày, chín sớm, quả dài khoảng 30 - 50 cm, đường kính khoảng 5 - 8 cm, có thể đậu một chùm 3 quả. Hình dạng quả thẳng đẹp, vỏ quả màu xanh bóng có đốm trắng nhạt, ăn ngon mềm.

Phân hữu cơ vi sinh Sông Gianh (gồm: 15% chất hữu cơ; 2,5% axit humic; 3% N; 2,5% P₂O₅; 2,5% K₂O; các chất trung lượng Ca, Mg, S: 0,3 - 0,5%; vi khuẩn *Bacillus*: 10⁶ CFU/g; *Azotobacter*: 10⁶ CFU/g; nấm *Aspergillus sp*: 10⁶ CFU/g).

2.2. Phương pháp nghiên cứu

Thí nghiệm được tiến hành ở vụ đông xuân (ĐX) 2017 - 2018 trên nền đất phù sa ven sông thành phố Kon Tum. Đất trồng trước thí nghiệm được phân tích có trị số pH bằng 3,41; chất hữu cơ tổng số (2,24% chất khô); lân tổng số (6,94 mg P₂O₅/100g đất khô); kali tổng số (6,76 mg K₂O/100g đất khô) và nitơ tổng số là 3,52 mg/100g đất khô. Gồm 4 nghiệm thức với các mức phân hữu cơ vi sinh khác nhau. Nền bón: 120 kg N + 90 kg P₂O₅ + 100 kg K₂O + 600 kg CaO (tính cho 1 ha). Mỗi ô thí nghiệm 15 m², lặp lại 3 lần, tổng diện tích thí nghiệm: 225 m².

ĐC: Nền + 0 tấn phân hữu cơ vi sinh/ha.

CT1: Nền + 0,5 tấn phân hữu cơ vi sinh/ha.

CT2: Nền + 1,0 tấn phân hữu cơ vi sinh/ha.

CT3: Nền + 1,5 tấn phân hữu cơ vi sinh/ha.

CT4: Nền + 2,0 tấn phân hữu cơ vi sinh/ha.

Thí nghiệm được bố trí theo khối ngẫu nhiên hoàn toàn (RCBD). Lên luống rộng 1,0 m, khoảng cách trồng 1,0 m x 1,5 m. Khoảng cách giữa 2 luống 1,0 m. Mật độ trồng 6.500 - 7.000

cây/ha. Phân bón được chia thành 4 đợt: Bón lót toàn bộ phân hữu cơ vi sinh + lân + vôi + 20% kali + 10% đạm, bón thúc lần 1: sau trồng 20 ngày, bón 20% kali + 20% đạm, bón thúc lần 2: sau trồng 40 ngày, bón 30% kali + 30% đạm, bón thúc lần 3: sau trồng 55 ngày, bón 30% kali + 40% đạm.

Các chỉ tiêu xác định:

- Một số chỉ tiêu dinh dưỡng trong đất trồng

Độ chua trao đổi theo phương pháp Daicuhara. Hàm lượng mùn theo phương pháp Walkley - Black. Hàm lượng nitơ dễ tiêu theo phương pháp Chiurin - Cononova. Phân tích kali dễ tiêu theo phương pháp Kiecxano.

- Một số chỉ tiêu sinh hóa trong lá:

Hàm lượng diệp lục: Phân tích qua 3 giai đoạn cây con, ra hoa và hình thành quả theo phương pháp so màu quang phổ. Hàm lượng chất khô xác định bằng phương pháp sấy khô ở 105°C và cân lại đến khi trọng lượng không đổi. Hàm lượng nitơ tổng số xác định theo phương pháp *Micro-Kjeldahl*.²

- Trọng lượng quả (kg): Mỗi nghiệm thức cân 15 quả và lấy trung bình.

- Năng suất thực thu (NSTT) (tấn/ha): Cân toàn bộ khối lượng quả trên mỗi nghiệm thức (kg) và quy về tấn/hecta.

