



TRƯỜNG ĐẠI HỌC THỦ ĐÔ HÀ NỘI
HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

TẠP CHÍ KHOA HỌC

SCIENCE JOURNAL OF HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

ISSN 2354-1504

SỐ 20 – KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ

THÁNG 12 – 2017

TẠP CHÍ KHOA HỌC TRƯỜNG ĐẠI HỌC THỦ ĐÔ HÀ NỘI

SCIENTIFIC JOURNAL OF HANOI METROPOLITAN UNIVERSITY

(Tập chí xuất bản định kì 1 tháng/số)

Tổng Biên tập

Đặng Văn Soa

Editor-in-Chief

Dang Van Soa

Phó Tổng biên tập

Vũ Công Hảo

Associate Editor-in-Chief

Vu Cong Hao

Hội đồng Biên tập

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

Editorial Board

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

Thư kí tòa soạn

Lê Thị Hiền

Secretary of the Journal

Le Thi Hien

Biên tập kĩ thuật

Phạm Thị Thanh

Technical Editor

Pham Thi Thanh

MỤC LỤC

Trang

1.	QUARTIC B SPLINES COLLOCATION METHOD FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE MRLW EQUATION	5
	<i>Phương pháp kết nối tron các đa thức bậc bốn giải phương trình MRLW</i>	
	Nguyen Van Dung, Nguyen Viet Chinh	
2.	APPLICATION OF THE COLLOCATION METHOD WITH B – SPLINE TO THE GRLW EQUATION.....	15
	<i>Phương pháp Collocation với cơ sở B - spline bậc 5 giải phương trình GRLW</i>	
	Nguyen Thi Thu Hoa, Nguyen Thi Thu Ha	
3.	PHƯƠNG PHÁP SỐ GIẢI MỘT SỐ BÀI TOÁN BIÊN TRONG MIỀN VÔ HẠN.....	26
	<i>The methods of settling a number of financial bonds</i>	
	Ngô Thúy Ngân	
4.	A NEW METHOD FOR SOLVING THE MGRLW EQUATION USING A BASE OF QUINTIC B – SPLINE	42
	<i>Phương pháp mới giải phương trình MGRLW sử dụng cơ sở B - spline bậc 5</i>	
	Nguyen Van Tuan, Nguyen Thi Tuyet	
5.	STUDY ON ELASTIC DEFORMATION OF SUBSTITUTION ALLOY AB WITH INTERSTITIAL ATOM C AND BCC STRUCTURE UNDER PRESSURE	55
	<i>Nghiên cứu biến dạng đàn hồi của hợp kim thay thế AB cấu trúc lập phương tâm khối có nguyên tử C xen kẽ dưới tác dụng của áp suất</i>	
	Nguyen Quang Hoc, Nguyen Thi Hoa, Nguyen Duc Hien	
6.	THE PHOTOSTIMULATED QUANTUM EFFECT IN RECTANGULAR QUANTUM WIRE WITH AN INFINITE POTENTIAL FOR THE CASE OF ELECTRON-ACOUSTIC PHONON SCATTERING	67
	<i>Hiệu ứng kích thích quang lượng tử trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thế cao vô hạn trong trường hợp tán xạ electron – phonon âm</i>	
	Nguyen Vu Nhan, Hoang Dinh Trien, Hoang Van Ngoc	
7.	INFLUENCE OF NISUBSTITUTION FOR Mn ON THE STRUCTURE AND IONIC CONDUCTIVITY OF LiNi _x Mn _{2-x} O ₄ SPINEL MATERIALS PREPAIRED BY THE SOL-GEL METHOD	75
	<i>Ảnh hưởng của sự thay thế Mn bằng Ni lên cấu trúc và độ dẫn ion của vật liệu Spinel LiNi_xMn_{2-x}O₄ tổng hợp bằng phương pháp Sol-Gel</i>	
	Ta Anh Tan, Le Huy Son, Dang Tran Chien	
8.	MAGNETIZATION IN HIGH-TC SUPERCONDUCTORS	87
	<i>Độ từ hóa của vật liệu siêu dẫn nhiệt độ cao</i>	
	Bui Duc Tinh, Le Minh Thu, Nguyen Quang Hoc	
9.	ELECTRONIC STRUCTURE AND THERMOELECTRIC PROPERTIES OF Bi ₂ Se ₃ UNDER OXYGEN SUBSTITUTION	93
	<i>Mật độ trạng thái và tính chất nhiệt điện của Bi₂Se₃ dưới tác dụng của thay thế nguyên tố O</i>	
	Tran Van Quang, Dinh Thi Men	

10. NGHIÊN CỨU, XÁC ĐỊNH THÀNH PHẦN DINH DƯỠNG CỦA MỘT SỐ LOÀI TẢO PHÂN LẬP TỪ VÙNG RỪNG NGẬP MẶN VƯỜN QUỐC GIA XUÂN THỦY, TỈNH NAM ĐỊNH 103
Identification of nutritional composition of some isolated micrialgae at mangroves forest in Xuan Thuy national park, Nam Dinh province
Lê Xuân Tuấn, Trần Thị Minh Hằng
11. XÁC ĐỊNH CÁC NHÓM LOÀI THỰC VẬT THÂN GỖ ƯU THẾ TRÊN CÁC DẠNG LẬP ĐỊA CỦA VÙNG ĐẤT CÁT NỘI ĐỒNG HUYỆN PHONG ĐIỀN, TỈNH THỪA THIÊN - HUẾ..... 118
Determination of dominant arbor plants of site types at inner sandy areas in Phong Dien district, Thua Thien - Hue province
Trương Thị Hiếu Thảo, Hoàng Xuân Thảo, Phạm Hồng Tính
12. ĐA DẠNG HÌNH THÁI RĂNG HẦU CỦA CÁC LOÀI THUỘC PHÂN HỌ CÁ BỔNG (CYPRINIDAE: BARBINAЕ) Ở VIỆT NAM..... 127
Morphological diversity of pharyngeal teeth of barb fish (cyprinidae: barbinae) in Vietnam
Tạ Thị Thủy, Nguyễn Thị Thủy, Hà Mạnh Linh, Trần Đức Hậu
13. IMPACTS OF DROUGHT ON CULTIVATION IN BINH THUAN PROVINCE IN THE CONTEXT OF CLIMATE CHANGE - PROJECT ASSESSMENT BY INTEGRATING GIS AND SWOT - AHP 136
Ảnh hưởng của hạn hạn đến trồng trọt ở tỉnh Bình Thuận trong bối cảnh biến đổi khí hậu – đánh giá dự tính bằng tích hợp Gis và Swot - Ahp
Bui Thanh Huong
14. ĐÁNH GIÁ ẢNH HƯỞNG Ô NHIỄM MÔI TRƯỜNG ĐẾN SỨC KHỎE CỘNG ĐỒNG TẠI LÀNG ĐÔNG HỒ, XÃ SONG HỒ, HUYỆN THUẬN THÀNH, TỈNH BẮC NINH..... 148
Evaluating the effect of environmental pollution on human health at Dong Ho village, Song Ho commune, Thuan Thanh district, Bac Ninh province
Nguyễn Bích Ngọc, Ngô Thanh Sơn

QUARTIC B SPLINES COLLOCATION METHOD FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE MRLW EQUATION

Nguyen Van Dung¹, Nguyen Viet Chinh²

¹Hanoi National University of Education

²Hanoi Metropolitan University

Abstract: In this paper, numerical solutions of the modified regularized long wave (MRLW) equation are obtained by a method based on collocation of quartic B splines. Applying the von-Neumann stability analysis, the proposed method is shown to be unconditionally stable. The method is applied on some test examples, and the numerical results have been compared with the exact solutions. The L_2 and L_∞ in the solutions show the efficiency of the method computationally.

Keywords: MRLW equation; quartic B spline; collocation method; finite difference.

Email: nvdungkiev@yahoo.com

Received 02 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

In this work, we consider the solution of the mGRLW equation

$$u_t + \alpha u_x + \varepsilon u^2 u_x - \beta u_{xxt} = 0, \quad (1)$$

$x \in [a, b], t \in [0, T],$

with the initial condition

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in [a, b], \quad (2)$$

and the boundary condition

$$\begin{cases} u(a, t) = 0, u(b, t) = 0 \\ u_x(a, t) = u_x(b, t) = 0 \\ u_{xx}(a, t) = u_{xx}(b, t) = 0, \end{cases} \quad (3)$$

where $\alpha, \varepsilon, \beta$ are constants, $\beta > 0$.

The MRLW equations play a dominant role in many branches of science and engineering [1]. In the past several years, many different methods have been used to estimate the solution of the MRLW equation, for example, see [1, 3].

In this present work, we have applied the quartic B spline collocation method to the MRLW equations. This work is built as follow: in Section 2, numerical scheme is presented. Section 3, is devoted to stability analysis of the method. The numerical results are discussed in Section 4. A conclusion is given at the end of the paper in Section 5.

2. QUINTIC B – SPLINE COLLOCATION METHOD

The interval $[a, b]$ is partitioned in to a mesh of uniform length $h = x_{i+1} - x_i$ by the knots x_i , $i = \overline{0, N}$ such that

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b.$$

Our numerical treatment for the MRLW equation using the collocation method with quartic B spline is to find an approximate solution $U(x, t)$ to the exact solution $u(x, t)$ in the form

$$U(x, t) = \sum_{i=-2}^{N+1} \delta_i(t) B_i(x), \quad (4)$$

where $\delta_i(t)$ are time-dependent quantities to be determined from the boundary conditions and collocation form of the differential equations. Also $B_i(x)$ are the quartic B spline basis functions at knots, given by [4].

$$B_i(x) = \frac{1}{h^4} \begin{cases} (x - x_{i-2})^4, & x_{i-2} \leq x \leq x_{i-1} \\ (x - x_{i-2})^4 - 5(x - x_{i-1})^4, & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x - x_{i-2})^4 - 5(x - x_{i-1})^4 + 10(x - x_i)^4, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ (x_{i+3} - x)^4 - 5(x_{i+2} - x)^4, & x_{i+1} \leq x \leq x_{i+2} \\ (x_{i+3} - x)^4, & x_{i+2} \leq x \leq x_{i+3} \\ 0, & x < x_{i-2} \cup x > x_{i+3}. \end{cases}$$

The value of $B_i(x)$ and its derivatives may be tabulated as in *Table 1*.

$$U_i = \delta_{i-2} + 11\delta_{i-1} + 11\delta_i + \delta_{i+1}$$

$$U'_i = \frac{4}{h} (-\delta_{i-2} - 3\delta_{i-1} + 3\delta_i + \delta_{i+1})$$

$$U''_i = \frac{12}{h^2} (\delta_{i-2} - \delta_{i-1} - \delta_i + \delta_{i+1}).$$

Table 1. B_i, B'_i , and B''_i at the node points

x	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	x_{i+3}
$B_i(x)$	0	1	11	11	1	0
$B'_i(x)$	0	$\frac{4}{h}$	$\frac{12}{h}$	$-\frac{12}{h}$	$-\frac{4}{h}$	0
$B''_i(x)$	0	$\frac{12}{h^2}$	$-\frac{12}{h^2}$	$-\frac{12}{h^2}$	$\frac{12}{h^2}$	0

Using the finite difference method, from the equation (1), we have:

$$\frac{(u-\beta u_{xx})^{n+1} - (u-\beta u_{xx})^n}{\Delta t} + \varepsilon(u)^n (u_x)^n \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \alpha \frac{(u_x)^{n+1} + (u_x)^n}{2} = 0. \quad (5)$$

Using the value given in *Table 1*, Eq. (5) can be calculated at the knots $x_i, i = \overline{0, N}$ so that Eq. (5) reduces to:

$$a_{m1} \delta_{m-2}^{n+1} + a_{m2} \delta_{m-1}^{n+1} + a_{m3} \delta_m^{n+1} + a_{m4} \delta_{m+1}^{n+1} = b_{m1} \delta_{m-2}^n + b_{m2} \delta_{m-1}^n + b_{m3} \delta_i^n + b_{m4} \delta_{i+1}^n, \quad (6)$$

where

$$a_{m1} = 2h^2 - 4h\alpha\Delta t - 24\beta - 4p + 4q,$$

$$a_{m2} = 22h^2 - 12h\alpha\Delta t + 24\beta - 12p + 22q,$$

$$a_{m3} = 22h^2 + 12h\alpha\Delta t + 24\beta + 12p + 22q,$$

$$a_{m4} = 2h^2 + 4h\alpha\Delta t - 24\beta + 4p_m + 4q_m,$$

$$b_{m1} = 2h^2 + 4h\alpha\Delta t - 24\beta - 4p_m,$$

$$b_{m2} = 22h^2 + 12h\alpha\Delta t - 24\beta - 12p_m,$$

$$b_{m3} = 22h^2 - 12h\alpha\Delta t + 24\beta + 12p_m,$$

$$b_{m4} = 2h^2 - 4h\alpha\Delta t - 24\beta + 4p_m,$$

$$p_m = h\Delta t \varepsilon L_1^2, q_m = h^2 \varepsilon \Delta t L_{m1} L_{m2},$$

$$L_{m1} = \delta_{m-2}^n + 11\delta_{m-1}^n + 11\delta_m^n + \delta_{m+1}^n,$$

$$L_{m2} = \frac{4}{h} (-\delta_{m-2}^n - 3\delta_{m-1}^n + 3\delta_m^n + \delta_{m+1}^n).$$

The system (6) consists of $N + 1$ equations in the $N + 4$ knowns $(\delta_{-2}, \delta_{-1}, \dots, \delta_{N+1})^T$.

To get a solution to this system, we need four additional constraints. These constraints are obtained from the boundary conditions (3) and can be used to eliminate from the system (6). Then, we get the matrix system equation

$$A(\delta^n)\delta^{n+1} = B(\delta^n)\delta^n + r, \quad (7)$$

Where the matrix $A(\delta^n)$, $B(\delta^n)$ are penta-diagonal $(N + 1) \times (N + 1)$ matrices and r is the $N + 1$ dimensional column vector. The algorithm is then used to solve the system (7). We apply the initial condition

$$U(x, 0) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i^0 B_i(x), \quad (8)$$

then we need that the approximately solution is satisfied following conditions

$$\begin{cases} U(x_i, 0) = f(x_i) \\ U_x(x_0, 0) = U_x(a, 0) = 0 \\ U_x(x_N, 0) = U_x(b, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_0, 0) = U_{xx}(a, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_N, 0) = U_{xx}(b, 0) = 0 \\ i = 0, 1, \dots, N. \end{cases} \quad (9)$$

Eliminating $\delta_{-2}^0, \delta_{-1}^0$ and δ_{N+1}^0 from the system (9), we get $A\delta^0 = r$, where A is the quartic-diagonal matrix given by:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \frac{37}{4} & \frac{43}{4} & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 11 & 11 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 11 & 11 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots \end{pmatrix}$$

and $\delta^0 = (\delta_0^0, \delta_1^0, \dots, \delta_N^0)^T, r = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N))^T$.

3. STABILITY ANALYSIS

In this section, we present the stability of the quartic B spline approximation (6) using the von-Neumann method. According to the von-Neumann method, we have:

$$\delta_m^n = \xi^n \exp(i\gamma m h), \quad i = \sqrt{-1}, \quad (10)$$

where γ is the mode number and h is the element size.

Being applicable to only linear schemes the nonlinear term U^2U_x is linearized by taking U as a locally constant value θ . The linearized form of proposed scheme is given as

$$\sigma_1 \delta_{i-2}^{n+1} + \sigma_2 \delta_{i-1}^{n+1} + \sigma_3 \delta_i^{n+1} + \sigma_4 \delta_{i+1}^{n+1} = \sigma_4 \delta_{i-2}^n + \sigma_3 \delta_{i-1}^n + \sigma_2 \delta_i^n + \sigma_1 \delta_{i+1}^n \quad (11)$$

where

$$\sigma_1 = 1 - \frac{4a_1}{h} - \frac{12\beta_1}{h^2}, \quad \sigma_2 = 11 - \frac{12a_1}{h} + \frac{12\beta_1}{h^2},$$

$$\sigma_3 = 11 + \frac{12a_1}{h} + \frac{12\beta_1}{h^2}, \quad \sigma_4 = 1 + \frac{4a_1}{h} - \frac{12\beta_1}{h^2},$$

$$a_1 = \frac{(\alpha + \varepsilon\theta^2)\Delta t}{h}.$$

Substitution of $\delta_i^n = \exp(i\gamma h)\xi^n$, into Eq. (11) leads to

$$\xi[\sigma_1 \exp(-2i\gamma h) + \sigma_2 \exp(-i\gamma h) + \sigma_3 + \sigma_4 \exp(i\gamma h)] = \sigma_4 \exp(-2i\gamma h) + \sigma_3 \exp(-i\gamma h) + \sigma_2 + \sigma_1 \exp(i\gamma h). \quad (12)$$

Simplifying Eq. (12), we get:

$$\xi = \frac{A_1 - iB}{C + iB},$$

It is clear that $C^2 + B^2 = A_1^2 + B^2$. So $|\xi| = 1$.

Therefore, the linearized numerical scheme for the MRLW equation is unconditionally stable.

4. NUMERICAL EXAMPLE

We now obtain the numerical solution of the MRLW equation for some problems. To show the efficiency of the present method for our problem in comparison with the exact solution, we report L_∞ and L_2 using formula:

$$L_\infty = \max_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|,$$

$$L_2 = \left(h \sum_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

where U is numerical solution and u denotes exact solution.

Three invariants of motion which correspond to the conservation of mass, momentum, and energy are given as:

$$I_1 = \int_a^b u dx, I_2 = \int_a^b (u^2 + \beta u_x^2) dx, I_3 = \int_a^b \left(u^4 - \frac{2\beta(p+1)}{\varepsilon} u_x^2 \right) dx.$$

We have the exact solution of the MRLW is:

$$u(x, t) = \frac{A}{\cosh(\rho(x - x_0 - ct))},$$

where

$$A = \sqrt{\frac{(p+1)(p+2)(c-\alpha)}{2\varepsilon}}, \rho = \sqrt{\frac{c-\alpha}{\beta c}}.$$

The initial condition of Equation (1) given by:

$$f(x) = \frac{A}{\cosh(\rho(x - x_0))}.$$

We take $\alpha = 1.1, \varepsilon = 64, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.025$ and $\Delta t = 0.01, h = 0.1$ and $h = 0.2, t \in [0, 20]$. The values of the variants and the error norms at several times are listed in *Table 2* and *Table 3*. From *Table 2*, we see that, changes of variants $I_1, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^4$ from their initial value are less than 0.1, 0.2 and 0.9, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.009695 and 0.008033, respectively.

In *Table 3*, changes of variants $I_1, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^4$ from their initial value are less than 0.7, 0.4 and 0.6, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.007553 and 0.008033, respectively.

Table 2. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.1, c = 1.11$
 $\varepsilon = 64, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.1, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	1.251299	1.287541	1.315251	1.335511	1.347595
I_2	0.037046	0.036778	0.036835	0.036867	0.036847
I_3	-0.001087	-0.001035	-0.001022	-0.001013	-0.001004
L_2	0.007105	0.006936	0.007444	0.008531	0.009695
L_∞	0.008033	0.005587	0.003866	0.002957	0.002993

Figure 1 shows approximate solution graphs at $t = 0, 5, 10, 15, 20$.

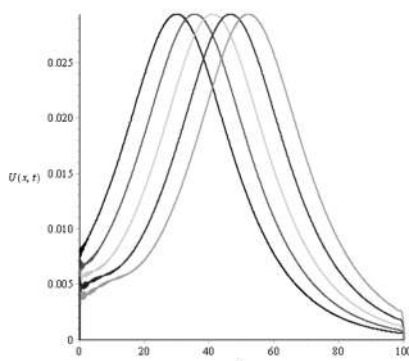


Figure 1. Single solitary wave with

$$\alpha = 1.1, c = 1.11, \varepsilon = 64, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, \\ h = 0.2, t = 0, 5, 10, 15, 20.$$

Table 3. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.1, c = 1.11$
 $\varepsilon = 64, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.2, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	1.250960	1.283776	1.304115	1.313904	1.314098
I_2	0.031271	0.030893	0.030752	0.030577	0.030395
I_3	-0.000546	-0.000488	-0.000464	-0.000443	-0.000426
L_2	0.007553	0.007163	0.006965	0.006883	0.006890
L_∞	0.008033	0.005587	0.003866	0.002670	0.002472

The plot of the estimated solution at time $t = 0, 5, 10, 15, 20$ in *Figure 2*.

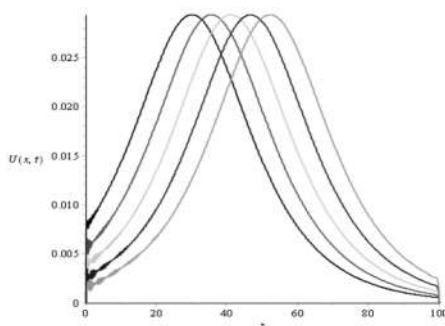


Figure 2. Single solitary wave with

$$\alpha = 1.1, c = 1.11, \varepsilon = 64, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, \\ h = 0.2, t = 0, 5, 10, 15, 20.$$

To get more the variants and error norms, we choose two sets of parameters by taking different values of $h = 0.1$ and $h = 0.2$ and the same values of $\alpha = 1.1, c = 1.11, \varepsilon = 128, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01$. The variants and error norms are calculated from time $t = 0$ to $t = 20$. The numerical results are given *Table 4* and *Table 5*. From *Table 4*, we see that, changes of variants $I_1 \times 10, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^4$ from their initial value are less than 0.7, 0.1 and 0.3, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.006855 and 0.005681, respectively.

In *Table 5*, changes of variants $I_1 \times 10, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^4$ from their initial value are less than 0.4, 0.6 and 0.4, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.005341 and 0.005680, respectively.

Error graphs are shown in *Figure 3* and *Figure 4* at $t = 0, 5, 10, 15$ and $t = 20$.

Table 4. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.1, c = 1.11$
 $\varepsilon = 128, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.1, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	0.884802	0.910429	0.930023	0.944348	0.952893
I_2	0.018523	0.018389	0.018418	0.018433	0.018424
I_3	-0.000272	-0.000259	-0.000256	-0.000253	-0.000251
L_2	0.005024	0.004905	0.005264	0.006033	0.006855
L_∞	0.005681	0.003950	0.002734	0.002091	0.002117

Table 5. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.1, c = 1.11$
 $\varepsilon = 128, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.2, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	0.884562	0.907767	0.922149	0.929070	0.929208
I_2	0.015636	0.015447	0.015376	0.015289	0.015120
I_3	-0.000137	-0.000122	-0.000116	-0.000111	-0.000106
L_2	0.005341	0.005065	0.004925	0.004867	0.004872
L_∞	0.005680	0.003950	0.002734	0.001888	0.001748

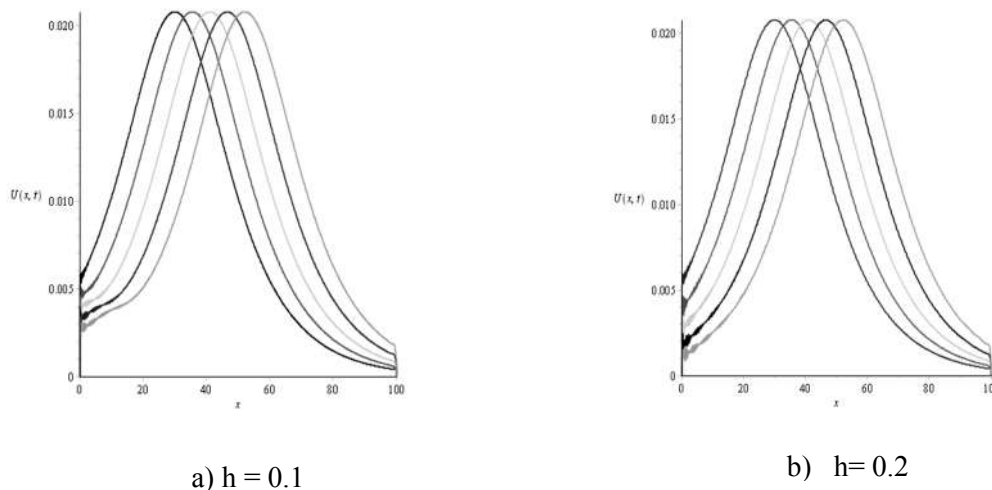


Figure 3. Single solitary wave with

$$\alpha = 1.1, c = 1.11, \varepsilon = 128, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, \\ h = 0.1, h = 0.2, t = 0, 5, 10, 15, 20.$$

Finally, we choose the parameter sets $\alpha = 1.5, \varepsilon = 256, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, c = 1.31, h = 0.1$ and $h = 0.2, t \in [0, 20]$. The obtained results are given in *Table 6* and *Table 7*. From *Table 6*, we see that, changes of variants $I_1 \times 10, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^5$ from their initial value are less than 0.4, 0.2 and 0.7, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.004010 and 0.004683, respectively. In *Table 7*, changes of variants $I_1 \times 10, I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^5$ from their initial value are less than 0.3, 0.5 and 0.2, respectively. Besides, we observed that the error in the L_2, L_∞ norm in those tables is small.

Table 6. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.3, c = 1.31$

$$\varepsilon = 256, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.1, t \in [0, 10]$$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	0.666901	0.677352	0.686507	0.694563	0.701611	0.707678
I_2	0.010805	0.010699	0.010714	0.010721	0.010730	0.010738
I_3	-0.000092	-0.000086	-0.000088	-0.000087	-0.000087	-0.000087
L_2	0.003753	0.003671	0.003636	0.003676	0.003804	0.004010
L_∞	0.004683	0.004010	0.003427	0.002925	0.002494	0.002126

Table 7. Variants and error norms of the MRLW equation with $\alpha = 1.3, c = 1.31$
 $\varepsilon = 256, \beta = 2, a = 0, b = 100, x_0 = 30, \Delta t = 0.01, h = 0.2, t \in [0, 10]$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	0.666670	0.676480	0.684479	0.690849	0.695687	0.699124
I_2	0.008842	0.008723	0.008715	0.008698	0.008674	0.008648
I_3	-0.000046	-0.000042	-0.000042	-0.000041	-0.000040	-0.000039
L_2	0.004040	0.003923	0.003836	0.003773	0.003732	0.003708
L_∞	0.004683	0.004010	0.003427	0.002925	0.002494	0.002126

5. CONCLUSION

In this work, we have used the quartic B spline collocation method for solution of the MRLW equation. The stability analysis of the method is shown to be unconditionally stable. The numerical results given in the previous section demonstrate the good accuracy and stability of the proposed scheme in this research.

REFERENCES

1. A.Gul Kaplan and Y.Maz Derel (2017), “Numerical solutions of the MRLW equation using moving least square collocation method”, *Commun.Fac.Sci.Univ.Ank.Series A1* Vol. 66(2), pp.349-361.
2. S.Islam, F.Haq and I.A.Tirmizi (2010), “Collocation method using quartic B-spline for numerical solution of the modified equal width wave equation”, *J. Appl. Math. Inform.*, Vol. 28 (3-4), pp.611-624.
3. R.Mohammadi (2015), “Exponential B spline collocation method for numerical solution of the generalized regularized long wave equation”, *Chin. Phys. B*, Vol. 24(5), 050206, pp.1-14.
4. P.M.Preter (1975), “Splines and Variational Methods”, *Wiley, New York*.
5. M.Zarebnia and R.Parvaz (2013), “Cubic B-spline collocation method for numerical solution of the Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equation”, *International Journal of Mathematical, Computational, Physical, Electrical and Computer Engineering*, Vol. 7(3), pp.540-543.

PHƯƠNG PHÁP KẾT NỐI TRƠN CÁC ĐA THỨC BẬC BỐN GIẢI PHƯƠNG TRÌNH MRLW

Tóm tắt: Trong bài báo này, nghiệm số của phương trình sóng dài chính quy cải biên (MRLW) sẽ tìm được dựa trên cơ sở sử dụng sự kết nối trơn các đa thức bậc 4. Sử dụng phương pháp Von-Neumann hệ phương trình sai phân ổn định vô điều kiện. Phương pháp giải nêu ra được áp dụng cho một số ví dụ và so sánh với nghiệm chính xác. Kết quả tính toán cho thấy hiệu lực của phương pháp đề xuất.

Từ khóa: Phương trình MRLW, spline bậc 4, phương pháp collocation, phương pháp sai phân hữu hạn.

APPLICATION OF THE COLLOCATION METHOD WITH B – SPLINE TO THE GRLW EQUATION

Nguyen Thi Thu Hoa, Nguyen Thi Thu Ha

Hanoi Metropolitan University

Abstract: In this work, solitary – wave solution of the generalized regularized long wave (GRLW) equation are obtained by using quintic B – spline collocation method. A linear new method based on collocation of quintic B – splines. Applying the von – Neumann stability analysis of the numerical scheme base on the von Neumann method is investigate. We compute the error in the L_2 and the L_∞ norms and in the variants I_1 , I_2 and I_3 of the GRLW equation. The numerical result are tabulated and are plotted at different time levels.

Keywords: Catot, $LiNi_xMn_{2-x}O_4$, pin liti-ion, LiBs.

Email: hoantt@daihocthudo.edu.vn

Received 05 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

In this work, we consider the solution of the mGRLW equation

$$u_t + \alpha u_x + \varepsilon u^p u_x - \beta u_{xxt} = 0, \quad (1)$$

where p is a positive interger number, ε , α and β are positive constants, $x \in [a, b]$, $t \in [0, T]$, and the boundary and initial conditions are assumed to be of the form

$$\begin{cases} u(a, t) = 0, u(b, t) = 0, u_x(a, t) = u_x(b, t) = 0 \\ u_{xx}(a, t) = u_{xx}(b, t) = 0, \\ u(x, 0) = f(x), x \in [a, b]. \end{cases} \quad (2)$$

The numerical solution of the GRLW has been stadied in the recent years. The septic B – spline collocation method was applied to the GRLW by S. BattalGaziKarakoça and H. Zeybek [2]. Roshan has solved the equation by using the Petrov–Galerkin method [16]...

In this paper, a quintic B-spline collocation method is presented for the GRLW equation. This work is designed as follow: in Section 2, discription of quintic B–spline collocation method is presented. The stability analysis of the method is established in Section 3. In Section 4, the numerical results are discussed. In the last Section, Section 5, conclusion is presented.

2. DISCRIPTION OF QUINTIC B – SPLINE COLLOCATION METHOD

We partition the interval $[a, b]$ into elements of uniform length h by the knots x_i such that partitioned in to a mesh of uniform length by the knots x_m , $m = \overline{0, N}$ such that

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b, \quad h = x_{m+1} - x_m.$$

The quintic B –spline functions $\{B_m(x)\}_{m=-2}^{N+2}$ at the knots x_m are given by Prenter [14].

Our numerical study for GRLW equation using the collocation method with quintic B-spline is to find an approximate solution $U(x, t)$ to exact solution $u(x, t)$ in the form

$$U(x, t) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i(t) B_i(x). \quad (3)$$

Substituting $B_m(x)$ into (3), the nodal values of U, U', U'' are obtained in terms

$$\begin{aligned} U(x_i, t) &= \delta_{i-2} + 26\delta_{i-1} + 66\delta_i + 26\delta_{i+1} + \delta_{i+2} \\ U'(x_i, t) &= \frac{5}{h} (-\delta_{i-2} - 10\delta_{i-1} + 10\delta_{i+1} + \delta_{i+2}) \end{aligned} \quad (4)$$

$$U''(x_i, t) = \frac{20}{h^2} (\delta_{i-2} + 2\delta_{i-1} - 6\delta_i + 2\delta_{i+1} + \delta_{i+2}), \quad i = 0, \dots, N.$$

Using the finite difference method, from the equation (1), we have:

$$\frac{(u - \beta u_{xx})^{n+1} - (u - \beta u_{xx})^n}{\Delta t} + \varepsilon (u^{p-1})^n (u_x)^n \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \alpha \frac{(u_x)^{n+1} + (u_x)^n}{2} = 0. \quad (5)$$

If we substitute the nodal values of U, U' and U'' given by (4) into (5), we obtain the following iterative system:

$$\begin{aligned} \gamma_{m1} \delta_{m-2}^{n+1} + \gamma_{m2} \delta_{m-1}^{n+1} + \gamma_{m3} \delta_m^{n+1} + \gamma_{m4} \delta_{m+1}^{n+1} + \gamma_{m5} \delta_{m+2}^{n+1} &= \sigma_{m1} \delta_{m-2}^n + \sigma_{m2} \delta_{m-1}^n + \\ &\sigma_{m3} \delta_i^n + \sigma_{m4} \delta_{i+1}^n + \sigma_{m5} \delta_{i+2}^n, \end{aligned} \quad (6)$$

where

$$\gamma_{m1} = M + q_m, \gamma_{m2} = N + 26q_m, \gamma_{m3} = P + 66q_m, \gamma_{m4} = Q + 26q_m, \gamma_{m5} = R + q_m,$$

$$\sigma_{m1} = R - q_m, \sigma_{m2} = Q - 26q_m, \sigma_{m3} = P - 66q_m, \sigma_{m4} = N - 26q_m, \sigma_{m5} = M - q_m,$$

$$M = 2h^2 - 5h\alpha\Delta t - 40\beta, N = 52h^2 - 50h\alpha\Delta t - 80\beta, P = 132h^2 + 240\beta,$$

$$Q = 52h^2 + 50h\alpha\Delta t - 80\beta, R = 2h^2 + 5h\alpha\Delta t - 40\beta,$$

$$L_1 = \delta_{m-2}^n + 26\delta_{m-1}^n + 66\delta_m^n + 26\delta_{m+1}^n + \delta_{m+2}^n,$$

$$L_2 = \frac{5}{h} (-\delta_{m-2}^n - 10\delta_{m-1}^n + 10\delta_{m+1}^n + \delta_{m+2}^n), \quad q_m = h^2 \varepsilon \Delta t L_1^p L_2, \quad m = 0, \dots, N.$$

The system (6) consists of $N + 1$ equations in the $N + 5$ knowns $(\delta_{-2}, \delta_{-1}, \dots, \delta_{N+1}, \delta_{N+2})^T$.

To get a solution to this system, we need four additional constraints. These constraints are obtained from the boundary conditions (2) and can be used to eliminate from the system (6). Then, we get the matrix system equation

$$A(\delta^n)\delta^{n+1} = B(\delta^n)\delta^n + r, \tag{7}$$

where the matrix $A(\delta^n)$, $B(\delta^n)$ are penta-diagonal $(N + 1) \times (N + 1)$ matrices and r is the $N + 1$ dimensional column vector. The algorithm is then used to solve the system (7). We apply first the initial condition

$$U(x, 0) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i^0 B_i(x), \tag{8}$$

then we need that the approximately solution is satisfied following conditions

$$\begin{cases} U(x_i, 0) = f(x_i) \\ U_x(x_0, 0) = U_x(a, 0) = 0 \\ U_x(x_N, 0) = U_x(b, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_0, 0) = U_{xx}(a, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_N, 0) = U_{xx}(b, 0) = 0 \\ i = 0, 1, \dots, N. \end{cases} \tag{9}$$

Eliminating $\delta_{-2}^0, \delta_{-1}^0, \delta_{N+1}^0$ and δ_{N+2}^0 from the system (11), we get:

$$A\delta^0 = r,$$

where A is the penta-diagonal matrix given by

$$A = \begin{pmatrix} 54 & 60 & 6 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{101}{4} & \frac{135}{2} & \frac{105}{4} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & \dots & & & \dots & & \\ \dots & & \dots & & & \dots & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \frac{105}{4} & \frac{135}{2} & \frac{101}{4} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 6 & 60 & 54 \end{pmatrix}$$

and $\delta^0 = (\delta_0^0, \delta_1^0, \dots, \delta_N^0)^T, r = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N))^T$.

3. STABILITY ANALYSIS

To apply the Von-Neumann stability for the system (6), we must first linearize this system.

We have:
$$\delta_j^n = \xi^n \exp(i\gamma jh), \quad i = \sqrt{-1}, \quad (10)$$

where γ is the mode number and h is the element size.

Being applicable to only linear schemes the nonlinear term $U^p U_x$ is linearized by taking U as a locally constant value ϑ . The linearized form of proposed scheme is given as

$$\rho_1 \delta_{i-2}^{n+1} + \rho_2 \delta_{i-1}^{n+1} + \rho_3 \delta_i^{n+1} + \rho_4 \delta_{i+1}^{n+1} + \rho_5 \delta_{i+2}^{n+1} = \rho_5 \delta_{i-2}^n + \rho_4 \delta_{i-1}^n + \rho_3 \delta_i^n + \rho_2 \delta_{i+1}^n + \rho_1 \delta_{i+2}^n \quad (11)$$

where

$$\begin{aligned} \rho_1 &= 1 - a_2 + a_3, \quad \rho_2 = 26 - 10a_2 + 2a_3, \quad \rho_3 = 66 - 6a_3, \\ \rho_4 &= 26 + 10a_2 + 2a_3, \quad \rho_5 = 1 + a_2 + a_3, \\ a_1 &= \frac{5(\alpha + \varepsilon \vartheta^p) \Delta t}{2}, \quad a_2 = \frac{5a_1}{h}, \quad a_3 = \frac{-20\beta}{h^2}. \end{aligned}$$

Substitution of $\delta_j^n = \exp(i\gamma jh) \xi^n$, into Eq. (11) leads to

$$\xi [\rho_1 \exp(-2i\gamma h) + \rho_2 \exp(-i\gamma h) + \rho_3 + \rho_4 \exp(i\gamma h) + \rho_5 \exp(2i\gamma h)] = \rho_5 \exp(-2i\gamma h) + \rho_4 \exp(-i\gamma h) + \rho_3 + \rho_2 \exp(i\gamma h) + \rho_1 \exp(2i\gamma h). \quad (12)$$

Simplifying Eq. (12), we get:

$$\xi = \frac{C - iD}{C + iD},$$

where

$$\begin{aligned} C &= (\rho_1 + \rho_5) \cos(2\phi) + (\rho_2 + \rho_4) \cos\phi + \rho_3, \quad D \\ &= (\rho_1 - \rho_5) \sin(2\phi) + (\rho_2 - \rho_4) \cos\phi \\ \phi &= \gamma h. \end{aligned}$$

$$\text{So } |\xi| = \sqrt{\frac{C^2 + D^2}{C^2 + D^2}} = 1.$$

Therefore, the linearized numerical scheme for the mGRLW equation is unconditionally stable.

4. NUMERICAL EXAMPLE

We now obtain the numerical solution of the GRLW equation for some problems. To show the efficiency of the present method for our problem in comparison with the exact solution, we report L_∞ and L_2 using formula

$$L_\infty = \max_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|,$$

$$L_2 = \left(h \sum_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

where U is numerical solution and u denotes exact solution.

Three invariants of motion which correspond to the conservation of mass, momentum, and energy are given as

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^b u dx, I_2 = \int_a^b (u^2 + \beta u_x^2) dx, I_3 \\ &= \int_a^b \left(u^4 - \frac{2\beta(p+1)}{\varepsilon} u_x^2 \right) dx. \end{aligned}$$

The exact solution of the GRLW is:

$$u(x, t) = \frac{E}{(\cosh^2(\theta(x - x_0 - ct)))^{\frac{1}{p}}},$$

where

$$\theta = \frac{p}{2} \sqrt{\frac{c - \alpha}{\beta c}}, E = \left(\frac{(p+1)(p+2)(c - \alpha)}{2\varepsilon} \right).$$

The initial condition of Equation (1) given by:

$$f(x) = \frac{E}{(\cosh^2(\theta(x - x_0)))^{\frac{1}{p}}}.$$

To get the variants and error norms, we choose four sets of parameters by taking different values of p , h , c and Δt and the same values of $\alpha = 1$, $\varepsilon = 13$, $\beta = 0.1$, $a = 0$, $b = 100$, $x_0 = 40$. The variants and error norms are calculated from time $t = 0$ to $t = 10$.

In the first case, we take $p = 2$, $h = 0.1$, $\Delta t = 0.1$, $c = 1.01$. The variants and error norms are listed in *Table 1*. In this table, we get, the changes of variants $I_1 \times 10^4$, $I_2 \times 10^5$ and $I_3 \times 10^7$ from their initial values are less than 0.3, 0.5 and 0.2, respectively. The error norms L_2 and L_∞ are less than 2.344479×10^{-3} and 1.166120×10^{-3} , respectively.

In the second case, $p = 2$, $h = 0.2$, $\Delta t = 0.1$, $c = 1.01$. The variants and error norms are listed in *Table 2*. In this table, we get, the changes of variants $I_1 \times 10^4$, $I_2 \times 10^5$ and $I_3 \times 10^7$ from their initial values are less than 0.4, 0.5 and 0.2, respectively. The error norms L_2 and L_∞ are less than 2.344994×10^{-3} and 1.164312×10^{-3} , respectively.

Table 1. Variants and error norms of the GRLW equation with $p = 2, \alpha = 1,$

$$\varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 1.01, t \in [0, 10]$$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	0.678287	0.678293	0.678299	0.678305	0.678311	0.678170
I_2	0.029433	0.029433	0.029434	0.029435	0.029436	0.029437
I_3	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046
$L_2 \times 10^3$	0	0.471693	0.942647	1.412144	1.879580	2.344479
$L_\infty \times 10^3$	0	0.222742	0.454863	0.691595	0.929801	1.166120

Table 2. Variants and error norms of the GRLW equation with $p = 2, \alpha = 1,$

$$\varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 1.01, t \in [0, 10]$$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	0.678287	0.678293	0.678299	0.678305	0.678311	0.678317
I_2	0.029433	0.029433	0.029434	0.029435	0.029359	0.029437
I_3	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046	0.000046
$L_2 \times 10^3$	0	0.471801	0.942860	1.412461	1.879997	2.344994
$L_\infty \times 10^3$	0	0.222831	0.453852	0.691887	0.930200	1.164312

Thirdly, if $p = 3, h = 0.1, \Delta t = 0.01$ and $\Delta t = 0.025, c = 1.01,$ and $c = 1.001,$ then the numerical results are reported in *Table 3* and *Table 4*.

In *Table 3*, we see that, changes of the variants $I_1 \times 10^3, I_2 \times 10^4$ and $I_3 \times 10^4$ from their initial value are less than 0.2, 0.5 and 0.1, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.951768×10^{-2} and 0.550608×10^{-2} , respectively. The motion of a single solitary wave is displayed at times $t = 0, 6, 10$ in *Figure 1*.

In *Table 4*, changes of the variants $I_1 \times 10, I_2 \times 10^4$ and $I_3 \times 10^6$ from their initial value are less than 0.2, 0.8 and 0.9, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 3.495260×10^{-3} and 1.687792×10^{-3} , respectively. The motion of a single solitary wave is displayed at times $t = 0, 6, 10$ in *Figure 2*.

Table 3. Variants and error norms of the GRLW equation with $p = 3, \alpha = 1, \varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 1.01, t \in [0, 10]$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	1.759327	1.759348	1.759369	1.759390	1.759411	1.759432
I_2	0.214500	0.214509	0.214519	0.214529	0.214538	0.214548
I_3	0.004856	0.004856	0.004855	0.004853	0.004850	0.004848
$L_2 \times 10^2$	0	0.195276	0.388971	0.579943	0.767609	0.951768
$L_\infty \times 10^2$	0	0.110925	0.226747	0.339792	0.447835	0.550608

Table 4. Variants and error norms of the GRLW equation with $p = 3, \alpha = 1, \varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.025, h = 0.1, c = 1.001, t \in [0, 10]$

t	0	2	4	6	8	10
I_1	2.540639	2.545207	2.549572	2.553716	2.557596	2.561150
I_2	0.144896	0.144910	0.144924	0.144938	0.144952	0.144966
I_3	0.000753	0.000753	0.000753	0.000753	0.000753	0.000753
$L_2 \times 10^3$	0	0.413323	1.087032	1.854905	2.668369	3.495260
$L_\infty \times 10^3$	0	0.484072	0.880360	1.204781	1.470369	1.687792

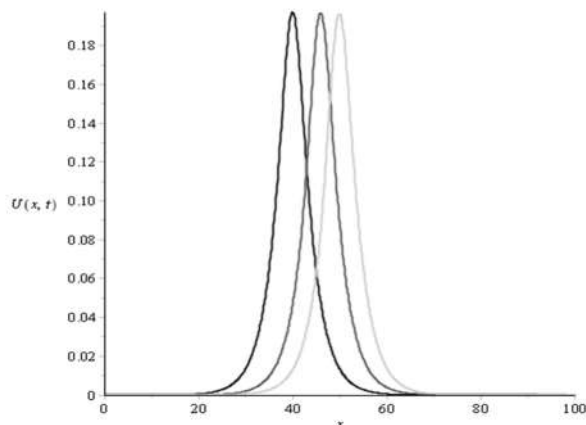


Figure 1. Single solitary wave with $p = 3, \alpha = 1, \varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 1.01, t = 0, 6, 10$

Finally, we choose the quantities $p = 4, \alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 0.1.001$.

The numerical computation are done up to $t = 20$. The obtained results are given in Table 5 which clearly shows that the changes of the variants $I_1 \times 10^3$, $I_2 \times 10^3$ and $I_3 \times 10^5$ from their initial value are less than 0.6, 0.2 and 0.4, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 2.647811×10^{-3} and 0.685645×10^{-3} , respectively. Solitary wave profiles are depicted at time levels in Figure 3.

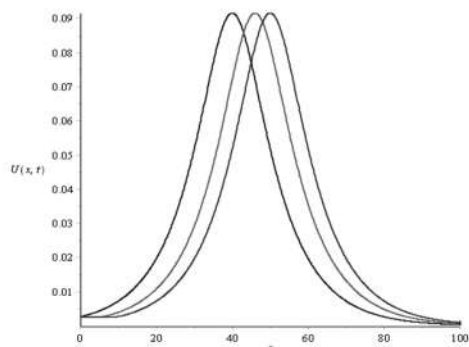


Figure 2. Single solitary wave with $p = 3$,
 $\alpha = 1, \varepsilon = 13, \beta = 0.1, a = 0$,
 $b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.025, h = 0.1$,
 $c = 1.001, t = 0, 6, 10$

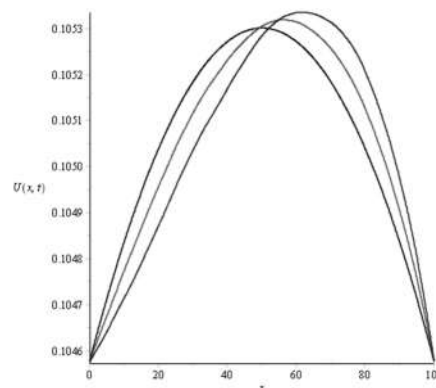


Figure 3. Single solitary wave with
 $p = 4, \alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360$,
 $a = 0, b = 100, x_0 = 50, \Delta t = 0.01$,
 $h = 0.1, c = 1.001, t = 0, 10, 20$.

Table 5. Variants and error norms of the GRLW equation with $p = 4, \alpha = 1$,
 $\varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 50, \Delta t = 0.01, h = 0.1, c = 1.001, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	10.516333	10.516566	10.516546	10.516299	10.515780
I_2	1.104843	1.104892	1.104888	1.104837	1.104729
I_3	0.012194	0.012195	0.012195	0.012194	0.012191
$L_2 \times 10^3$	0	0.611587	1.243961	1.917332	2.647811
$L_\infty \times 10^3$	0	0.150865	0.315534	0.493848	0.685645

For the purpose of illustration of the presented method for solving the GRLW equation, we use parameters $p = 2, 3, 5, 7, 9$ with $\alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 50$. The parameters $\Delta t, h, c$ are given by different values. The error norms at $t = 20$ are listed in Table 6 and Table 7.

The plot of the estimated solution at time $t = 10$ in Figure 4.

From these tables, we see that, the error norms L_2, L_∞ are quite small for present method.

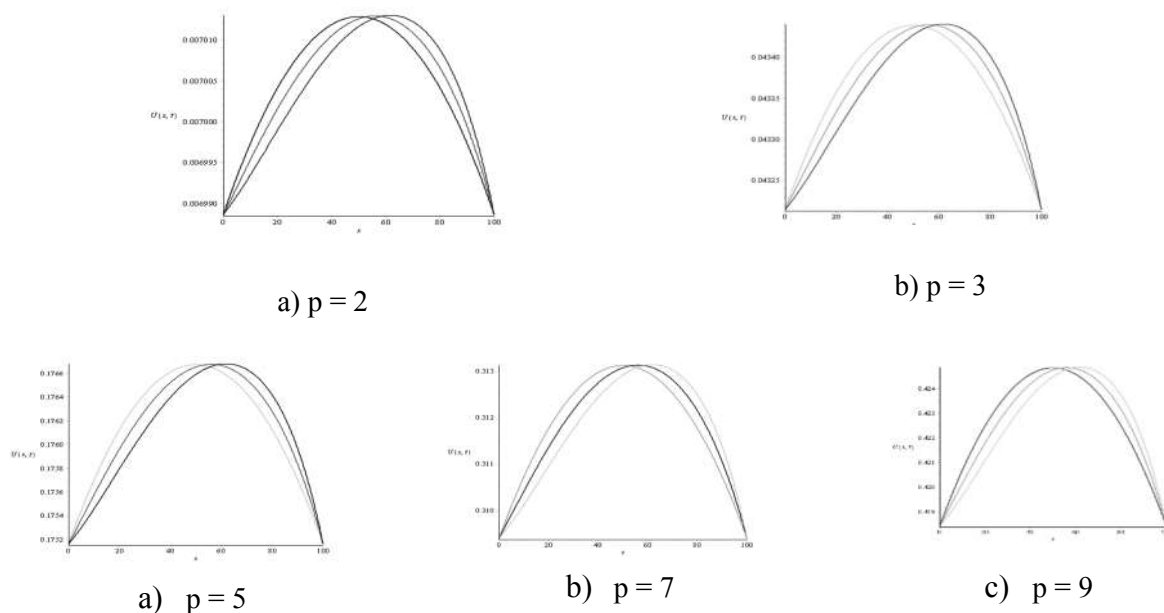


Figure 4. Single solitary wave with

$$\alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 50, t = 0, 10, 20.$$

Table 6. Error norms for single solitary wave for the wave of the GRLW equation with $\alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 50, t = 20.$

			p = 2		p = 3		p = 5	
		c	1.0001	1.001	1.0001	1.001	1.0001	1.001
	h	Δt						
L_2	0.1	0.01	0.004482	0.088766	0.047287	0.818658	0.377707	5.529901
×	0.2	0.01	0.002899	0.088349	0.037387	0.822547	0.340665	5.535953
10^3	0.1	0.05	0.002830	0.089675	0.038396	0.830843	0.356645	5.559609
	0.2	0.05	0.003044	0.090680	0.040881	0.837106	0.367814	5.597731
L_∞	0.1	0.01	0.000739	0.023181	0.010066	0.213927	0.092579	1.423652
×	0.2	0.01	0.000739	0.023181	0.010066	0.213927	0.092578	1.423652
10^3	0.1	0.05	0.000738	0.023181	0.010065	0.213926	0.092579	1.423653
	0.2	0.05	0.000738	0.023181	0.010065	0.213926	0.092578	1.423652

Table 7. Error norms for single solitary wave for the wave of the GRLW equation with $\alpha = 1, \varepsilon = 122, \beta = 360, a = 0, b = 100, x_0 = 50, t = 20$

			p = 7		p = 9	
			1.0001	1.001	1.0001	1.001
	h	Δt				
L_2	0.1	0.01	1.037021	13.513875	1.895832	23.097371
\times	0.2	0.01	0.969144	13.539687	1.824487	23.188402
10^3	0.1	0.05	1.010284	13.578334	1.883411	23.220042
	0.2	0.05	1.033718	13.654954	1.925747	23.333349
L_∞	0.1	0.01	0.261341	3.446876	0.488891	5.835234
\times	0.2	0.01	0.261340	3.446875	0.488890	5.835235
10^3	0.1	0.05	0.261341	3.446876	0.488891	5.835234
	0.2	0.05	0.261340	3.446875	0.488890	5.835235

5. CONCLUSION

In this work, we have used the quintic B-spline collocation method for solution of the GRLW equation. We tested our scheme through single solitary wave and the obtained results are tabulaces. These tables show that, the changes of variants are small. The error norms L_2, L_∞ for the GRLW equation are acceptable. So the present method is more capable for solving these equations.

REFERENCES

1. S.S.Askar and A.A.Karawia (2015), "On solving pentadiagonal linear systems via transformations", *Mathematical Problems in Engineering*, Vol. 2015, pp.1-9.
2. S.Battal Gazi Karakoça, Halil Zeybek (2016), "Solitary - wave solutions of the GRLW equation using septic B - spline collocation method", *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 289, pp.159-171.
3. H.Che, X.Pan, L.Zhang and Y.Wang (2012), "Numerical analysis of a linear-implicit average scheme for generalized Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equation", *J.Applied Mathematics*, Vol. 2012, pp.1-14.
4. D.J.Evans and K.R.Raslan (2005), "Solitary waves for the generalized equal width (GEW) equation", *International J. of Computer Mathematics*, Vol. 82(4), pp.445-455.
5. C.M.García-Lospez, J.I.Ramos (2012), "Effects of convection on a modified GRLW equation", *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 219, pp.4118-4132.
6. C.M.García-Lospez, J.I.Ramos (2015), "Solitari waves generated by bell-shaped initial conditions in the inviscid and viscous GRLW equations", *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 39(21), pp.6645-6668.
7. P.A.Hammad, M.S.El-Azab (2015), "A 2N order compact finite difference method for solving the generalized regularized long wave (GRLW) equation", *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 253, pp.248-261.

8. B.Hong, D.Lu (2008), “New exact solutions for the generalized BBM and Burgers-BBM equations”, *World Journal of Modelling and Simulation*, Vol. 4(4), pp.243-249.
9. S.Islam, F.Haq and I.A.Tirmizi (2010), “Collocation method using quartic B-spline for numerical solution of the modified equal width wave equation”, *J.Appl.Math.Inform*, Vol. 28(3-4), pp.611-624.
10. A.G.Kaplan, Y.Dereli (2017), “Numerical solutions of the GEW equation using MLS collocation method”, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 28(1), 1750011, pp.1-23.
11. M.Mohammadi, R.Mokhtari (2011), “Solving the generalized regularized long wave equation on the basis of a reproducing kernel space”, *J. of Computation and Applied Mathematics*, Vol. 235, pp.4003-4014.
12. R.Mokhtari, M.Mohammadi (2010), “Numerical solution of GRLW equation using sinc-collocation method”, *Computer Physics Communications*, Vol. 181, pp.1266-1274.
13. E.Pindza and E.Maré (2014), “Solving the generalized regularized long wave equation using a distributed approximating functional method”, *International Journal of Computational Mathematics*, Vol. 2014, pp.1-12.
14. P.M.Preter (1975), “Splines and Variational Methods”, *Wiley, New York*.
15. T.Roshan (2011), “A Petrov – Galerkin method for solving the generalized equal width (GEW) equation”, *J. Comput.Appl.Math.*, Vol. 235, pp.1641-1652.
16. T.Roshan (2012), “A Petrov–Galerkin method for solving the generalized regularized long wave (GRLW) equation”, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 63, pp.943-956.
17. M.Zarebnia and R.Parvaz (2013), “Cubic B-spline collocation method for numerical solution of the Benjamin-Bona-Mahony-Burgers equation”, *International Journal of Mathematical, Computational, Physical, Electrical and Computer Engineering*, Vol. 7(3), pp.540-543.
18. H.Zeybek and S.Battal Gazi Karakoça (2017), “Application of the collocation method with B - spline to the GEW equation”, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, Vol. 46, pp.71-88.

PHƯƠNG PHÁP COLLOCATION VỚI CƠ SỞ B-SPLINE BẬC 5 GIẢI PHƯƠNG TRÌNH GRLW

Tóm tắt: Trong bài báo này, nghiệm số của phương trình GRLW sẽ tìm được dựa trên cơ sở sử dụng cơ sở B-spline bậc 5. Chúng ta chứng minh lược đồ sai phân ứng với phương trình là ổn định vô điều kiện theo phương pháp Von–Neumann. Thuật toán được giải minh họa với sóng đơn và thể hiện bằng đồ thị. Kết quả số chứng tỏ phương pháp đưa ra có thể giải phương trình trên.

Từ khóa: Phương trình GRLW, spline bậc 5, phương pháp Collocation, phương pháp sai phân hữu hạn.

PHƯƠNG PHÁP SỐ GIẢI MỘT SỐ BÀI TOÁN BIÊN TRONG MIỀN VÔ HẠN

Ngô Thúy Ngân

Trường Đại học Đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Lý thuyết về các bài toán biên trong miền vô hạn là một trong những lĩnh vực quan trọng của lý thuyết phương trình đạo hàm riêng hiện đại. Rất nhiều bài toán cơ học và vật lý được đặt ra trong miền vô hạn như bài toán truyền nhiệt trong thanh dài vô hạn, trong một dải vô hạn, bài toán lan truyền khí thải trong khí quyển bao la... Để giải quyết được bài toán trên, người ta thường hạn chế xét bài toán trong miền hữu hạn. Khi đó một loạt vấn đề được đặt ra là xét miền rộng bao nhiêu là đủ và đặt điều kiện biên trên biên ảo như thế nào để thu được nghiệm xấp xỉ tốt nghiệm của bài toán trong miền vô hạn. Vì vậy, việc tìm hiểu và nghiên cứu bài toán biên trong miền vô hạn là hết sức quan trọng. Đặc biệt, ở trong nước, đây là lĩnh vực còn tương đối mới mẻ, hầu như chưa có các tài liệu để cập một cách đầy đủ vấn đề này.

Từ khóa: Bài toán biên, miền vô hạn.

Nhận bài ngày 7.11.2017; gửi phản biện, chỉnh sửa và duyệt đăng ngày 20.12.2017

Liên hệ tác giả: Ngô Thúy Ngân; Email: ntngan@daihocthudo.edu.vn

1. MỞ ĐẦU

Trong bài báo này ta quan tâm đến hai loại bài toán: Bài toán biên và bài toán có trị ban đầu. Mỗi loại bài toán sẽ có cách giải riêng.

Để trình bày những khái niệm cơ bản của phương pháp sai phân, trước hết ta xét một số bài toán đơn giản đối với phương trình vi phân thường.

Tiếp đó, mục đích của bài báo đề xuất một phương pháp hệ vô hạn đối với các bài toán dừng, phương trình parabolic trong thanh nửa vô hạn và cách cài đặt của các thuật toán đó.

2. NỘI DUNG

2.1. Phương pháp sai phân giải bài toán có trị ban đầu

2.1.1. Mô hình bài toán

Cho khoảng $[x_0, X]$. Tìm hàm $u = u(x)$ xác định tại $[x_0, X]$ và thỏa mãn:

$$u' = f(x, u) \quad x_0 < x < X \quad (2.1)$$

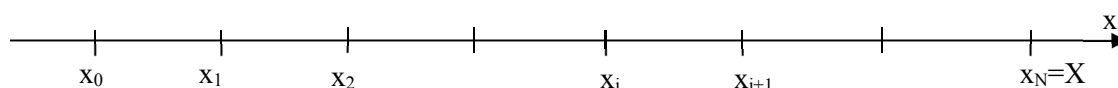
$$u(x_0) = \eta \quad (2.2)$$

Trong đó $f(x, u)$ là một hàm số cho trước và η là một số cho trước.

Giả sử bài toán (2.1), (2.2) có nghiệm $u = u(x)$ đủ trơn, nghĩa là nó có đạo hàm liên tục đến cấp mà ta cần.

2.1.2. Lưới sai phân

Ta chia đoạn $[x_0, X]$ thành N đoạn con bằng nhau, mỗi đoạn con dài $h = (b - a) / N$ bởi các điểm $x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \dots, N$ (hình 1). Tập các điểm x_i gọi là một lưới sai phân trên $[x_0, X]$ ký hiệu là Ω_h , mỗi điểm x_i gọi là một nút của lưới, h gọi là bước đi của lưới.



Hình 1. Lưới sai phân

Ta sẽ tìm cách tính gần đúng giá trị của nghiệm $u(x)$ tại các nút x_i của lưới Ω_h .

Đó là ý tưởng đầu tiên của phương pháp sai phân, còn gọi là phương pháp lưới.

2.1.3. Hàm lưới

Đó là những hàm số xác định tại các nút của lưới Ω_h . Giá trị của hàm lưới v tại nút x_i viết là v_i . Một hàm số $u(x)$ xác định tại mọi $x \in [a, b]$ sẽ tạo ra hàm lưới u có giá trị tại nút x_i là $u_i = u(x_i)$.

2.1.4. Đạo hàm lưới

Xét hàm số v . Đạo hàm lưới tiến cấp một của v , ký hiệu là v_x , có giá trị tại nút x_i là:

$$v_{xi} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}$$

Đạo hàm lưới lùi cấp một của v , ký hiệu v_x^- , có giá trị tại nút x_i là

$$v_{xi}^- = \frac{v_i - v_{i-1}}{h}$$

Khi h bé thì đạo hàm lưới “xấp xỉ” được đạo hàm thường.

2.2. Phương pháp sai phân giải bài toán truyền nhiệt một chiều

2.2.1. Mô hình bài toán

Cho các số a, b ; $a < b$ và $T > 0$. Xét:

$$Q_T = (a, b) \times (0, T]; \quad \bar{Q}_T = [a, b] \times [0, T]$$

Xét bài toán biên thứ nhất đối với phương trình truyền nhiệt:

Tìm hàm số $u(x, t)$ thỏa mãn:

$$Lu \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t), \quad (x, t) \in Q_T \quad (2.3)$$

$$u(x, 0) = g(x), \quad a < x < b \quad (2.4)$$

$$u(a, t) = g_a(t), \quad u(b, t) = g_b(t), \quad 0 < t \leq T \quad (2.5)$$

Trong đó $f(x, t)$, $g(x)$, $g_a(t)$, $g_b(t)$ là những hàm số cho trước.

Phương trình (2.3) là phương trình Parabol và gọi phương trình (2.3) là phương trình truyền nhiệt một chiều. Biến x gọi là biến không gian, còn biến t là biến thời gian.

Bài toán (2.3) - (2.5) là một bài toán vừa có điều kiện ban đầu (đó là điều kiện (2.4)), vừa có điều kiện biên (đó là điều kiện (2.5)); Đó là bài toán biên loại một đối với phương trình (2.3).

Giả sử bài toán (2.3) - (2.5) có nghiệm duy nhất đủ trơn trong \bar{Q}_T .

2.2.2. Lưới sai phân và hàm lưới

a) Lưới sai phân

Chọn hai số nguyên $N > 1$ và $M \geq 1$ và đặt:

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

$$\tau = \frac{T}{M}, \quad t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, 2, \dots, M$$

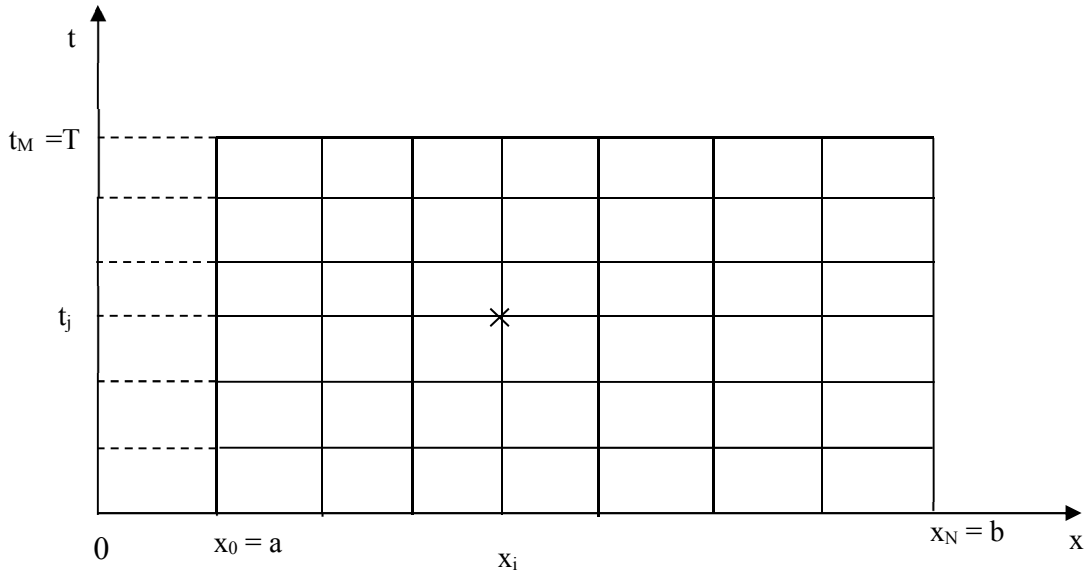
Ta chia miền Q_T thành ô bởi những đường thẳng $x = x_i$, $t = t_j$ (hình 1.2). Mỗi điểm (x_i, t_j) gọi là một nút, nút điểm (x_i, t_j) còn được viết gọn là (i, j) ; h gọi là bước đi theo không gian, τ gọi là bước đi theo thời gian.

Tập tất cả các nút tạo thành một lưới sai phân trên \bar{Q}_T .

Lưới trên $[a, b]$ (lưới v_i không gian): Tập:

$$\Omega_h = \{x_i \mid i = 1, 2, \dots, N-1\}$$

gọi là tập các nút trên $[a, b]$. Tập: $\Gamma_h = \{x_i | i = 0, N\}$ gọi là tập các nút biên trên $[a, b]$; nút 0 và nút N là hai nút biên. Tập: $\bar{\Omega}_h = \Omega_h \cup \Gamma_h$ gọi là một lưới sai phân trên $[a, b]$



Hình 2. Lưới sai phân và hàm lưới

Lưới trên $[0, T]$ (lưới thời gian): Tập:

$\Omega_\tau = \{t_j | j = 1, 2, \dots, M\}$ gọi là một lưới sai phân trên $(0, T]$. Tập:

$\bar{\Omega}_\tau = \{t_j | j = 0, 1, \dots, M\} = \Omega_\tau \cup \{t_0 = 0\}$ gọi là một lưới sai phân trên $[0, T]$; nút $t_0 = 0$ là nút ban đầu.

Tập: $\Omega_{hr} = \Omega_h \times \Omega_\tau$ là tập các nút trong trên \bar{Q}_T . Tập:

$\Gamma_{hr}^- = \{x_0 = a\} \times \Omega_\tau$ gọi là tập các nút biên trái. Tập:

$\Gamma_{hr}^+ = \{x_N = b\} \times \Omega_\tau$ gọi là tập các nút biên phải. Tập:

$\Gamma_{hr}^0 = \bar{\Omega}_h \times \{t_0 = 0\}$ gọi là tập các nút ban đầu.

Như vậy tập:

$$\bar{\Omega}_{hr} = \bar{\Omega}_h \times \bar{\Omega}_\tau = \Omega_{hr} \cup \Gamma_{hr}^- \cup \Gamma_{hr}^+ \cup \Gamma_{hr}^0 \text{ chính là lưới sai phân trên } \bar{Q}_T.$$

Ta phân lưới sai phân \bar{Q}_T thành nhiều lớp: Lớp thứ j tạo bởi các nút ứng cùng một giá trị thời gian t_j là:

$\bar{\Omega}_h^j = \{(x_i, t_j), i = 0, 1, \dots, N\}$; nút $(x_0, t_j) = (a, t_j)$ và $(x_N, t_j) = (b, t_j)$ là hai nút biên.

b) Hàm lưới

Hàm số xác định tại các nút của một lưới nào đó gọi là một hàm lưới. Giá trị của hàm lưới v tại nút (i, j) viết là v_i^j . Các giá trị của hàm lưới v tại các nút của lớp $\bar{\Omega}_h^j$ tạo thành hàm lưới v^j xác định trên $\bar{\Omega}_h$. Ta có:

$$v^j = (v_0^j, v_1^j, \dots, v_N^j) \in R^{N+1}$$

Trong tập các hàm lưới này ta xét hai loại chuẩn:

$$\|v^j\|_\infty = \max_{0 \leq i \leq N} \{ |v_i^j| \}; \quad \|v^j\|_2 = \sqrt{(v_0^j)^2 + (v_1^j)^2 + \dots + (v_N^j)^2}$$

Mỗi hàm số $u(x, t)$ xác định trên \bar{Q}_T có giá trị tại (i, j) là $u(x_i, t_j)$ và tạo ra hàm lưới u xác định bởi $u_i^j = u(x_i, t_j)$.

2.3. Bài toán truyền nhiệt trong thanh vô hạn

2.3.1. Bài toán Cauchy

Đặt bài toán

Xét phân bố nhiệt độ trong một thanh rất mảnh, dài vô hạn, đặt dọc theo trục x và không có nguồn nhiệt. Ta phải giải bài toán Cauchy sau:

Tìm hàm $u(x, t)$ thỏa mãn phương trình truyền nhiệt

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad -\infty < x < +\infty \quad 0 < t \leq T \quad (2.6)$$

$$u|_{t=0} = \varphi(x) \quad -\infty < x < +\infty \quad (2.7)$$

Hàm số $\varphi(x)$ liên tục trên toàn bộ trục x , và có thể phân tích nó thành chuỗi Fourier trên quãng $(-l, l)$, thỏa mãn điều kiện $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\xi)| d\xi < \infty$

2.3.2. Tính duy nhất nghiệm

Giả sử bài toán đó có hai nghiệm bị chặn u_1, u_2 : $|u_1(x, t)| \leq M$ $|u_2(x, t)| \leq M$ với $-\infty < x < +\infty$ $0 < t \leq T$. Hiệu $v = u_1 - u_2$ cũng thỏa mãn phương trình (2.6) và thỏa mãn điều kiện đầu $v|_{t=0} = 0$.

Ngoài ra trong toàn miền ta có $|v(x, t)| \leq |u_1(x, t)| + |u_2(x, t)| \leq 2M$.

Xét miền bị chặn $\{|x| \leq L, 0 \leq t \leq T\}$. Nhận thấy $W(x, t) = \frac{4M}{L^2} \left(\frac{x^2}{2} + a^2 t \right)$ là nghiệm của phương trình (2.1)

Ta có $W(x, 0) \pm v(x, 0) = W(x, 0) \geq 0$

$$W(\pm L, t) \pm v(\pm L, t) \geq 2M \pm v(\pm L, t) \geq 0$$

Áp dụng nguyên lý cực đại của hàm $W(x, t) \pm v(x, t)$ và miền bị chặn $\{|x| \leq L, 0 \leq t \leq T\}$.

Trong miền ấy, hàm $W(x, t) \pm v(x, t)$ đạt giá trị nhỏ nhất tại $t = 0$ hoặc tại $x = \pm L$. Vậy giá trị nhỏ nhất ấy không âm $W(x, t) \pm v(x, t) \geq 0$ hay $|v| \leq W$ tức là $|v| \leq \frac{4M}{L^2} \left(\frac{x^2}{2} + a^2 t \right)$.

Xét hàm v tại một điểm cố định (x_0, t_0) nào đó. Cho $L \rightarrow 0$ ta được $v(x_0, t_0) = 0$, vì (x_0, t_0) là một điểm tùy ý nên ta có $v(x, t) \equiv 0 \quad u_1 \equiv u_2$ (đpcm).

2.3.3. Giải bài toán Cauchy

Sử dụng phương pháp tách biến.

Ta sẽ tìm nghiệm của bài toán Cauchy (2.6), (2.7) dưới dạng $u(x, t) = X(x).T(t)$ thế biểu thức đó vào phương trình (2.6) ta đi đến hai phương trình sau:

$$T' + \lambda a^2 T = 0$$

$$X'' + \lambda X = 0$$

Trong đó λ là một hằng số.

Nghiệm của phương trình đầu là $T(t) = e^{-\lambda a^2 t}$. Vì tại mỗi điểm x của thanh nhiệt độ $u(x, t)$ không thể lớn hơn vô cùng khi $t \rightarrow +\infty \Rightarrow \lambda > 0$ và đặt $\lambda = \alpha^2$ ta được $T(t) = e^{-\alpha^2 a^2 t}$, $X(x) = A \cos \alpha x + B \sin \alpha x$, trong đó A, B là những hằng số có thể phụ thuộc tham số α , vậy $u_\alpha(x, t) = e^{-\alpha^2 a^2 t} [A(\alpha) \cos \alpha x + B(\alpha) \sin \alpha x]$ với $\forall \alpha$ cố định đều là nghiệm riêng của phương trình (2.6). Vậy ta được một hệ nghiệm riêng phụ thuộc tham số α .

Khi giải bài toán hỗn hợp với các điều kiện biên bằng không, ta có $\lambda = \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l} \right)^2$ $n = 1, 2, \dots$ Khi đó ta tìm nghiệm của bài toán dưới dạng chuỗi hàm. Ở đây λ có thể lấy mọi giá trị không âm, do đó tham số α có thể lấy mọi giá trị thuộc $(-\infty, +\infty)$.

Ta sẽ tìm nghiệm của bài toán dưới dạng:

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_{\alpha}(x,t) d\alpha = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 a^2 t} [A(\alpha) \cos \alpha x + B(\alpha) \sin \alpha x] d\alpha \quad (2.8)$$

Để thấy hàm $u(x,t)$ cho bởi (2.8) cũng là nghiệm riêng của phương trình (2.6). Nếu tích phân ấy hội tụ đều và có thể lấy đạo hàm dưới dấu tích phân đó một lần đối với t hai lần đối với x .

Ta chọn $A(\alpha), B(\alpha)$ sao cho (2.8) thỏa mãn điều kiện đầu (2.7)

$$u|_{t=0} = \varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} [A(\alpha) \cos \alpha x + B(\alpha) \sin \alpha x] d\alpha$$

$$\Rightarrow A(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) \cos \alpha \xi d\xi$$

$$B(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) \sin \alpha \xi d\xi$$

thế vào (2.3), ta suy ra
$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\alpha^2 a^2 t)} \cos \alpha (\xi - x) d\alpha \right] \varphi(\xi) d\xi \quad (2.9)$$

Đổi biến $\omega = \frac{\xi - x}{a\sqrt{t}}$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 a^2 t} \cos \alpha (\xi - x) d\alpha = \frac{1}{a\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma^2} \cos \sigma \omega d\sigma = \frac{1}{a\sqrt{t}} I(\omega).$$

Trong đó $I(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma^2} \cos \sigma \omega d\sigma \Rightarrow I'(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma e^{-\sigma^2} \sin \sigma \omega d\sigma$ (ở đây có thể lấy

đạo hàm dưới dấu tích phân được vì tích phân sau cùng hội tụ đều). Bằng cách lấy tích phân từng phần, ta được

$$\Rightarrow I'(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma e^{-\sigma^2} \sin \sigma \omega d\sigma = \frac{1}{2} e^{-\sigma^2} \sin \sigma \omega \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\omega}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma^2} \cos \sigma \omega d\sigma = -\frac{\omega}{2} I(\omega)$$

$$\frac{I'(\omega)}{I(\omega)} = -\frac{\omega}{2} \Rightarrow \ln I(\omega) = -\frac{\omega^2}{4} + \ln C \Rightarrow I(\omega) = C e^{-\frac{\omega^2}{4}}. \text{ Trong đó, } C \text{ là một hằng số}$$

tùy ý. Để xác định C ta cho $\omega=0 \Rightarrow I(0) = C$ lại vì $I(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma^2} d\sigma = \sqrt{\pi}$ (tích phân

poisson, tính $I(0)^2$ bằng cách chuyển sang tọa độ cực)

$$\Rightarrow I(\omega) = \sqrt{\pi} e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2} \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 a^2 t} \cos \alpha (\xi-x) d\alpha = \frac{\sqrt{\pi}}{a\sqrt{t}} e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2}.$$

Vậy công thức (2.10) có thể viết:
$$u(x,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2} d\xi \quad (2.10)$$

Chúng minh $\lim_{t \rightarrow 0} u(x,t) = \varphi(x)$.

Bằng cách đổi biến $s = \frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}$ suy ra ta có thể viết:

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x+2as\sqrt{t}) e^{-s^2} ds.$$

$$|u(x,t) - \varphi(x)| = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x+2as\sqrt{t}) - \varphi(x)| e^{-s^2} ds.$$

Vì $\varphi(x)$ là một hàm bị chặn, nên ta giả sử $\varphi(x) \leq M$, suy ra

$$|\varphi(x+2as\sqrt{t}) - \varphi(x)| \leq 2M.$$

Suy ra

$$|u(x,t) - \varphi(x)| \leq \frac{2M}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-N} e^{-s^2} ds + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-N}^{+N} |\varphi(x+2as\sqrt{t}) - \varphi(x)| e^{-s^2} ds + \frac{2M}{\sqrt{\pi}} \int_N^{+\infty} e^{-s^2} ds$$

Vì $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} ds$ hội tụ nên tồn tại một số $N > 0$ đủ lớn sao cho:

$$\frac{2M}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-N} e^{-s^2} ds \leq \frac{\varepsilon}{3}, \quad \frac{2M}{\sqrt{\pi}} \int_N^{+\infty} e^{-s^2} ds \leq \frac{\varepsilon}{3}.$$

Vậy
$$|u(x,t) - \varphi(x)| \leq \frac{2\varepsilon}{3} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-N}^{+N} |\varphi(x+2as\sqrt{t}) - \varphi(x)| e^{-s^2} ds \leq \frac{2\varepsilon}{3} +$$

$$\frac{\varepsilon}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-N}^{+N} e^{-s^2} ds \leq \frac{2\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} ds = \varepsilon. \text{ đpcm.}$$

Chúng minh nghiệm (2.10) phụ thuộc liên tục vào điều kiện ban đầu.

Gọi $\bar{u}(x, t)$ là nghiệm của phương trình (2.6) thỏa mãn điều kiện ban đầu $\bar{u}|_{t=0} = \bar{\varphi}(x)$. Khi đó hiệu $u(x, t) - \bar{u}(x, t)$ là nghiệm của (2.6) thỏa mãn $(u - \bar{u})|_{t=0} = \varphi(x) - \bar{\varphi}(x)$.

$$u(x, t) - \bar{u}(x, t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} [\varphi(\xi) - \bar{\varphi}(\xi)] e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2} d\xi. \quad \text{Nếu } |\varphi(x) - \bar{\varphi}(x)| < \varepsilon \quad \forall x$$

thì

$$|u(x, t) - \bar{u}(x, t)| \leq \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\xi) - \bar{\varphi}(\xi)| e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2} d\xi \leq \varepsilon \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{\xi-x}{2a\sqrt{t}}\right)^2} d\xi$$

hay $|u(x, t) - \bar{u}(x, t)| \leq \varepsilon$ (đpcm).

2.4. Phương pháp hệ vô hạn đối với các bài toán dừng

Trong phần này sẽ trình bày chi tiết phương pháp hệ vô hạn trên mô hình bài toán truyền nhiệt dừng trong thanh nửa vô hạn:

$$-(ku')' + du = f(x), \quad x > 0, \quad (2.11)$$

$$u(0) = \mu_0, \quad u(+\infty) = 0$$

với các giả thiết thông thường

$$K_0 \leq k(x) \leq K_1, \quad D_0 \leq d(x) \leq D_1, \quad f(x) \in L^2(0, \infty) \cap C(0, \infty). \quad (2.12)$$

Nhận xét: Trong trường hợp k, d là các hằng số và $f(x)$ có giá compact là $[0, L]$ người ta dễ dàng tìm được điều kiện biên nhân tạo chính xác tại $x = L$ nhờ ánh xạ Dirichlet-to-Neumann. Khi f không có giá compact nhưng có dạng đặc biệt sao cho có thể tìm được nghiệm riêng của phương trình

$$-u'' + cu = f \quad (c = \text{constant} > 0)$$

điều kiện biên nhân tạo chính xác cũng có thể thiết lập được. Trong trường hợp tổng quát khi k, d, f chỉ thỏa mãn điều kiện (2.11) và hạn chế xét bài toán trong một khoảng hữu hạn nào đó $[0, L]$ người ta không tìm được điều kiện chính xác tại $x = L$. Để giải quyết bài toán (2.11), (2.12) chúng tôi đưa vào lưới điểm cách đều $\{x_i = ih, i = 0, 1, \dots\}$ và xét lược đồ sai phân:

$$\begin{aligned} -(ay_{\bar{x}})_x + dy &= f_i \quad i = 1, 2, \dots \\ y_0 &= \mu_0, \quad y_i \rightarrow 0, \quad i \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.13)$$

trong đó:

$$a_i = k(x_i - h/2), \quad d_i = d(x_i), \quad f_i = f(x_i).$$

Viết lại lược đồ sai phân (2.13) trong dạng hệ phương trình sai phân ba điểm thông thường

$$\begin{aligned} -A_i y_{i-1} + C_i y_i - B_i y_{i+1} &= f_i, \quad i=1, 2, \dots \\ y_0 &= \mu_0, \quad y_i \rightarrow 0, \quad i \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ở đây:

$$A_i = \frac{a_i}{h^2}, \quad B_i = \frac{a_{i+1}}{h^2}, \quad C_i = A_i + B_i + d_i. \quad (2.15)$$

Đặt:

$$\begin{aligned} p_0 &= q_0 = 0, \quad r_0 = \mu_0, \\ p_i &= \frac{A_i}{C_i}, \quad q_i = \frac{B_i}{C_i}, \quad r_i = \frac{f_i}{C_i} \quad (i=1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (2.16)$$

ta viết hệ (2.14) trong dạng chính tắc của hệ vô hạn như sau:

$$\begin{aligned} y_i &= p_i y_{i-1} + q_i y_{i+1} + r_i, \quad i=1, 2, \dots \\ y_i &\rightarrow 0, \quad i \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.17)$$

Ta có:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 1 - p_0 - q_0 = 1 \text{ và} \\ \rho_i &= 1 - p_i - q_i = \frac{d_i}{C_i} > 0 \quad (i=1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Như vậy, hệ (2.17) là chính quy. Chính xác hơn, nó là hệ hoàn toàn chính qui vì dễ dàng kiểm tra rằng

$$\rho_i \geq \frac{D_0}{D_1 + 2K_1/h^2} \quad (i=1, 2, \dots) \quad (2.19)$$

Bây giờ xét $\frac{r_i}{\rho_i}$. Từ (2.16), (2.17), ta có $\frac{r_i}{\rho_i} = \frac{f_i}{d_i}$. Từ các giả thiết (2.11) suy ra rằng:

$\frac{f_i}{d_i} \rightarrow 0$, do đó tồn tại hằng số k^* sao cho $|f_i| \leq K^* d_i$ với mọi i . Vì thế điều kiện của định

lý 2 được thỏa mãn và nghiệm vô hạn của (2.12) có thể tìm được bằng phương pháp cắt cụt.

Vấn đề đặt ra là cắt cụt hệ vô hạn đến cỡ nào để thu được nghiệm gần đúng với sai số cho trước. Dưới đây sẽ trả lời câu hỏi trên.