- Một số chỉ tiêu phẩm chất trong quả:

Hàm lượng chất xơ: Dùng kiềm và acid mạnh thủy phân, rửa sạch bằng nước cất, sấy khô ở 105°C và cân lại đến trọng lượng không đổi. Hàm lượng protein xác định theo phương pháp Biure, Hàm lượng đường tổng số dùng acid HCl thủy phân đưa về dạng đường khử và xác định theo Bectrand, vitamin C dùng iốt chuẩn độ,² hàm lượng Ca xác định bằng máy quang phổ hấp thụ nguyên tử (AAS).

Số liệu thu được tính toán và xử lý bằng các phần mềm Excel 2003, phần mềm Statgraphics, so sánh các giá trị trung bình bằng phương pháp kiểm định LSD ở mức ý nghĩa 5%.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Một số chỉ tiêu sinh hóa trong lá bí ngòi

Kết quả trình bày ở bảng 1 cho thấy hàm lượng diệp lục a, b và a+b ở các mức phân hữu cơ vi sinh (HCVS) 0,5; 1,0; 1,5; 2,0 tấn/ha (CT1, CT2, CT3, CT4) ở cả 3 giai đoạn cây con, ra hoa và thu hoạch đều cao hơn so với ĐC. Trong đó hàm lượng diệp lục a+b ở CT3 ở giai đoạn cây con (1,83 mg/g lá) và giai đoạn thu hoạch (1,89 mg/g lá) đều cao hơn so với CT ĐC và có sai khác có ý nghĩa so với CT ĐC. Như vậy, việc bổ

sung phân HCVS ở mức 1,5 tấn/ha cho cây bí ngòi đã có tác động tích cực đến hàm lượng diệp lục của lá bí ngòi.

Ngoài ra, số liệu phân tích còn cho thấy hàm lượng diệp lục a luôn luôn cao hơn hàm lượng diệp lục b ở tất cả các công thức và ở các giai đoạn. Ở giai đoạn thu hoạch hàm lượng diệp lục thấp nhất trong 3 giai đoạn. Điều này phù hợp với quá trình sinh trưởng, phát triển chung ở thực vật, ở giai đoạn tăng trưởng của quả chủ yếu các chất tích lũy ở cơ quan thân, lá vận chuyển về quả, nên hàm lượng diệp lục giảm xuống.^{6,10}

Bảng 1. Hàm lượng diệp lục trong lá cây bí ngòi qua các giai đoạn sinh trưởng, phát triển.

| CTTN | Giai đoạn cây con | | | Giai đoạn ra hoa | | | Giai đoạn thu hoạch | | |
|---------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|-------------------|-------------------|---------------------|--------------------|--------------------|
| | Dl a | Dl b | Dl (a+b) | Dl a | Dl b | Dl (a+b) | Dl a | Dl b | Dl (a+b) |
| ĐC | 1,12 ^c | 0,27 ^c | 1,39 ^c | 1,41 ^a | 0,45 ^a | 1,86 ^a | 1,21 ^b | 0,37 ^{ab} | 1,58 ^b |
| CT1 | 1,15 ^c | 0,29 ^c | 1,44 ^c | 1,45 ^a | 0,46 ^a | 1,91 ^a | 1,24 ^b | 0,38 ^a | 1,62 ^b |
| CT2 | 1,35 ^a | 0,42 ^b | 1,77 ^{ab} | 1,48 ^a | 0,48 ^a | 1,96 ^a | 1,43 ^{ab} | 0,39 ^b | 1,82 ^{ab} |
| CT3 | 1,32 ^{ab} | 0,51 ^a | 1,83 ^a | 1,49 ^a | 0,58 ^a | 2,07 ^a | 1,47 ^{ab} | 0,51 ^a | 1,98 ^a |
| CT4 | 1,25 ^b | 0,41 ^b | 1,66 ^b | 1,42 ^a | 0,51 ^a | 1,93 ^a | 1,43 ^{ab} | 0,45 ^a | 1,88 ^{ab} |
| LSD _{0,05} | 0,09 | 0,03 | 0,12 | 0,21 | 0,24 | 0,45 | 0,27 | 0,18 | 0,35 |
| CV(%) | 3,59 | 3,25 | 7,84 | 4,12 | 4,34 | 8,46 | 3,63 | 4,62 | 8,25 |