Ta sẽ tìm nghiệm của hệ (2.12) trong dạng

$$y_i = \alpha_{i+1}y_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad i = 0, 1, \dots, \quad (2.20)$$

trong đó các hệ số được tính như sau:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0, \quad \beta_1 = \mu_0, \\ \alpha_{i+1} &= \frac{q_i}{1 - p_i\alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{r_i + p_i\beta_i}{1 - p_i\alpha_i}, \quad i = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.21)$$

Tương tự như trong trường hợp hệ phương trình sai phân ba điểm hữu hạn có thể chứng minh bằng quy nạp rằng $0 \leq \alpha_i < 1$ ($i = 0, 1, \dots$). Do đó, từ điều kiện $y_i \rightarrow 0$ và từ (2.15) suy ra $\beta_i \rightarrow 0$ khi $i \rightarrow \infty$.

Xét hệ cắt cụt

$$\begin{aligned} \bar{y}_i &= p_i\bar{y}_{i-1} + q_i\bar{y}_{i+1} + r_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N \\ \bar{y}_i &= 0, \quad i \geq N + 1 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Định lý 4: Cho trước sai số $\varepsilon > 0$. Nếu

$$\frac{|\beta_i|}{1 - \alpha_i} \leq \varepsilon, \quad i \geq N + 1 \quad (2.23)$$

thì ta có đánh giá sau đối với sai số của nghiệm của hệ vô hạn (2.12) so với nghiệm của hệ cắt cụt (2.17)

$$\sup_i |y_i - \bar{y}_i| \leq \varepsilon. \quad (2.24)$$

Chứng minh: Ký hiệu $z_i = y_i - \bar{y}_i$. Khi đó dễ dàng kiểm tra rằng z_i thỏa mãn hệ vô hạn sau

$$z_i = \alpha_{i+1}z_{i+1} + b_i, \quad i = 0, 1, \dots, \quad (2.25)$$

trong đó:

$$b_i = \begin{cases} 0, & i = 0, \dots, N, \\ \beta_{i+1} & i \geq N + 1. \end{cases}$$

Hệ này là hệ chính quy vì đối với nó $\rho_i = 1 - \alpha_{i+1} > 0$ do $0 \leq \alpha_i \leq 1$ ($i = 0, 1, \dots$) như đã nói ở trên. Từ điều kiện (2.18) suy ra $|b_i| \leq \varepsilon \rho_i$ với mọi $i = 0, 1, \dots$. Do đó, theo lý thuyết hệ vô hạn ta có đánh giá $|z_i| \leq \varepsilon$, $i = 0, 1, \dots$. Định lý được chứng minh.

Nhận xét: Định lý trên cho phép ta trong quá trình tính các hệ số truy đuổi (2.16) xác định khi nào cắt cụt của hệ vô hạn (2.12) để đảm bảo rằng nghiệm của hệ cắt cụt sai khác so với nghiệm của hệ vô hạn không ε quá cho trước.

Dưới đây chúng ta xét một ví dụ minh họa hiệu quả của việc sử dụng định lý trên.

Ví dụ. Xét bài toán:

$$-\left((1 + \sin^2 x)u'\right)' + \frac{1}{1+x}u = e^{-x}(\sin 2x - 1, 5 + \cos 2x/2 + \frac{1}{1+x})$$

$$u(0) = 1, \quad u(+\infty) = 0.$$

Bài toán này có nghiệm đúng $u(x) = e^{-x}$.

Xây dựng hệ vô hạn (3.12) và cắt cụt nó khi định lý trên được thỏa mãn. Nghiệm của hệ cắt cụt được so sánh với các nghiệm chính xác. Kết quả tính toán trên lưới với $h=0.1$ và $h=0.05$ được cho trong các bảng dưới đây, trong đó N là cỡ của hệ được tự động cắt cụt, $SS = \max_{0 \leq i \leq N} |\bar{y}_i - u_i|$, $u_i = u(x_i)$.

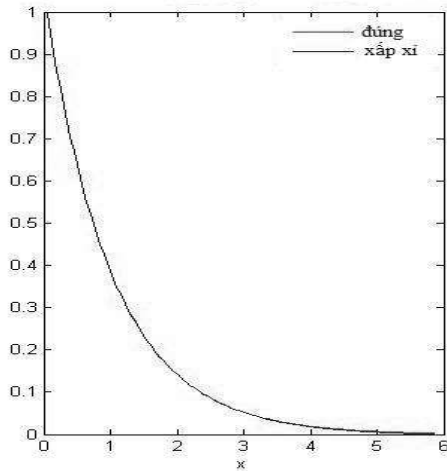
Bảng 1. $h = 0.1$

ε	N	SS
0.01	59	0.0027
0.001	86	2.7761e-4
0.0001	116	2.8224e-4

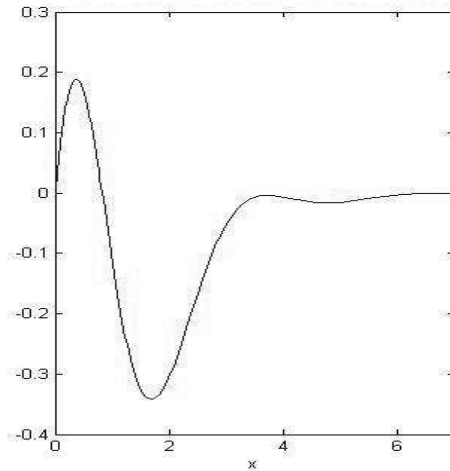
Bảng 2. $h = 0.05$

ε	N	SS
0.01	117	0.0029
0.001	170	2.0347e-4
0.0001	224	7.0619e-5

Đồ thị của nghiệm đúng, nghiệm gần đúng với $h=0.05$, $\varepsilon=0.01$ và hàm vế phải cho trong các Hình 3 và Hình 4.

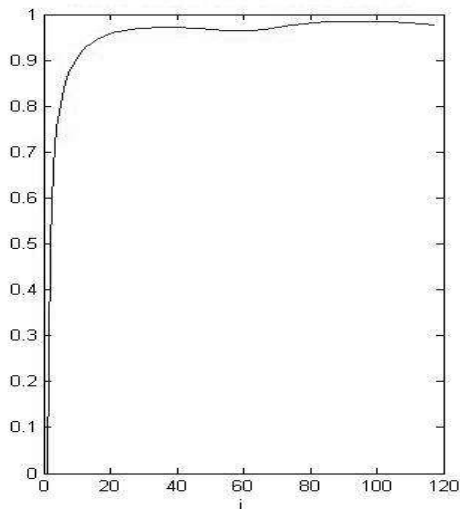


Hình 3. Nghiệm đúng và nghiệm xấp xỉ với $h = 0.05$ và $\varepsilon = 0.01$

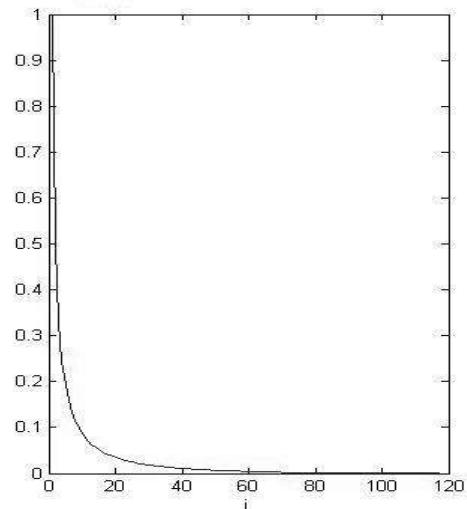


Hình 4. Hàm vế phải với $h = 0.05$ và $\varepsilon = 0.01$

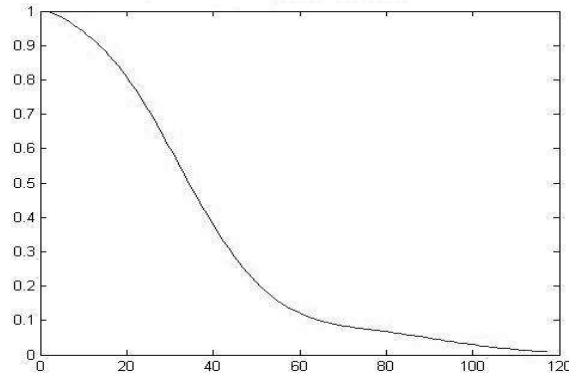
Trong quá trình tính toán ta nhận thấy rằng các hệ số $\beta_i \rightarrow 0$ rất nhanh và các hệ số α_i có xu thế dần tới 1 nhưng tỷ số $\beta_i/(1-\alpha_i)$ tiến tới 0 cũng khá nhanh. Đồ thị các hệ số và tỷ số của chúng cho trong các Hình 5 – 7.



Hình 5. Các hệ số α với $h = 0.05$ và $\varepsilon = 0.01$



Hình 6. Các hệ số β với $h = 0.05$ và $\varepsilon = 0.01$



Hình 7. Tỷ số $\beta/(1-\alpha)$ với $h = 0.05$ và $\varepsilon = 0.01$

2.5. Phương trình parabolic trong thanh nửa vô hạn

Trong mục này chúng ta sẽ áp dụng kỹ thuật hệ vô hạn đã đề xuất ở mục trước cho bài toán biên-giá trị đầu cho phương trình parabolic.

a) Đầu tiên ta xét bài toán truyền nhiệt với hệ số hằng

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < +\infty, t > 0 \\ u(x, 0) &= 0, \quad u(0, t) = 1, \quad u(+\infty, t) = 0. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Bài toán này có nghiệm đúng là

$$u(x, t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x/2\sqrt{kt}}^{+\infty} \exp(-\xi^2) d\xi. \quad (2.27)$$

Sử dụng lược đồ sai phân ẩn thuần túy trên lưới đều với bước lưới không gian là h và bước lưới thời gian là τ ta dẫn được bài toán về hệ vô hạn trên mỗi lớp thời gian $j+1$

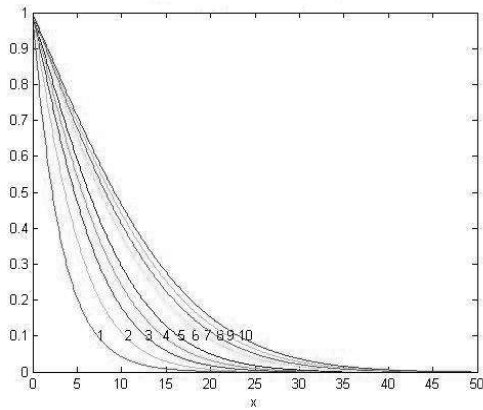
$$\begin{aligned} -ry_{i-1}^{j+1} + (1+2r)y_i^{j+1} - ry_{i+1}^{j+1} &= y_i^j, \quad i = 1, 2, \dots \\ y_0^{j+1} &= 1, \quad y_i^{j+1} \rightarrow 0, i \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (2.28)$$

trong đó $r = k\tau/h^2$, i, j là chỉ số nút theo không gian và thời gian.

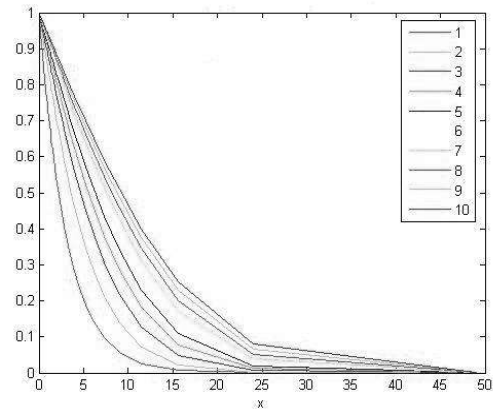
Hệ (2.28) được xử lý tương tự như hệ (2.9).

Để thấy được tính ưu việt của phương pháp hệ vô hạn so với phương pháp lưới tựa đều được đề xuất và ứng dụng từ năm 2001 chúng tôi đã thực hiện tính toán theo hai phương pháp: hệ vô hạn trên lưới đều và hệ hữu hạn trên lưới tựa đều $x_i = \frac{i}{N-i}$ ($i = 0, \dots, N$) với $N = 50$. Do mật độ các nút tựa đều rất thưa khi $i \geq 25$ nên các profile thu được bị gãy khúc. Các hình 8 và hình 9 cho các profile tính bằng hai phương pháp nêu trên với

$k = 10, \varepsilon = 0.001$. Từ các hình này ta thấy rõ ràng là kết quả tính trên lưới đều sử dụng hệ vô hạn cho kết quả tốt hơn.



Hình 8. Profiles $u(x, j\tau)$ với các j khác nhau và $\tau = 1$ tính bằng hệ vô hạn



Hình 9. Profiles $u(x, j\tau)$ với các j khác nhau và $\tau = 1$, sử dụng lưới tựa đều

b) Bài toán ô nhiễm khí quyển dừng do một nguồn điểm có cường độ không đổi Q gây ra tại điểm $(0, H)$ đã được dẫn về bài toán

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} - w_g \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} v \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi = 0, \quad x > 0, \quad (2.29)$$

$$u \varphi = Q \delta(z - H), \quad x = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \alpha \varphi, \quad z = 0, \quad \varphi \rightarrow 0, \quad z \rightarrow \infty, \quad (2.31)$$

trong đó φ là nồng độ khí thải, u là vận tốc gió theo chiều x , w_g vận tốc rơi của khí thải do trọng trường, f cường độ nguồn thải, $\sigma \geq 0$ hệ số biến đổi, v hệ số khuếch tán theo chiều thẳng đứng, $\alpha \geq 0$ hệ số hấp thụ của mặt đất. Lời giải số bài toán trên sử dụng lưới đều và hệ vô hạn đã được nghiên cứu, ở đó định lý tương tự như Định lý 4 với các giả thiết là tồn tại số N sao cho $0 < \beta_i \leq \varepsilon, 0 < \alpha_i \leq \mu < 1$ với mọi $i > N$ đã được chứng minh.

Một điều lý thú đã được chứng minh trong [2.29] là nếu hạn chế xét bài toán ô nhiễm trong miền có độ cao hữu hạn $0 \leq z \leq Z$ và đặt điều kiện biên nhân tạo $\varphi(x, Z) = 0$ thì ta được nghiệm “non”, còn nếu đặt $\frac{\partial \varphi}{\partial z}(x, Z) = 0$ thì ta được nghiệm “già” hơn nghiệm bài toán với điều kiện biên $\varphi(x, +\infty) = 0$.

3. KẾT LUẬN

Bài báo đã đề cập đến lý thuyết về phương pháp sai phân giải bài toán biên và bài toán giá trị đầu, nghiên cứu phương pháp hệ vô hạn các phương trình đại số giải một số bài toán một chiều không gian phụ thuộc hoặc không phụ thuộc thời gian, trong đó cốt lõi là cách xác định khi nào thì cắt cụt hệ vô hạn để đảm bảo thu được nghiệm gần đúng với sai số cho trước. Phương pháp này thể hiện ưu thế vượt trội so với phương pháp lưới tựa đều do các nhà toán học Nga mới đề xuất năm 2001 trong các bài toán phụ thuộc thời gian, đặc biệt là các bài toán truyền sóng.

Trong khoảng thời gian ngắn, bài báo chưa thể đề cập đến nhiều thuật toán trong lý thuyết toán học tính toán cũng như nhiều dạng bài toán biên khác nhau.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Đặng Quang Á (2007), “Phương pháp hệ vô hạn các phương trình đại số đối với các bài toán trong miền không giới nội”, *Kỷ yếu Hội thảo Khoa học quốc gia lần III FAIR*, Nha Trang.
2. E.A.Alshina, N.N.Kalitkin and S.L.Panchenko (2002), “Numerical solution of boundary value problems in unbounded domains”, *Math. Modelling*, Vol.14, No 11, pp.10-22.
3. A.B.Alshin, E.A.Alshina, A.A.Boltnev, O.A.Kacher and P.V.Koryakin (2004), “Numerical solution of initial-boundary value problems for Sobolev-type equations on quasi-uniform grids”. *Comput. Math. and Math. Phys.*, 44(3), pp.490-510.
4. A.Samarskii (2001), *The Theory of Difference Schemes*. New York: Marcel Dekker.
5. T.Colonius (2004), “Modeling Artificial Boundary Conditions for Compressible Flow”. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36, pp.315-345.

THE METHODS OF SETTLING A NUMBER OF FINANCIAL BONDS

Abstract: *The theory of boundary boundary problems in the infinite domain is one of the important areas of modern differential equation theory. Many mechanical and physical mathematical problems are posed in infinite domain, such as heat transfer in an infinite bar, in an infinite range, the problem of spreading the exhaust in the vast atmosphere... The problem is solved in a finite domain. Then a series of issues are set out to determine how large a domain is and how to place the boundary conditions on the virtual boundary to obtain an approximate solution of the problem in the infinite domain. Therefore, studying and researching boundary problems in infinite domain is very important. Particularly in the country, this is a relatively new field, almost no documents adequately addressed this issue.*

Keywords: *Boundary problem, infinite domain.*

A NEW METHOD FOR SOLVING THE mGRLW EQUATION USING A BASE OF QUINTIC B - SPLINE

Nguyen Van Tuan, Nguyen Thi Tuyet
Hanoi Metropolitan University

Abstract: In this paper, numerical solution of a modified generalized regularized long wave (mGRLW) equation are obtained by a new method based on collocation of quintic B – splines. Applying the von – Neumann stability analysis, the proposed method is shown to be unconditionally stable. The numerical algorithm is applied to some test problems consisting of a single solitary wave. The numerical result shows that the present method is a successful numerical technique for solving the mGRLW equations.

Keywords: mGRLW equation, quintic B-spline, collocation method, finite differences

Email: nvtuan@daihocthudo.edu.vn

Received 01 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

In this work, we consider the solution of the mGRLW equation

$$u_t + \alpha u_x + \varepsilon u^p u_x - \mu u_{xx} - \beta u_{xxt} = 0, \quad (1)$$

$x \in [a, b], t \in [0, T]$, with the initial condition

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in [a, b], \quad (2)$$

and the boundary condition

$$\begin{cases} u(a, t) = 0, u(b, t) = 0 \\ u_x(a, t) = u_x(b, t) = 0 \\ u_{xx}(a, t) = u_{xx}(b, t) = 0, \end{cases} \quad (3)$$

where $\alpha, \varepsilon, \mu, \beta, p$ are constants, $\mu > 0, \beta > 0, p$ is an integer.

The equation (1) is called the modified generalized regularized long wave (mGRLW) equation if $\mu = 0$, the generalized regularized long wave (GRLW) equation if $\mu = 0$, the regularized long wave (RLW) equation or Benjamin – Bona – Mohony (BBM) equation if $\beta = 1, p = 1$, etc.

Equation (1) describes the mathematical model of wave formation and propagation in fluid dynamics, turbulence, acoustics, plasma dynamics, ect. So in recent years, researchers solve the GRLW and mGRLW equation by both analytic and numerical methods.

In this present work, we have applied the quintic B – spline collocation method to the mGRLW equations. This work is built as follow: in Section 2, numerical scheme is presented. The stability analysis of the method is established in Section 3. The numerical results are discussed in Section 4. In the last Section, Section 5, conclusion is presented.

2. QUINTIC B – SPLINE COLLOCATION METHOD

The interval $[a, b]$ is partitioned in to a mesh of uniform length $h = x_{i+1} - x_i$ by the knots $x_i, i = \overline{0, N}$ such that:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b.$$

Our numerical study for mGRLW equation using the collocation method with quintic B-spline is to find an approximate solution $U(x, t)$ to exact solution $u(x, t)$ in the form:

$$U(x, t) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i(t) B_i(x), \tag{4}$$

$B_i(x)$ are the quintic B-spline basis functions at knots, given by [4].

$$B_i(x) = \frac{1}{h^5} \begin{cases} (x - x_{i-3})^5, & x_{i-3} \leq x \leq x_{i-2} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5, & x_{i-2} \leq x \leq x_{i-1} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5, & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - \\ \quad - 20(x - x_i)^5, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - 20(x - x_i)^5 + \\ \quad + 15(x - x_{i+1})^5, & x_{i+1} \leq x \leq x_{i+2} \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 - 20(x - x_i)^5 + \\ \quad + 15(x - x_{i+1})^5 - 6(x - x_{i+2})^5, & x_{i+2} \leq x \leq x_{i+3} \\ 0, & x < x_{i-3} \cup x > x_{i+3}. \end{cases}$$

The value of $B_i(x)$ and its derivatives may be tabulated as in Table 1.

$$\begin{aligned} U_i &= \delta_{i-2} + 26\delta_{i-1} + 66\delta_i + 26\delta_{i+1} + \delta_{i+2} \\ U'_i &= \frac{5}{h} (-\delta_{i-2} - 10\delta_{i-1} + 10\delta_{i+1} + \delta_{i+2}) \\ U''_i &= \frac{20}{h^2} (\delta_{i-2} + 2\delta_{i-1} - 6\delta_i + 2\delta_{i+1} + \delta_{i+2}). \end{aligned}$$

Table 1. B_i, B'_i , and B''_i at the node points

x	x_{i-3}	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	x_{i+3}
$B_i(x)$	0	1	26	66	26	1	0
$B'_i(x)$	0	$\frac{5}{h}$	$\frac{50}{h}$	0	$-\frac{50}{h}$	$-\frac{5}{h}$	0
$B''_i(x)$	0	$\frac{20}{h^2}$	$\frac{40}{h^2}$	$-\frac{120}{h^2}$	$\frac{40}{h^2}$	$\frac{20}{h^2}$	0

Using the finite difference method, from the equation (1), we have:

$$\frac{(u - \beta u_{xx})^{n+1} - (u - \beta u_{xx})^n}{\Delta t} + \varepsilon(u^{p-1})^n (u_x)^n \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \alpha \frac{(u_x)^{n+1} + (u_x)^n}{2} - \mu \frac{u_{xx}^{n+1} + u_{xx}^n}{2} = 0. \quad (5)$$

Using the value given in Table 1, Eq. (5) can be calculated at the knots $x_i, i = \overline{0, N}$ so that at $x = x_0$, Eq. (5) reduces to

$$a_{m1} \delta_{m-2}^{n+1} + a_{m2} \delta_{m-1}^{n+1} + a_{m3} \delta_m^{n+1} + a_{m4} \delta_{m+1}^{n+1} + a_{m5} \delta_{m+2}^{n+1} = b_{m1} \delta_{m-2}^n + b_{m2} \delta_{m-1}^n + b_{m3} \delta_i^n + b_{m4} \delta_{i+1}^n + b_{m5} \delta_{i+2}^n, \quad (6)$$

where:

$$\begin{aligned} a_{m1} &= 2h^2 - 5h\alpha\Delta t - 20\mu\Delta t - 40\beta + L_1^{p-1}L_2, \\ a_{m2} &= 52h^2 - 50h\alpha\Delta t - 40\mu\Delta t - 80\beta + 26L_1^{p-1}L_2, \\ a_{m3} &= 132h^2 + 120\mu\Delta t + 240\beta + 66L_1^{p-1}L_2, \\ a_{m4} &= 52h^2 + 50h\alpha\Delta t - 40\mu\Delta t - 80\beta + 26L_1^{p-1}L_2, \\ a_{m5} &= 2h^2 + 5h\alpha\Delta t - 20\mu\Delta t - 40\beta + L_1^{p-1}L_2, \\ b_{m1} &= 2h^2 + 5h\alpha\Delta t + 20\mu\Delta t - 40\beta - L_1^{p-1}L_2, \\ b_{m2} &= 52h^2 + 50h\alpha\Delta t + 40\mu\Delta t - 80\beta - 26L_1^{p-1}L_2, \\ b_{m3} &= 132h^2 - 120\mu\Delta t + 240\beta - 66L_1^{p-1}L_2, \\ b_{m4} &= 52h^2 - 50h\alpha\Delta t + 40\mu\Delta t - 80\beta - 26L_1^{p-1}L_2, \\ b_{m5} &= 2h^2 - 5h\alpha\Delta t + 20\mu\Delta t - 40\beta - L_1^{p-1}L_2, \\ L_1 &= \delta_{m-2}^n + 26\delta_{m-1}^n + 66\delta_m^n + 26\delta_{m+1}^n + \delta_{m+2}^n, \end{aligned}$$

$$L_2 = \frac{5}{h} (-\delta_{m-2}^n - 10\delta_{m-1}^n + 10\delta_{m+1}^n + \delta_{m+2}^n).$$

The system (6) consists of $N + 1$ equations in the $N + 5$ knowns $(\delta_{-2}, \delta_{-1}, \dots, \delta_{N+1}, \delta_{N+2})^T$.

To get a solution to this system, we need four additional constraints. These constraints are obtained from the boundary conditions (3) and can be used to eliminate from the system (6). Then, we get the matrix system equation:

$$A(\delta^n)\delta^{n+1} = B(\delta^n)\delta^n + r, \tag{7}$$

where the matrix $A(\delta^n)$, $B(\delta^n)$ are penta-diagonal $(N + 1) \times (N + 1)$ matrices and r is the $N + 1$ dimensional column vector. The algorithm is then used to solve the system (7). We apply first the initial condition:

$$U(x, 0) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_i^0 B_i(x), \tag{8}$$

then we need that the approximately solution is satisfied following conditions

$$\begin{cases} U(x_i, 0) = f(x_i) \\ U_x(x_0, 0) = U_x(a, 0) = 0 \\ U_x(x_N, 0) = U_x(b, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_0, 0) = U_{xx}(a, 0) = 0 \\ U_{xx}(x_N, 0) = U_{xx}(b, 0) = 0 \\ i = 0, 1, \dots, N. \end{cases} \tag{9}$$

Eliminating $\delta_{-2}^0, \delta_{-1}^0, \delta_{N+1}^0$ and δ_{N+2}^0 from the system (11), we get:

$$A\delta^0 = r,$$

where A is the penta-diagonal matrix given by

$$A = \begin{pmatrix} 54 & 60 & 6 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{101}{4} & \frac{135}{2} & \frac{105}{4} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \frac{105}{4} & \frac{135}{2} & \frac{101}{4} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 6 & 60 & 54 \end{pmatrix}$$

and $\delta^0 = (\delta_0^0, \delta_1^0, \dots, \delta_N^0)^T, r = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N))^T$.

3. STABILITY ANALYSIS

To apply the Von-Neumann stability for the system (6), we must first linearize this system.

We have:

$$\delta_j^n = \xi^n \exp(i\gamma jh), \quad i = \sqrt{-1}, \quad (10)$$

where γ is the mode number and h is the element size.

Being applicable to only linear schemes the nonlinear term $U^p U_x$ is linearized by taking U as a locally constant value c . The linearized form of proposed scheme is given as

$$p_1 \delta_{i-2}^{n+1} + p_2 \delta_{i-1}^{n+1} + p_3 \delta_i^{n+1} + p_4 \delta_{i+1}^{n+1} + p_5 \delta_{i+2}^{n+1} = p'_1 \delta_{i-2}^n + p'_2 \delta_{i-1}^n + p'_3 \delta_i^n + p'_4 \delta_{i+1}^n + p'_5 \delta_{i+2}^n \quad (11)$$

where

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 - M - N_1 - P, \quad p_2 = 26 - 10M - 2N_1 - 2P, \quad p_3 = 66 + 6N_1 + 6P, \\ p_4 &= 26 + 10M - 2N_1 - 2P, \quad p_5 = 1 + M - N_1 - P, \\ p'_1 &= 1 + M + N_1 - P, \quad p'_2 = 26 + 10M + 2N_1 - 2P, \quad p'_3 = 66 - 6N_1 + 6P, \\ p'_4 &= 26 - 10M + 2N_1 - 2P, \quad p'_5 = 1 - M + N_1 - P, \end{aligned}$$

$$M = \frac{5(\alpha + \varepsilon c^p)\Delta t}{h}, \quad N_1 = \frac{10\mu\Delta t}{h^2}, \quad P = \frac{10\beta}{h^2}.$$

Substitution of $\delta_j^n = \exp(i\gamma jh)\xi^n$, into Eq. (11) leads to

$$\xi[p_1 \exp(-2i\gamma h) + p_2 \exp(-i\gamma h) + p_3 + p_4 \exp(i\gamma h) + p_5 \exp(2i\gamma h)] = p'_5 \exp(-2i\gamma h) + p'_4 \exp(-i\gamma h) + p'_3 + p'_2 \exp(i\gamma h) + p'_1 \exp(2i\gamma h). \quad (12)$$

Simplifying Eq. (13), we get:

$$\xi = \frac{A_1 - iB}{C + iB},$$

where

$$\begin{aligned} A_1 &= 2(1 + N_1 - P) \cos(2\phi) + 4(13 + N_1 - P) \cos\phi + 66 - 6N_1 + 6P, \\ B &= 2M(\sin(2\phi) + 10), \\ C &= 2(1 - N_1 - P) \cos(2\phi) + 4(13 - N_1 - P) \cos\phi + 66 + 6N_1 + 6P, \\ \phi &= \gamma h. \end{aligned}$$

It is clear that $C^2 \geq A_1^2$. So $|\xi| \leq 1$.

Therefore, the linearized numerical scheme for the mGRLW equation is unconditionally stable.

4. NUMERICAL EXAMPLE

We now obtain the numerical solution of the mGRLW equation for some problems. To show the efficiency of the present method for our problem in comparison with the exact solution, we report L_∞ and L_2 using formula:

$$L_\infty = \max_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|,$$

$$L_2 = \left(h \sum_i |U(x_i, t) - u(x_i, t)|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

where U is numerical solution and u denotes exact solution.

Three invariants of motion which correspond to the conservation of mass, momentum, and energy are given as:

$$I_1 = \int_a^b u dx, I_2 = \int_a^b (u^2 + \beta u_x^2) dx, I_3 = \int_a^b \left(u^4 - \frac{2\beta(p+1)}{\varepsilon} u_x^2 \right) dx.$$

Using the method [8], we find the exact solution of the mGRLW is:

$$u(x, t) = \left\{ \rho \left[1 + \frac{3 \sinh(kx + \omega t + x_0) + 5 \cosh(kx + \omega t + x_0)}{3 \cosh(kx + \omega t + x_0) + 5 \sinh(kx + \omega t + x_0)} \right] \right\}^{\frac{2}{p}},$$

where $\rho = \sqrt{\frac{1}{8\beta\varepsilon(p+4)} (\alpha\beta(p^2 + 5p + 4 + (p+1)A_2))}$, $k = \frac{1}{8\beta\mu(p+2)} (-\alpha\beta(p+4) + A_2)$,

$$\omega = \frac{-p\mu}{2\beta(p+4)}, A_2 = \sqrt{\beta(p+4)[\alpha^2\beta(p+4) - 8\mu^2]}.$$

The initial condition of Equation (1) given by:

$$f(x) = \left\{ \rho \left[1 + \frac{3 \sinh(kx + x_0) + 5 \cosh(kx + x_0)}{3 \cosh(kx + x_0) + 5 \sinh(kx + x_0)} \right] \right\}^{\frac{2}{p}}.$$

We take $p = 2$, $\alpha = 2$, $\varepsilon = 24$, $\mu = 1$, $\beta = 1$, $a = 0$, $b = 100$, $x_0 = 40$, $\Delta t = 0.025$ and $\Delta t = 0.01$, $h = 0.1$ and $h = 0.2$, $t \in [0, 20]$. The values of the variants and the error norms at several times are listed in *Table 2* and *Table 3*. From *Table 2*, we see that, changes of variants $I_1 \times 10^3$, $I_2 \times 10^4$ and $I_3 \times 10^5$ from their initial value are less than 0.2, 0.5 and

0.2, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.214669×10^{-4} and 0.027200×10^{-4} , respectively.

In Table 3, changes of variants $I_1 \times 10^4, I_2 \times 10^5$ and $I_3 \times 10^6$ from their initial value are less than 0.3, 0.5 and 0.2, respectively. The error norms L_2, L_∞ are less than 0.236126×10^{-5} and 0.029150×10^{-5} , respectively.

Table 2. Variants and error norms of the mGRLW equation with $p = 2, \alpha = 2,$
 $\varepsilon = 24, \mu = 1, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.025, h = 0.1, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	11.364457	11.364400	11.364348	11.364304	11.364267
I_2	1.290217	1.290206	1.290104	1.290184	1.290175
I_3	0.016630	0.016630	0.016629	0.016629	0.016629
$L_2 \times 10^4$	0	0.061154	0.118178	0.169317	0.214669
$L_\infty \times 10^4$	0	0.006843	0.013690	0.020430	0.027200

Table 3. Variants and error norms of the mGRLW equation with $p = 2, \alpha = 2,$
 $\varepsilon = 24, \mu = 1, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.2, t \in [0, 20]$

t	0	5	10	15	20
I_1	11.375810	11.375816	11.375821	11.375827	11.375831
I_2	1.291507	1.291509	1.291510	1.291511	1.291512
I_3	0.016647	0.016647	0.016647	0.016647	0.016647
$L_2 \times 10^4$	0	0.058625	0.121810	0.179241	0.236126
$L_\infty \times 10^4$	0	0.007040	0.014610	0.021330	0.029150

To get more the variants and error norms, we choose two sets of parameters by taking different values of α, μ and the same values of $\varepsilon = 1, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1$. The variants and error norms are calculated from time $t = 0$ to $t = 20$.

In the first case, we take $\alpha = 0.5, \mu = 0.1$. The variants and error norms are listed in Table 4. In this table, we get, the changes of variants $I_1 \times 10^2, I_2 \times 10$ and $I_3 \times 10$ from their initial values are less than 0.5, 0.1 and 0.2, respectively. The error norms L_2 and L_∞ are less than 5.242345×10^{-4} and 0.602344×10^{-4} , respectively.

In the second case, we take $\alpha = 2, \mu = 1$. The variants and error norms are reported in *Table 5*. In this case the changes of variants $I_1 \times 10^2, I_2 \times 10$ and $I_3 \times 10$ from their initial values are less than 0.4, 0.2 and 0.2, respectively. The error norms L_2 and L_∞ are less than 3.688247×10^{-4} and 0.632360×10^{-4} , respectively.

Table 4. Variants and error norms of the mGRLW equation with $p = 3, \alpha = 0.5, \varepsilon = 1, \mu = 0.1, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, t \in [0, 20]$

t	0	2	4	8	12	16	18	20
I_1	99.32692	99.32640	99.32589	99.32490	99.32393	99.32299	99.32254	99.32209
I_2	98.55980	98.55878	98.55776	98.55580	98.55387	98.55202	98.55111	98.55022
I_3	97.04331	97.04128	97.03928	97.03543	97.03163	97.02797	97.02620	97.02444
$L_2 \times 10^4$	0	0.54936	1.09383	2.15848	3.21381	4.23946	4.74164	5.24235
$L_\infty \times 10^4$	0	0.05982	0.11815	0.23941	0.36735	0.48803	0.54477	0.60234

Table 5. Variants and error norms of the mGRLW equation with $p = 3, \alpha = 2, \varepsilon = 1, \mu = 1, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, h = 0.1, t \in [0, 20]$

t	0	2	4	8	12	16	18	20
I_1	239.043	239.042	239.042	239.041	239.040	239.040	239.040	239.040
I_2	570.844	570.842	570.839	570.835	570.832	570.830	570.830	570.830
I_3	3255.376	3255.345	3255.318	3255.267	3255.234	3255.216	3255.209	3255.210
$L_2 \times 10^4$	0	0.6432	1.1874	2.2901	3.0685	3.5351	3.6736	3.6882
$L_\infty \times 10^4$	0	0.0747	0.1378	0.2895	0.4371	0.5773	0.6382	0.6324

For the purpose of illustration of the presented method for solving the mGRLW equation, we use parameters $p = 2, 3, 4, 6, 8, 10$ with $\alpha = 2, \varepsilon = 24, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01$. The parameters $\mu, h, \Delta t$ are given by different values. The error norms at $t = 20$ are listed in *Table 6* and *Table 7*.

The plot of the estimated solution at time $t = 10$ in *Figure 1*.

From from these tables, we see that, the error norms L_2, L_∞ are quite small for present method.

Table 6. Error norms for single solitary wave for the wave of the mGRLW equation with $\alpha = 2, \varepsilon = 24, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, t = 20$

			$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$	
		μ	0.1	1	0.1	1	0.1	1
	h	Δt						
L_2	0.1	0.01	0.062100	0.107056	0.150177	0.271077	0.224643	0.040491
\times	0.2	0.01	0.018732	0.002361	0.044972	0.006232	0.059671	0.010141
10^3	0.1	0.05	0.013397	0.013568	0.032648	0.034148	0.048668	0.052384
	0.2	0.05	0.002668	0.000637	0.006430	0.000216	0.009456	0.000185
L_∞	0.1	0.01	0.007807	0.013540	0.019111	0.034270	0.029513	0.052550
\times	0.2	0.01	0.002668	0.000292	0.006927	0.000781	0.010058	0.001250
10^3	0.1	0.05	0.001687	0.001725	0.004170	0.004312	0.006433	0.006589
	0.2	0.05	0.003912	0.000116	0.0011023	0.000045	0.001645	0.000041

Table 7. Error norms for single solitary wave for the wave of the mGRLW equation with $\alpha = 2, \varepsilon = 24, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.01, t = 20$

			$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$	
		μ	0.1	1	0.1	1	0.1	1
	h	Δt						
L_2	0.1	0.01	0.309913	0.593026	0.358476	0.500835	0.337468	0.037617
\times	0.2	0.01	0.030661	0.014702	0.026530	0.000057	0.026736	0.014881
10^3	0.1	0.05	0.068003	0.048202	0.074398	0.051122	0.052456	0.054893
	0.2	0.05	0.013297	0.000254	0.014837	0.000116	0.011335	0.000240
L_∞	0.1	0.01	0.043625	0.077968	0.063399	0.067385	0.074938	0.052721
\times	0.2	0.01	0.006700	0.001808	0.006961	0.000031	0.008780	0.001892
10^3	0.1	0.05	0.009617	0.006266	0.013268	0.007106	0.012321	0.007796
	0.2	0.05	0.002797	0.000054	0.004030	0.000046	0.003991	0.000047

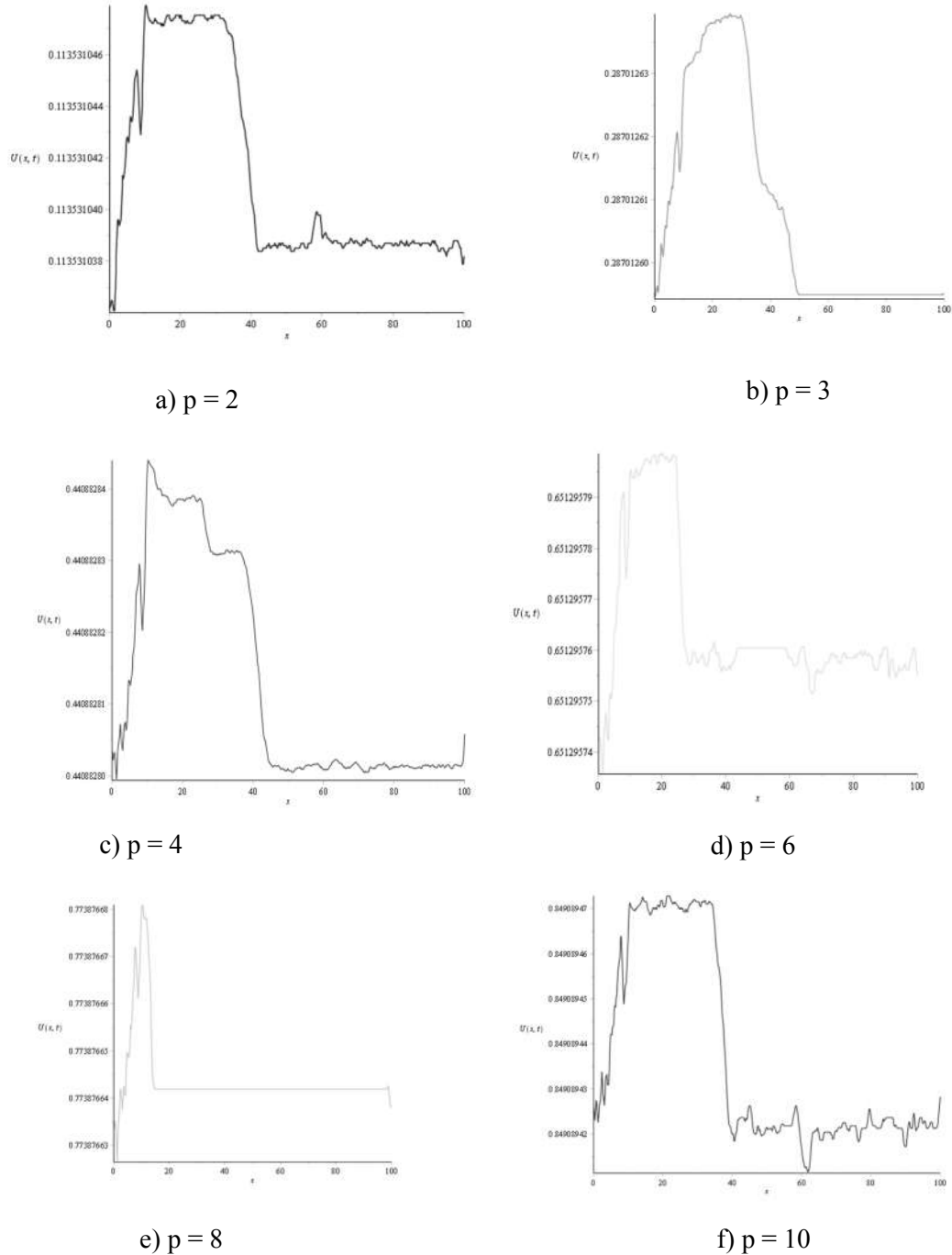


Figure 1. Single solitary wave with $\alpha = 2, \varepsilon = 24, \beta = 1, a = 0, b = 100, x_0 = 40, \Delta t = 0.05, t = 20$

A detailed comparison of numerical results at $t = 10$ are given in Table 8. It is clearly seen from this table that our error norm values are smaller than the results in [3].