Ghi chú: các chữ cái biểu hiện sự sai khác có ý nghĩa thống kê ở mức ý nghĩa 5%, CV (coefficient variance) là hệ số biến thiên, LSD (Least Significant Difference) là hệ số sai khác nhỏ nhất có ý nghĩa, đơn vị: mg/g lá tươi.

Ngoài ra, số liệu phân tích còn cho thấy hàm lượng diệp lục a luôn luôn cao hơn hàm lượng diệp lục b ở tất cả các công thức và ở các giai đoạn. Ở giai đoạn thu hoạch hàm lượng diệp lục thấp nhất trong 3 giai đoạn. Điều này phù hợp với quá trình sinh trưởng, phát triển chung ở thực vật, ở giai đoạn tăng trưởng của quả chủ yếu các chất tích lũy ở cơ quan thân, lá vận chuyển về quả, nên hàm lượng diệp lục giảm xuống.^{6,10}

Bảng 2. Hàm lượng nitơ tổng số trong lá bí ngòi.

| CTTN | Hàm lượng nitơ tổng số (g/100 g chất khô) | | |
|---------------------|---|--------------------|---------------------|
| | Giai đoạn cây con | Giai đoạn ra hoa | Giai đoạn thu hoạch |
| ĐC | 2,91 ^c | 3,48 ^c | 1,18 ^{ab} |
| CT1 | 3,61 ^a | 3,98 ^{ab} | 1,20 ^{ab} |
| CT2 | 3,27 ^b | 3,26 ^{bc} | 1,15 ^b |
| CT3 | 3,63 ^a | 4,20 ^a | 1,24 ^a |
| CT4 | 3,05 ^c | 3,63 ^{bc} | 1,14 ^b |
| LSD _{0,05} | 0,35 | 0,41 | 0,07 |
| CV (%) | 1,25 | 2,50 | 1,80 |

Kết quả phân tích cho thấy ở giai đoạn cây con hàm lượng nitơ tổng số trong lá bí ngòi dao động từ 2,91 - 3,63 g/100 g chất khô và giai đoạn thu hoạch từ 1,14 - 1,24 g/100 g chất khô, thấp hơn ở giai đoạn ra hoa (3,26 - 4,20 g/100g chất khô). Ở giai đoạn cây con, bón phân HCVS ở mức 0,5; 1,0; 1,5 tấn/ha đều làm tăng hàm lượng nitơ tổng số trong lá bí so với công thức ĐC và sai khác có ý nghĩa thống kê, với p = 0,05. Ở giai đoạn ra hoa bón phân HCVS 1,5 tấn/ha cũng làm tăng hàm lượng nitơ tổng số trong lá so với ĐC và so với các công thức bón phân HCVS khác, còn ở giai đoạn thu hoạch không có sự sai khác về hàm lượng nitơ tổng số giữa các công thức thí nghiệm (CTTN). Như vậy, hàm lượng nitơ tổng số trong lá bí ngòi tăng lên ở giai đoạn ra hoa và giảm xuống ở giai đoạn thu hoạch có liên quan chặt chẽ đến hàm lượng diệp lục và phù hợp với giai đoạn sinh trưởng của cây trồng. Điều này cũng đã được đề cập trong một số công trình nghiên cứu của các tác giả trước đây.⁹

Bảng 3. Hàm lượng chất khô trong lá bí ngồi (%).

| CTTN | Hàm lượng chất khô (%) | | |
|---------------------|------------------------|-------------------|---------------------|
| | Giai đoạn cây con | Giai đoạn ra hoa | Giai đoạn thu hoạch |
| ĐC | 9,20 ^{ab} | 8,78 ^a | 12,56 ^b |
| CT1 | 10,26 ^a | 9,28 ^a | 13,30 ^a |
| CT2 | 9,48 ^{ab} | 8,98 ^a | 13,76 ^a |
| CT3 | 8,90 ^b | 8,75 ^a | 13,78 ^a |
| CT4 | 8,80 ^b | 8,66 ^a | 12,14 ^b |
| LSD _{0,05} | 1,03 | 1,26 | 0,70 |
| CV (%) | 5,90 | 5,91 | 4,74 |

Hàm lượng chất khô trong lá bí ngồi ở giai đoạn thu hoạch đạt trị số cao nhất (12,14 - 13,78%). Ở giai đoạn này, việc bổ sung phân HCVS ở các mức bón 0,5; 1,0; 1,5 tấn/ha (CT1, CT2, CT3) đã có tác động tích cực đến sự tích lũy chất khô trong lá bí so với công thức ĐC. Bón phân HCVS ở mức 1,5 tấn/ha (CT3) hàm lượng chất khô trong lá đạt cao nhất (13,78%), sai khác có ý nghĩa thống kê so với ĐC và mức bón 2,0 tấn/ha, với $p=0,05$. Ở giai đoạn cây con và giai đoạn ra hoa, hàm lượng chất khô trong lá gần như tương đương nhau và giữa các CTTN, không có sự sai khác có ý nghĩa thống kê.

3.2. Một số chỉ tiêu phát triển và năng suất

Bảng 4. Số hoa/cây, tỷ lệ đậu quả và kích thước quả.

| CTTN | Tổng số hoa/cây | Số hoa cái/cây | Tỷ lệ đậu quả (%) | Chiều dài quả (cm) | Đường kính quả (cm) | Độ dày thịt quả (cm) |
|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|---------------------|---------------------|----------------------|
| ĐC | 10,42 ^b | 5,20 ^c | 60,25 ^a | 38,43 ^c | 6,72 ^b | 1,28 ^c |
| CT1 | 12,34 ^{ab} | 5,54 ^{bc} | 62,74 ^a | 42,33 ^{bc} | 7,14 ^b | 1,37 ^{bc} |
| CT2 | 13,08 ^{ab} | 6,34 ^{ab} | 64,37 ^a | 44,83 ^b | 7,58 ^b | 1,42 ^b |
| CT3 | 13,56 ^a | 6,86 ^a | 65,26 ^a | 50,83 ^a | 9,86 ^a | 2,52 ^a |
| CT4 | 14,26 ^a | 6,58 ^{ab} | 66,42 ^a | 48,50 ^a | 8,78 ^a | 2,36 ^a |
| LSD _{0,05} | 1,72 | 0,87 | 6,35 | 4,26 | 1,12 | 0,28 |
| CV (%) | 6,16 | 7,69 | 9,38 | 6,52 | 6,46 | 6,67 |

Kết quả xác định cho thấy tổng số hoa/cây dao động ở các công thức từ 10,42 - 14,26 hoa/cây. Việc bổ sung phân HCVS ở tất cả các CT đều có tác động rõ rệt đến số hoa/cây, cao hơn so với đối chứng (10,42 hoa). Bón phân HCVS 1,5 và 2,0 tấn/ha (CT3, CT4) đã làm tăng tổng số hoa/cây, khác biệt có ý nghĩa so với ĐC. Ở các mức bón HCVS khác nhau, không có sự khác biệt có ý nghĩa thống kê về tổng số hoa/cây.

Tương tự như tổng số hoa/cây, bổ sung phân HCVS cũng làm tăng số hoa cái/cây so với ĐC, không bón thêm phân HCVS, đạt cao nhất ở CT3 (6,86 hoa). Tuy nhiên, ở các mức bón khác nhau (CT2, CT3, CT4) không có sự khác biệt về số hoa cái/cây có ý nghĩa thống kê.