Table 8. Error norms for single solitary wave for the wave of the mGRLW equation with $\alpha = 1, \varepsilon = 1, \beta = 1, \mu = 0.5, a = 0, b = 1, x_0 = 30, \Delta t = 0.1, t = 10$

		p = 2		p = 4		p = 8	
	Methods	LIAS	Our BCS	LIAS	Our BCS	LIAS	Our BCS
	h						
L_2	0.25	63.77969	0.00023	63.16492	0.000008	11.50448	0.00007
\times	0.125	15.82597	0.00084	15.68213	0.00008	2.98155	0.00113
10^3	0.0625	3.92074	0.00141	3.88572	0.00182	0.74262	0.00075
	0.03125	0.95011	0.01380	94.16614	0.00140	0.18014	0.00788
L_∞	0.25	93.52639	0.00042	92.62624	0.000007	18.22979	0.00010
\times	0.125	23.14686	0.00212	22.94480	0.00010	4.67495	0.00200
10^3	0.0625	5.89364	0.00218	5.82816	0.00290	1.16764	0.00140
	0.03125	1.42826	0.01922	1.41245	0.00165	0.28796	0.01126

5. CONCLUSION

In this work, we have used the quintic B - spline collocation method for solution of the mGRLW equation. We tested our scheme through single solitary wave and the obtained results are tabulaces. These tables show that, the changes of variants are quite small. The error norms L_2, L_∞ for the inviscid and mGRLW equation are better than the ones in previous methods. So the present method is more capable for solving these equations.

REFERENCES

1. S.S.Askar and A.A.Karawia (2015), "On solving pentadiagonal linear systems via transformations", *Mathematical Problems in Engineering*, Vol. 2015, pp.1-9.
2. S.Battal Gazi Karakoça, Halil Zeybek (2016), "Solitary - wave solutions of the GRLW equation using septic B - spline collocation method", *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 289, pp.159-171.
3. H.Che, X.Pan, L.Zhang and Y.Wang (2012), "Numerical analysis of a linear - implicit average scheme for generalized Benjamin - Bona - Mahony - Burgers equation", *J. Applied Mathematics*, Vol. 2012, pp.1-14.

4. D.J.Evans and K.R.Raslan (2005), “Solitary waves for the generalized equal width (GEW) equation”, *International J. of Computer Mathematics*, Vol. 82(4), pp.445-455.
5. C.M.García - Lospez, J.I.Ramos (2012), “Effects of convection on a modified GRLW equation”, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 219, pp.4118-4132.
6. C.M.García - Lospez, J.I.Ramos (2015), “Solitari waves generated by bell - shaped initial conditions in the invicis and viscous GRLW equations”, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 39 (21), pp.6645-6668.
7. P.A.Hammad, M.S.EI – Azab (2015), “A 2N order compact finite difference method for solving the generalized regularized long wave (GRLW) equation”, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 253, pp.248-261.
8. B.Hong, D.Lu (2008), “New exact solutions for the generalized BBM and Burgers - BBM equations”, *World Journal of Modelling and Simulation*, Vol. 4(4), pp.243-249.
9. S.Islam, F.Haq and I.A.Tirmizi (2010), “Collocation method using quartic B-spline for numerical solution of the modified equal width wave equation”, *J. Appl. Math. Inform.*, Vol. 28(3 - 4), pp.611-624.
10. A.G.Kaplan, Y.Dereli (2017), “Numerical solutions of the GEW equation using MLS collocation method”, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 28(1), 1750011, pp.1-23.
11. M.Mohammadi, R.Mokhtari (2011), “Solving the generalized regularized long wave equation on the basis of a reproducing kernel space”, *J. of Computation and Applied Mathematics*, Vol. 235, pp.4003-4014.
12. R.Mokhtari, M.Mohammadi (2010), “Numerical solution of GRLW equation using sinc - collocation method”, *Computer Physics Communications*, Vol. 181, pp.1266-1274.
13. E.Pindza and E.Maré (2014), “Solving the generalized regularized long wave equation using a distributed approximating functional method”, *International Journal of Computational Mathematics*, Vol. 2014, pp.1-12.
14. P.M.Preuter (1975), “Splines and Variational Methods”, *Wiley, New York*.
15. T.Roshan (2011), “A Petrov – Galerkin method for solving the generalized equal width (GEW) equation”, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 235, pp.1641-1652.
16. T.Roshan (2012), “A Petrov – Galerkin method for solving the generalized regularized long wave (GRLW) equation”, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 63, pp.943-956.
17. M.Zarebnia and R.Parvaz (2013), “Cubic B-spline collocation method for numerical solution of the Benjamin - Bona - Mahony - Burgers equation”, *International Journal of Mathematical, Computational, Physical, Electrical and Computer Engineering*, Vol. 7 (3), pp.540-543.
18. H.Zeybek and S.Battal Gazi Karakoça (2017), “Application of the collocation method with B - spline to the GEW equation”, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, Vol. 46, pp.71-88.
19. L.Zhang (2005), “A finite difference scheme for generalized regularized long wave equation”, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 168, pp.962-972.
20. J.Wang, F.Bai and Y.Cheng (2011), “A meshless method for the nonlinear generalized regularized long wave equation”, *Chin. Phys. B*, Vol. 20(3), 030206, pp.1-8.

PHƯƠNG PHÁP MỚI GIẢI PHƯƠNG TRÌNH MGRLW SỬ DỤNG CƠ SỞ B – SPLINE BẬC 5

Tóm tắt: Trong bài báo này, nghiệm số của phương trình mGRLW sẽ tìm được dựa trên cơ sở phương pháp mới sử dụng cơ sở B – spline bậc 5. Sử dụng phương pháp Von – Neumann hệ phương trình sai phân ổn định vô điều kiện. Thuật toán được với sóng đơn được áp dụng giải một số ví dụ. Kết quả số chứng tỏ phương pháp đưa ra hữu hiệu để giải phương trình trên.

Từ khóa: Phương trình mGRLW, spline bậc 5, phương pháp collocation, phương pháp sai phân hữu hạn.

STUDY ON ELASTIC DEFORMATION OF SUBSTITUTION ALLOY AB WITH INTERSTITIAL ATOM C AND BCC STRUCTURE UNDER PRESSURE

Nguyen Quang Hoc¹, Nguyen Thi Hoa² and Nguyen Duc Hien³

¹Hanoi National University of Education

²University of Transport and Communication

³Mac Dinh Chi High School

Abstract: *The analytic expressions of the free energy, the mean nearest neighbor distance between two atoms, the elastic moduli such as the Young modulus E , the bulk modulus K , the rigidity modulus G and the elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} for substitution alloy AB with interstitial atom C and BCC structure under pressure are derived from the statistical moment method. The elastic deformations of main metal A, substitution alloy AB and interstitial alloy AC are special cases of elastic deformation for alloy ABC. The theoretical results are applied to alloy FeCrSi. The numerical results for alloy FeCrSi are compared with the numerical results for main metal Fe, substitution alloy FeCr, interstitial alloy FeSi and experiments.*

Keywords: *Substitution and interstitial alloy, elastic deformation, Young modulus, bulk modulus, rigidity modulus, elastic constant, Poisson ratio.*

Email: hoanguyen1974@gmail.com

Received 02 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

Thermodynamic and elastic properties of interstitial alloys are specially interested by many theoretical and experimental researchers [1-7, 10, 12, 13].

In this paper, we build the theory of elastic deformation for substitution alloy AB with interstitial atom C and body-centered cubic (BCC) structure under pressure by the statistical moment method (SMM) [8-10].

2. CONTENT OF RESEARCH

2.1. Analytic results

In interstitial alloy AC with BCC structure, the cohesive energy of the atom C (in face centers of cubic unit cell) with the atoms A (in body center and peaks of cubic unit cell) in the approximation of three coordination spheres with the center C and the radii $r_1, r_1\sqrt{2}, r_1\sqrt{5}$ is determined by [8-10].

$$\begin{aligned} u_{0C} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_i} \varphi_{AC}(r_i) = \frac{1}{2} [2\varphi_{AC}(r_1) + 4\varphi_{AC}(r_1\sqrt{2}) + 8\varphi_{AC}(r_1\sqrt{5})] = \\ &= \varphi_{AC}(r_1) + 2\varphi_{AC}(r_1\sqrt{2}) + 4\varphi_{AC}(r_1\sqrt{5}), \end{aligned} \quad (2.1)$$

where φ_{AC} is the interaction potential between the atom A and the atom C, n_i is the number of atoms on the i^{th} coordination sphere with the radius $r_i (i=1,2,3)$, $r_1 \equiv r_{1C} = r_{01C} + y_{0A_1}(T)$ is the nearest neighbor distance between the interstitial atom C and the metallic atom A at temperature T , r_{01C} is the nearest neighbor distance between the interstitial atom C and the metallic atom A at 0K and is determined from the minimum condition of the cohesive energy u_{0C} , $y_{0A_1}(T)$ is the displacement of the atom A_1 (the atom A stays in the body center of cubic unit cell) from equilibrium position at temperature T . The alloy's parameters for the atom C in the approximation of three coordination spheres have the form [8-10].

$$\begin{aligned} k_C &= \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} = \varphi_{AC}^{(2)}(r_1) + \frac{\sqrt{2}}{r_1} \varphi_{AC}^{(1)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{16}{5\sqrt{5}r_1} \varphi_{AC}^{(1)}(r_1\sqrt{5}), \quad \gamma_C = 4(\gamma_{1C} + \gamma_{2C}), \\ \gamma_{1C} &= \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^4} \right)_{eq} = \frac{1}{24} \varphi_{AC}^{(4)}(r_1) + \frac{1}{8r_1^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) - \frac{\sqrt{2}}{16r_1^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_1) + \frac{1}{150} \varphi_{AC}^{(4)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{4\sqrt{5}}{125r_1} \varphi_{AC}^{(3)}(r_1\sqrt{5}), \\ \gamma_{2C} &= \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\alpha}^2 \partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} = \frac{1}{4r_1} \varphi_{AC}^{(3)}(r_1) - \frac{1}{4r_1^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_1) + \frac{5}{8r_1^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_1) + \frac{\sqrt{2}}{8r_1} \varphi_{AC}^{(3)}(r_1\sqrt{2}) \\ &\quad - \frac{1}{8r_1^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{2}{25} \varphi_{AC}^{(4)}(r_1\sqrt{5}) + \frac{3}{25r_1\sqrt{5}} \varphi_{AC}^{(3)}(r_1\sqrt{5}) + \frac{2}{25r_1^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_1\sqrt{5}) - \frac{3}{25r_1^3\sqrt{5}} \varphi_{AC}^{(1)}(r_1\sqrt{5}), \end{aligned} \quad (2.2)$$

where $\varphi_{AC}^{(i)}(r_i) = \partial^2 \varphi_{AC}(r_i) / \partial r_i^2 (i=1,2,3,4)$, $\alpha, \beta = x, y, z, \alpha \neq \beta$ and $u_{i\beta}$ is the displacement of the i^{th} atom in the direction β .

The cohesive energy of the atom A_1 (which contains the interstitial atom C on the first coordination sphere) with the atoms in crystalline lattice and the corresponding alloy's parameters in the approximation of three coordination spheres with the center A_1 is determined by [8-10]

$$\begin{aligned}
 u_{0A_1} &= u_{0A} + \varphi_{AC}(r_{1A_1}), \\
 k_{A_1} &= k_A + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = k_A + \varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_1}) + \frac{5}{2r_{1A_1}} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_1}), \gamma_{A_1} = 4(\gamma_{1A_1} + \gamma_{2A_1}), \\
 \gamma_{1A_1} &= \gamma_{1A} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^4} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \gamma_{1A} + \frac{1}{24} \varphi_{AC}^{(4)}(r_{1A_1}) + \frac{1}{8r_{1A_1}^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_1}) + \frac{1}{8r_{1A_1}^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_1}), \\
 \gamma_{2A_1} &= \gamma_{2A} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\alpha}^2 \partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_1}} = \gamma_{2A} + \frac{1}{2r_{1A_1}} \varphi_{AC}^{(3)}(r_{1A_1}) - \frac{3}{4r_{1A_1}^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_1}) + \frac{3}{4r_{1A_1}^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_1})
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

where $r_{1A_1} \approx r_{1C}$ is the nearest neighbor distance between the atom A_1 and atoms in crystalline lattice.

The cohesive energy of the atom A_2 (which contains the interstitial atom C on the first coordination sphere) with the atoms in crystalline lattice and the corresponding alloy's parameters in the approximation of three coordination spheres with the center A_2 is determined by [8-10].

$$\begin{aligned}
 u_{0A_2} &= u_{0A} + \varphi_{AC}(r_{1A_2}), \\
 k_{A_2} &= k_A + \frac{1}{2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = k_A + 2\varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_2}) + \frac{4}{r_{1A_2}} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_2}), \gamma_{A_2} = 4(\gamma_{1A_2} + \gamma_{2A_2}), \\
 \gamma_{1A_2} &= \gamma_{1A} + \frac{1}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\beta}^4} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{1A} + \frac{1}{24} \varphi_{AC}^{(4)}(r_{1A_2}) + \frac{1}{4r_{1A_2}} \varphi_{AC}^{(3)}(r_{1A_2}) - \frac{1}{8r_{1A_2}^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_2}) + \frac{1}{8r_{1A_2}^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_2}), \\
 \gamma_{2A_2} &= \gamma_{2A} + \frac{6}{48} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{AC}}{\partial u_{i\alpha}^2 \partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} \right]_{r=r_{1A_2}} = \gamma_{2A} + \frac{1}{8} \varphi_{AC}^{(4)}(r_{1A_2}) + \frac{1}{4r_{1A_2}} \varphi_{AC}^{(3)}(r_{1A_2}) + \frac{3}{8r_{1A_2}^2} \varphi_{AC}^{(2)}(r_{1A_2}) - \frac{3}{8r_{1A_2}^3} \varphi_{AC}^{(1)}(r_{1A_2})
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

where $r_{1A} = r_{01A} + y_{0C}(T)$, r_{01A} is the nearest neighbor distance between the atom A_2 and atoms in crystalline lattice at 0K and is determined from the minimum condition of the cohesive energy u_{0A_2} , $y_{0C}(T)$ is the displacement of the atom C at temperature T .

In Eqs. (2.3) and (2.4), u_{0A} , k_A , γ_{1A} , γ_{2A} are the corresponding quantities in clean metal A in the approximation of two coordination sphere [8-10]

The equation of state for interstitial alloy AC with BCC structure at temperature T and pressure P is written in the form

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \theta x \operatorname{cth} x \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (2.5)$$

At 0K and pressure P , this equation has the form

$$Pv = -r_1 \left(\frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_0}{4k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (2.6)$$

If knowing the form of interaction potential φ_{i0} , eq. (2.6) permits us to determine the nearest neighbor distance $r_{1X}(P, 0)$ ($X = C, A, A_1, A_2$) at 0K and pressure P . After knowing $r_{1X}(P, 0)$, we can determine alloy parameters $k_X(P, 0)$, $\gamma_{1X}(P, 0)$, $\gamma_{2X}(P, 0)$, $\gamma_X(P, 0)$ at 0K and pressure P . After that, we can calculate the displacements [8-10].

$$y_{0X}(P, T) = \sqrt{\frac{2\gamma_X(P, 0)\theta^2}{3k_X^3(P, 0)}} A_X(P, T),$$

$$A_X = a_{1X} + \sum_{i=2}^5 \left(\frac{\gamma_X \theta}{k_X^2} \right)^i a_{iX}, k_X = m\omega_X^2, x_X = \frac{\hbar\omega_X}{2\theta}, a_{1X} = 1 + \frac{Y_X}{2}, \quad (2.7)$$

With a_{iX} ($i = 1, 2, \dots, 5$) are the values of parameters of crystal depending on the structure of crystal lattice [10].

From that, we derive the nearest neighbor distance $r_{1X}(P, T)$ at temperature T and pressure P :

$$r_{1C}(P, T) = r_{1C}(P, 0) + y_{A_1}(P, T), r_{1A}(P, T) = r_{1A}(P, 0) + y_A(P, T),$$

$$r_{1A_1}(P, T) \approx r_{1C}(P, T), r_{1A_2}(P, T) = r_{1A_2}(P, 0) + y_C(P, T). \quad (2.8)$$

Then, we calculate the mean nearest neighbor distance in interstitial alloy AC by the expressions as follows [8-10].

$$\begin{aligned}\overline{r_{1A}(P, T)} &= \overline{r_{1A}(P, 0)} + \overline{y(P, T)}, \overline{r_{1A}(P, 0)} = (1 - c_C)r_{1A}(P, 0) + c_C r'_{1A}(P, 0), \\ r'_{1A}(P, 0) &\approx \sqrt{3}r_{1C}(P, 0), \overline{y(P, T)} = (1 - 7c_C)y_A(P, T) + c_C y_C(P, T) + 2c_C y_{A_1}(P, T) + 4c_C y_{A_2}(P, T),\end{aligned}\quad (2.9)$$

where $\overline{r_{1A}(P, T)}$ is the mean nearest neighbor distance between atoms A in interstitial alloy AC at pressure P and temperature T , $\overline{r_{1A}(P, 0)}$ is the mean nearest neighbor distance between atoms A in interstitial alloy AC at pressure P and 0K, $r_{1A}(P, 0)$ is the nearest neighbor distance between atoms A in clean metal A at pressure P and 0K, $r'_{1A}(P, 0)$ is the nearest neighbor distance between atoms A in the zone containing the interstitial atom C at pressure P and 0K and c_C is the concentration of interstitial atoms C.

In alloy ABC with BCC structure (interstitial alloy AC with atoms A in peaks and body center, interstitial atom C in facer centers and then, atom B substitutes atom A in body center), the mean nearest neighbor distance between atoms A at pressure P and temperature T is determined by:

$$\begin{aligned}a_{ABC}(P, T, c_B, c_C) &= c_{AC}a_{AC} \frac{B_{TAC}}{B_T} + c_B a_B \frac{B_{TB}}{B_T}, \overline{B_T} = c_{AC}B_{TAC} + c_B B_{TB}, \\ c_{AC} &= c_A + c_C, a_{AC} = \overline{r_{1A}(P, T)}, B_{TAC} = \frac{1}{\chi_{TAC}}, B_{TB} = \frac{1}{\chi_{TB}}, \\ \chi_{TAC}(P, T, c_C) &= \frac{\left(\frac{a_{AC}(P, T, c_C)}{a_{0AC}(P, 0, c_C)}\right)^3}{2P + \frac{\sqrt{3}}{4a_{AC}(P, T, c_C)} \frac{1}{3N} \left(\frac{\partial^2 \psi_{AC}}{\partial a_{AC}^2}\right)_T}, \\ \left(\frac{\partial^2 \psi_{AC}}{\partial a_{AC}^2}\right)_T &= \left[\frac{\partial^2 \psi_{AC}}{\partial r_{1A}^2(P, T)}\right]_T \approx (1 - 7c_C) \left(\frac{\partial^2 \psi_A}{\partial a_A^2}\right)_T + c_C \left(\frac{\partial^2 \psi_C}{\partial a_C^2}\right)_T + 2c_C \left(\frac{\partial^2 \psi_{A_1}}{\partial a_{A_1}^2}\right)_T + 4c_C \left(\frac{\partial^2 \psi_{A_2}}{\partial a_{A_2}^2}\right)_T, \\ \frac{1}{3N} \left(\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial a_X^2}\right)_T &= \frac{1}{6} \frac{\partial^2 u_{0X}}{\partial a_X^2} + \frac{\hbar \omega_X}{4k_X} \left[\frac{\partial^2 k_X}{\partial a_X^2} - \frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial a_X}\right)^2\right], a_X \equiv r_{1X}(P, T).\end{aligned}\quad (2.10)$$

The mean nearest neighbor distance between atoms A in alloy ABC at pressure P and temperature T is determined by:

$$a_{0ABC}(P, T, c_B, c_C) = c_{AC}a_{0AC} \frac{B_{0TAC}}{B_{0T}} + c_B a_{0B} \frac{B_{0TB}}{B_{0T}}. \quad (2.11)$$

The free energy of alloy ABC with BCC structure and the condition $c_C \ll c_B \ll c_A$ has the form:

$$\begin{aligned}\psi_{ABC} &= \psi_{AC} + c_B(\psi_B - \psi_A) + TS_c^{AC} - TS_c^{ABC}, \\ \psi_{AC} &= (1 - 7c_C)\psi_A + c_C\psi_C + 2c_C\psi_{A_1} + 4c_C\psi_{A_2} - TS_c^{AC}, \\ \psi_X &\approx U_{0X} + \psi_{0X} + 3N \left\{ \frac{\theta^2}{k_X^2} \left[\gamma_{2X} X_X^2 - \frac{2\gamma_{1X}}{3} \left(1 + \frac{X_X}{2} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2\theta^3}{k_X^4} \left[\frac{4}{3} \gamma_{2X}^2 X_X \left(1 + \frac{X_X}{2} \right) - 2(\gamma_{1X}^2 + 2\gamma_{1X}\gamma_{2X}) \left(1 + \frac{X_X}{2} \right) (1 + X_X) \right] \right\}, \\ \psi_{0X} &= 3N\theta \left[x_X + \ln(1 - e^{-2x_X}) \right], X_X \equiv x_X \coth x_X.\end{aligned}\quad (2.12)$$

where ψ_X is the free energy of atom X , ψ_{AC} is the free energy of interstitial alloy AC, S_c^{AC} is the configuration entropy of interstitial alloy AC and S_c^{ABC} is the configuration entropy of alloy ABC.

The Young modulus of alloy ABC with BCC structure at temperature T and pressure P is determined by:

$$\begin{aligned}E_{ABC} &= c_B(E_B - E_A) + E_{AC} = c_B E_B + c_A E_A - (c_A + c_B) E_A + E_{AC} = E_{AB} - (c_A + c_B) E_A + E_{AC}, \\ E_{AB} &= c_A E_A + c_B E_B, E_{AC} = E_A \left(1 - 7c_C + c_C \frac{\frac{\partial^2 \psi_C}{\partial \varepsilon^2} + 2 \frac{\partial^2 \psi_{A_1}}{\partial \varepsilon^2} + 4 \frac{\partial^2 \psi_{A_2}}{\partial \varepsilon^2}}{\frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \varepsilon^2}} \right), E_A = \frac{1}{\pi r_{1A} A_{1A}}, \\ A_{1A} &= \frac{1}{k_A} \left[1 + \frac{2\gamma_A^2 \theta^2}{k_A^4} \left(1 + \frac{1}{2} x_A \operatorname{cth} x_A \right) (1 + x_A \operatorname{cth} x_A) \right], x_A = \frac{\hbar \omega_A}{2\theta}, \\ \frac{\partial^2 \psi_X}{\partial \varepsilon^2} &= \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{0X}}{\partial r_{1X}^2} + \frac{3}{4} \frac{\hbar \omega_X}{k_X} \left[\frac{\partial^2 k_X}{\partial r_{1X}^2} - \frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right)^2 \right] \right\} 4r_{01X}^2 + \\ &+ \left(\frac{1}{2} \frac{\partial U_{0X}}{\partial r_{1X}} + \frac{3}{2} \hbar \omega_X \operatorname{cth} x_X \frac{1}{2k_X} \frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right) 2r_{01X}, x_X = \frac{\hbar \omega_X}{2\theta}, \omega_X = \sqrt{\frac{k_X}{m}},\end{aligned}\quad (2.13)$$

where ε is the relative deformation, $E_{ABC} = E_{ABC}(c_B, c_C, P, T)$, $E_{AB} = E_{AB}(c_B, P, T)$ is the Young modulus of substitution alloy AB and $E_{AC} = E_{AC}(c_C, P, T)$ is the Young modulus of interstitial alloy AC.

The bulk modulus of alloy ABC with BCC structure at temperature T and pressure P has the form:

$$K_{ABC}(c_B, c_C, P, T) = \frac{E_{AB}(c_B, c_C, P, T)}{3(1-2\nu_A)}. \quad (2.14)$$

The rigidity modulus of alloy ABC with BCC structure at temperature T and pressure P has the form:

$$G_{ABC}(c_B, c_C, P, T) = \frac{E_{ABC}(c_B, c_C, P, T)}{2(1+\nu_A)}. \quad (2.15)$$

The elastic constants of alloy ABC with BCC structure at temperature T and pressure P has the form:

$$C_{11ABC}(c_B, c_C, P, T) = \frac{E_{ABC}(c_B, c_C, P, T)(1-\nu_A)}{(1+\nu_A)(1-2\nu_A)}, \quad (2.16)$$

$$C_{12ABC}(c_B, c_C, P, T) = \frac{E_{ABC}(c_B, c_C, P, T)\nu_A}{(1+\nu_A)(1-2\nu_A)}, \quad (2.17)$$

$$C_{44ABC}(c_B, c_C, P, T) = \frac{E_{ABC}(c_B, c_C, P, T)}{2(1+\nu_A)}. \quad (2.18)$$

The Poisson ratio of alloy ABC with BCC structure has the form:

$$\nu_{ABC} = c_A\nu_A + c_B\nu_B + c_C\nu_C \approx c_A\nu_A + c_B\nu_B = \nu_{AB}. \quad (2.19)$$

where ν_A, ν_B and ν_C respectively are the Poisson ratios of materials A, B and C and are determined from the experimental data.

When the concentration of interstitial atom C is equal to zero, the obtained results for alloy ABC become the corresponding results for substitution alloy AB. When the concentration of substitution atom B is equal to zero, the obtained results for alloy ABC become the corresponding results for interstitial alloy AC. When the concentrations of substitution atoms B and interstitial atoms C are equal to zero, the obtained results for alloy ABC become the corresponding results for main metal A.

2.2. Numerical results for alloy FeCrSi

For alloy FeCrSi, we use the n - m pair potential

$$\varphi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad (2.20)$$

where the potential parameters are given in Table 1 [11].

Table 1. Potential parameters m , n , D , r_0 of materials

Material	m	n	$D [10^{-16} \text{ erg}]$	$r_0 [10^{-10} \text{ m}]$
Fe	7.0	11.5	6416.448	2.4775
Cr	6.0	15.5	6612.96	2.4950
Si	6.0	12.0	45128.24	2.2950

Considering the interaction between atoms Fe and Si in interstitial alloy FeSi, we use the potential (2.20) but we take approximately $\bar{D} = \sqrt{D_{\text{Fe}} D_{\text{Si}}}$, $\bar{r}_0 = \sqrt{r_{0\text{Fe}} r_{0\text{Si}}}$. Therefore,

$$\varphi_{\text{Fe-Si}}(r) = \frac{\bar{D}}{\bar{n} - \bar{m}} \left[\bar{m} \left(\frac{\bar{r}_0}{r} \right)^{\bar{n}} - \bar{n} \left(\frac{\bar{r}_0}{r} \right)^{\bar{m}} \right], \quad (2.21)$$

where \bar{m} and \bar{n} are determined empirically. The potential parameters for interstitial alloy FeSi are taken as in Table 2 [10].

Table 2. Potential parameters \bar{m} , \bar{n} , \bar{r}_0 , \bar{D} of alloy FeSi

Alloy	\bar{m}	\bar{n}	$\bar{D} [10^{-16} \text{ erg}]$	$\bar{r}_0 [10^{-10} \text{ m}]$
FeSi	2.0	5.5	17016.5698	2.3845

According to our numerical results as shown in figures from Figure 1 to Figure 6 for alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of substitution atoms when the concentration of interstitial atoms increases, the mean nearest neighbor distance also increases. For example, for alloy FeCrSi at the same temperature, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms when pressure increases, the mean nearest neighbor distance decreases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300\text{K}$, $c_{\text{Cr}} = 10\%$, $c_{\text{Si}} = 3\%$ when P increases from 0 to 70 GPa, r_1 decreases from 2.4715Å to 2.3683Å .

For alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of interstitial atoms when the concentration of substitution atoms increases, the mean nearest neighbor distance decreases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300\text{K}$, $P = 50 \text{ GPa}$, $C_{\text{Si}} = 5\%$ when C_{Cr} increases from 0 to 15% r_1 decreases from 2.4216 Å to 2.4178 Å .

For alloy FeCrSi at the same pressure, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms when temperature increases, the mean nearest neighbor

distance increases. For example for alloy FeCrSi at $P = 0$, $C_{Cr} = 10\%$ và $C_{Si} = 3\%$ when T increases from 50K to 1000K, r_1 increases from $2.4687A^0$ to $2.4801A^0$.

For alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of substitution atoms when the concentration of interstitial atoms increases, the elastic moduli E , G , K increases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $P = 10GPa$ and $C_{Cr} = 10\%$ when C_{Si} increases from 0 to 5%, E increases from $18.4723.10^{10}$ Pa to $30.0379.10^{10}$ Pa.

For alloy FeCrSi at the same temperature, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms when pressure increases, the elastic moduli E , G , K increases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $C_{Cr} = 10\%$, $C_{Si} = 1\%$ when P increases from 0 to 70GPa, E increases from $15.2862.10^{10}$ Pa to $48.0400.10^{10}$ Pa.

For alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of interstitial atoms when the concentration of substitution atoms increases, the elastic moduli E , G , K decreases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $P = 30GPa$, $C_{Si} = 5\%$ when C_{Cr} tăng từ 0 đến 15%, E decreases from 39.389310^{10} Pa to $39.2128.10^{10}$ Pa.

For alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of substitution atoms when the concentration of interstitial atoms increases, the elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} increases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $P = 10GPa$, $C_{Cr} = 10\%$ when C_{Si} increases from 0 to 5%, C_{11} increases from $23.7286.10^{10}$ Pa to $38.5851.10^{10}$ Pa.

For alloy FeCrSi at the same temperature, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms when pressure increases, the elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} increases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $C_{Cr} = 10\%$, $C_{Si} = 1\%$ when P increases from 0 to 70GPa, C_{11} increases from $14.6358.10^{10}$ Pa to $61.7096.10^{10}$ Pa.

For alloy FeCrSi at the same pressure, temperature and concentration of interstitial atoms when the concentration of substitution atoms increases, the elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} decreases. For example for alloy FeCrSi at $T = 300K$, $P = 30GPa$, $C_{Si} = 5\%$ when C_{Cr} increases from 0 to 15% C_{11} decreases from $51.6175.10^{10}$ Pa to $49.8943.10^{10}$ Pa.

When the concentration of substitution atoms and the concentration of interstitial atoms are equal to zero, the mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants of alloy FeCrSi becomes the mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants of metal Fe. The dependence of mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants on pressure and concentration of interstitial atoms for alloy FeCrSi is the same as the dependence of mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants on pressure and concentration of interstitial atoms for interstitial alloy FeSi. The dependence of mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants on pressure and concentration of substitution atoms for alloy

FeCrSi is the same as the dependence of mean nearest neighbor distance, the elastic moduli and the elastic constants on pressure and concentration of substitution atoms for substitution alloy FeCr.

Table 3 gives the nearest neighbor distance and the elastic moduli of Fe at $T = 300\text{K}$, $P = 0$ according to the SMM and the experimental data [12, 13].

3. CONCLUSION

The analytic expressions of the free energy, the mean nearest neighbor distance between two atoms, the elastic moduli such as the Young modulus, the bulk modulus, the rigidity modulus and the elastic constants depending on temperature, concentration of substitution atoms and concentration of interstitial atoms for substitution alloy AB with interstitial atom C and BCC structure under pressure are derived by the SMM. The numerical results for alloy FeCrSi are in good agreement with the numerical results for substitution alloy FeCr, interstitial alloy FeSi and main metal Fe. Temperature changes from 5 to 1000K, pressure changes from 0 to 70 GPa, the concentration of substitution atoms Cr changes from 0 to 15% and the concentration of interstitial atoms Si changes from 0 to 5%.

Table 3. Nearest neighbor distance and elastic moduli E , G of Fe at $P = 0$, $T = 300\text{K}$ according to SMM and EXPT [12, 13]

Method	$a(A^0)$	$E(10^{10} \text{ Pa})$	$G(10^{10} \text{ Pa})$
SMM	2.4298	20.83	8.27
EXPT	2.74[12]	20.98[13]	8.12[13]

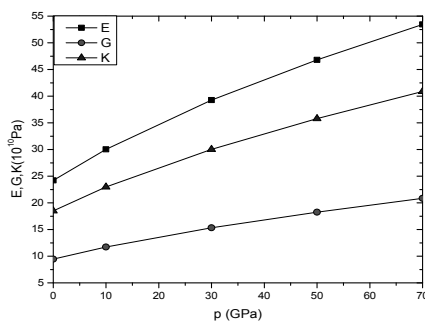


Figure 1. Dependence of elastic moduli E , G , K (10^{10} Pa) on pressure for alloy Fe-10%Cr-5%Si at $T = 300\text{K}$

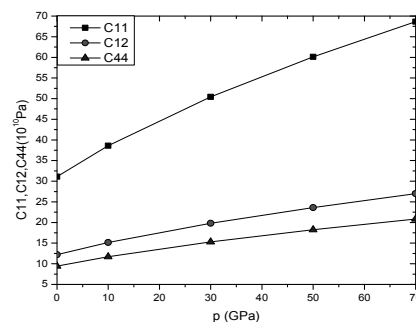


Figure 2. Dependence of elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} (10^{10} Pa) on pressure for alloy Fe-10%Cr-5%Si at $T = 300\text{K}$

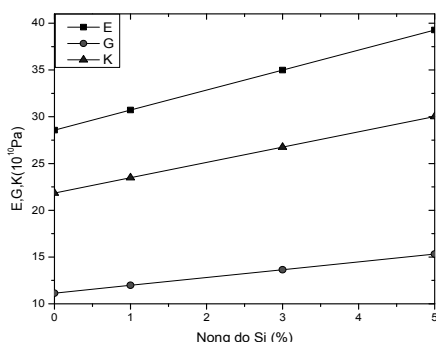


Figure 3. Dependence of elastic moduli E , G , K (10^{10} Pa) on concentration of Si for alloy Fe-10%Cr-xSi at $P = 30$ GPa and $T = 300$ K

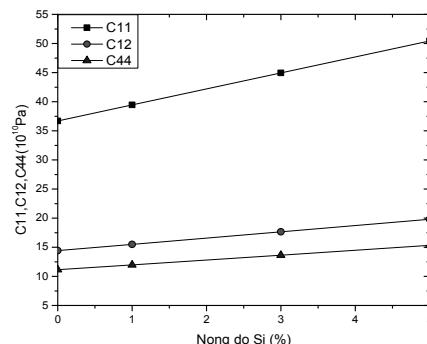


Figure 4. Dependence of elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} (10^{10} Pa) on concentration of Si for alloy Fe-10%Cr-xSi at $P = 30$ GPa and $T = 300$ K

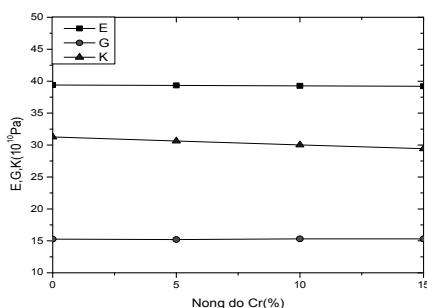


Figure 5. Dependence of elastic moduli E , G , K (10^{10} Pa) on concentration of Cr for alloy Fe-xCr-5%Si at $P = 30$ GPa and $T = 300$ K

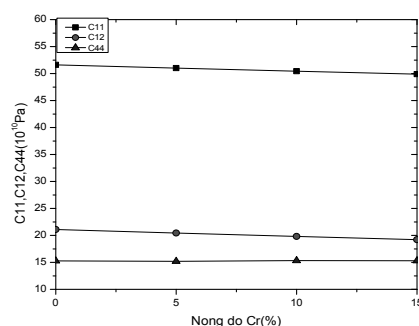


Figure 6. Dependence of elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{44} (10^{10} Pa) on concentration of Cr for alloy Fe-xCr-5%Si at $P = 30$ GPa and $T = 300$ K

REFERENCES

1. K. E. Mironov (1967), *Interstitial alloy*. Plenum Press, New York.
2. A. A. Smirnov (1979), *Theory of Interstitial Alloys*, Nauka, Moscow, Russian.
3. A. G. Morachevskii and I. V. Sladkov (1993), *Thermodynamic Calculations in Metallurgy*, Metallurgiya, Moscow, Russian.
4. V.V.Heychenko, A.A.Smirnov (1974), *Reine und angewandte Metallkunde in Einzeldarstellungen* **24**, pp.80-112.
5. V. A. Volkov, G. S. Masharov and S. I. Masharov (2006), *Rus. Phys. J.*, No.10, 1084 .
6. S. E. Andryushechkin, M. G. Karpman (1999), *Metal Science and Heat Treatment* **41**, 2 80.

7. M.Hirabayashi, S.Yamaguchi, H.Asano, K.Hiraga (1974), *Reine und angewandte Metallkunde in Einzeldarstellungen* **24**, p.266.
8. N. Tang, V. V. Hung, *Phys. Stat. Sol. (b)* **149**(1988), p.511; **161**(1990), p.165; **162** (1990)371; **162**(1990), p.379.
9. V. V. Hung (2009), *Statistical moment method in studying thermodynamic and elastic property of crystal*, HNUE Publishing House.
10. N.Q.Hoc, D.Q.Vinh, B.D.Tinh, T.T.C.Loan, N.L.Phuong, T.T.Hue, D.T.T.Thuy (2015), Thermodynamic properties of binary interstitial alloys with a BCC structure: dependence on temperature and concentration of interstitial atoms, *Journal of Science of HNUE, Math. and Phys. Sci.* **60**, 7, pp.146-155.
11. M.N.Magomedov (1987), *J. Fiz. Khimic* **61**1003,(in Russian).
12. D.R.Lide (2005), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 86th Ed., Taylor & Francis, Boca Raton London, New York, Singapore.
13. L.V.Tikhonov et al (1986), *Mechanical properties of metals and alloys*, Kiev.

NGHIÊN CỨU BIẾN DẠNG ĐÀN HỒI CỦA HỢP KIM THAY THẾ AB CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI CÓ NGUYÊN TỬ C XEN KẼ DƯỚI TÁC DỤNG CỦA ÁP SUẤT

Tóm tắt: Áp dụng phương pháp thống kê mô men vào nghiên cứu biến dạng đàn hồi của hợp kim thay thế AB cấu trúc lập phương tâm khối có nguyên tử C xen kẽ, chúng tôi thu được các biểu thức giải tích cho phép xác định các đại lượng: năng lượng tự do, khoảng lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử, mô đun Young E, mô đun khối K, mô đun trượt G và các hằng số đàn hồi của các hợp kim này dưới tác dụng của áp suất. Các kết quả lý thuyết được áp dụng tính số với hợp kim FeCrSi. Trong trường hợp giới hạn, các kết quả tính số được so sánh với các số liệu thực nghiệm của kim loại Fe, hợp kim thay thế FeCr và hợp kim xen kẽ FeSi.

Từ khóa: Hợp kim thay thế, hợp kim xen kẽ, biến dạng đàn hồi, mô đun Young, mô đun khối, mô đun trượt, hằng số đàn hồi, hệ số Poisson.

THE PHOTOSTIMULATED QUANTUM EFFECT IN RECTANGULAR QUANTUM WIRE WITH AN INFINITE POTENTIAL FOR THE CASE OF ELECTRON-ACOUSTIC PHONON SCATTERING

Nguyen Vu Nhan¹, Hoang Dinh Trien², Hoang Van Ngoc³

¹Hanoi Metropolitan University

²The University of Da Nang

³Hanoi University of Sciences, Hanoi National University

Abstract: Based on the quantum kinetic equation for electrons under the action of a linearly polarized electromagnetic wave, a dc electric field and an intense laser field, analytic expressions for the density of the direct current in rectangular quantum wire with an infinite potential for the case of electron - acoustic phonon scattering are calculated. The current density is studied as a function of the frequency of the laser radiation field, the frequency of the linearly polarized electromagnetic wave, the temperature of system and the size of quantum wire. The analytic expressions are numerically evaluated and plotted for a specific quantum wire, GaAs/AlGaAs. All these results of quantum wire are compared with bulk semiconductors and superlattices to show the differences.

Keywords: Semiconductors, quantum wells, quantum wires, superlattices and quantum dot.

Email: nvnhan@daihocthudo.edu.vn

Received 02 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

The photostimulated quantum effect by electromagnetic wave is explained by the possibility of using this phenomenon for detecting intense electromagnetic radiation, as well as for characterizing kinetic properties of semiconductors [1]. It is known that the presence of intense laser radiation can influence the electrical conductivity and kinetic effects in material. In recent years, it has been revealed that the photostimulated quantum effect in superlattices and in quantum wells should be characterized by new features under the action of strong fields [2-4]. However, in quantum wire, the photostimulated quantum effect still opens for studying.

In this work, we use the quantum kinetic to study the drag of charge carriers in rectangular quantum wire with an infinite potential by a linearly polarized electromagnetic, a dc electric field and a laser field. We obtained the density of the current for the case electrons interacting with acoustic phonon.