Tỷ lệ đậu quả ở các CTTN đều tương đương nhau, dao động trong khoảng 60,25% -

66,42% và không có sự khác biệt về mặt thống kê. Tuy nhiên, bón thêm phân HCVS ở mức 1,5 và 2,0 tấn/ha đều có ảnh hưởng tốt đến chiều dài, đường kính quả và độ dày thịt quả. Trong đó, tăng cao nhất ở CT3, các trị số này tăng tương ứng so với ở CT ĐC lần lượt là 12,40 cm; 3,14 cm; 1,24 cm. Như vậy, bón thêm phân HCVS ở các mức từ 1,5 tấn/ha đã làm tăng chiều dài và đường kính quả đáng kể so với đối chứng.

Kết quả thu được ở bảng 5 cho thấy số quả trên cây đạt từ 3,08 - 3,48 quả, cao nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha phân HCVS, sai khác so với CT ĐC và mức bón 0,5 tấn/ha. Tương tự như vậy, trọng lượng quả trung bình ở các CT bổ sung HCVS cao hơn so với ĐC, cao nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha (1,40 kg), tiếp đến ở mức bón 2,0 tấn/ha (1,30 kg). Tuy nhiên, ở 2 mức bón này trọng lượng quả sai khác không có ý nghĩa thống kê.

Bảng 5. Một số chỉ tiêu năng suất và năng suất bí ngoài.

| CTTN | Số quả/cây (quả) | TLTB quả (kg) | NSLT | | NSTT | |
|---------------------|--------------------|--------------------|----------------------|--------|----------------------|--------|
| | | | kg/CTTN | tấn/ha | kg/CTTN | tấn/ha |
| ĐC | 3,08 ^b | 1,06 ^{bc} | 95,49 ^{cd} | 21,22 | 93,96 ^{bc} | 20,88 |
| CT1 | 3,16 ^b | 1,18 ^b | 109,06 ^c | 24,23 | 100,66 ^b | 22,37 |
| CT2 | 3,28 ^{ab} | 1,22 ^b | 117,04 ^{bc} | 26,00 | 102,69 ^{ab} | 22,82 |
| CT3 | 3,48 ^a | 1,40 ^a | 142,50 ^a | 31,66 | 114,75 ^a | 25,50 |
| CT4 | 3,30 ^{ab} | 1,30 ^{ab} | 125,48 ^b | 27,88 | 106,33 ^{ab} | 23,63 |
| LSD _{0,05} | 0,22 | 0,17 | 15,20 | | 13,15 | |
| CV (%) | 16,45 | 8,60 | 12,50 | | 20,35 | |

Năng suất lý thuyết (NSLT) ở các mức bón phân HCVS khác nhau dao động từ 109,06 - 142,50 kg/CTTN, tương ứng đạt 24,33 - 31,66 tấn/ha, cao hơn so với ĐC (95,49 kg/CTTN và 21,22 tấn/ha). Trong đó NSLT cao nhất ở CT3 đạt 31,66 tấn/ha, còn ở công thức CT4, bón 2,0 tấn/ha, NSLT giảm xuống còn 27,88 tấn/ha).

Năng suất thực thu ở các CTTN đạt từ 93,96 kg đến 114,75 kg/CTTN, tương đương với 21,22 tấn - 31,66 tấn/ha. Ở các công thức có

bón phân HCVS đều cao hơn so với đối chứng từ 6,70 kg - 10,79 kg/CTTN, tương ứng tăng từ 1,49 tấn - 4,62 tấn/ha. Trong đó, tăng cao nhất ở công thức bón 1,5 tấn/ha phân HCVS, tăng 12,21% so với ĐC. Từ những kết quả trên cho thấy bón phân HCVS đã làm tăng tỷ lệ đậu quả, tăng số quả/cây và kích thước quả, vì vậy làm tăng năng suất thực thu. Điều này cũng phù hợp với nghiên cứu của một số tác giả sử dụng phân HCVS bón cho cây trồng khác.^{4,6}

3.3. Một số chỉ tiêu phẩm chất

Bảng 6. Hàm lượng chất khô, đường tổng số, vitamin C, chất xơ và calci trong quả bí ngoài.

| Chỉ tiêu phẩm chất | Công thức thí nghiệm | | | | |
|---|----------------------|-------|-------|-------|-------|
| | ĐC | CT1 | CT2 | CT3 | CT4 |
| Chất khô (% chất tươi) | 3,98 | 4,24 | 4,26 | 4,16 | 4,20 |
| Hàm lượng đường tổng số (% chất tươi) | 1,46 | 1,56 | 1,59 | 1,74 | 1,52 |
| Hàm lượng vitamin C (mg/100g chất tươi) | 12,58 | 11,88 | 13,38 | 14,70 | 13,50 |
| Hàm lượng calci (mg/100g chất tươi) | 12,28 | 11,38 | 13,84 | 12,64 | 12,98 |
| Tỉ lệ chất xơ (% chất tươi) | 0,95 | 0,85 | 0,90 | 0,83 | 0,81 |

Hàm lượng chất khô trong quả bí ở các CTTN chiếm từ 3,98% - 4,26%, giữa các công thức bón phân HCVS sai khác không đáng kể. Hàm lượng đường tổng số ở các công thức bón phân HCVS cao hơn so với ĐC từ 0,1% - 0,28% trọng lượng chất tươi, cao nhất ở CT3 (1,74% chất tươi) và thấp nhất ở công thức ĐC (1,46% chất tươi). Hàm lượng vitamin C cao nhất ở CT3 (14,70 mg/100g chất tươi) cao hơn 2,12 mg so

với ĐC, thấp nhất ở CT1 (11,88 mg/100g chất tươi), thấp hơn so với ĐC 0,70 mg. Hàm lượng vitamin C ở CT2 và CT4 gần như tương đương nhau (13,38 mg và 13,50 mg/100g chất tươi). Như vậy, bón phân HCVS ở mức 1,0; 1,5; 2,0 tấn/ha đều có ảnh hưởng tốt đến hàm lượng vitamin C trong quả bí ngoài.

Hàm lượng calci trong quả bí ngoài ở các công thức thí nghiệm dao động từ 11,38 mg -

13,84 mg/100g chất tươi. Trong đó hàm lượng calci trong quả bí cao nhất ở CT2 (13,84 mg/100g chất tươi) và thấp nhất ở CT1 (11,38 mg/100g chất tươi), còn ở CT3 và CT4 có hàm lượng calci tương đương nhau (12,64 mg và 12,98 mg/100g chất tươi). Hàm lượng chất xơ trong quả bí ở các công thức bón phân HCVS sai khác so với ĐC không đáng kể, giảm từ 0,05% - 0,14% chất tươi.