2. CALCULATING THE DENSITY OF THE CURRENT BY THE QUANTUM KINETIC EQUATION METHOD

We examine the electron system, which is placed in a linearly polarized electromagnetic wave ($\vec{E}(t) = \vec{E}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$, $\vec{H}(t) = [\vec{n}, \vec{E}(t)]$), in a dc electric field \vec{E}_0 and in a strong radiation field $\vec{F}(t) = \vec{F} \sin \Omega t$. The Hamiltonian of the electron - phonon system in the quantum wire can be written as:

$$H = H_0 + U = \sum_{n,l,\vec{p}_z} \varepsilon_{n,l,\vec{p}_z} (\vec{p}_z - \frac{e}{\hbar c} \vec{A}(t)) \cdot \vec{a}_{n,l,\vec{p}_z}^+ \cdot \vec{a}_{n,l,\vec{p}_z} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + \sum_{n,l,n',l'} \sum_{\vec{p}_z, \vec{q}} C_{\vec{q}} \cdot I_{n,l,n',l'}(\vec{q}) a_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}}^+ \cdot \vec{a}_{n,l,\vec{p}_z} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^+) \quad , \quad (1)$$

where $\vec{A}(t)$ is the vector potential of laser field (only the laser field affects the probability of scattering): $-\frac{1}{c} \vec{A}(t) = \vec{F}_0 \sin \Omega t$; a_{n,l,p_z}^+ and a_{n,l,p_z}^- ($b_{\vec{q}}^+$ and $b_{\vec{q}}^-$) are the creation and annihilation operators of electron (phonon); $\omega_{\vec{q}}$ is the frequency of acoustic phonon; $C_{\vec{q}}$ is the electron-acoustic phonon interaction constant: $C_{\vec{q}}^2 = \frac{\xi^2 q}{2\rho v_s V}$, here V , ρ , v_s and ξ are volume, the density, the acoustic velocity and the deformation potential constant; $I_{n',l',n,l}(\vec{q})$ is form factor.

The electron energy takes the simple:

$$\varepsilon_{n,l,p_z} = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2} \right) \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad l = 1, 2, 3, \dots).$$

In order to establish the quantum kinetic equations for electrons in quantum wire, we use general quantum equations for the particle number operator or electron distribution function:

$$i\hbar \frac{\partial f_{n,l,p_z}(t)}{\partial t} = \langle [a_{n,l,p_z}^+ a_{n,l,p_z}, H] \rangle_t \quad , \quad (2)$$

with $f_{n,l,p_z}(t) = \langle a_{n,l,p_z}^\dagger a_{n,l,p_z} \rangle_t$ is distribution function. From Eqs. (1) and (2), we obtain the quantum kinetic equation for electrons in quantum wire (after supplement: a linearly polarized electromagnetic wave field and a direct electric field \vec{E}_0):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{n,l,\vec{p}_z}(t)}{\partial t} + \left(e\vec{E}(t) + e\vec{E}_0 + \omega_c [\vec{p}_z, \vec{h}(t)] \right) \frac{\partial f_{n,l,\vec{p}_z}(t)}{\partial \vec{p}_z} = \\ = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n',l',\vec{q}} |D_{n,l,n',l'}(\vec{q})|^2 \cdot \sum_{L=-\infty}^{\infty} J_L^2\left(\frac{e\vec{E}_0\vec{q}}{m\Omega}\right) N_q \left\{ [f_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}}(t) - f_{n,l,\vec{p}_z}(t)] \delta(\varepsilon_{n',l',\vec{p}_z+\vec{q}} - \varepsilon_{n,l,\vec{p}_z} - L\Omega) + \right. \\ \left. + [f_{n',l',\vec{p}_z-\vec{q}_z}(t) - f_{n,l,\vec{p}_z}(t)] \delta(\varepsilon_{n',l',\vec{p}_z-\vec{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\vec{p}_z} - L\Omega) \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

where $\vec{h} = \frac{\vec{H}}{H}$ is the unit vector in the magnetic field direction, $J_L\left(\frac{e\vec{E}_0\vec{q}}{m\Omega}\right)$ is the Bessel function of real argument; N_q is the time-independent component of distribution function of phonon: $N_q = \frac{k_B T}{v_s q_z}$; ω_c is the cyclotron frequency, $\tau(\varepsilon)$ is the relaxation time of electrons with energy ε .

For simplicity, we limit the problem to the case of $l = 0, \pm 1$. We multiply both sides Eq. (2) by $(-e/m)\vec{p}_z \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,\vec{p}_z})$ are carry out the summation over n, l and \vec{p}_z , we obtained:

$$\left(-i\omega + \frac{1}{\tau(\varepsilon)}\right)\vec{R}(\varepsilon) = \vec{Q}(\varepsilon) + \vec{S}(\varepsilon) + \omega_c [\vec{R}_0(\varepsilon), \vec{h}], \quad (4)$$

$$\left(-i\omega + \frac{1}{\tau(\varepsilon)}\right)\vec{R}^*(\varepsilon) = \vec{Q}(\varepsilon) + \vec{S}^*(\varepsilon) + \omega_c [\vec{R}_0(\varepsilon), \vec{h}], \quad (5)$$

$$\frac{\vec{R}_0(\varepsilon)}{\tau(\varepsilon)} = \vec{Q}_0(\varepsilon) + \vec{S}_0(\varepsilon) + \omega_c [\vec{R}(\varepsilon) + \vec{R}^*(\varepsilon), \vec{h}], \quad (6)$$

with:

$$\vec{R}(\varepsilon) = \frac{e}{m} \sum_{n,l,\vec{p}_z} \vec{p}_z f_1(\vec{p}_z) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,l,p_z}), \quad (7)$$

$$\vec{Q}(\varepsilon) = \frac{e^2 \vec{E}}{m^2 k_B T} \sum_{n,l,p_z} p_z^2 f_0(\varepsilon_{n,l,p_z}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,l,p_z}), \quad (8)$$

$$\vec{Q}_0(\varepsilon) = \frac{e^2 \vec{E}_0}{m^2 k_B T} \sum_{n,l,p_z} p_z^2 f_0(\varepsilon_{n,l,p_z}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,l,p_z}), \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_0(\varepsilon) = & \frac{2\pi e}{m} \sum_{n,l,n',l',p_z,q_z} C_q^2 |I_{n,l,n',l'}(q)|^2 N_q \bar{q}_z f_{10}(\bar{p}_z) \frac{e^2 F^2 q_z^2}{4m^2 \Omega^4} \times \\
& \times \left\{ \left[\delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z+\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} - \omega_q + \Omega) + \delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z+\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} - \omega_q - \Omega) \right] - \right. \\
& - \left. \left[\delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z-\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} + \omega_q + \Omega) + \delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z-\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} + \omega_q - \Omega) \right] \right\} \times \\
& \times \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z}),
\end{aligned} \tag{10}$$

where $f_{10}(\bar{p}_z) = -\bar{p}_z \bar{\chi}_0 \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{n,l,p_z}}$; $\bar{\chi}_0 = \frac{e}{m} \bar{E}_0 \tau(\varepsilon_{n,l,p_z})$; $f_0 = n_0 \exp(-\frac{\varepsilon_{n,l,p_z}}{k_B T})$; n_0 is particle density; k_B is Boltzmann constant; T is temperature of system.

$$\begin{aligned}
\bar{S}(\varepsilon) = & \frac{2\pi e}{m} \sum_{n,l,n',l',p_z,q_z} C_q^2 |I_{n,l,n',l'}(q)|^2 N_q \bar{q}_z f_1(\bar{p}_z) \frac{e^2 F^2 q_z^2}{4m^2 \Omega^4} \times \\
& \times \left\{ \left[\delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z+\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} - \omega_q + \Omega) + \delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z+\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} - \omega_q - \Omega) \right] - \right. \\
& - \left. \left[\delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z-\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} + \omega_q + \Omega) + \delta(\varepsilon_{n,l',\bar{p}_z-\bar{q}_z} - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z} + \omega_q - \Omega) \right] \right\} \times \\
& \times \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,l,\bar{p}_z}),
\end{aligned} \tag{11}$$

with $f_1(\bar{p}_z) = -\bar{p}_z \bar{\chi} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{n,l,p_z}}$; $\bar{\chi} = \frac{e}{m} \bar{E} \frac{\tau(\varepsilon_{n,l,p_z})}{1 - i\omega\tau(\varepsilon_{n,l,p_z})}$.

Solving the equation system (4), (5), (6), we obtain:

$$\bar{R}_0(\varepsilon) = \tau(\varepsilon)(\bar{Q}_0 + \bar{S}_0) + \frac{2\omega_c \tau^2(\varepsilon)}{1 + \omega^2 \tau^2(\varepsilon)} [\bar{Q}, \bar{h}] + 2\omega_c \tau^2(\varepsilon) \operatorname{Re} \left\{ \frac{[\bar{S}, \bar{h}]}{1 - i\omega \tau(\varepsilon)} \right\}. \tag{12}$$

The density of current:

$$\bar{j}_0 = \int_0^\infty \bar{R}_0(\varepsilon) d\varepsilon = [AC + D] \bar{E}_0 + \frac{2\omega_c \tau(\varepsilon_F)}{1 + \omega^2 \tau^2(\varepsilon_F)} \left[\frac{1 - \omega^2 \tau^2(\varepsilon_F)}{1 + \omega^2 \tau^2(\varepsilon_F)} AC + D \right] [\bar{E}, \bar{h}], \tag{13}$$

$$\text{where } A = \frac{n_0 e^3 F^2 \tau^2(\varepsilon_F) \xi^2}{32\pi m^4 \rho v_s^2 \Omega^2} \sum_{n,l,n',l'} I_{n,l,n',l'}^2 \exp \left\{ -\beta \frac{\pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2} \right) \right\}, \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
C = & -4N_1^{7/2} \left[12\psi_{(4,9/2;\beta \frac{N_1}{2m})} + 24\psi_{(3,7/2;\beta \frac{N_1}{2m})} + \psi_{(2,5/2;\beta \frac{N_1}{2m})} \right] - \\
& -4N_2^{7/2} \left[12\psi_{(4,9/2;\beta \frac{N_2}{2m})} + 24\psi_{(3,7/2;\beta \frac{N_2}{2m})} + \psi_{(2,5/2;\beta \frac{N_2}{2m})} \right],
\end{aligned} \tag{15}$$

$$N_1 = -\frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} (n'^2 - n^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} (l'^2 - l^2) + \Omega \right], \quad (16)$$

$$N_2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} (n'^2 - n^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} (l'^2 - l^2) - \Omega \right], \quad (17)$$

$$D = \frac{n_0^2 e^2 \hbar}{4\pi m^2 k_B T} \left(\beta \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{-2} \tau(\epsilon_F) \sum_{n,l} \exp \left\{ -\beta \frac{\pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2} \right) \right\}, \quad (18)$$

$\Psi_{(a,b,z)} = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty e^{-zx} x^{a-1} (1+ax)^{b-a-1} dx$ is the Hypergeometrix function.

We obtain the expressions for the current density \vec{j}_0 , and select: $\vec{E} \uparrow \uparrow 0x$; $\vec{h} \uparrow \uparrow 0y$:

$$j_{0x} = [AC + D]E_{0x}; \quad j_{0y} = [AC + D]E_{0y} \quad (19)$$

$$j_{0z} = [AC + D]E_{0z} + \frac{2\omega_c \tau(\epsilon_F)}{1 + \omega^2 \tau^2(\epsilon_F)} \left[\frac{1 - \omega^2 \tau^2(\epsilon_F)}{1 + \omega^2 \tau^2(\epsilon_F)} AC + D \right] E \quad (20)$$

Equation (13) shows the dependent of the direct current density on the frequency Ω of the laser radiation field, the frequency ω of the linearly polarized electromagnetic wave, the size of the wire. We also see the dependence of the constant current density on characteristic parameters for quantum wire such as: wave function; energy spectrum; form factor $I_{n,l,n',l'}$ and potential barrier, that is the difference between the quantum wire, superlattices, quantum wells, and bulk semiconductors.

3. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSION

In this section, we will survey, plot and discuss the expressions for j_{0z} for the case of a specific GaAs/GaAsAl quantum wire. The parameters used in the calculations are as follows [2-12]: $m = 0,0665m_0$ (m_0 is the mass of free electron); $\epsilon_F = 50meV$; $\tau(\epsilon_F) \sim 10^{-11}s^{-1}$; $n_0 = 10^{23} m^{-3}$; $\rho = 5.3 \times 10^3 kg / m^3$; $\xi = 2.2 \times 10^{-8} J$; $E = 10^6 V/m$; $E_0 = 5.10^6 V/m$; $F = 10^5 N$.

Fig.1 shows the dependence of j_{0z} on the frequency Ω of the intense laser radiation. From these figure, we can see the nonlinear dependence of j_{0z} on the frequency Ω of the intense laser radiation, when the frequency Ω of the intense laser radiation increases j_{0z} increases.

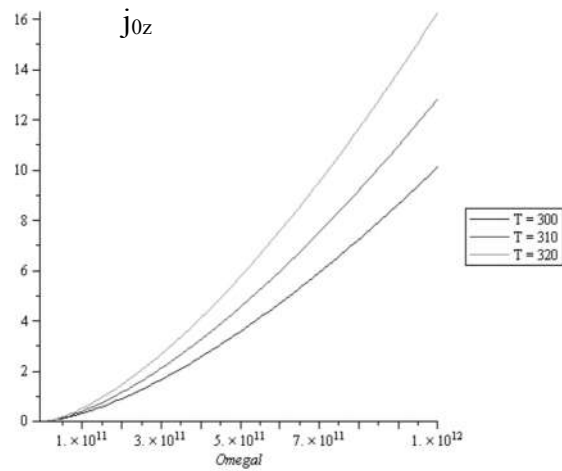


Fig.1. The dependence of j_z on the frequency Ω of the laser radiation with different values of T

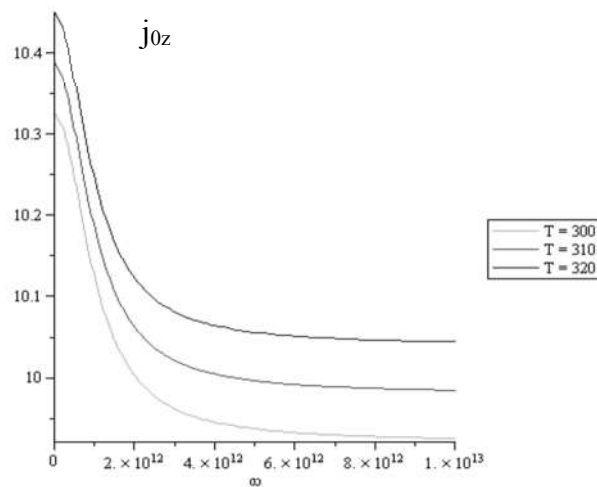


Fig.2. The dependence of j_z on the frequency ω of the electromagnetic wave with different values of T

Fig.2 shows the dependence of j_{0z} on the frequency ω of the electromagnetic wave. From these figure, we can see the nonlinear dependence of j_{0z} on the frequency ω of the electromagnetic wave, when the frequency ω of the electromagnetic wave increases j_{0z} decreases and j_{0z} will have a stable value when ω có giá trị cỡ 10^{13} .

Fig.3 shows the dependence of j_{0z} on the size of the wire. From this figure, when radius increase j_{0z} increases, when L_x, L_y continue to increase then j_{0z} will have a stable value.

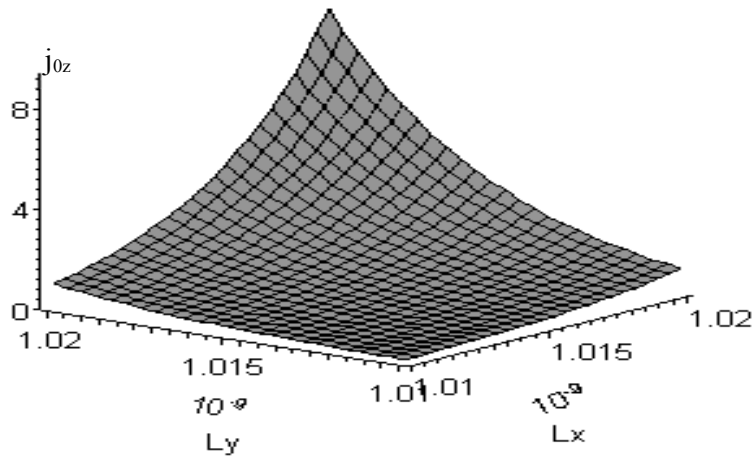


Fig. 3. The dependence of j_{0z} on the size of the wire

4. CONCLUSION

In this paper, we have studied the photostimulated quantum effect in rectangular quantum wire with a infinite potential for the case of electron – acoustic phonon scattering. In this case, one dimensional electron systems is placed in a linearly polarized electromagnetic wave, a dc electric field and a laser radiation field at high frequency. We obtain the expressions for current density vector \vec{j}_0 , in which, plot and discuss the expressions for j_{0z} . The expressions of j_{0z} show the dependence of j_{0z} on the frequency ω of the linearly polarized electromagnetic wave, on the size of the wire, the frequency Ω of the intense laser radiation; and on the basic elements of quantum wire with a infinite potential. The analytical results are numerically evaluated and plotted for a specific quantum wire GaAs/AlGaAs.

Acknowledgment: This work was completed with financial support from project B2016.DNA.25, thanks also basic research program of the Hanoi Metropolitan University.

REFERENCES

1. G.M.Shmelev, G.I.Tsurkan and É.M.Épshtein (1982), “Photostumilated radioelectrical transverse effect in semiconductors”, *Phys. Stat. Sol. B*, Vol. 109, p.53.
2. B.D.Hung, N.V.Nhan, L.V.Tung, and N.Q.Bau (2012), “Photostimulated quantum effects in quantum wells with a parabolic potential”, *Proc. Natl. Conf. Theor. Phys*, Vol 37, p.168.

3. S.V.Kryuchkov, E.I.Kukhar' and E.S.Sivashova (2008), "Radioelectric effect in a superlattice under the action of an elliptically polarized electromagnetic wave", *Physics of the Solid State*, Vol 50, No. 6, p.1150.
4. A.Grinberg and Luryi (1988), "Theory of the photon - drag effect in a two-dimensional electron gas", *Phys. Rev. B* 38, p.87.
5. N.Q.Bau and B.D.Hoi (2012), "Influence of a strong electromagnetic wave (Laser radiation) on the Hall effect in quantum well with a parabolic potential", *J. Korean Phys. Soc.*, Vol.60, p.59.
6. V.L.Malevich Izv (1977), "High-frequency conductivity of semiconductors in a laser radiation field", *Radiophysics and quantum electronics*, Vol. 20, Issue 1, p.98.
7. M.F.Kimmitt, C.R.Pidgeon, D.A.Jaroszynski, R.J.Bakker, A.F.G.Van Der Meer, and D.Oepts (1992), "Infrared free electron laser measurement of the photon drag effect in P-Silicon", *Int. J. Infrared Millimeter Waves*, Vol 13, No 8, p.1065.
8. S.D.Ganichev, H.Ketterl, and W.Prettl (1999), "Spin-dependent terahertz nonlinearities at inter-valance-band absorption in p-Ge", *Physica B* 272, p.464.
9. G.M.Shmelev, L.A.Chaikovskii and N.Q.Bau (1978), "HF conduction in semiconductors superlattices", *Sov. Phys. Tech. Semicond.*, Vol 12, No. 10, p.1932.
10. N.Q.Bau, D.M.Hung and L.T.Hung (2010), "The influences of confined phonons on the nonlinear absorption coefficient of a strong electromagnetic wave by confined electrons in doping superlattices", *PIER Letters*, Vol. 15, p.175.
11. N.Q.Bau and D.M.Hung, "Calculating of the nonlinear absorption coefficient of a strong electromagnetic wave by confined electrons in doping superlattices", *PIER B* 25 (2010) 39.
12. N.Q.Bau, D.M.Hung and N.B.Ngoc (2009), "The nonlinear absorption coefficient of a strong electromagnetic wave caused by confined electrons in quantum wells", *J. Korean Phys. Soc* 54, p.765.

HIỆU ỨNG KÍCH THÍCH QUANG LƯỢNG TỬ TRONG DÂY LƯỢNG TỬ HÌNH CHỮ NHẬT VỚI HỐ THỂ CAO VÔ HẠN TRONG TRƯỜNG HỢP TÁN XẠ ELECTRON – PHONON ÂM

Tóm tắt: Thu được biểu thức giải tích cho mật độ dòng điện trên cơ sở phương trình động lượng tử cho các eletrons dưới ảnh hưởng của các trường sóng điện từ phân cực thẳng, điện trường không đổi và laze cường độ mạnh trong dây lượng tử hình chữ nhật với hố thể cao vô hạn trong trường hợp tán xạ electron-phonon âm. Mật độ dòng điện là một hàm số phụ thuộc vào tần số của laze, tần số của sóng điện từ phân cực thẳng, nhiệt độ hệ và kích thước của dây lượng tử. Biểu thức giải tích của mật độ dòng được đánh giá số và vẽ đồ thị cho dây lượng tử đặc biệt GaAs/AlGaAs. Các kết quả nhận được trong dây lượng tử được so sánh với các kết quả tương ứng trong bán dẫn khối và siêu mạng cho thấy sự khác biệt.

Từ khóa: Bán dẫn, hố lượng tử, dây lượng tử, siêu mạng, chấm lượng tử.

INFLUENCE OF Ni SUBSTITUTION FOR Mn ON THE STRUCTURE AND IONIC CONDUCTIVITY OF $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ SPINEL MATERIALS PREPARED BY THE SOL-GEL METHOD

Ta Anh Tan¹, Le Huy Son¹, Dang Tran Chien²

¹ Faculty of Natural Sciences, Hanoi Metropolitan University

² Hanoi University of Natural Resources and Environment

Abstract: Electrode materials $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ with ($x = 0; 0.05; 0.1; 0.2$) were synthesized by the sol-gel method from lithium acetate, manganese acetate and nickel acetate. The FE-SEMs show that the morphology of the material changes when the annealing temperature and the proportion replacement of Mn with Ni changes. XRDs confirmed that the samples have $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ spinel structures without any contaminants. Lattice constants of the material increase with annealing temperature and decrease when Ni ratio substitution increases. As the proportion replacement of Ni increases, the particle size of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ samples decreases while the grain boundary changes from the rounded form at $x = 0$ to the form of sharp edges at $x = 0.1$ and 0.2 . These results show the effect of nickel doping on crystal stability. The studies of impedance spectroscopy were applied to the bulk materials showing the Li^+ ion conductivity of the material. The results indicate that substituting Ni for Mn improved the conductivity of the materials $\sigma_p = 19,773 \times 10^{-5} \text{ S.cm}^{-1}$ with $x = 0.1$, annealing temperature at 700°C compared to $\sigma_p = 0.111 \times 10^{-5} \text{ S.cm}^{-1}$ of the samples with $x = 0$.

Keywords: Electrode materials, $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$, Liti-ion batteries, Ion conductivity, Ni substitution.

Email: tatan@daihocthudo.edu.vn

Received 05 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

Cathode materials for lithium ion battery are based on three basic materials. Those are: i/ LiCoO_2 layer structure (LCO); ii/ LiMn_2O_4 (LMO) spinel structure; iii/ LiFePO_4 olivine structures (LFP). These are materials that exchange and store H^+ and Li^+ ions very well, and they are the basis materials used for making cathode electrodes in lithium ion batteries (LIBs).

The most important thing is that ion-exchange electrode materials used in lithium ion batteries must simultaneously have high electron conductivity and conductivity. However, the recent works have shown that ionic conductivity of LiMn_2O_4 reached the value of $10^{-6} \div 10^{-10} \text{S.cm}^{-1}$ [1]. This low value of ionic conductivity leads to weakness of the electrochemical activity and slowness of the flow rate of the battery cycling.

Thus, many studies have attempted to improve the ionic conductivity of the materials such as changing in the methods of fabrication; synthesis temperature or replacement of Mn in LiMn_2O_4 with the metals (Li, Co, Ni, Al, Mg, Cr, Fe). These can improve the conductivity of the materials. Among these materials, $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ shows the best charging/discharging stability [2-6]. Although $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ performs a good improvement in lithium ion conductivity and stability during charging/discharging but if a large amount of Ni substitution for Mn can significantly reduce power at 4 V. Therefore, most studies on $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ have been limited with $x \leq 0.2$ for stable crystalline structure and optimum electrochemical efficiency [7, 8].

There are many methods used for synthesis of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ spinel such as: solid phase reaction method [9]; sol-gel method [10]; polime spray [11]; hydrothermal[12], etc... However, in this study, the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ spinel with ($x = 0; 0.05; 0.1$ and 0.2) were fabricated by the sol-gel method. This is a simple technology method, high economic efficiency and can be produced in large quantities.

2. EXPERIMENTAL

$\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ ion-conducting materials are made from lithium acetate, manganese acetate and nickel acetate based on the ratio of atomic composition Li: Ni: Mn = 1: x :2 - x with ($x = 0; 0.05; 0.1$ and 0.2). The initial materials were dissolved in deionized water at a certain ratio of solubility, then stirred at 80 °C for 10 hours (to get the gel formation, citric acid is added at a ratio of Li: Mn: citric = 1: 2: 3 and the pH is kept at 7 by addition of NH_3) then a gel is formed. This gel is dried in air for 15 hours at the temperature of 120 °C. Finally, the materials were annealed at temperature of 300 °C; 500 °C; 700 °C; and 800 °C for 6 hours. The samples are denoted as in Tab 1.

The X-ray diffraction system D5005 SIEMEN with the CuK_α emission source ($\lambda = 1.5406\text{\AA}$) was used to investigate the structural characteristics of the materials. The constants of the lattices and crystal structure parameters were determined by Sherrer mode and Unitcell software. Morphological characteristics were examined with scanning electron microscope FE-SEM HITACHI 4800.

Tab. 1. Symbol of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ with Ni substitution $x = 0, 0.05, 0.1$ and 0.2 at annealing temperature of $300\text{ }^\circ\text{C}, 500\text{ }^\circ\text{C}, 700\text{ }^\circ\text{C}$ and $800\text{ }^\circ\text{C}$.

Sample symbol	$\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$	Temperature ($^\circ\text{C}$)
G0-300	$x = 0$	300
G0-500	$x = 0$	500
G0-700	$x = 0$	700
G0-800	$x = 0$	800
G1-300	$x = 0,05$	300
G1-500	$x = 0,05$	500
G1-700	$x = 0,05$	700
G1-800	$x = 0,05$	800
G2-300	$x = 0,1$	300
G2-500	$x = 0,1$	500
G2-700	$x = 0,1$	700
G2-800	$x = 0,1$	800
G3-300	$x = 0,2$	300
G3-500	$x = 0,2$	500
G3-700	$x = 0,2$	700
G3-800	$x = 0,2$	800

Impedance spectra were applied to investigate the ionic conductivity of the samples via electrochemical systems Autolab PSGTAT 100. The ionic conductivity of the material is determined by the method of matching the experimental results using the NOVA software. The samples were prepared by pressing a 1cm- diameter pellet with a pressure of 40 MPa/cm^2 . A Au electrode with a diameter of 0.8 cm and a thickness of $1\text{ }\mu\text{m}$ was deposited on both sizes of each sample using the vacuum evaporation method. The pattern is described in fig.1.

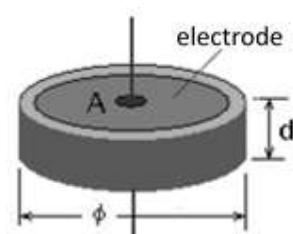


Fig. 1. Sample for impedance spectrometry

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Effect of temperature on morphology of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials

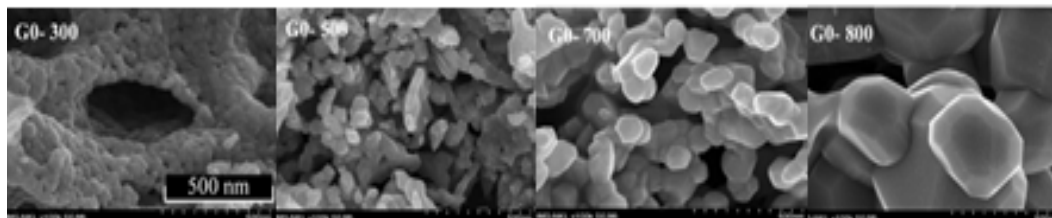


Fig. 2. SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with replacement ratio of Ni ($x = 0$) synthesized by the sol - gel method and then annealed at 300 °C; 500 °C; 700 °C and 800 °C

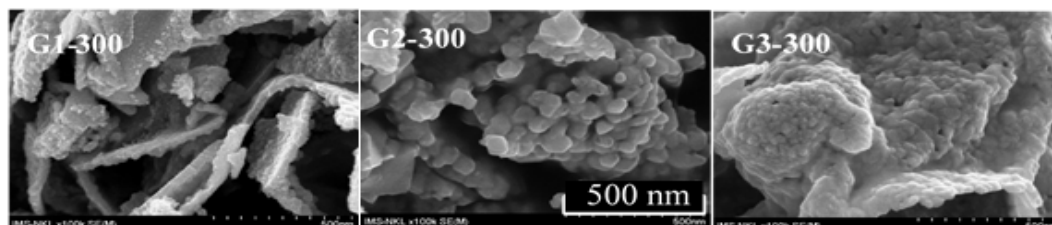


Fig. 3. SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with replacement ratio Ni ($x = 0.05$; 0.1 and 0.2) annealed at 300 °C

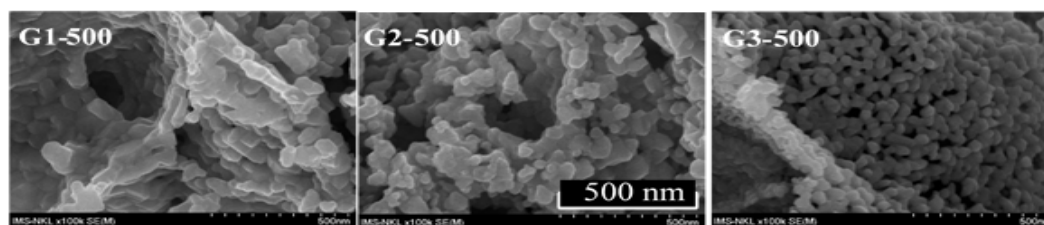


Fig. 4. SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with replacement ratio of Ni ($x = 0.05$; 0.1 and 0.2) annealed at 500 °C

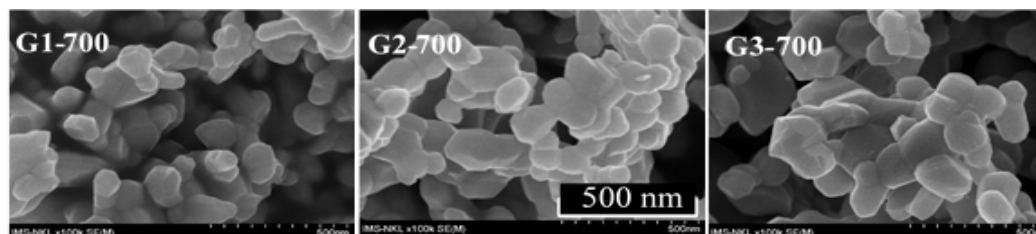


Fig. 5. SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with replacement ratio of Ni ($x = 0.05$; 0.1 and 0.2) annealed at 700 °C.

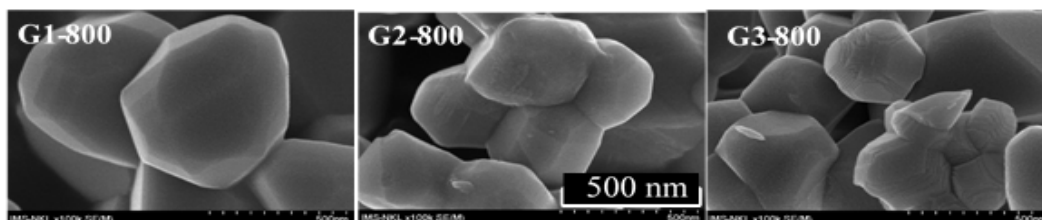


Fig. 6. SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with replacement ratio Ni ($x = 0.05$; 0.1 and 0.2) annealed at $800\text{ }^\circ\text{C}$.

The images from Figures 2 to 6, are the SEM images of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ material samples with different proportions of Ni molecules and at the annealing temperature of $300\text{ }^\circ\text{C}$; $500\text{ }^\circ\text{C}$; $700\text{ }^\circ\text{C}$ and $800\text{ }^\circ\text{C}$. SEM images show that the morphology of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with the replacement ratio of Ni (x ranges 0 to 0.2) with annealing temperature at from $300\text{ }^\circ\text{C}$ to $500\text{ }^\circ\text{C}$. The grain sizes change very little while being grouped into clusters. When the annealing temperature increases, the particles tend to separate, and at the temperature at from $700\text{ }^\circ\text{C}$ to $800\text{ }^\circ\text{C}$ the particle sizes increase very strongly. The average size of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ crystal particles calculated from the SEM image are shown in Tab 2. The above results show that the size of the crystalline particles depends strongly on the annealing process.

Tab. 2. Average value of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ particle annealed at different temperatures

$\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$	$T = 300\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 500\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 700\text{ }^\circ\text{C}$	$T = 800\text{ }^\circ\text{C}$
$x = 0$	45 nm	54 nm	95 nm	500 nm
$x = 0,05$	~ 20 nm	45 nm	100 nm	580 nm
$x = 0,1$	58 nm	60 nm	120 nm	310 nm
$x = 0,2$	42 nm	40 nm	130	270

At temperatures below $500\text{ }^\circ\text{C}$, the grain size changes little when the annealing temperature between $300\text{ }^\circ\text{C}$ and $500\text{ }^\circ\text{C}$. When the annealing temperature is increased to $700\text{ }^\circ\text{C}$, particle size increases significantly and particles tend to separate. Especially at $800\text{ }^\circ\text{C}$ the particles grow very fast and the size increases several times. The rapid growth of particle size at temperatures of $700\text{ }^\circ\text{C}$ and $800\text{ }^\circ\text{C}$ is due to the formation of LiMn_2O_4 at about $700\text{ }^\circ\text{C}$ ($698\text{ }^\circ\text{C}$). This has been pointed out from the schema differential thermal analysis of the sample DTG and DTA of the LiMn_2O_3 [13] and it also explains why at $800\text{ }^\circ\text{C}$ particle size increased several times compared to that at below $700\text{ }^\circ\text{C}$.

3.2. Effect of Ni replacement ratio on the morphology of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials

SEM images (Figure 2 ÷ 6) show that at temperatures below 700 °C, replacement ratio of Ni dose not impact to the crystal particle size (the sizes ranged from 40 nm to 60 nm). At a temperature of 700 °C the particle size decreases, the grain boundary changes from round to sharp when the replacement ratio of the Ni molecule increases. This demonstrates that the presence of Ni increases the stability of the spinel structure of the LiMn_2O_4 materials. It is perfectly suited to the study [2, 6]. In this work, Ni substituted for Mn reduces lattice distortion Jahn - Teller [14-16]. In other words, there was a substitution of Ni atoms for Mn atoms in the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ material produced by the sol-gel method.

3.3. Structural characteristics of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials

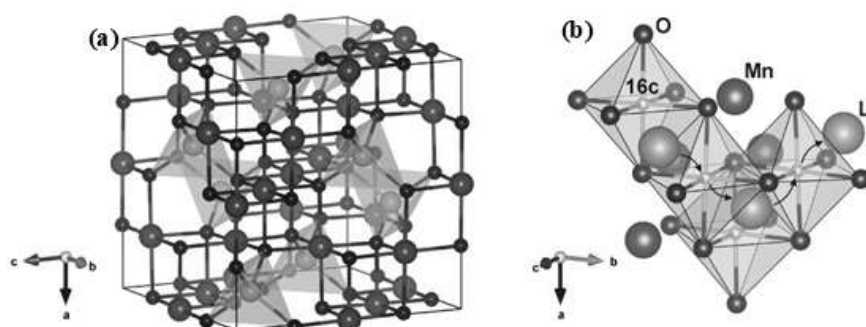


Fig. 7. Crystal structure of LiMn_2O_4 materials (a). Illustrate the diffusion of Li^+ through location 16c (b). The black arrow indicates the diffusion path of the Li^+ ion.

As known at room temperature, the LiMn_2O_4 spinel materials have a cubic structure with the space group $\text{Fd-}3\text{m}$, where the Li, Mn and O atoms respectively occupy positions 8a, 16d, and 32e [17]. Meanwhile lattice structure and the arrangement of atoms in the lattice can be shown as in Figure 7a and the formation of Li^+ ion channel through the octahedral as presented in Figure 7b.

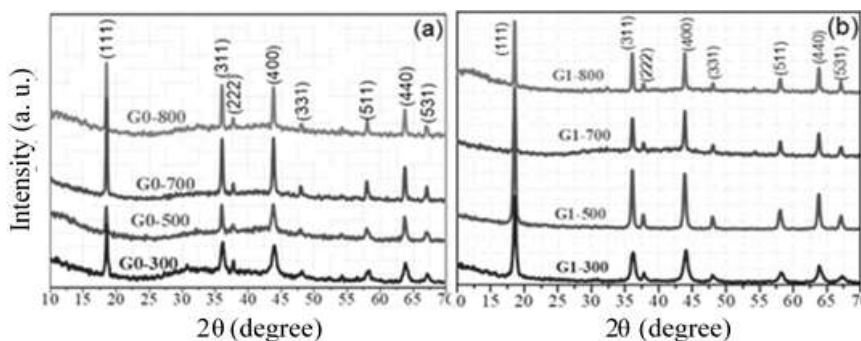


Fig. 8. XRD spectra of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with Ni substitution $x = 0$ (a) and 0.05 (b) synthesized by the sol-gel method at 300 °C; 500 °C; 700 °C and 800 °C.

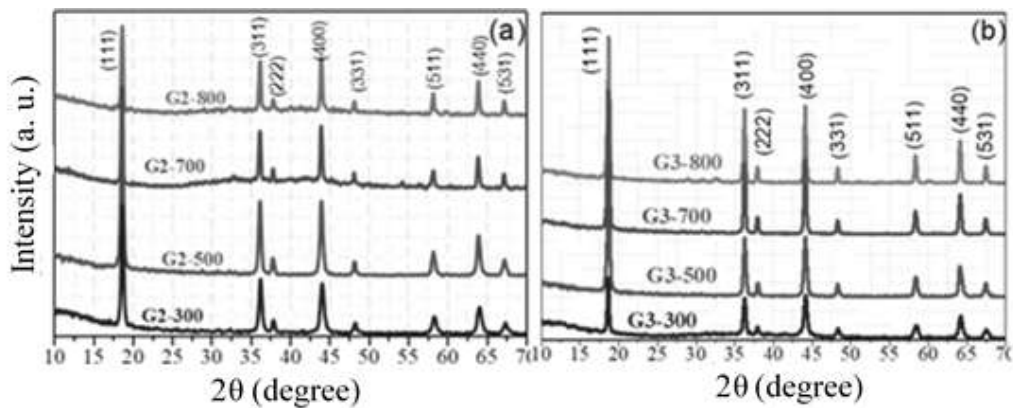


Fig. 9. XRD spectra of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials with Ni substitution $x = 0.1$ (a) and 0.2 (b) synthesized by the sol-gel method at $300\text{ }^\circ\text{C}$; $500\text{ }^\circ\text{C}$; $700\text{ }^\circ\text{C}$ and $800\text{ }^\circ\text{C}$.

Fig. 8 and 9 are the XRD spectra of G0, G1, G2 and G3 samples synthesized by the sol-gel method at $300\text{ }^\circ\text{C}$; $500\text{ }^\circ\text{C}$; $700\text{ }^\circ\text{C}$ and $800\text{ }^\circ\text{C}$. At all Ni replacement ratios and annealing temperatures, all diffraction peaks on the XRD spectra match a single JPCDS No 35-0782. This suggests that substituting Ni with proportions ($x = 0 \div 0.2$) did not change the structure of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials compared to the structure of the original LiMn_2O_4 spinel materials. This result shows that Ni has replaced the Mn position in the crystal lattice. In other words, $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials have been successfully synthesized in which the substitution of Ni for Mn with the ratio of $x = 0$; 0.05 ; 0.1 and 0.2 . However, X-ray diffraction is only sufficient to show that the vertices of the spinel material phase are formed without being able to show whether the material produced contains Ni ions. In order to obtain the proof of this substitution in the formulated samples, we proceeded to analyze the Raman spectra of Ni substitution samples for Mn.

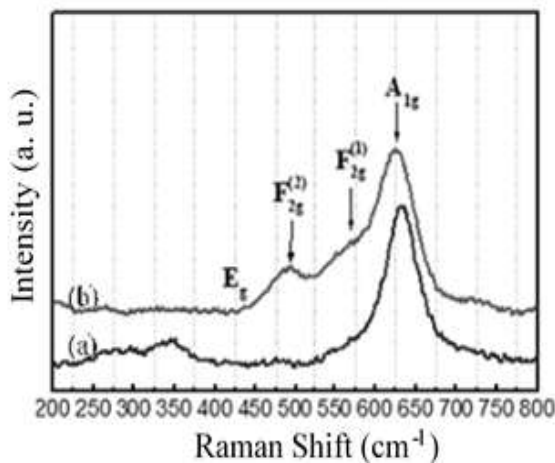


Fig. 10. Raman Spectra of G0-700 and G2-700 ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ replacement ratio of Ni $x = 0$ (a) and $x = 0.1$ (b)).

Fig.10 is the Raman scattering spectra of the samples G0-700 and G2-700. Fig.10a, the Raman spectra of spinel LiMn_2O_4 shows a broad and strong region (Ranging Mn-O stretching) at $\sim 620 \text{ cm}^{-1}$ accompanied by a small peak at $\sim 580 \text{ cm}^{-1}$.

They are closely related to the octahedral MnO_6 and the oxidation state of Mn, respectively called A_{1g} and $F_{2g}^{(1)}$ [18]. The expansion of the A_{1g} region is due to the small difference in the octahedral Mn^{4+}O_6 octahedral structure and the octahedral Mn^{3+}O_6 is partially distorted in LiMn_2O_4 . Its intensity depends on the concentration of Mn^{4+} in the material and reflects the average oxidation state of Mn. For this reason, according to Yingjin Wei and colleagues [18] the regions A_{1g} and $F_{2g}^{(1)}$ are not separated in unmodified LiMn_2O_4 because the concentrations of Mn^{3+} and Mn^{4+} are equal in the material. Then $F_{2g}^{(1)}$ is clearly distinguished by the substitution of Ni and the sequence A_{1g} becomes distinct and sharper from the region $F_{2g}^{(1)}$. The change in A_{1g} and $F_{2g}^{(1)}$ with the replacement of Ni is consistent with the increase in Mn^{4+} concentration as well as the increase of Mn oxidation state in $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$. Peak $F_{2g}^{(1)}$ derives primarily from the oscillation of the Mn^{4+} -O bond. Its intensity depends on the concentration of Mn^{4+} in the medium reflecting the oxidation state of Mn in Figure 10b.

3.4. Effects of temperature and Ni substitution ratio on the lattice constants of the materials

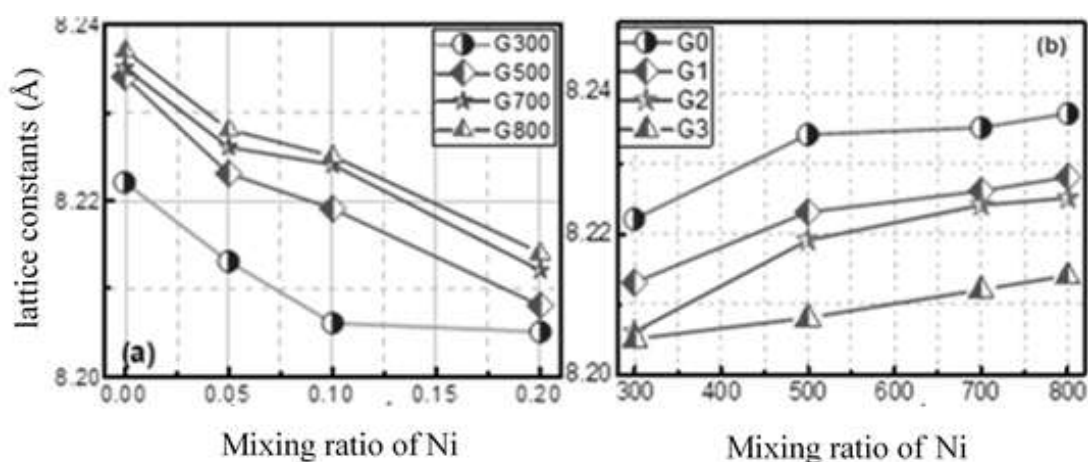


Fig. 11. Dependence of the lattice constants on the Ni (a) ratio and the annealing temperature (b).

Fig.11 showed the dependence of the lattice constant on the annealing temperature. (Fig.11b) and the substitution ratio of Ni for Mn (Fig.11a). As can be seen from Fig.11b,

lattice constant of the materials increased slightly, about 0.015 Å when the annealing temperature increased from 300 °C to 800 °C. The increase of crystalline lattice constant of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials is explained by the transition of Mn^{4+} to Mn^{3+} (LS or HS) and the transition of Mn^{3+} (LS) to Mn^{3+} (HS) as the annealing temperature increases. Fig. 11 a shows that the crystal lattice constant of the material decreases to 0.023 Å when the replacement ratio of Ni increases from $x = 0$ to $x = 0.2$. From XRD spectra shown in fig. 8 and 9, one can find in all the samples, the substitution ratio of Ni for Mn increases, the diffraction peak at angle 2θ is higher. This suggests that the lattice constant of the material is reduced when the replacement ratio of Ni increases [18]. It is explained that when the replacement ratio of Ni in the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials increases leading to increase of the Mn^{4+} concentration. The ionic radius of Mn^{4+} ($r = 0.53$ Å) is much smaller than Mn^{3+} ($r = 0.645$ Å). The ionic radius of Ni^{3+} ($r = 0.56$ Å) is smaller than the radius of Mn^{3+} ion ($r = 0.645$ Å) [19]. When Mn^{3+} ion is replaced by Ni^{3+} ion, Mn - O distance was reduced. Oxygen defect spaces at high annealing temperatures were also reduced [18].

3.5. Li^+ ion conductivity of the materials system

Fig.12 showed the typical Nyquist plot in the complex plane presented the imaginary part Z'' depends on the real part Z' of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials at room temperature. The impedance spectra consist of two semicircular regions. A semicircular in the high frequency region from 1MHz to a few tens Hz, they are attributed to the lithium ion conduction in the particle and a semicircular in the low frequency region is attributed to the ionic conduction at the grain boundary [19, 20]. Total resistance ($R_b + R_{gb}$) and bulk resistor (R_b) of the samples correspond to block point on the right and the left of the semicircular with the real axis in the schema. The value of the grain boundary resistance (R_{gb}) is reflected by the difference between ($R_b + R_{gb}$) and R_b .

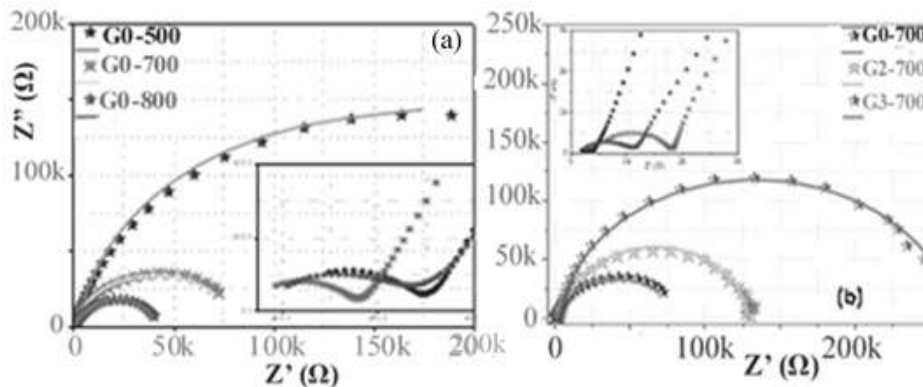


Fig. 12. Nyquist diagram of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ doped Ni ($x = 0; 0.1$ and 0.2) synthesized by Sol-gel at 700 °C (a) and block points of the two regions of the semicirculars (b).

Fig.12 showed that when synthesis temperature or ratio of Ni change, it leads to changing block point in both of the low frequency and high frequency on the Nyquits diagram. This shows that the R_b and R_{gb} resistors are all change and the particle conductivity σ_b and grain boundary conductivity σ_{gb} of the materials will depend on both synthesis temperature and replacement ratio of Ni with Mn.

The dependence of the conductivity on the nickel substitution ratio and the synthetic temperature are shown in Fig.13 and 14.

The calculation results of the lithium ion conductivity of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials showed that the lithium ion conductivity changed when the nickel replacement ratio and annealing temperature changed. In particular, the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials have a nickel replacement ratio of $x = 1$ annealed at 700°C gives the best lithium ion conductivity (G2-700 sample) with the largest total conductivity $\sigma_{tp} = 19,773 \times 10^{-5} \text{ S.cm}^{-1}$. On the contrary, samples G0-500 with the smallest conductivity $\sigma_{tp} = 0,116 \times 10^{-5} \text{ S.cm}^{-1}$.

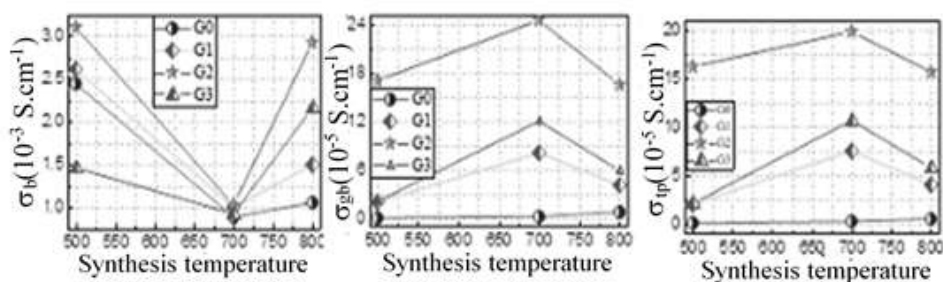


Fig.13. Influence of synthesis temperature on ion conductivity of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ synthesized by sol-gel method (G0, G1, G2 and G3).

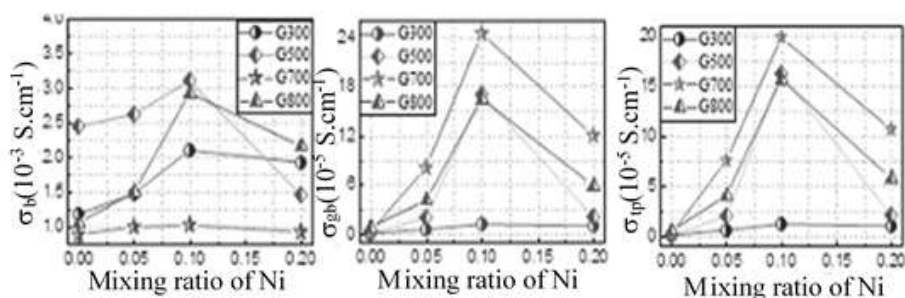


Fig.14. Influence of the mixing ratio of Ni on the ion conductivity of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials synthesized by the sol-gel method (G0, G1, G2 and G3).

4. CONCLUSION

$\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ materials have been successfully fabricated by the sol-gel method. Particle size increases as the annealing temperature increases and decreases when the

substitution ratio of Ni substituted for Mn increases. The surface of the $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ particles from the rounded form turns sharp when the ratio of Ni increases. Particle sizes change in the range of 30 nm to 500 nm. The lattice constant (a) of the materials increases with increase of the annealing temperature and decreases with the increase of the ratio of Ni. The values are between 8.21 and 8.24 Å. The ionic conductivity of the materials is strongly dependent on the substitution ratio of Ni molecules for Mn. The sample has the best conductivity at the ratio of $x = 0.1$; $T = 700\text{ }^\circ\text{C}$ and gives the maximum ionic conductivity $\sigma_{\text{tp}} = 19,773.10^{-5}\text{ S.cm}^{-1}$.

REFERENCES

1. Wu.M, B.Xu, and C.Ouyang (2016), *Physics of electron and lithium-ion transport in electrode materials for Li-ion batteries*. Chin.Phys.B, **25**(1): p.018206
2. Xin.G, et al. (2012), *Synthesis of Spinel $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ ($x=0, 0.1, 0.16$) and Their High Rate Charge-Discharge Performances* Int. J. Electrochem. Sci, **7**: pp.2504 – 2512
3. Kebede.M.A, et al (2013), *Synthesis and Electrochemical Properties of Ni Doped Spinel $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 0.5$) Cathode Materials for Li-Ion Battery*. ECS Transactions, **50**(40): pp.1-14
4. Wang.F.X, et al (2013), *Spinel $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ as cathode material for aqueous rechargeable lithium batteries*. Electrochimica Acta, **93**: pp.301-306.
5. Adnan Hafez.M, K.Mohammad Bashir, and K. Ahmed Khaled (2016), *Studying Structural and Optical Properties of Thin Films $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ ($x = 0, 0.4, 0.5, 0.6$) Prepared by Sol-Gel Method* American Journal of Nanosciences, **2**(4): pp.46-50.
6. Purwaningsih.D, R.Roto, and H.Sutrisno (2016), *Synthesis of $\text{LiNi}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$ by low-temperature solid-state reaction and its microstructure*. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, **107**(1): pp.012-033.
7. Guo.D, et al (2014), *Facile synthesis of $\text{LiAl}_{0.1}\text{Mn}_{1.9}\text{O}_4$ as cathode material for lithium ion batteries: towards rate and cycling capabilities at an elevated temperature*. Electrochimica Acta, **134**: pp.338-346.
8. Lee.Y-S, N.Kumada, and M.Yoshio (2001), *Synthesis and characterization of lithium aluminum-doped spinel ($\text{LiAl}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_4$) for lithium secondary battery*. Journal of Power Sources, **96**(2): pp.376-384.
9. Liu. B-S, et al (2015), *Preparation of submicrocrystal LiMn_2O_4 used Mn_3O_4 as precursor and its electrochemical performance for lithium ion battery*. Journal of Alloys and Compounds, **622**: pp.902-907.
10. Wang.S, et al (2015), *Preparation of spinel $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ and Cr-doped $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ cathode materials by tartaric acid assisted sol-gel method*. Ceramics International, **41**(1, Part B): pp.1347-1353.
11. Karthick.S.N, et al (2010), *Nanocrystalline LiMn_2O_4 thin film cathode material prepared by polymer spray pyrolysis method for Li-ion battery*. Journal of Alloys and Compounds, **489**(2): pp.674-677.

12. Xia.H, et al (2012), *Ultrafine LiMn₂O₄/carbon nanotube nanocomposite with excellent rate capability and cycling stability for lithium-ion batteries*. Journal of Power Sources, **212**: pp.28-34.
13. Phạm Duy Long (2002), *Chế tạo màng mỏng oxit kim loại chuyển tiếp (W, Mn) và nghiên cứu các tính chất điện sắc, tích trữ ion của chúng*. Luận án Tiến sĩ Khoa học Vật liệu, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.
14. Shi.S, et al (2003), *First-principles studies of cation-doped spinel LiMn₂O₄ for lithium ion batteries*. Physical Review B, **67**(11): p.115130.
15. Arroyo y de Dompablo, M.E. and J.Morales (2006), *A First-Principles Investigation of the Role Played by Oxygen Deficiency in the Electrochemical Properties of LiCu_{0.5}Mn_{1.5}O_{4-δ} Spinel*. Journal of The Electrochemical Society, **153**(11): pp.A2098-A2102.
16. Yi T-F, Y-R.Zhu, and R-S.Zhu (2008), *Density functional theory study of lithium intercalation for 5 V LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄ cathode materials*. Solid State Ionics, **179**(38): pp.2132-2136.
17. Zhong.Q, et al (1997), *Synthesis and Electrochemistry of LiNi_xMn_{2-x}O₄*. Journal of The Electrochemical Society, **144**(1): pp.205-213.
18. Wei.Y, et al (2006), *Spectroscopic studies of the structural properties of Ni substituted spinel LiMn₂O₄*. Solid State Ionics, **177**(1-2): pp.29-35.
19. Bauerle. J.E (1969), *Study of solid electrolyte polarization by a complex admittance method*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, **30**(12): pp.2657-2670.
20. Mariusz.K.R.Marta, and R.Mieczyslaw (2011), *Impedance Spectroscopy Study of ElectrodeElectrolyte System in Solid Oxide Fuel Cells*. Materialy Ceramiczne/Ceramic Materials, **63**(1): pp.157-163.

ẢNH HƯỞNG CỦA SỰ THAY THẾ MN BẰNG NI LÊN CẤU TRÚC VÀ ĐỘ DẪN ION CỦA VẬT LIỆU SPINEL LiNi_xMn_{2-x}O₄ TỔNG HỢP BẰNG PHƯƠNG PHÁP SOL – GEL

Tóm tắt: Vật liệu điện cực LiNi_xMn_{2-x}O₄ với (x = 0; 0,05; 0,1; 0,2) được tổng hợp ở bằng phương pháp sol - gel từ liti axetat, mangan axetat và niken axetat. Ảnh FE-SEM cho thấy hình thái học của vật liệu thay đổi theo nhiệt độ tổng hợp và tỷ lệ thay thế của Ni cho Mn. Phổ XRD đã xác nhận các mẫu thu được có cấu trúc spinel của LiNi_xMn_{2-x}O₄ mà không có bất kỳ tạp chất nào. Hằng số mạng của hệ vật liệu tăng lên theo nhiệt độ ủ và giảm đi khi tỷ lệ thay thế Ni tăng lên. Khi hàm lượng Ni tăng lên, kích thước hạt của các mẫu LiNi_xMn_{2-x}O₄ giảm đi đồng thời biên hạt chuyển từ dạng tròn cạnh tại x = 0 sang dạng các hình khối sắc cạnh ở x = 0,1 và 0,2 cho thấy hiệu quả rõ rệt của việc pha tạp niken đến sự ổn định trật tự của tinh thể. Phép đo phổ tổng trở xoay chiều của vật liệu dạng khối xác định được độ dẫn ion Li⁺ của vật liệu. Kết quả chỉ ra rằng, thay thế Ni cho Mn cải thiện tốt độ dẫn của vật liệu, đồng thời cho thấy vật liệu có x = 0,1 và nhiệt độ tổng hợp ở 700 °C cho độ dẫn cao nhất $\sigma_p = 19,773 \times 10^{-5} \text{ S.cm-Iso}$ với mẫu có x = 0 chỉ đạt $\sigma_p = 0,115 \times 10^{-5} \text{ S.cm-I}$.

Keywords: Vật liệu điện cực, LiNi_xMn_{2-x}O₄, Pin Liti-ion, độ dẫn Ion, tỷ lệ thay thế của Ni

MAGNETIZATION IN HIGH-TC SUPERCONDUCTORS

Bui Duc Tinh, Le Minh Thu, Nguyen Quang Hoc

Hanoi National University of Education

Abstract: We use the self-consistent method in the presence of magnetic field for the Ginzburg-Landau description of strongly thermal fluctuations effects to calculate magnetization in high- T_c superconductors. The obtained results are summation over all Landau levels which are valid for arbitrary values of the magnetic field not too close to H_{c1} . It is showed that the intersection point of magnetization curves appears and magnetization just below T_c is nonmonotonic. Our calculation supports the phase disordering picture of fluctuations above T_c .

Keywords: Magnetization, superconductor, magnetic, high- T_c

Email: bdtinh@hnue.edu.vn

Received 05 December 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

A interesting feature of magnetization curves intersecting at the same point for a wide range of magnetic fields was observed in high- T_c superconductors long time ago, such as $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO) [1], $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) [2]. It was found that the intersection point was no longer the same for all the magnetic fields in several classes of layered high- T_c superconductors, such as $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (HBCCO) [3], $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LaSCO) [4]. Normally, for superconductor materials such as YBCO, HBCCO, and optimally doped LaSCO, the intersection point moves from a high temperature at low fields to a lower temperature as the magnetic field increases. The intersection point is always below T_c .

Magnetization in high- T_c superconductor has been studied theoretically [5] within both the microscopic theory and the Ginzburg-Landau approach. In all of these calculations the fluctuations were assumed to be small enough, so they can be taken into account perturbatively. To determine theoretically fluctuation magnetization for strong thermal fluctuations, we therefore must go beyond this simple approximation neglecting the effect of the quartic term in the Ginzburg-Landau free energy. The effect of the quartic term in Ginzburg-Landau free energy is taken into account within the self-consistent theory.

2. GINZBURG-LANDAU MODEL

We start with the Gibbs free energy in two dimension

$$G = s' \int dx dy \left[F[\psi, A] + \frac{(\vec{B} - \vec{H})^2}{8\pi} \right], \quad (1)$$

where F is the free energy given by

$$F[\psi, A] = s' \int dx dy \left[\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} |\vec{D}\psi|^2 + \alpha(T - T_\Lambda)|\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 \right]. \quad (2)$$

Here is the order parameter effective “thickness”, ψ is the order parameter describing superconductivity, m_α is mass of Cooper pair, the covariant derivatives are defined by $\vec{D} \equiv \nabla + \frac{ie^*}{\hbar c} \vec{A}$ ($e^* = 2|e|$ is charge of Cooper pair), the vector potential describes constant and homogeneous magnetic field $\vec{A} = (-By, 0)$.

Throughout most of the paper we use the coherence length ξ as a unit of length, $H_{c2}(0) = \hbar c/e^* \xi^2$ as a unit of the magnetic field, $\phi = \sqrt{\beta/2T_\Lambda} \psi$ as dimensionless order parameter. The dimensionless Boltzmann factor becomes

$$f(\phi, b) = \frac{F(\phi, \vec{A})}{T} = \frac{1}{2\omega_\Lambda t_\Lambda} \int dx dy \left[|\vec{D}\phi|^2 - (1 - t_\Lambda)|\phi|^2 + |\phi|^4 \right], \quad (3)$$

where $t_\Lambda = T/T_\Lambda$, $\omega_\Lambda = \frac{\pi}{s} \sqrt{2Gi_\Lambda}$ with $Gi_\Lambda = 2 \frac{\pi^2}{s^2} \left(\frac{e^*}{ch} \right)^4 \kappa^4 \xi^4 T_\Lambda^2$ being the Ginzburg-Landau parameter.

The thermodynamic (effective) Gibbs energy [6],

$$G = -\omega_\Lambda t_\Lambda \ln Z, \quad (4)$$

defined as dimensionless thermodynamic Gibbs energy, which determines the magnetization and Z is the partition function of the Gibbs ensemble

$$Z = \int D\psi D\psi^* \exp\left(-\frac{G}{T}\right) = \int D\psi D\psi^* \exp(-g[\psi]). \quad (5)$$

Performing the same rescaling of fields: $g \equiv G/T = f(\phi, b) + f_{mag}[b]$, where f is given in Eq. (3), $b = B/H_{c2}$ and

$$f_{mag}[b] = \frac{\kappa^2}{4\omega_\Lambda t_\Lambda} \int dx dy (\vec{b} - \vec{h})^2. \quad (6)$$

3. MAGNETIZATION WITHIN THE SELF-CONSISTENT METHOD

Magnetization in the presence of thermal fluctuation is determined from

$$\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta b} = Z^{-1} \int D\psi^* D\psi \left[\frac{\delta f}{\delta b} + \frac{\kappa^2}{2\omega_\Lambda t_\Lambda} (\vec{b} - \vec{h}) \right] = 0. \quad (7)$$

Taking the derivative, one obtains

$$\vec{m} = \frac{1}{4\pi} \langle \vec{b} - \vec{h} \rangle = -Z^{-1} \frac{\omega_\Lambda t_\Lambda}{2\pi\kappa^2} \int D\psi^* D\psi \frac{\delta f}{\delta \vec{b}} \exp(g[\psi]). \quad (8)$$

Since $\kappa \ll 1$ magnetization is small $\left[\langle \vec{b} - \vec{h} \rangle / 4\pi \sim \kappa^{-2} h \right]$, and it suffices to consider a simpler statistical sum

$$Z \approx \int D\Psi D\Psi^* \exp\left(-\frac{F}{T}\right) = \int D\Psi D\Psi^* \exp(-f[\Psi]). \quad (9)$$

We take $f[\phi, b] = K + W$, which are defined below,

$$K = \frac{1}{2\omega_\Lambda t_\Lambda} \int dx dy \left[|\vec{D}\phi|^2 + (2\varepsilon - b)|\phi|^2 \right], \quad (10)$$

$$W = \frac{1}{2\omega_\Lambda t_\Lambda} \int dx dy \left[(t_\Lambda + b - 1 - 2\varepsilon)|\phi|^2 + |\phi|^4 \right]. \quad (11)$$

The thermodynamic free energy in Eq. (4) can be written as

$$f_{gauss} = f_1 + \langle W \rangle, \quad (12)$$

where

$$f_1 = -\omega_\Lambda t_\Lambda \log \left[\int D\psi D\psi^* \exp(-K) \right] = \frac{\omega_\Lambda t_\Lambda b}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \log(nb + \varepsilon), \quad (13)$$

$$\langle W \rangle = \left(\frac{t_\Lambda + b - 1}{2} - \varepsilon \right) \frac{b}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{nb + \varepsilon} + \omega_\Lambda t_\Lambda \left(\frac{b}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{nb + \varepsilon} \right)^2. \quad (14)$$

At large n the sums diverge, so one need to introduce an UV momentum cutoff which effectively limits the number of Landau levels to $N_f = \Lambda / b - 1$. Finally, total thermodynamic free energy takes a form

$$f_{gauss} = \frac{1}{2\pi} \Lambda (\log \Lambda - 1) - \omega t \left(\frac{1}{2\pi} \log \Lambda \right)^2 - \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \frac{1}{2\pi} \log \Lambda$$

$$-\left(\frac{1-t-b}{2} + \varepsilon\right)u' + u + \omega t(u')^2, \quad (14)$$

where $u'(\varepsilon, t) = \frac{1}{2\pi} [f(\varepsilon/b) - \log b]$, f is PolyGamma function, and the temperature T_c is renormalized

$$T_c = T_\Lambda \left(1 - \frac{\omega}{\pi} \log \Lambda\right), \quad (15)$$

Note that $\omega t = \omega_\Lambda t_\Lambda$, $t = T/T_c$, $\omega = \frac{\pi}{s} \sqrt{2Gi}$, $Gi = 2 \frac{\pi^2}{s'^2} \left(\frac{e^*}{c\hbar}\right)^2 \kappa^4 \xi^4 T_c^2$ (T_Λ is now replaced by T_c).

The gap equation is arrived by minimizing the free energy density of the system $\partial f_{\text{gauss}}/\partial \varepsilon = 0$

$$\varepsilon = \frac{1-t-b}{2} + 2\omega t u'(\varepsilon, t) \quad (16)$$

Combining Eqs. (4), (8), (9), and (14), the average magnetization in the sample is obtained

$$m = -\frac{1}{2\pi\kappa^2} \frac{\partial f_{\text{gauss}}}{\partial b}. \quad (17)$$

4. RESULT AND DISCUSSION

In order to illustrate the main features of our model, we take as example a common material, like $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO). Typical characteristic parameters are then: $T_c = 24$ K for the critical temperature under very small electric field and no magnetic field, $\omega = 0.1$ for the strength of thermal fluctuations, $H_{c2} = 45$ T for the critical field, and $s' = 8 \text{ \AA}$ for the effective “thickness” of layer.

In Fig.1 the magnetization curves computed according to Eqs. (16) and (17), are shown for different temperatures. The theoretical magnetization just below T_c is nonmonotonic, consistent with the experiment [7,8]. Above T_c , the theoretical magnetization is still nonmonotonic, which means that thermal fluctuation plays an important role.

In Fig.2, the magnetization curves computed according to Eqs. (16) and (17), are shown for different magnetic fields. Our calculation shows that the intersection point magnetization

curves is below T_c in wide region of magnetic field, which is consistent with experimental [6,7]. This feature cannot be explained by the mean field theory that can only be explained by theory of thermal fluctuation.

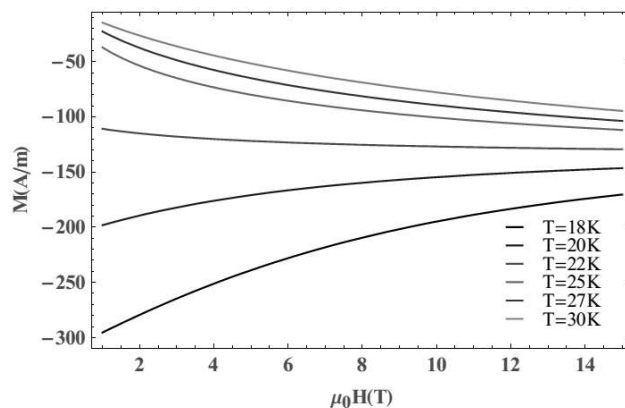


Fig. 1. Magnetization as a function of magnetic field, for different temperature

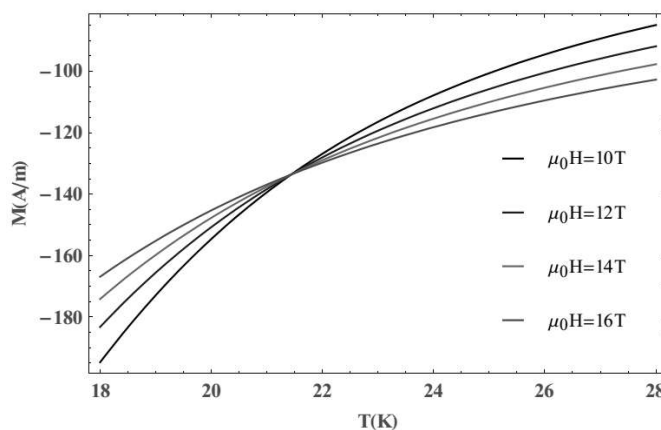


Fig. 2. Magnetization as a function of temperature, for different magnetic field

5. CONCLUSION

We have studied effect of thermal fluctuation on magnetization of high- T_c superconductor by using the self-consistent method with Ginzburg-Landau model. Our results including all Landau levels are valid for arbitrary values of the magnetic field not too close to H_{c1} . The method used in the present paper can also apply to strong type II low- T_c superconductors. Our magnetization just below T_c is in fact nonmonotonic, consistent with the experiment. Our calculation supports the phase-disordering picture of fluctuations advocated by $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [9].

Acknowledgment: This work was supported by the National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) of Vietnam under Grant No. 103.02-2017.316.

REFERENCES

1. R. Jin, A. Schilling, and H. R. Ott (1994), Phys. Rev. B 49, p.9218.
2. U. Welp et al (1991), Phys. Rev. Lett. 67, p.3180.
3. M. J. Naughton (2000), Phys. Rev. B 61, p.1605.
4. Y. M. Huh and D. K. Finnemore (2002), Phys. Rev. B 65, p.092506.
5. A. Larkin and A. Varlamov (2005), Theory of Fluctuations in Superconductors (Clarendon Press, Oxford).
6. B. Rosenstein and D. Li (2010), Rev. Mod. Phys. 82, p.109.
7. Lu Li, Y. Wang, S. Komiyama, S. Ono, Y. Ando, G. D. Gu, and N. P. Ong (2010), Phys. Rev. B 81, p.054510.
8. Y. Wang, Lu Li, M. J. Naughton, G. D. Gu, S. Uchida, and N. P. Ong (2005), Phys. Rev. Lett. 95, p.247002.
9. Lu Li, Y. Wang, and N. P. Ong (2013), Phys. Rev. B 87, p.056502.

ĐỘ TỪ HÓA CỦA VẬT LIỆU SIÊU DẪN NHIỆT ĐỘ CAO

Tóm tắt: Chúng tôi sử dụng phương pháp tự hợp trong hình lý thuyết Ginzburg-Landau để tính toán ảnh hưởng của thăng giáng nhiệt lên độ từ hóa của vật liệu siêu dẫn nhiệt độ cao đặt trong từ trường. Kết quả thu được bao gồm tất cả các mức Landau mà có thể áp dụng cho từ trường bất kỳ không quá gần H_{c1} . Kết quả chỉ ra rằng các đường từ hóa cắt nhau và không đơn điệu dưới nhiệt độ T_c . Tính toán của chúng tôi xác nhận pha mất trật tự do thăng giáng nhiệt ở trên T_c .

Từ khóa: Độ từ hóa, vật liệu siêu dẫn, từ trường, nhiệt độ cao

ELECTRONIC STRUCTURE AND THERMOELECTRIC PROPERTIES OF BI₂SE₃ UNDER OXYGEN SUBSTITUTION

Tran Van Quang¹, Dinh Thi Men²

¹University of Transport and Communications

²Hanoi National University of Education

Abstract: Though thermoelectric effect which enables to convert directly heat into electricity has been investigated long time ago, its practical applications have been still few due to the low efficiency. Material science focuses on developing the area to increase the performance is still under investigation. The best-known thermoelectric materials operating at room temperature for the highest efficiency recorded now belong to the class of Bi based-chalcogenides materials. In this report, we employ density functional theory in local density approximation to study the effect of O substitution on the electronic structure and the thermoelectric property of the Bi₂Se₃ semiconductor. The newly formed compound is a fairly large band-gap semiconductor with the value of 0.33 eV. The density of states at the conduction band indicates the presence of light bands above Fermi energy which play an important role for the considerable-high electrical conductivity. To explore the thermoelectric property, we utilize the solution of the semi-classical Boltzmann equation to perform the calculation of the thermoelectric coefficients, namely the Seebeck coefficient S , the electrical conductivity σ and the power factor, $S^2\sigma$. The results show that σ of the material in n-type doping greatly increases with the increase of carrier concentration whereas S decreases monotonically. The competition between S and σ leads to a relatively large power factor, which determines the thermal-electric conversion efficiency of the material at high carrier concentration. It indicates that high dopings might benefit for obtaining the high thermoelectric performance of this material.

Keywords: Thermoelectric effect, chalcogenide, Seebeck coefficient, density function theory.

Email: tranquang@utc.edu.vn

Received 05 December 2017

Accepted for publication 27 December 2017

1. INTRODUCTION

The thermoelectric effect has been investigated since late 19th century. It allows convert directly waste heat into electricity and vice versa. The temperature gradient induces an electric field $\vec{E} = S\nabla T$, where S is the Seebeck coefficient or the thermopower, T is the

temperature. By contrast, the gradient temperature is occurred in thermoelectric materials when current applied. This is so called Peltier effect. In order to qualify the thermoelectric performance of a material or a device, one defines the dimensionless figure of merit^{1,2}

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_L + \kappa_e} \quad (1)$$

in which T is the temperature; S the Seebeck coefficient or thermopower; σ the electrical conductivity; κ_e, κ_L the electronic and lattice thermal conductivity, respectively. Therefore, high ZT value is desired. To satisfy this, one must search for ways to improve S and σ and simultaneously to decrease the thermal conductivity, $\kappa = \kappa_e + \kappa_L$. However, these coefficients have inter-relationship in which the increase of σ is accompanied by the increase of κ and the decrease of S . Thus, improving ZT is very challenging.

Semiconductors are the best thermoelectric materials among insulators and metals. The highest recorded ZT values at room temperature are in the chalcogenides compounds with the values around unity such as Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , PbTe , etc.³⁻⁵ Recently, the oxygen substitution in the materials resulting in many peculiar properties and manifest new techniques to improve ZT .⁶ Indeed, the oxygen substitution reduces the lattice constant thereby increase the mass density of Bi_2Se_3 . This is responsible for the low thermal conductivity of the material.⁷⁻¹⁰ In addition, the distribution of O on Bi_2Se_3 surface induces topological phase which significantly enhances the thermoelectric power factor.¹¹ In this report, we present our results of the study of oxygen substitution on the electronic structure and thermoelectric properties of Bi_2Se_3 under of oxygen substitution using first-principles density functional theory (DFT) within local density approximation (LDA) and the semiclassical Boltzmann Transport Equation.

2. COMPUTATIONAL DETAILS

In solid-state physics, the well-know approach to solve the many particle problem is use of variational method to minimize total energy to seek for the ground state. In order to solve this problem systematically, Hohenberg and Kohn formulated the density functional theory.¹² Later on, within the theory Kohn and Sham derived a simple equation that enables to determine the electron density and energy of system by means of self-consistent solving the Kohn-Sham equation. Accordingly, the authors have expressed the total energy function of the electronic system through the electron density function, ρ ^{12,13}

$$E[\rho] = T_s[\rho] + J[\rho] + E_{xc} + \int v(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r}, \quad (2)$$

$$\sigma_{ij}(\varepsilon) = ITD_{ij}^{(0)}, \quad (7)$$

as well as the Seebeck coefficient

$$S_{ij} = -\frac{1}{eT} \sum_{k=x,y,z} (ITD_{ik}^{(0)})^{-1} ITD_{kj}^{(1)}, \quad (8)$$

and the thermoelectric power factor

$$PF_{ik} = \sum_{j=xyz} (S_{ij})^2 \sigma_{jk}. \quad (9)$$

3. RESULTS AND DISCUSSIONS

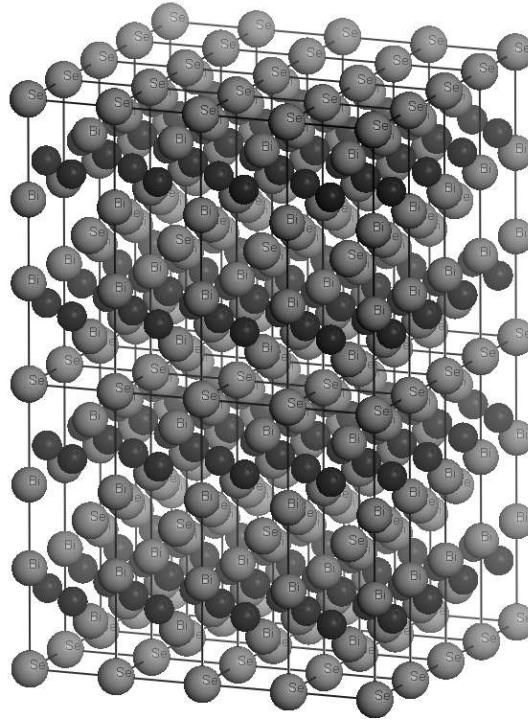


Figure 1. The crystal structure of Bi_2O_2Se

The O substitutions into Se in the Bi_2Se_3 crystal forming the new structure. Due to the strong interaction of O with around atoms, the formed structure is to be asymmetric and distorted. The Bi_2Se_3 structure is a rhombohedral structure whereas the newly formed structure Bi_2O_2Se is triclinic with parameters $\alpha = \beta = 146.14^\circ$; $\gamma = 48.64^\circ$ and $a = b = c = 6.67$ bohr. Such crystal structure is shown in FIG. 1 in term of a tetragonal conventional-cell structure.

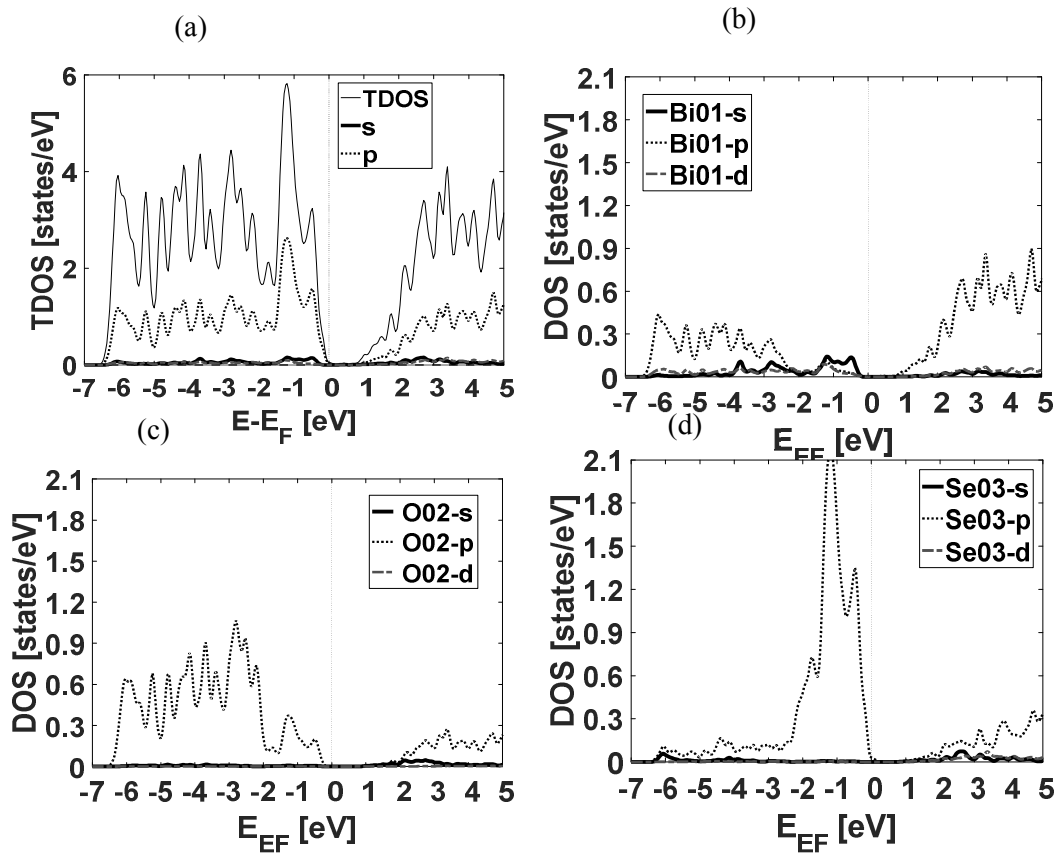


Figure 2. (a) Total density of states and projected density of states of (b) Bi, (c) O and (d) Se shown along with the l-like density of states.

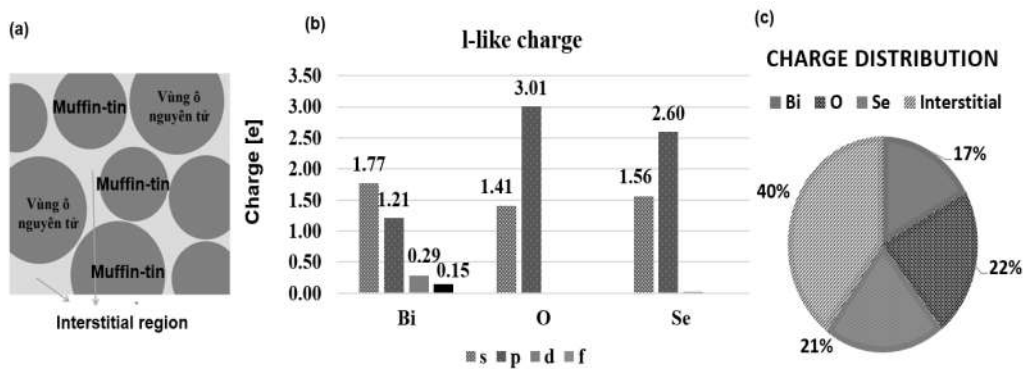


Figure 3. (a) Space and distribution of (b) l-like and (c) total charges in the appropriate space

By use of the LDA calculation, we compute the total density of states (Total DOS) and present the results in Figure.2. The density of state provide transport information especially the states near Fermi energy, which play a crucial role in the transport properties of the material. Figure.2 (a) - (c) show the density of state contributed by the elemental elements

in the crystal. Figure.2 (d) shows the total contribution of all the elements to the total density of state of the crystal. The Fermi energy is set to be zero. Right next to the Fermi level, in the valence band, the width of DOS is very large. According to Mahan - Sofo, this would lead to an enhancement of S .¹⁹ The vanished DOS in the 0~1 eV region shows the band gap of the material. In the detailed calculation, the obtained band gap is 0.33 eV. In the conduction band the small slope of DOS indicates the light bands to be dominated. This shows that the mobility of the electrons is improved leading to the possible high σ . On the one hand, σ is increased by increasing the doping level whereas S is expected not to be effected much due to the bipolar conduction and Pisarenko relationship.²² This stems from the fairly large bandgap of 0.33 eV as discussed above.