4. KẾT LUẬN

Bón thêm phân HCVS cho cây bí ngòi trồng tại Kon Tum với mức 0,5 tấn - 2,0 tấn/ha làm tăng tỷ lệ đậu quả, số quả/cây, tăng kích thước và trọng lượng quả. Trọng lượng quả và kích thước quả tăng nhiều nhất ở mức bón 1,5 tấn/ha. Năng suất thực thu ước đạt ở các CT bón thêm phân HCVS tăng từ 1,49 tấn - 4,62 tấn/ha so với ĐC, tăng cao nhất ở công thức bón 1,5 tấn/ha (25,5 tấn). Bón phân HCVS còn ảnh hưởng tích cực đến hàm lượng diệp lục trong lá, hàm lượng đường tổng số và hàm lượng vitamin C trong quả bí, tăng nhiều nhất mức bón 1,5 tấn/ha phân HCVS. Hàm lượng calci và chất xơ trong quả ít có sự sai khác giữa các công thức bón thêm phân HCVS so với đối chứng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bộ Y tế - Viện Dinh dưỡng. *Bảng thành phần dinh dưỡng thực phẩm Việt Nam*, Nxb Y học, Hà Nội, 2000.
2. Phạm Thị Trân Châu. Nguyễn Thị Hiền và Phùng Gia Tường. *Thực hành Hóa sinh học*, Nxb Giáo dục, 131, 1998.
3. Tô Thị Thu Hà, Ngô Thị Hạnh, Lê Thị Tình, Trịnh Khắc Quang, Nguyễn Văn Tuất, Bùi Thị Huy Hợp, Cho Von Dae, Pák Chôn Keun. *Kỹ thuật trồng và chăm sóc xà lách, cải củ, bí ngòi của Hàn Quốc tại miền Bắc Việt Nam*, Nxb Hà Nội, 2012.
4. Vũ Thanh Hải, Nguyễn Văn Đĩnh. Nghiên cứu một số biện pháp kỹ thuật trồng bí xanh tại Yên Châu, Sơn La, *Tạp chí Khoa học và Phát triển*, **2008**, 6(6).
5. Phạm Tiến Hoàng. Phân hữu cơ trong hệ thống quản lý dinh dưỡng tổng hợp cho cây trồng, *Tạp chí khoa học đất*, 2003, 18.
6. Võ Minh Thứ. Ảnh hưởng của phân hữu cơ vi sinh đến một số chỉ tiêu năng suất và phẩm chất của bí xanh (*Benincasa cerifera Savi*), *Tạp chí Khoa học công nghệ nông nghiệp Việt Nam*, **2016**, 8(69), 50-54.
7. Hyounjeong Choi và cộng sự. "A water-soluble extract from Cucurbita moschata shows anti-obesity effects by controlling lipid metabolism in a high fat diet-induced obesity mouse model", *Biochemical and Biophysical Research Communications*, **2015**, 359(3), 419-425.
8. Allen V. Barker, David J. and Pilbeam. *Handbook of Plant Nutrition*, Hardback by CRC, 453, 2006.
9. Horst Marchner. *Mineral nutrition of higher plant*, Institute of plant University of Hohenheim Federal Republic of Germany, 89, 1996.
10. Lincol Taizger. *Plant physiology, 3 third edition*, CRC, 662 P., 2006.

CONTENTS

| | | |
|----|--|----|
| 1. | State estimation of Binh Dinh power system Nguyen Xuan Tham, Le Tuan Ho | 5 |
| 2. | Power system state estimation by using a generalized maximum likelihood method Le Tuan Ho | 17 |
| 3. | Asymptotic behaviour of reachable sets in the singularly perturbed control systems Nguyen Ngoc Quoc Thuong | 27 |
| 4. | A technique for training data selection based on clustering Le Thi Kim Nga, Dinh Thi My Canh | 42 |
| 5. | Some biological characteristics of broadhead sleeper (<i>Eleotris melanosoma</i>) distributed in Thi Nai lagoon, Binh Dinh province Do Thi Xuan Tru, Vo Van Chi | 49 |
| 6. | Initial research on the impact of <i>Callisiafragrans</i> in additional diet for New Zealand white rabbit cultivated in Quang Ngai city, Quang Ngai province Le Thi Luong Van, Tran Thanh Son | 57 |
| 7. | Evaluation of biomass potential in Binh Dinh province Dinh Quoc Viet, Huynh Van Nam, Truong Thanh Tam, Van Dinh Son Tho | 68 |
| 8. | Effects of substituents on intermolecular interaction and stability of complexes of CO ₂ and CH ₃ OCHX ₂ (X = H, F, Cl, Br, CH ₃) Pham Thi Hoa, Phan Dang Cam Tu, Nguyen Tien Trung | 76 |
| 9. | Theoretical study on adsorption of organic molecules containing benzene ring onto rutile-TiO ₂ (110) surface using density functional theory method Huynh Thi My Phuc, Nguyen Ngoc Tri, Nguyen Tien Trung | 85 |

10. The effect of microbial organic fertilizer on some biochemical indicators, on the productivity and quality of Korean zucchini (*Cucurbita pepo L.*) planted in soil of Kon Tum city

Vo Minh Thu, Nguyen Thi Y Thanh, Nguyen Tho Duc95