The charge distribution in the orbitals and states for all the atom is obtained by integrating the appropriate density of state. The results are represented in Figure.3. Note that the total valence electrons of a crystal in a primitive unit cell are 20. As can be seen, electrons are mainly distributed into orbital s and p. The number of electrons occupied in p-orbital is most important. Near Fermi energy in the valence band, Se-4p states are emerged to play crucial role to contribute the conductivity of the material. Also a relatively large amount of charge is in the interstitial region. This means that the transport properties of the crystalline $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ are highly dependent on the Se element, particularly the Se-4p orbital. In addition, the number of electrons in the interstitial area is 40%. Thus, it also plays an important role in the transport properties. This is illustrated in Figure.3 (c). Note that the Total DOS for each energy value consists of the sum of all density of states of each atom in the muffin-tin region and the density of state in the interstitial region (outside the muffin). It indicates that near the Fermi energy in the valence band, the density of state due to the contribution of the interstitial region is also large. Hence, they also play an important role to shape the transport properties, in particularly, the thermoelectric properties of the material.

From the ground states, we obtained eigenvalues $\varepsilon(\vec{k})$ as a function of wave vector (see eq. (4)). This information identifies the ITD function (eq. (6)) thereby the values of the conductivity σ (eq. (7)), the Seebeck coefficient S (eq. (8)) and power factor (eq. (9)).

Figure. 4 presents the results of the calculation of the Seebeck coefficient S as a two-dimensional function as a function of carrier concentration ($\log_{10}(n)$, with n in unit cm^{-3}) and temperature T (in unit K). The value of T varies from 0 to 600 K and n varies from $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ to $5 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$. The results show that the magnitude of the S coefficient depends strongly on both the temperature and the carrier concentration. When fixing the carrier concentration, we find that S increases monotonically with temperature. This increase comes from the contribution of the thermal excitation, while the relatively large band gap prevents the generation of intrinsic carrier and this is conducive to increase value of S . On the other

hand, at temperatures around room temperature, the value of S also decreases monotonically with carrier concentration. This result originates from the Pisarenko relationship.²² S is very high at high temperatures and low carrier concentration. Thus, in order to increase the S coefficient, we need to increase the temperature, while keeping the carrier concentration to be low. The value of S can therefore easily reach over 200 $\mu\text{V}/\text{K}$. This value is even greater than that of Bi_2Te_3 which is one of the best thermoelectric material operation at room temperature.²³⁻²⁵

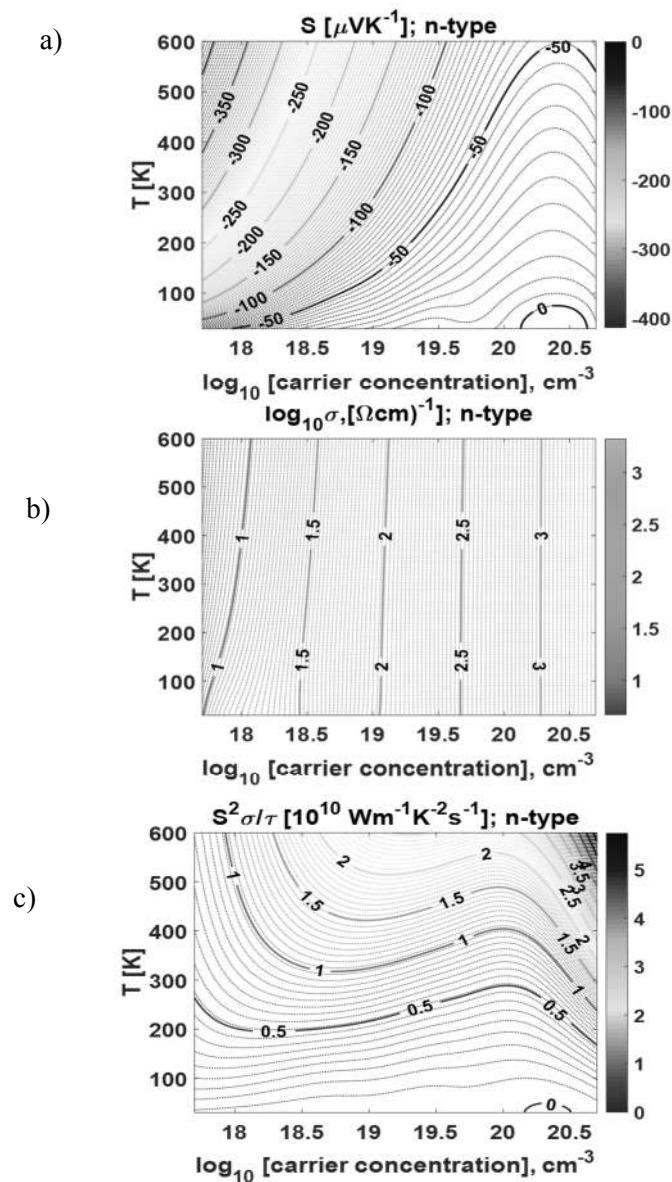


Figure 4. (a) The Seebeck coefficients S , (b) electrical conductivity σ and (c) power factor $S^2\sigma$

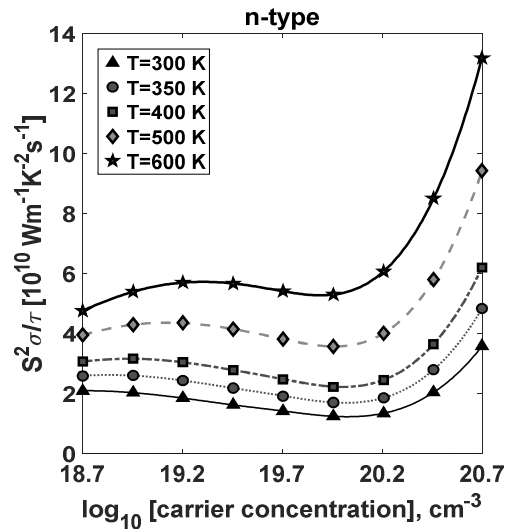


Figure 5. Thermoelectric power factor $S^2\sigma/\tau$ as a function of carrier concentration at various temperatures

For electrical conductivity σ , we present the calculation results in Figure. 4b. The results show that σ is almost unchanged with the temperature. The main change here is at low carrier concentration. The σ value increases slightly with temperature due to thermal excitation. This represents the relatively large bandgap semiconductor as shown above. When doping is low, intrinsic carriers are unlikely to be excited by thermal excitation to cross the bandgap, even at relatively high temperatures.⁶ As a result, at high doping level, the carrier concentration will not depend much on temperature. At a fixed temperature, σ increases almost linearly and monotonically with the carrier concentration.

Thus, when the carrier concentration is large, σ increases while S decreases. This strong competition between σ and S determines the value of ZT (eq. (1)). We calculate the thermal power factor $PF = S^2\sigma$ depending on temperatures and carrier concentration. The results are shown in Figure 4. Note that the calculation results depend on the constant relaxation time constant τ . Thus, for convenience we represent $S^2\sigma / \tau$. From there we see that when the carrier concentration increases, the power factor increases significantly.¹⁷ It is clear that this increase is determined by the sharp increase of σ due to temperature and carrier density. In the low carrier concentration, the power factor is determined by S meanwhile in the high carrier concentration it is determined by σ .

To substantiate the dependence of the power factor on the carrier concentration, we calculate $S^2\sigma/\tau$ as a function of n . The results are presented in Figure. 5. As can be seen, at room temperature the optimal carrier concentration is about $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. It indicates that to improve the power factor, the carrier concentration should be increased. In other word, making high doping level is a promising method to improve the thermoelectric performance of the $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ material. This result is consistent with the results of previous published reports.²¹

4. CONCLUSION

By employing first-principles density functional theory within local density approximation and the solution of Boltzmann Transport Equation in relaxation time approximation, we studied the effect of O substitution on electronic structure and thermoelectric properties of Bi_2Se_3 material in n-type doping. We found that the newly formed material is a fairly large band gap semiconductor, $E_g=0.33\text{eV}$. The calculated results show a strong dependence of the Seebeck coefficient, the electrical conductivity and the power factor on the temperature and the carrier concentration. At low concentrations, the Seebeck coefficient plays a crucial role to determine the power factor whereas in high doping levels the electrical conductivity dominates the power factor. Due to the relative large bandgap, the carrier concentration does not much depend on temperature especially at high doping levels. The increase of carrier concentration significantly improves the power factor due to the monotonic increase of σ , although S slightly decreases. It suggests that to improve the thermoelectric performance of $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$, the carrier concentration must be increased. This conclusion suggests that experimental studies might optimize the appropriate impurities to increase the carrier concentration which is leading to improve the thermal efficiency of the material.

Acknowledgment: This research is funded by Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under grant number 103.01-2015.11. The authors also thank the program for science and technology development of University of Transport and Communications.

REFERENCES

1. G.J.Snyder and E.S.Toberer (2008), *Nat. Mater.***7**, p.105.
2. T.Van Quang and M.Kim (2013), *J.Appl. Phys.***113**, p.17A934.
3. G.J.Snyder, M.Christensen, E.Nishibori, T.Caillat, and B.B.Iversen (2004), *Nat.Mater.* **3**, p.458.
4. A.J.Minnich, M.S.Dresselhaus, Z.F.Ren, and G.Chen (2009), *Energy Environ.Sci.***2**, p.466.
5. L.Zhang and D.J.Singh (2010), *Phys.Rev.B* **81**, p.245119.
6. T.Van Quang and M.Kim (2017), *J.Appl.Phys.* **122**, p.245104.
7. P.Ruleova, C.Drasar, P.Lostak, C.P.Li, S.Ballikaya, and C.Uher, *Mater.Chem* (2010), *Phys.***119**, p.299.
8. S.D.N.Luu and P.Vaqueiro (2016), *J.Mater.***2**, p.131.
9. S.D.N.Luu and P.Vaqueiro (2015), *J.Solid State Chem.***226**, p.219.
10. J.Bardeen and W.Shockley (1950), *Phys.Rev.***80**, p.72.
11. J.H.Song, H.Jin, and A.J.Freeman (2010), *Phys.Rev.Lett.***105**, p.96403.
12. P.Hohenberg and W.Kohn (1964), *Phys.Rev.***136**, p.B864.
13. W.Kohn and L.J.Sham (1965), *Phys.Rev.***140**, p.A1134.

14. E.Wimmer, H.Krakauer, M.Weinert, and A.J.Freeman (1981), Phys.Rev. B **24**, p.864.
15. S.Youn and A.J.Freeman (2001), Phys.Rev. B **63**, p.85112.
16. M.Kim, A.J.Freeman, and C.B.Geller (2005), Phys.Rev. B **72**, p.35205.
17. T.Van Quang and K.Miyoung (2016), J.Korean Phys. Soc. **68**, p.393.
18. N.W.Ashcroft and N.D.Mermin (1976), Solid State Phys.
19. G.D.Mahan and J.O.Sofa (1996), Proc.Natl.Acad.Sci.U.S. A. **93**, p.7436.
20. T.Van Quang and M.Kim (2014), IEEE Trans.Magn. **50**, p.1000904.
21. T.Quang, H.Lim, and M.Kim (2012), J.Korean Phys.Soc. **61**, p.1728
22. J.P.Heremans, B.Wiendlocha, and A.M.Chamoire (2012), Energy Environ.Sci. **5**, p.5510.
23. M.S.Park, J.H.Song, J.E.Medvedeva, M.Kim, I.G.Kim, and A.J.Freeman (2010), Phys.Rev.B **81**, p.155211.
24. K.Nishikawa, Y.Takeda, and T.Motohiro (2013), Appl.Phys.Lett. **102**, p.33903.
25. J.N.Kim, M.Kaviany and J-H.Shim (2016), Phys.Rev.B **93**, p.75119.

MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI VÀ TÍNH CHẤT NHIỆT ĐIỆN CỦA Bi_2Se_3 DƯỚI TÁC DỤNG CỦA THAY THẾ NGUYÊN TỐ O

Tóm tắt: Hiện tượng nhiệt điện tuy đã được phát hiện từ lâu song những ứng dụng trong thực tiễn sản xuất đến nay vẫn gặp nhiều khó khăn do hiệu suất chuyển đổi nhiệt thành điện còn rất thấp. Khoa học vật liệu tập trung phát triển những khía cạnh khác nhau cho phép tăng cao hiệu suất là một bài toán thời sự. Các chất nhiệt điện hiện tại được biết hoạt động ở nhiệt độ phòng cho hiệu suất cao nhất hiện nay đều thuộc lớp các vật liệu chalcogenides. Trong bài báo cáo này, chúng tôi sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ trong gần đúng mật độ địa phương nghiên cứu trạng thái nền và tính chất vận chuyển của bán dẫn Bi_2Se_3 với sự thay thế của nguyên tố O. Kết quả cho thấy trong hợp chất mới được tạo thành là một bán dẫn vùng cấm khá rộng, cỡ 0.33 eV. Mật độ trạng thái ở vùng dẫn cho thấy sự xuất hiện của các nhánh nhẹ (light bands) mà kết quả là độ dẫn ở chế độ hạt tải n là lớn. Trong khi đó mật độ trạng thái ở vùng hóa trị có độ dốc rất lớn. Điều này ảnh hưởng đáng kể đến suất điện động nhiệt điện của vật liệu này. Để làm rõ hơn tính chất này, chúng tôi thực hiện tính toán các hệ số nhiệt điện bằng cách sử dụng nghiệm của phương trình Boltzmann bán cổ điển. Kết quả cho thấy độ dẫn điện của vật liệu ở chế độ hạt tải điện tử lớn hơn khi tăng nồng độ hạt tải. Sự cạnh tranh giữa suất điện động nhiệt điện và độ dẫn dẫn tới kết quả là hệ số công suất, đại lượng quyết định hiệu suất chuyển hóa nhiệt – điện của vật liệu, ở trạng thái nồng độ hạt dẫn cao tăng lên đáng kể. Kết quả tính toán phù hợp với kết quả thực nghiệm và các báo cáo tính toán khác. Như vậy, việc tăng nồng độ hạt tải là một biện pháp tiềm năng cho phép tăng hiệu năng nhiệt điện của vật liệu này.

Từ khóa: Hiệu ứng nhiệt điện, chalcogenide, hệ số Seebeck, lý thuyết phiếm hàm mật độ.

NGHIÊN CỨU, XÁC ĐỊNH THÀNH PHẦN DINH DƯỠNG CỦA MỘT SỐ LOÀI TẢO PHÂN LẬP TỪ VÙNG RỪNG NGẬP MẶN VƯỜN QUỐC GIA XUÂN THỦY, TỈNH NAM ĐỊNH

Lê Xuân Tuấn, Trần Thị Minh Hằng

Trường Đại học Tài nguyên và Môi trường Hà Nội

Tóm tắt: Bài báo xác định thành phần dinh dưỡng của 5 loài tảo *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscula*, *Chlorella vulgaris* được phân lập từ vùng rừng ngập mặn Vườn quốc gia Xuân Thủy. Các loài tảo này thường được sử dụng làm thức ăn cho tôm, cá và các loài hai mảnh vỏ nhằm tạo điều kiện cho ấu trùng phát triển cung cấp nguồn dinh dưỡng cho cá thể bố mẹ và ít gây ảnh hưởng đến ô nhiễm môi trường. Kết quả nghiên cứu đã xác định được 24 loại acid béo trong 5 loài tảo nghiên cứu, trong đó tỉ lệ acid béo chưa no chiếm 71.7%. Có 17 loại acid béo ở loài *Navicula tuscula* và tỉ lệ acid béo chưa no chiếm 29.6%. Loài *Amphiprora alata* có hàm lượng protein là 8.1g/100g trọng lượng khô và *Chlorella vulgaris* có hàm lượng protein là 4.44g/100g trọng lượng khô. Loài tảo *Nannochloropsis oculata* có hàm lượng carbohydrate là 11.8g/100g trọng lượng khô và *Navicula tuscula* có hàm lượng này là 5.47g/100g trọng lượng khô.

Từ khóa: Vi tảo, vùng rừng ngập mặn, *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscul*, *Chlorella vulgaris*.

Nhận bài ngày 10.11.2017; gửi phản biện, chỉnh sửa và duyệt đăng ngày 10.12.2017

Liên hệ tác giả: Tạ Thị Thủy; Email: ttthuy@daihocthudo.edu.vn

1. MỞ ĐẦU

Rừng ngập mặn thuộc Vườn quốc gia Xuân Thủy có tầm quan trọng to lớn nhờ các chức năng và dịch vụ, là khu bảo tồn mẫu chuẩn điển hình của hệ sinh thái đất ngập nước ven biển đồng bằng sông Hồng. Tháng 1 năm 1989, vùng rừng ngập mặn thuộc Vườn quốc gia Xuân Thủy được UNESCO chính thức công nhận là điểm RAMSAR thứ 50 của thế giới và là khu RAMSAR đầu tiên của Đông Nam Á. Sự kiện này mở ra những hướng nghiên cứu, phát triển mới đối với Vườn quốc gia Xuân Thủy, thu hút sự hợp tác của các chuyên gia trong và ngoài nước.

Trong hệ sinh thái rừng ngập mặn, các vi sinh vật mà đặc biệt là vi tảo có vai trò quan trọng vì chúng là mắt xích không thể thiếu trong quá trình chuyển hoá vật chất và năng lượng. Tảo có tốc độ sinh trưởng nhanh, tạo ra sinh khối lớn, là thức ăn chính của các loài động vật phù du và là thức ăn không thể thay thế cho ấu trùng của các loài tôm, cua, cá, các loài động vật thân mềm ăn lọc, các loài cá bột và một số loài cá trưởng thành. Hàm lượng dinh dưỡng của các loài vi tảo rất cao, ngoài protein, lipid, carbohydrate, vitamin, vi tảo còn cung cấp cho động vật các hợp chất silic, canxicacbonat và pectin, các chất này có vai trò trong cấu trúc bộ xương của động vật. Tảo còn được dùng làm thức ăn cho chính bản thân con người như: rau câu, rau diếp biển, rong mứt...

Amphiprora alata, *Chaetoceros muelleri*, *Chlorella vulgaris*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscula* là các loài vi tảo đang được ứng dụng rộng rãi như: làm thức ăn cho tôm và các loài động vật 2 mảnh vỏ (Akihiko Shirota (1996); Trương Ngọc An, 1993; Lê Viễn Chí, 1996; A. Ben-Amotz và cs, 1987), góp phần làm giảm ô nhiễm môi trường trong đầm nuôi (Lê Xuân Tuấn và cs, 2005, 2008)... Sự kết hợp 5 loài vi tảo này trong thức ăn nuôi thủy sản vừa tạo điều kiện cho ấu trùng phát triển vừa cung cấp nguồn dinh dưỡng cho các cá thể bố mẹ.

Nghiên cứu nhằm mục đích nuôi trồng tảo đạt sinh khối lớn với hàm lượng dinh dưỡng cao làm thức ăn trong sản xuất thủy sản, và tách định thành phần dinh dưỡng (acid béo, protein, carbohydrate...) của các loài vi tảo là rất cần thiết và có ý nghĩa thực tiễn.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Nuôi cấy và phân lập tảo

Mẫu tảo được thu vào 2 đợt. Đợt 1 vào tháng 3/2015 và đợt 2 vào tháng 3/2016 từ vùng rừng ngập mặn Vườn quốc gia Xuân Thủy. Tảo được làm giàu và phân lập bằng phương pháp tách, thuần khiết trên đĩa thạch. Những mẫu tách đã thuần khiết sẽ được giữ lại phục vụ các nghiên cứu tiếp theo. Quá trình phân lập được tiến hành theo phương pháp của Makoto Shirai và cs, 1989 có cải tiến. Các mẫu tảo sau khi làm giàu được xác định sơ bộ dưới kính hiển vi quang học qua quan sát hình thái sau đó tiến hành phân lập và nuôi cấy (5-7 ngày) ở nhiệt độ phòng với cường độ sáng là 10000 - 20000 lux theo quang chu kì là 10h chiếu sáng và 14h tối. Tảo sử dụng trong quá trình nghiên cứu được thực hiện tại Phòng Công nghệ Tảo, Viện Vi sinh vật và Công nghệ Sinh học và Khoa Sinh học, trường Đại học Sư phạm Hà Nội.

2.2. Làm giàu mẫu

Hút 1000 µl mẫu nước cho vào ống Eppendorf, ly tâm ở tốc độ 7000 vòng/phút trong 10 phút và rửa 2 lần với dung dịch muối sinh lý 0.05% nhằm mục đích giữ vững đặc tính

sinh lý của vi tảo. Sau đó hút 100 μ l dịch huyền phù tảo cho vào nuôi cấy trong lọ penicillin dung tích 20 ml chứa môi trường F/2. Nuôi giữ ở nhiệt độ phòng với ánh sáng đèn neon với cường độ sáng là 10000-20000 lux theo quang chu kì là 10h chiếu sáng và 14h tối. Sau thời gian 5 - 7 ngày nuôi cấy, quan sát khả năng sinh trưởng của mẫu vi tảo đã được làm giàu bằng kính hiển vi quang học ở độ phóng đại 400-1000 lần.

2.3. Nhân nuôi sinh khối các loài tảo nghiên cứu

Nhân nuôi và thu sinh khối vi tảo ở môi trường tối ưu đã xác định với độ mặn phù hợp để phân tích thành phần dinh dưỡng. Đối với bình nuôi sinh khối có dung tích lớn 4 lít và 8 lít được chiếu sáng ánh sáng đèn neon với cường độ sáng là 10000-20000 lux và sục khí liên tục 24/24, còn các bình dung tích nhỏ hơn được chiếu sáng theo quang chu kì là 10h chiếu sáng và 14h tối và không có sục khí.

2.4. Xác định thành phần acid béo của các loài vi tảo nghiên cứu

Mật độ tế bào được xác định 2 ngày/lần và sinh khối vi tảo được thu vào giai đoạn đầu của pha cân bằng sau đó được xử lý theo quy trình chiết tảo: Mẫu nuôi sinh khối tảo được ly tâm (10000 vòng/phút, 15 phút, 20°C) tạo sinh khối tươi, sau đó thêm dịch chiết (metanol/chlorofooc (1:1) v/v) và cô quay chân không tạo cặn chiết. Cặn chiết vi tảo được hòa tan bằng metanol: acid sulfuric (95:5, v/v) và đun ở 80°C trong 4h để este hóa các acid béo. Sau đó cho thêm 2ml nước. Các acid béo sau khi được metyl este hóa được chiết 2 lần với 2ml n-hexan. Hỗn hợp metyl este của các acid béo được phân tích trên máy sắc ký khí (GC, gas chromatography, Finnigan Trace GC, cột BPX70 (50M) tại phòng Sinh học biển, Viện Hóa học các hợp chất thiên nhiên. Các acid béo được xác định bằng cách so sánh về thời gian lưu (retention time) với dung dịch chất chuẩn và được định lượng bằng cách so sánh các peak với chuẩn.

2.5. Xác định thành phần protein của các loài tảo nghiên cứu

Mẫu tảo khô được thủy phân bằng 1N NaOH trong 1 giờ. Sau đó, dịch thủy phân được pha loãng 5 lần và ly tâm ở 4000v/phút trong 15 phút. Dung dịch mẫu được đem phân tích theo phương pháp Bradford với bovine serum albumin (BSA) làm chất chuẩn và đo ở bước sóng 595nm. Dung dịch Coomassie brilliant blue (CBB) được pha với thành phần: 0.01% CBB G-250, 4.75% ethanol, 8.5% H₃PO₄. (Ben-Amotz và cs, 1987; Nguyễn Văn Mùi, 2001).

2.6. Xác định thành phần carbohydrate của các loài tảo nghiên cứu

Theo phương pháp của Ben-Amotz và cs (1987) mẫu khô được thủy phân trong dung dịch 2.5N HCl trong 1 giờ. Sau đó mẫu được pha loãng 20 lần và ly tâm ở 8000 v/phút trong

15 phút. Dung dịch mẫu được phân tích theo phương pháp phenol – acid sulfuric sử dụng 5% phenol, 96% H₂SO₄ với glucose làm chất chuẩn và đo ở bước sóng 490nm.

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ BIỆN LUẬN

3.1. Thành phần acid béo của *Amphiprora alata*

Acid béo là các chuỗi nguyên tử cacbon thẳng và dài, chứa khoảng 12 - 22 nguyên tử (C₁₂ - C₂₂). Chúng có một đầu hoà tan trong nước và một đầu hoà tan trong dầu. Dọc theo chuỗi cacbon là các nguyên tử hydro. Những chuỗi này là thành phần quan trọng trong màng tế bào của mọi sinh vật sống. Acid béo gồm 2 loại là acid béo no và acid béo không no (Nguyễn Thị Hiền, Vũ Thy Thu, 2005).

Acid béo là thành phần quan trọng không thể thiếu của mọi sinh vật (đặc biệt là các acid béo không no). Vì vậy, nghiên cứu thành phần acid béo là việc làm cần thiết để xác định giá trị dinh dưỡng của vi tảo cung cấp thức ăn cho nuôi thủy sản.

Trong các bảng phân tích thành phần acid béo, kí hiệu (--) nghĩa là các acid béo không có mặt trong thành phần (lượng quá nhỏ không nhận biết được) hoặc là những acid béo chưa biết định danh.

Kết quả phân tích thành phần acid béo của loài vi tảo *Amphiprora alata* được tổng kết qua *Bảng 3.1*.

Bảng 3.1. Thành phần acid béo của tảo *Amphiprora alata*

STT	Acid béo	Danh pháp	Tên thường gọi	Tỷ lệ phần trăm (% tổng số acid béo)
1	C 12:0	Dodecanoic acid	Lauric	0,63
2	C 14:0	Tetradecanoic acid	Myristic	13,26
3	C 15:0	Pentadecanoic acid	Convolvulinolic	1,10
4	C 15:1n-5	Pentadecenoic acid	Hormelic	0,34
5	C 16:0	Hexadecanoic acid	Palmitic	14,31
6	C 16:1n-7	9-hexadecenoic acid	Palmitoleic	13,15
7	C 16:1n-9	7-hexadecenoic acid	Ambrettolic	4,47
8	C 17:0	Heptadecanoic acid	Margric	5,01
9	C 17:1n-7	Heptadecenoic acid	--	0,82
10	C 18:0	Octadecanoic acid	Stearic	4,15

11	C 18:1n-7	11-octadecenoic acid	Asclepic	4,65
12	C 19:0	Nonadecanoic acid	Isoarachidic	0,92
13	C 18:5n-3	Octadecapentaenoic acid	--	0,58
14	C 18: 4n-3	Octadecatetraenoic acid	--	0,59
15	C 20:0	Eicosanoic acid	Arachidic	2,21
16	C 20:1n-9	11-eicosaenoic acid	Gondoic	1,45
17	C 20:4n-6	5,8,11,14-eicosatetraenoic acid	Arachidonic acid (AA)	7,97
18	C 20:5n-3	5,8,11,14,17-eicosapentaenoic acid	Eicosapentaenoic acid (EPA)	9,12
19	C 22:5n-6	Docosatetraenoic acid	Docosatetraenoic acid (DPA)	3,65
20	C 22:6n-3	4,7,10,13,16,19-docosahexaenoic	Docosahexaenoic acid (DHA)	5,25
21	C 24:0	Tetracosanoic acid	Lignoceric	2,83
Tổng các acid béo no (9)				44,43
Tổng các acid béo không no (12)				52,21
Tổng các acid béo nhóm omega 3 (ω 3)				15,61
Tổng các acid béo nhóm omega 6 (ω 6)				11,62

Số liệu ở *Bảng 3.1* cho thấy thành phần acid béo của *Amphiprora alata* rất đa dạng, gồm các acid béo từ 12C đến 24C. Trong số này, có 9 loại acid béo no chiếm tỉ lệ 44.43% và 12 loại acid béo không no chiếm tỉ lệ 52.21%. Hàm lượng các acid béo chưa no đa nối đôi ước tính chiếm gần 30%. Đây là những acid béo đóng vai trò quan trọng trong việc hình thành màng tế bào, có giá trị lớn trong sản xuất dược phẩm và những thực phẩm có lợi cho sức khỏe con người. Đặc biệt, *A. alata* còn chứa các acid béo chưa no có giá trị như: C 22:6n-3(DHA) chiếm tỉ lệ 5.25% có vai trò lớn đối với sự phát triển của não bộ, võng mạc mắt và tái tạo mô; C 20:5n-3 (EPA) chiếm tỉ lệ 9.12% có vai trò quan trọng trong việc tổng hợp prostaglandin, C 20:4n-6(AA) chiếm tỉ lệ 7.96% - là acid béo cần thiết cho việc hồi phục và phát triển của mô cơ xương. Điều này cho thấy chất lượng dinh dưỡng cao của loài *A. alata* và tiềm năng ứng dụng trong sản xuất thức ăn phục vụ nuôi thủy sản và thực phẩm chức năng cho con người.

3.2. Thành phần acid béo của loài *Chaetoceros muelleri*

Số liệu phân tích thành phần acid béo của *Chaetoceros muelleri* được trình bày ở Bảng 3.2.

Bảng 3.2. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Chaetoceros muelleri*

STT	Acid béo	Danh pháp	Tên thường gọi	Tỷ lệ % tổng số acid béo
1	C 14:0	Tetradecanoic acid	Myristic	1,91
2	C 14:1n-5	Tetradecenoic acid	Myristoleic	18,09
3	C 15:0	Pentadecanoic acid	Convolvulinolic	0,74
4	C 15:1n-5	Pentadecenoic acid	Hormelic	0,096
5	C 16:0	Hexadecanoic acid	Palmitic	5,53
6	C 16:1n-7	9-hexadecenoic acid	Palmitoleic	15,23
7	C 16:1n-9	7-hexadecenoic acid	Ambrettolic	2,20
8	C 17:0	Heptadecanoic acid	Margric	9,52
9	C 18:0	Octadecanoic acid	Stearic	1,46
10	C 18:1n-7	11-octadecenoic acid	Asclepic	3,74
11	C 18:2n-6-t	9,12-octadecadienoic acid	Linoleic	2,70
12	C 18:3n-6	6,9,12-octadecatrienoic acid	γ - Linolenic acid (GLA)	1,12
13	C 18:4n-3	Octadecatetraenoic acid	--	0,22
14	C 20:0	Eicosanoic acid	Arachidic	1,05
15	C 20:1n-7	13-eicosaenoic acid	Paullinic	0,26
16	C 20:1n-9	11-eicosaenoic acid	Gondoic	0,10
17	C 20:4n-6	5,8,11,14-eicosatetraenoic acid	Arachidonic acid (AA)	7,84
18	C 20:5n-3	5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic acid	Eicosapentaenoic acid (EPA)	24,76
19	C 24:0	Tetracosanoic acid	Lignoceric	0,12
Tổng các acid béo no (7)				20,33
Tổng các acid béo không no (12)				76,35
Tổng các acid béo nhóm omega 3 (ω 3)				24,98
Tổng các acid béo nhóm omega 6 (ω 6)				10,54

Số liệu ở *Bảng 3.2* cho thấy thành phần acid béo của loài *Chaetoceros muelleri* tương đối đa dạng, gồm các acid béo từ 12C – 24C. Trong đó, có 7 loại acid béo no chiếm 20.33% và 12 loại acid béo chưa no chiếm 76.35%. Acid béo no chiếm tỉ lệ cao nhất là C17:0 (chiếm tỉ lệ 9.52%), acid béo chưa no chiếm tỉ lệ cao nhất là C20:5n-3 (EPA) (chiếm tỉ lệ 24.76%). Hàm lượng các acid béo chưa no đa nối đôi chiếm 36.64 %, trong số này không có các acid béo như DHA và DPA nhưng *C.muelleri* lại rất giàu EPA và acid béo chưa no AA chiếm tỉ lệ khá cao là 7.84%. Dựa trên kết quả phân tích thành phần acid béo của *C.muelleri*, chúng tôi thấy rằng: nếu kết hợp *C.muelleri* với các loại vi tảo khác sẽ đem lại nguồn thức ăn giàu dinh dưỡng cho nuôi thủy sản với các đối tượng như động vật 2 mảnh vỏ, giáp xác (Le Thi Phuong Hoa và cs, 2010A và 2010B).

3.3. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Chlorella vulgaris*

Kết quả phân tích thành phần acid béo của loài vi tảo *Chlorella vulgaris* được thể hiện trong *Bảng 3.3*.

Bảng 3.3. Thành phần acid béo của tảo *Chlorella vulgaris*

STT	Acid béo	Danh pháp	Tên thường gọi	Tỷ lệ % TS acid béo
1	C 14:0	Tetradecanoic acid	Myristic	1,53
2	C 16:0	Hexadecanoic acid	Palmitic	27,43
3	C 16:1n-7	9-hexadecenoic acid	Palmitoleic	5,15
4	C 16:1n-9	7-hexadecenoic acid	Ambrettolic	1,2
5	C 17:0	Heptadecanoic acid	Margric	2,69
6	C 17:1n-7	Heptadecenoic acid	--	6,15
7	C 18:0	Octadecanoic acid	Stearic	2,91
8	C 18:1n-9	9-octadecenoic acid	Oleic	20,06
9	C 18:2n-6-t	9,12-Octadecadienoic acid	Linoleic acid(LA)	8,42
10	C 18:3n-3	9,12,15-octadecatrienoic acid	Anpha-Linoleic acid(LNA)	17,46
11	C 20:0	Eicosanoic acid	Arachidic	4,98
Tổng các acid béo no (5)				39,55
Tổng các acid béo không no (6)				59,24
Tổng các acid béo nhóm omega 3 (ω 3)				17,46
Tổng các acid béo nhóm omega 6 (ω 6)				8,42

Qua số liệu ở *Bảng 3.3*, chúng tôi nhận thấy thành phần acid béo của loài vi tảo lục *Chlorella vulgaris* không đa dạng như các loài vi tảo đã phân tích (*bảng 3.1* và *3.2*). Loài *C.vulgaris* phân tích, xác định có 11 loại acid béo trong đó có 5 loại acid béo no chiếm 39.55% và 6 loại acid không no chiếm 59.24%. Vi tảo lục *C.vulgaris* không có AA, EPA, DHA, DPA nhưng nhóm acid béo chưa nối đôi chỉ gồm 2 loại C18:2n-6-t (LA) và C18:3n-3 đã chiếm tới 25.88%. Đây là 2 acid béo cần thiết đối với sự sinh trưởng, phát triển của sinh vật mà người và đa số các động vật không tự tổng hợp được nên cần phải được bổ sung trong chế độ dinh dưỡng hàng ngày. Những acid béo này có vai trò quan trọng với sự phát triển của não bộ và hàm lượng LA còn là tiêu chuẩn để đánh giá giá trị sinh học của chất béo. Bên cạnh đó, giá trị dinh dưỡng của vi tảo cũng chịu ảnh hưởng nhiều của yếu tố môi trường và thời gian nuôi cấy. Vì vậy, nếu xác định được thời điểm nuôi cấy để thành phần acid béo của tảo *C.vulgaris* đạt hàm lượng cao thì sự kết hợp giữa tảo *C.vulgaris* với các loại tảo silic khác sẽ tạo ra nguồn thức ăn giàu dinh dưỡng cho nuôi thủy sản.

3.4. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Nannochloropsis oculata*

Tỷ lệ acid béo của loài tảo *Nannochloropsis oculata* là khá phong phú.

Bảng 3.4. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Nannochloropsis oculata*

STT	Acid béo	Danh pháp	Tên thường gọi	Tỷ lệ % TS acid béo
1	C 12:0	Dodecanoic acid	Lauric	0,2
2	C 14:0	Tetradecanoic acid	Myristic	3,6
3	C 16:0	Hexadecanoic acid	Palmitic	21,3
4	C 16:1n-7	9-hexadecenoic acid	Palmitoleic	14,4
5	C 16:2n	--	--	1,2
6	C 16:3n-6	hexadecatrienoic acid	--	0,2
7	C 16:3n-3	7,10,13-hexadecatrienoic acid	--	3,7
8	C 18:0	Octadecanoic acid	Stearic	0,3
9	C 18:1n	Cis 9 oleic acid	--	7,6
10	C 18:2n-6	9,12-Octadecadienoic Acid	Linoleic acid(LA)	7,6
11	C 18:3n-6	6,9,12-Octadecatrienoic Acid	gamma - Linolenic Acid	0,3

12	C 18:3n-3	9,12,15-octadecatrienoic acid	Anpha-Linoleic Acid(LNA)	5,8
14	C 20:0	Eicosanoic acid	Arachidic	0,1
15	C 20:1n	11-eicosenoic acid	--	0,2
16	C 20:2n-9	8,11-cis-eicosadienoic acid	--	0,1
17	C 20:2n-6	11,14-eicosadienoic Acid	Eicosadienoic Acid	0,1
18	C 20:3n-9	5,8,11-eicosatrienoic Acid	Mead Acid	0,1
19	C 20:3n-6	8,11,14-eicosatrienoic Acid	Dihomo-g - Linolenic Acid	0,2
20	C 20:4n-6	5,8,11,14-Eicosatetraenoic Acid	Arachidonic Acid (AA)	3,0
23	C 20:5n-3	5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic Acid	Timnodonic Acid (EPA)	26,7
24	C 22:0	--	Behenic acid	0,1
25	C 22:1	13-docosenoic acid	--	0,1
27	C 22:4n-6	7,10-13-16-Ocosatetraenoic Acid	Adrenic Acid	0,3
30	C 22:6n-3	4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic Acid	Docosahexaenoic Acid (DHA)	0,1
31			Acid khác	2,8
Tổng các acid béo no (6)				25,6
Tổng các acid béo không no (18)				71,7
Tổng các acid béo nhóm omega 3 (ω 3)				36,3
Tổng các acid béo nhóm omega 6 (ω 6)				8,7

Số liệu ở *Bảng 3.4* cho thấy tỉ lệ acid béo trong vi tảo *Nannochloropsis oculata* khá đa dạng. *N. oculata* chứa hơn 30 loại acid béo khác nhau, trong đó acid béo no có 6 acid chiếm 25.6%, còn lại là các acid béo không no chiếm đến 71.7%. Trong đó, EPA (C20:5n-3) chiếm tỷ lệ cao nhất, tới 26.7% tổng số acid thu được. Đây là đặc trưng của chi *Nannochloropsis*. Kế đến là acid palmitic (16:0) và acid palmitoleic (16:1n-7) chiếm tỷ lệ lần lượt là 21.3% và 14.4% tổng số acid. Đặc biệt, tỷ lệ acid linoleic (LA) và acid α -linoleic cũng chiếm tỷ lệ khá cao, lần lượt là 7.6% và 5.8% tổng số acid thu được. Acid linoleic (LA) và acid α -linoleic là

tiền chất của các acid dòng ω -3 và ω -6 như acid arachidonic (20:4 ω -6) và EPA (20:5 ω -6); DHA (22:6 ω -3) có vai trò tổng hợp nên một loạt chất có hoạt tính sinh học cao như các loại prostaglandin, leukotriene, thromboxane.

Có thể thấy tổng các acid nhóm (n-3) chiếm tới 36.3% thành phần acid. Đây là nhóm acid béo không no rất có ý nghĩa trong việc nâng cao khả năng hoạt động của tế bào não. Bên cạnh đó, tổng các acid nhóm (n-6), là nhóm acid béo quan trọng đối với sự phát triển của trẻ nhỏ chiếm tới 8.7%.

Như vậy, loài vi tảo *Nannochloropsis oculata* có thành phần acid béo rất đa dạng và những acid béo có vai trò quan trọng chiếm tỉ lệ rất cao, điều này mở ra nhiều ứng dụng trong đời sống và nuôi trồng thủy sản của loài này.

3.5. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Navicula tuscula*

Kết quả phân tích thành phần acid béo của loài vi tảo *Navicula tuscula* được tổng hợp qua Bảng 3.5.

Bảng 3.5. Thành phần acid béo của loài vi tảo *Navicula tuscula*

STT	Acid béo	Danh pháp	Tên thường gọi	Tỷ lệ % TS acid béo
1	C 4:0	Butyric acid	--	1,17
2	C 10:0	Decanoic acid	--	0,33
3	C 14:0	Tetradecanoic acid	Myristic	9,69
4	C 14:1n-5	Tetradecenoic acid	Myristoleic	0,80
5	C 15:1n-5	Pentadecenoic acid	Hormelic	0,70
6	C 16:0	Hexadecanoic acid	Palmitic	52,56
7	C 16:1n-7	9-hexadecenoic acid	Palmitoleic	13,67
8	C 17:0	Heptadecanoic acid	Margric	1,20
9	C 17:1n-7	Heptadecenoic acid	--	1,49
10	C 18:0	Octadecanoic acid	Stearic	3,77
11	C 18:1n-7	11-octadecenoic acid	Asclepic	8,62
12	C 18:2n-6	9,12-Octadecadienoic acid	Linoleic acid(LA)	1,27
13	C 18:3n-6	6,9,12-Octadecatrienoic Acid	gamma -linolenic acid	0,35

14	C 18:5n-3	Octadecapentaenoic acid	--	1,56
15	C 20:4n-6	5,8,11,14-eicosatetraenoic acid	Arachidonic acid (AA)	0,76
16	C 22:0	--	Behenic acid	1,04
17	C 22:4n-6	7,10-13-16-Ocosatetraenoic acid	Adrenic acid	0,34
Tổng các acid béo no (7)				69,76
Tổng các acid béo không no (10)				29,56
Tổng các acid béo nhóm omega 3 (ω 3)				1,56
Tổng các acid béo nhóm omega 6 (ω 6)				4,29

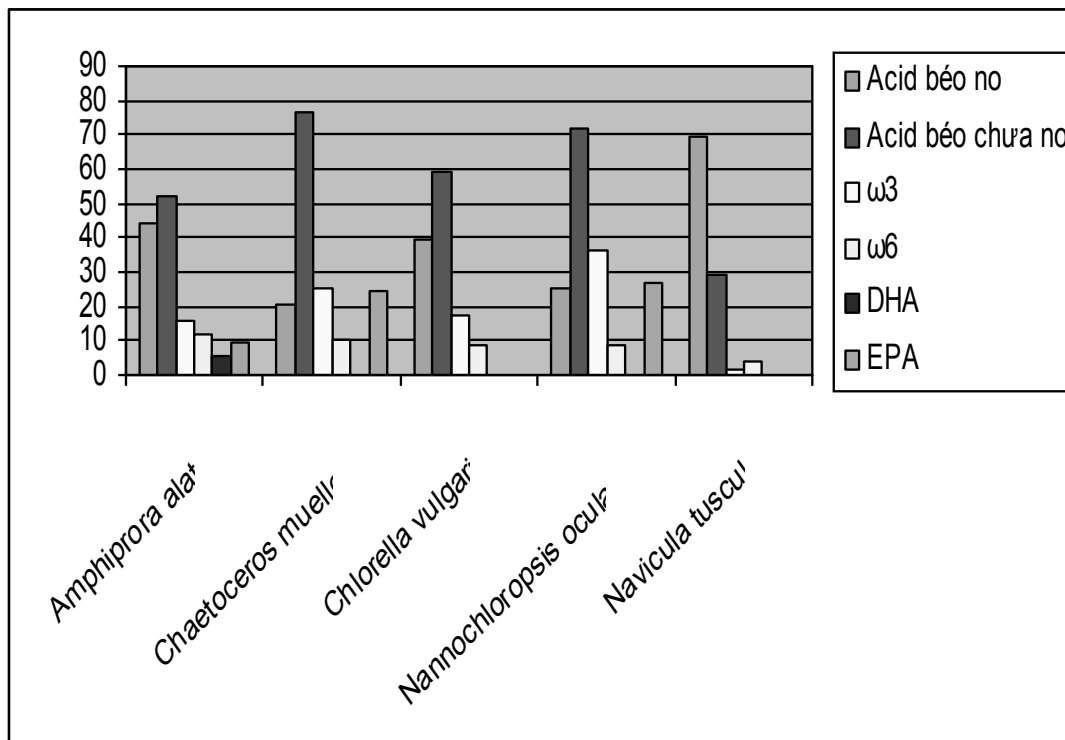
Loài tảo *Navicula tuscula* có 7 acid béo no chiếm tỉ lệ 69.761% và có 10 acid béo không no chiếm 29.597%, hàm lượng acid béo chưa no thấp nhất trong các loài vi tảo nghiên cứu (Bảng 3.5). Acid béo chiếm tỉ lệ nhiều nhất là acid béo no C16:0 (52.557%). Bên cạnh đó, tỉ lệ acid béo nhóm ω 3 và ω 6 của loài này cũng rất thấp nhưng thành phần acid béo thuộc nhóm ω 6 rất đa dạng (C 20:4n-6, C 22:4n-6, C 18:2n-6, C 18:3n-6). Tuy nhiên, *N.tuscula* là vi tảo có kích thước lớn, phù hợp làm thức ăn cho các cá thể bố mẹ trong nuôi thủy sản. Điều này cho thấy nếu kết hợp *N.tuscula* với các loài khác để bổ sung dinh dưỡng cho các đối tượng nuôi thủy sản gồm cả ấu trùng và cá thể bố mẹ là rất phù hợp.

3.6. Thành phần acid béo của 5 loài tảo *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Chlorella vulgaris*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscula*

Từ số liệu ở Bảng 3.1 và Bảng 3.5, chúng tôi nhận thấy thành phần acid béo của 5 loài vi tảo nghiên cứu khá đa dạng. Bên cạnh những điểm tương đồng, chúng tôi cũng nhận thấy sự khác biệt về thành phần acid béo ở các yếu tố như: tỉ lệ các acid béo no và không no, tỉ lệ các acid béo thuộc nhóm ω 3 và ω 6, tỉ lệ DHA và EPA. Sự khác nhau về các yếu tố này giữa 5 loài vi tảo *A.alata*, *N.oculata*, *C.muelleri*, *N.tuscula*, *C.vulgaris* được thể hiện ở Hình 3.1.

Hình 3.1 cho thấy hầu hết các loài vi tảo đều có tỉ lệ acid béo chưa no rất cao, chỉ ở loài *Navicula tuscula* có tỉ lệ acid béo chưa no cao hơn tỉ lệ acid béo no. Điều này cho thấy các loài vi tảo có chất lượng dinh dưỡng tốt. Bên cạnh đó, tỉ lệ các acid béo thuộc nhóm ω 3 cao nhất ở loài *Nannochloropsis oculata* sau đó tới *Chaetoceros muelleri*, *Chlorella vulgaris*, *Amphiprora alata* và thấp nhất ở loài *Navicula tuscula*. Tỉ lệ các acid béo thuộc nhóm ω 6 cao nhất ở loài *Amphiprora alata* sau đó tới *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Chlorella vulgaris* và thấp nhất ở loài *Navicula tuscula*. Tỉ lệ acid béo DHA cao nhất ở loài *Amphiprora alata* (5.25%) và thấp nhất ở loài *Nannochloropsis oculata* (0.1%), các loài còn

lại không có acid béo này. Tỷ lệ acid béo EPA cao nhất ở loài *Nannochloropsis oculata* (26.7%) sau đó tới loài *Chaetoceros muelleri* và thấp nhất ở loài *Amphiprora alata*, các loài còn lại không có acid béo này.

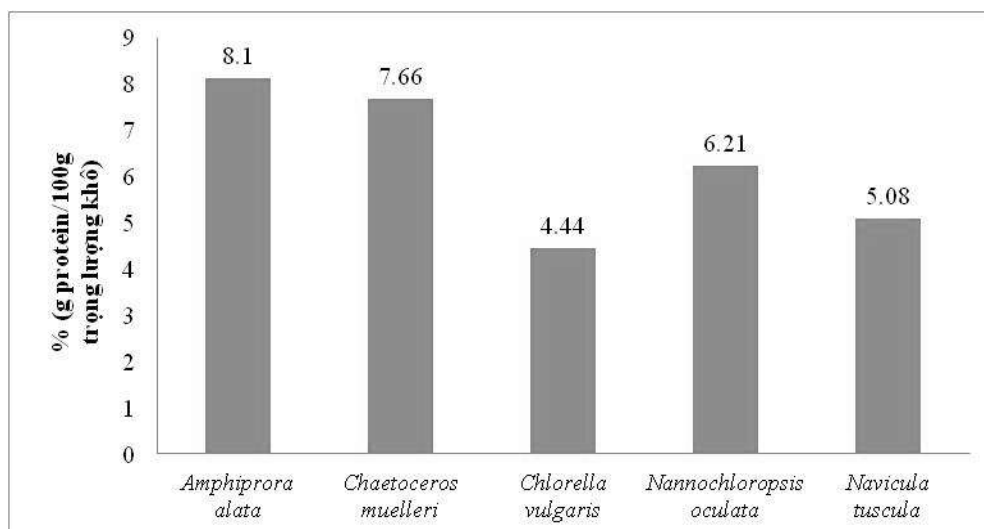


Hình 3.1. Thành phần acid béo của 5 loài vi tảo nghiên cứu

Nhìn chung, giá trị dinh dưỡng về acid béo của tảo silic cao hơn tảo lục và tùy từng loại vi tảo mà thành phần acid béo giàu về tỷ lệ acid béo này nhưng lại nghèo về tỷ lệ acid béo kia. *N. oculata* là một loại tảo mắt có thành phần acid béo rất đa dạng và là nguồn thức ăn tốt cho thủy sản. *A. alata* là tảo silic có đầy đủ các loại acid béo cần thiết, nhưng *N. tuscula* lại có thành phần acid béo tương đối nghèo nàn hơn và không có cả DHA, EPA. *C. muelleri* không có DHA nhưng tỷ lệ EPA rất cao. Vì vậy, nếu chúng ta kết hợp khéo léo các loài vi tảo này trong thức ăn vào những giai đoạn phát triển khác nhau của đối tượng nuôi thủy sản như: tu hài, ngao, các động vật giáp xác và 2 mảnh vỏ khác..., thì sản phẩm thu hoạch sẽ đạt năng suất, chất lượng cao.

3.7. Hàm lượng protein của 5 loài tảo *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscula*, *Chlorella vulgaris*

Hàm lượng protein là một trong những yếu tố cần thiết để đánh giá giá trị dinh dưỡng của vi tảo. Kết quả phân tích hàm lượng protein của các loài tảo nghiên cứu, hàm lượng protein được tính với tỷ lệ so với 100g trọng lượng khô được thể hiện ở Hình 3.2.



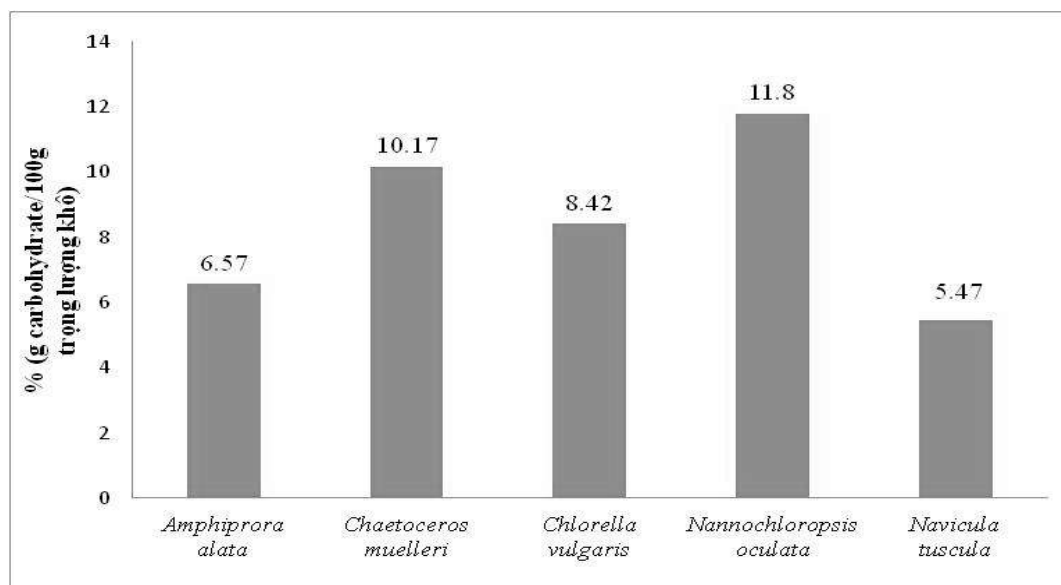
Hình 3.2. Hàm lượng protein (g protein/100g trọng lượng khô) của tảo

Hàm lượng protein cao nhất ở loài *Amphiprora alata*, sau đó tới *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscua* và thấp nhất ở loài *Chlorella vulgaris* (Hình 3.2). Kết quả cũng cho thấy loài tảo có thành phần acid béo cao thì hàm lượng protein cũng rất cao nên giàu giá trị dinh dưỡng. Các loài vi tảo nghiên cứu có hàm lượng protein không khác biệt nhau quá nhiều, hàm lượng protein của các loài vi tảo dao động từ 5.08%- 8.01%. Protein là hợp chất hữu cơ đóng vai trò quan trọng trong mọi hoạt động sống của sinh vật như: tham gia xúc tác, vận chuyển, điều hoà, bảo vệ, dự trữ..., nên việc bổ sung protein trong thức ăn là rất cần thiết. Ngoài ra, để tạo thức ăn có đầy đủ các acid amin phục vụ nuôi thủy sản, chúng ta nên sử dụng thức ăn hỗn hợp trong đó có các loài vi tảo giàu dinh dưỡng như trên.

3.8. Hàm lượng carbohydrate của các loài tảo nghiên cứu

Carbohydrate (đường, tinh bột và chất xơ) còn có tên gọi khác là glucid. Carbohydrate đóng vai trò đặc biệt quan trọng trong việc cung cấp năng lượng cho cơ thể sinh vật. Kết quả phân tích carbohydrate được tổng hợp ở Hình 3.3.

Loài *Nannochloropsis oculata* có hàm lượng carbohydrate cao nhất sau đó tới loài *Chaetoceros muelleri*, *Chlorella vulgaris*, *Amphiprora alata* và thấp nhất ở loài *Navicula tuscua*, sự chênh lệch về hàm lượng carbohydrate của các loài vi tảo cao hơn so với sự chênh lệch về hàm lượng protein (hàm lượng carbohydrate ở *N. oculata* gấp đôi so với hàm lượng carbohydrate của *N. tuscua*). Kết hợp với các kết quả về thành phần protein và acid béo, chúng tôi nhận thấy loài vi tảo giàu dinh dưỡng nhất là *Nannochloropsis oculata*, tuy nhiên không thể chỉ sử dụng 1 loài này để bổ sung vào nguồn thức ăn của đối tượng nuôi thủy sản mà cần phối hợp các loài khác để có nguồn dinh dưỡng tối ưu nhất.



Hình 3.3. Hàm lượng carbohydrate (g carbohydrate/100g trọng lượng khô) của tảo

Kết quả phân tích cho thấy thành phần acid béo, protein và carbohydrate khá đa dạng và đặc trưng riêng cho từng loài. Việc kết hợp các loài tảo này sẽ tạo nguồn thức ăn tương đối đầy đủ thành phần dinh dưỡng với tỉ lệ cao các acid béo chưa no đa nối đôi (DHA, EPA) đồng thời cung cấp lượng protein và carbohydrate dồi dào cho các chuyển hóa quan trọng của sinh vật. Cùng với sự đa dạng về kích thước, nếu biết phối hợp hiệu quả 5 loài vi tảo này sẽ tạo nguồn thức ăn giàu dinh dưỡng trong nuôi trồng thủy sản ở vùng ven biển.

4. KẾT LUẬN VÀ KHUYẾN NGHỊ

Trong 5 loài tảo nghiên cứu đều rất giàu dinh dưỡng, trong đó *Nannochloropsis oculata* có thành phần acid béo đa dạng nhất (có 24 loại acid béo và tỉ lệ acid béo chưa no chiếm 71.7%), hàm lượng acid béo thấp nhất là *Navicula tuscula* (17 loại acid béo và tỉ lệ acid béo chưa no chiếm 29.6%). *Amphiprora alata* giàu hàm lượng protein nhất (8.1g/100g trọng lượng khô) và *Chlorella vulgaris* có hàm lượng protein thấp nhất (4.44g/100g trọng lượng khô). *Nannochloropsis oculata* giàu carbohydrate nhất (11.8g/100g trọng lượng khô) và *Navicula tuscula* có hàm lượng này thấp nhất (5.47g/100g trọng lượng khô).

Từ các kết quả nghiên cứu có được, chúng tôi có khuyến nghị cần có các thử nghiệm thực tế sử dụng bổ sung thành phần vi tảo với các công thức khác nhau vào khẩu phần ăn của thủy sản nhằm nâng cao chất lượng sản phẩm và tận dụng tối đa nguồn dinh dưỡng quý giá từ tảo phân lập từ vùng ven biển có rừng ngập mặn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Ben-Amotz, R. Fishier and A. Schneller (1987), *Marine Biology*, pp. 95-31-36.
2. Akihiko Shirota (1996), *The plankton of South Vietnam fresh and marine plankton*, Oversea technical cooperation Agency Japan.
3. Trương Ngọc An (1993), *Phân loại tảo silic phù du biển Việt Nam*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.
4. Lê Viễn Chí (1996), *Nghiên cứu một số đặc điểm sinh học, công nghệ nuôi tảo silic *Skeletonema costatum*(greville) cleve làm thức ăn cho ấu trùng tôm biển*, Luận án PTS Sinh học, Hải Phòng.
5. Le Thi Phuong Hoa, Nguyen Thi Hoai Ha, Dang Ngoc Quang, Nguyen Hoang Tri (2010), “Fatty acid profiles of mangrove microalge and their potential use as food”, *Tạp chí khoa học và Công nghệ*, Tập 48, số 2A.
6. Le Thi Phuong Hoa, Nguyen Thi Hoai Ha, Pham Thi Bich Dao, Nguyen Ngoc Tuyen (2010), “Biological properties and biomass culture of *Chaetoceros muelleri* from Giao Thuy mangrove for use in aquaculture”, pp.609-614, (2010B).
7. Nguyễn Văn Mùi (2001), *Thực hành hóa sinh học*, Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội, tr 89.
8. Lê Xuân Tuấn, Mai Sỹ Tuấn (2005), “Nghiên cứu chất lượng và thành phần Phytoplankton trong rừng ngập mặn trồng tại xã Giao Lạc, huyện Giao Thủy, tỉnh Nam Định”, *Kỷ yếu Hội nghị khoa học về môi trường và phát triển bền vững*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật, tr.450-461.
9. Le Xuan Tuan, Mai Sy Tuan, Le Thi Phuong and Nguyen Thi Thu Hoa, (2008). “Study on the ability of *Platymonas* sp. And *Nannochloropsis oculata* micro-algae to reduce shrimp pond water pollution in Giao Thuy District, Nam Dinh Province”. *Journal of Science of HNUE*, Vol.53, No 7, pp.83-89.

IDENTIFICATION OF NUTRITIONAL COMPOSITION OF SOME ISOLATED MICROALGAE AT MANGROVES FOREST IN XUAN THUY NATIONAL PARK, NAM DINH PROVINCE

Abstract: This paper attempts to identify nutrient composition of 5 microalgae species: *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscule*, *Chlorella vulgaris*. These species are extracted from mangrove area in Xuan Thuy National Park. They are food sources for fishes, shrimps and bivalves and have little impacts to environment. The research has identified 24 fatty acids in 5 phytoplankton species. 71.7% of them are unsaturated. *Navicula tuscule* has 17 fatty acid with 29.6% unsaturated one. *Amphiprora alata*'s protein content is 8.1g per 100g of dry weight. *Chlorella vulgaris* has protein content of 4.44g per 100g dry weight. Carbohydrate content of *Nannochloropsis oculata* is 11.8g per 100g dry weight and that of *Navicula tuscule* is 5.47g per 100g dry weight.

Keywords: Microalgae, mangrove, *Amphiprora alata*, *Chaetoceros muelleri*, *Nannochloropsis oculata*, *Navicula tuscule*, *Chlorella vulgaris*.

XÁC ĐỊNH CÁC NHÓM LOÀI THỰC VẬT THÂN GỖ ƯU THẾ TRÊN CÁC DẠNG LẬP ĐỊA CỦA VÙNG ĐẤT CÁT NỘI ĐỒNG HUYỆN PHONG ĐIỀN, TỈNH THỪA THIÊN - HUẾ

Trương Thị Hiếu Thảo¹, Hoàng Xuân Thảo¹, Phạm Hồng Tính²

¹Trường ĐHSP Huế

²Tổng cục Quản lý đất đai

Tóm tắt: Đã xác định được ba nhóm thực vật thân gỗ ưu thế trên các dạng lập địa của vùng đất cát nội đồng. Cụ thể, trên vùng đất cát nội đồng khô gồm 6 loài; vùng ven tràm, ngập nước định kỳ là 1 loài; và vùng đầm lầy than bùn, ngập nước định kỳ là 5 loài. Sự ưu thế của các loài trong từng dạng lập địa điển hình thể hiện qua sự phân bố rộng rãi, mật độ cao, và hệ số tổ thành cao.

Từ khóa: Thực vật thân gỗ, ưu thế, mật độ, hệ số tổ thành, đất cát nội đồng

Nhận bài ngày 01.12.2017; gửi phản biện, chỉnh sửa và duyệt đăng ngày 25.12.2017

Liên hệ tác giả: Trương Thị Hiếu Thảo; Email: truonghieuthao9@gmail.com

1. MỞ ĐẦU

Đất cát nội đồng (ĐCND) huyện Phong Điền, tỉnh Thừa Thiên - Huế là một vùng đất khá đặc thù bởi điều kiện thổ nhưỡng, địa hình và khí hậu. Nằm sâu trong vùng dân cư và ngăn cách với cát ven biển bởi hệ thống đầm phá Tam Giang- Cầu Hai, ĐCND có tổng diện tích là 22.127 ha chiếm 4,8% tổng diện tích đất của tỉnh Thừa Thiên - Huế [8]. So với vùng đất cát ven biển, vùng ĐCND khá bằng phẳng hơn [10], nơi cao nhất khoảng 10m, và nơi thấp nhất dưới 2m so với mực nước biển. Với điều kiện thổ nhưỡng, địa hình, khí hậu khá khắc nghiệt, nhưng ở đây vẫn luôn tồn tại thảm thực vật tự nhiên khá phong phú. Hồ Chính (2004) [4] đã chia vùng ĐCND thành 3 dạng lập địa chính đó là: i) vùng đất cát phân bố cao không bị ngập nước; ii) vùng đất cát phân bố vùng thấp, ven tràm (bàu nước) thường hạn vào mùa khô và bị úng ngập vào mùa mưa; iii) vùng đất cát đầm lầy than bùn (vết tích của các con sông cổ) luôn tồn tại một lớp than bùn dày khoảng 1m trên bề mặt vì vậy luôn ẩm ướt và mùa mưa thì bị úng ngập. Tương ứng với mỗi một dạng lập địa là một hệ thực vật khác nhau về thành phần loài, mật độ, cấu trúc, dạng sống... Mỗi một dạng lập địa là một

nhóm loài thực vật ưu thế khác nhau, tạo nên một thảm thực vật vùng đất cát đa dạng và đặc trưng riêng.

Nghiên cứu để xác định các nhóm loài thực vật thân gỗ ưu thế là nghiên cứu cơ bản nhằm tìm ra các loài ưu thế trong từng dạng lập địa chính của vùng đất cát. Việc xác định các loài thực thân gỗ ưu thế còn cung cấp các giống cây có nguồn gốc tự nhiên bản địa thích nghi lâu dài với môi trường đất cát, có thể dùng để trồng và phục hồi thảm thực vật trên đất cát sau này theo hướng bền vững.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Thực vật thân gỗ tự nhiên vùng ĐCNĐ huyện Phong Điền, tỉnh Thừa Thiên - Huế.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Phương pháp nghiên cứu tài liệu

Kế thừa có chọn lọc tất cả các tài liệu liên quan đến vùng nghiên cứu.

2.2.2. Phương pháp nghiên cứu thực địa

Áp dụng điều tra theo hệ thống tuyến và ô tiêu chuẩn [4, 9]: sử dụng máy định vị để xác định các tuyến từ Tây sang Đông (dọc theo vùng cát) từ xã Phong Hiền đến Phong Chương và tuyến từ Bắc đến Nam (cắt ngang vùng cát) từ xã Phong Hòa đến Phong Chương huyện Phong Điền tỉnh Thừa Thiên - Huế. Kích thước của mỗi ô 10m x 10m; các ô được thiết kế trên toàn tuyến điều tra ngẫu nhiên. Trong mỗi ô tiến hành đo chiều cao vút ngọn, đường kính ngang ngực, đường kính tán, đếm số lượng các loài và số cá thể của một loài.

Thu mẫu và cố định mẫu thực vật để phân tích trong phòng thí nghiệm.

2.2.3. Phương pháp nghiên cứu trong phòng thí nghiệm

Giám định tên khoa học mẫu thực vật bằng phương pháp so sánh hình thái tham chiếu hệ thống phân loại và tài liệu nghiên cứu của Nguyễn Tiến Bản (1997 - 2003) [1,2], Phạm Hoàng Hộ tập 1,2,3 (1999,2000) [7].

2.2.4. Phương pháp xác định mật độ, tổ thành loài

- Mật độ của các loài thực vật vùng ĐCNĐ được xác định theo phương pháp của Hoàng Chung (2004) [4]:

$$N = n / S_0 \times 10.000 \text{ m}^2$$

Trong đó: n = số lượng cây trung bình trong các ô tiêu chuẩn

S_0 = diện tích ô tiêu chuẩn

N = Mật độ của loài/ha

- Áp dụng phương pháp tính tổ thành loài của Nguyễn Nghĩa Thìn (2008) [9], theo công thức:

$$P \% = P_1 + P_2 + \dots + P_i$$

Trong đó: P = Hệ số tổ thành loài (%)

$$P_1 = n/N \times 100\%$$

n = là số cá thể của loài 1

N = Tổng số cá thể của các loài.

Theo Daniel Mannilod, chỉ những loài có $P \geq 5\%$ mới thực sự có ý nghĩa sinh thái trong lâm phần (được tham gia vào công thức tổ thành), nếu $P < 5\%$ thì loài đó không tham gia vào công thức tổ thành.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Qua quá trình nghiên cứu về thảm thực vật vùng ĐCNĐ, bước đầu đã xác định có 300 loài thực vật xuất hiện ở đây chiếm khoảng 75% thành phần loài thực vật vùng cát của cả huyện Phong Điền (kể cả cát ven biển và cát nội đồng) [3,6]. Trên mỗi dạng lập địa là một hệ thực vật khác nhau về thành phần loài, cấu trúc. Những loài ưu thế là những loài có phân bố rộng, mật độ cao, và hệ số tổ thành loài cao.

3.1. Vùng ĐCNĐ khô hạn

Vùng ĐCNĐ khô hạn phân bố ở địa hình cao 6 – 8m so với mực nước biển, vào mùa mưa nước thấm hút rất nhanh và không gây ra tình trạng úng ngập, nhưng vào mùa khô môi trường trở nên khô hạn và thiếu nước. Thực vật tự nhiên phân bố vùng này rất nhiều, tạo nên hệ thực vật vùng cát rất điển hình. Tuy nhiên do điều kiện khá khắc nghiệt, thiếu nước thường xuyên, nên đây là nơi tập trung chủ yếu của các loài thực vật thân bụi. Các loài thân gỗ thường mọc xen trong các bụi, phân nhánh rất sớm, và chiều cao của các loài thường không vượt quá 10m.

Kết quả điều tra về mật độ trong các ô tiêu chuẩn trên địa bàn nghiên cứu được thể hiện qua bảng 3.1.

Bảng 3.1. Mật độ các cá thể của loài ở nhóm cây gỗ

STT	Tên loài		Mật độ cá thể loài/ha	Tỉ lệ %
	Tên khoa học	Tên tiếng Việt		
1	<i>Myrsine linearis</i> (Lour.) Poir.	Mà ca	413,33	19,94
2	<i>Syzygium corticosum</i> (Lour.) Merr. & L.M. Perry	Trâm bù gỗ	400,00	19,29
3	<i>Vatica mangachapoi</i> Blanco subsp. <i>obtusifolia</i> (Elmer) Ashton	Táu duyên hải	243,33	11,74
4	<i>Engelhardtia</i> sp.	Chẹo	240,00	11,58
5	<i>Lithocarpus concentricus</i> (Wall. ex A.DC.) Rehd.	Đẻ cát	200,00	9,08
6	<i>Syzygium zeylanicum</i> (L.) DC.	Trâm tích lan	130,00	6,27
7	<i>Garcinia ferrea</i> Pierre	Rối mật	100,00	4,82
8	<i>Orsmosia chevalieri</i> Niyomdham	Ràng ràng	96,67	4,66
9	<i>Archidendron bauchei</i> (Gagnep.) I.C. Neils.	Cổ ướm	93,33	4,50
10	<i>Carallia brachiata</i> (Lour.) Merr.	Xăng mã	53,33	2,57
11	<i>Aporosa</i> sp1.	Ngăm	26,67	1,29
12	<i>Cinnamomum burmannii</i> (Nees & T. Nees) Blume	Quế rành	26,67	1,29
13	<i>Acronychia pedunculata</i> (L.) Miq.	Bưởi bung	23,33	1,13
14	<i>Gluta megalocarpa</i> (Evr.) Tard.	Trâm mộc quả to	10,00	0,48
15	<i>Litsea glutinosa</i> (Lour.) C.B. Rob.	Bời lời nhót	6,67	0,32
16	<i>Garcinia schefferi</i> Pierre	Bứa cát	6,67	0,32
Tổng			2073,33	100,00

Từ bảng mật độ có thể thấy rằng, đạt mật độ trên 100 cá thể/ha chỉ có 7 loài, trong đó 2 loài Mả ca và Trâm bù gổ có mật độ cao nhất là 413 và 400 cá thể/ha.



a)

b)

Hình 3.1: a) Thực vật vùng ĐCNĐ khô hạn;
b) Cây Mả ca (*Myrsine linearis* (Lour.) Poir.)

Công thức tổ thành loài thực vật thân gỗ trên vùng ĐCNĐ khô hạn có thể xây dựng như sau: 19,94 Mả ca; 19,29 Trâm bù gổ; 11,74 Táo duyên hải; 11,58 Chẹo; 9,08 Dẻ cát; 6,27 Trâm tích lan; 4,82 Rôi mật; 17,28 các loại cây gỗ khác.

Theo Daniel Mannilod [9], chỉ những loài có hệ số tổ thành trên 5% mới có ý nghĩa sinh thái. Trong công thức tổ thành loài được xây dựng của nhóm thực vật thân gỗ vùng ĐCNĐ khô hạn, nhận thấy có 6 loài đạt trên 5%, vì vậy đây sẽ là những loài có ý nghĩa sinh thái trong vùng đất này.

Từ mật độ và công thức tổ thành loài vùng ĐCNĐ khô hạn đã xác định được 5 loài có mật độ cao trên 200 cá thể/ha đó là những loài Mả ca, Trâm bù gổ, Táo duyên hải, Chẹo, và Dẻ cát. Đây cũng là những loài chính làm thành nên hệ số tổ thành của thực vật thân gỗ vùng này. Ngoài ra, những loài này phân bố khá rộng, xuất hiện hầu hết trong các OTC được đặt ở vùng ĐCNĐ khô.

3.2. Vùng ĐCNĐ ven tràm, ngập nước định kỳ

Vùng ĐCNĐ ven tràm, ngập nước định kỳ phân bố gần các tràm nước, đặc trưng của vùng này là khô hạn vào mùa khô nhưng lại bị úng ngập vào mùa mưa. Khác với vùng ĐCNĐ khô, thành phần loài thực vật hiện diện trong vùng này không nhiều. Mật độ của các loài được thể hiện trong bảng 3.2.

Bảng 3.2. Mật độ các loài thực vật vùng ĐCND ven tràm, ngập nước định kỳ

STT	Nhóm cây	Tên loài		Mật độ cá thể của loài/ha	Tỉ lệ %
		Tên khoa học	Tên tiếng Việt		
1	Gỗ	<i>Melaleuca cajuputi</i> Powell	Tràm	3880	70,80
2		<i>Gardenia angustifolia</i> Lodd.	Dành dành	260	4,74
3		<i>Fagraea fragrans</i> Roxb.	Trai nước	160	2,92
4	Các loại khác	<i>Baekkea frutescens</i> L.	Chổi sể	380	6,93
5		<i>Melastoma normale</i> D. Don	Mua thường	360	6,57
6		<i>Nepenthes mirabilis</i> (Lour.) Druce	Nắp ấm hoa đôi	440	8,03
Tổng				5480	100

Từ bảng mật độ có thể thấy, Tràm là loài chiếm ưu thế trong vùng, vì vậy vùng này còn gọi tên là *rừng Tràm*, với mật độ đạt 3880 cá thể/ha. Tràm ở vùng này có chiều cao cây từ 8 – 12m, đường kính ngang ngực cũng đạt từ 8 – 15cm. Bên cạnh Tràm, một số loài thực vật thân gỗ khác như Dành dành, Trai nước, Bứa cát... cũng xuất hiện, tuy nhiên với mật độ khá thấp.

Công thức tổ thành loài của thực vật vùng ĐCND ven tràm, ngập nước định kỳ như sau:
70,80 Tràm : 8,03 Nắp ấm : 6,93 Chổi sể : 6,57 Mua : 7,67 loài khác.

Thực vật thân gỗ có ý nghĩa trong vùng này chỉ có 1 loài đó là cây Tràm.



a)

b)

Hình 3.2: a) Quần xã Tràm thời kỳ không ngập nước; b) thời kỳ ngập nước

3.3. Vùng ĐCND đầm lầy than bùn, ngập nước định kỳ

Vùng ĐCND đầm lầy than bùn, ngập nước định kỳ vào mùa mưa, là vùng khá trũng. Đây và vết tích của các con sông cổ (sông chết), trên bề mặt có lớp than bùn khá dày khoảng 1m. Sự tồn tại của lớp than bùn đã làm tăng độ mùn trong đất, luôn luôn ẩm ướt kể cả trong mùa khô. Chính điều này đã tạo điều kiện thuận lợi, mùa mưa thì luôn ngập, giúp cho các loài thực vật thân gỗ phát triển rất nhiều. Kích thước cây khá lớn, chiều cao nhiều khi lên đến 25m.



a)



b)



c)

Hình 3.3. a) Vùng ĐCND đầm lầy than bùn mùa khô; b) lớp than bùn trên bề mặt; c) thời kỳ ngập nước

Mật độ của các loài thực vật vùng ĐCND đầm lầy than bùn được thể hiện qua bảng 3.3.

Đây là vùng ưu thế của các loài gỗ lớn, từ bảng nghiên cứu về mật độ của các loài, nhận thấy các loài như Vàng trắng, Côm, Nhựa ruồi, Búi ba hoa là những loài chiếm ưu thế về mật độ chiếm trên 200 cá thể/ha. Trong đó hai loài xuất hiện với ưu thế lớn nhất là Vàng trắng với 985,71 cá thể/ha và Côm là 714,29 cá thể/ha. Công thức tổ thành của thực vật vùng

này như sau: 32,94 Vàng trắng; 23,87 Côm; 7,64 Nhựa ruồi; 7,64 Búi 3 hoa; 6,13 Vối; 5,25 Lài trâu choải; 16,53 các loại khác...

Công thức tổ thành loài, cùng với mật độ của thực vật vùng ĐCNĐ đầm lầy than bùn cho thấy, thực vật thân gỗ ưu thế ở đây gồm có 5 loài đó là Vàng trắng, Côm, Nhựa ruồi, Búi ba hoa và Vối.

Bảng 3.3. Mật độ các loài thực vật vùng cát trũng ngập nước định kỳ

STT	Nhóm cây	Tên cây		Mật độ cá thể loài/ha	Tỉ lệ %
		Tên khoa học	Tên tiếng Việt		
1	Gỗ	<i>Alseodaphne chinensis</i> Champ. ex Benth.	Vàng trắng	985,71	32,94
2		<i>Elaeocarpus</i> sp.	Côm	714,29	23,87
3		<i>Ilex cymosa</i> Blume	Nhựa ruồi	228,57	7,64
4		<i>Ilex triflora</i> Blume	Búi 3 hoa	228,57	7,64
5		<i>Cleistocalyx operculatus</i> (Roxb.) Merr. & Perry	Vối	183,33	6,13
6		<i>Syzygium polyanthum</i> (Wight) Walp.	Sắn thuyền	114,29	3,82
7		<i>Psychotria montana</i> Blume	Lầu núi	114,29	3,82
8		<i>Gardenia angustifolia</i> Lodd.	Dành Dành	85,71	2,86
9		<i>Euodia lepta</i> (Spreng.) Merr.	Ba chạc	71,43	2,36
10		<i>Caryota mitis</i> Lour.	Đùng đình	66,67	2,20
11		<i>Fagraea fragrans</i> Roxb.	Trai nước	14,29	0,47
12	Bụi	<i>Tabernaemontana buffalina</i> Lour.	Lài trâu choải	157,14	5,25
13		<i>Pandanus bipollicaris</i> H.St. John.	Dứa chót chẻ	28,57	0,95
Tổng				2992,86	100,00

4. KẾT LUẬN

Từ kết quả phân tích, đã xác định được 3 nhóm thực vật thân gỗ ưu thế trên các dạng lập địa khác nhau của vùng ĐCNĐ. Cụ thể, trên vùng ĐCNĐ khô hạn là sự ưu thế của các loài Mã ca, Trâm bù gỗ, Tấu duyên hải, Chẹo, Dẻ cát, Trâm tích lan; trên vùng ĐCNĐ ven tràm ngập nước định kỳ là sự ưu thế của Trâm; trên vùng ĐCNĐ đầm lầy than bùn là sự ưu thế của các loài Vàng trắng, Côm, Nhựa ruồi, Búi ba hoa, Vối.

Vùng ĐCNĐ đang đứng trước nguy cơ bị sa mạc hoá, việc tìm ra các nhóm thực vật thân gỗ ưu thế rất có giá trị trong việc cung cấp nguồn giống có nguồn gốc bản địa thích nghi với môi trường sống để trồng và phục hồi thảm thực vật, cải tạo môi trường cho vùng đất cát nội đồng huyện Phong Điền, tỉnh Thừa Thiên - Huế.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Tiến Bân (1997), *Cẩm nang tra cứu và nhận biết các họ thực vật hạt kín ở Việt Nam*, - Nxb Khoa học và kỹ thuật, Hà Nội.
2. Nguyễn Tiến Bân (Chủ biên) (2003), *Danh lục các loài Thực vật Việt Nam* (Tập I, II, III), - Nxb Nông nghiệp, Hà Nội.
3. Đỗ Xuân Cẩm (2004), “Rú cát nội đồng, một sinh cảnh cần được bảo tồn”, *Tạp chí Nghiên cứu và Phát triển*, số (4), Sở Khoa học và Công nghệ Thừa Thiên - Huế, tr. 83 - 91.
4. Hồ Chí (chủ biên) (2005), *Báo cáo tổng hợp: “Điều tra đánh giá tiềm năng đất đai vùng cát nội đồng tỉnh Thừa Thiên - Huế phục vụ phát triển Nông- Lâm- Ngư nghiệp”*, - Sở Khoa học và Công nghệ Thừa Thiên - Huế.
5. Hoàng Chung (2004), *Các phương pháp nghiên cứu quần xã thực vật*, - Nxb Giáo dục, Hà Nội.
6. Phan Thị Thuý Hằng và Nguyễn Nghĩa Thìn (2009), “Đa dạng thảm thực vật ở vùng cát huyện Phong Điền tỉnh Thừa Thiên - Huế”, *Hội nghị Sinh thái và Tài nguyên sinh vật lần thứ 3*, Viện Sinh Thái và Tài nguyên sinh vật Hà Nội.
7. Phạm Hoàng Hộ (1999- 2000), *Cây cỏ Việt Nam* (Quyển I, II, III), - Nxb Trẻ, TP HCM.
8. Nguyễn Thanh (2005), *Địa chí Thừa Thiên - Huế (phần Tự Nhiên)*, - Nxb Khoa học Xã hội.
9. Nguyễn Nghĩa Thìn (2008), *Các phương pháp nghiên cứu thực vật*, - Nxb Đại học Quốc gia Hà Nội.
10. Ủy ban nhân dân huyện Phong Điền (2005), *Địa chí Phong Điền*, Nxb Chính trị Quốc gia Hà Nội.

DETERMINATION OF DOMINANT ARBOR PLANTS OF SITE TYPES AT INNER SANDY AREAS IN PHONG DIEN DISTRICT, THUA THIEN HUE PROVINCE

Abstract: *There are three group of dominant arbor plants at inner sandy areas in Phong Dien distric, Thua Thien - Hue province. At drought inner sandy, there are six species; at lakeside, periodic flooding, there is one specie; at peat swamp, periodic flooding, there are five species. These species are dominated by wide distribution, high density, and high coefficient of formation.*

Keywords: *Arbor plant, dominant, density, coefficient of formation, inner sandy.*

ĐA DẠNG HÌNH THÁI RĂNG HẦU CỦA CÁC LOÀI THUỘC PHÂN HỌ CÁ BỔNG (CYPRINIDAE: BARBINAE) Ở VIỆT NAM

Tạ Thị Thủy¹, Nguyễn Thị Thủy², Hà Mạnh Linh³, Trần Đức Hậu⁴

¹Trường Đại học Thủ đô Hà Nội

²Trường THPT Nghĩa Hưng A, Nam Định

³Trường Đại học Tây Bắc

⁴Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Tóm tắt: Nghiên cứu này mô tả hình thái răng hầu của 36 loài trong phân họ cá Bống (Barbinae) dựa trên 198 mẫu thu tại các lưu vực sông khác nhau ở Việt Nam. Kết quả cho thấy có 33 loài có công thức răng hầu (Ph.) 3 hàng, trong đó: 28 loài có Ph.=2.3.5–5.3.2; 4 loài (*Systemus takhoaensis*, *Barbodes schwanenfeldi*, *Scaphiodonichthys macracanthus* và *Mystacoleucus greenwayi*) có Ph.=2.3.4–4.3.2 và 1 loài (*Hampala macrolepidota*) có Ph.=1.3.5–5.3.1. Một loài (*Acrossocheilus elongatus*) có răng hầu 4 hàng (Ph.=1.2.3.5–5.3.2.1). Hai loài có công thức răng hầu thay đổi theo kích thước: *Varicorhinus (Scaphesthes) microstomus* và *Scaphiodonichthys microcorpus*. Hầu hết các loài trong cùng 1 giống có công thức răng hầu giống nhau, trừ các giống: *Hampala*, *Systemus*, *Barbodes*, *Acrossocheilus*, *Varicorhinus* và *Scaphiodonichthys*. Hình thái răng hầu có sự khác nhau giữa các loài và kích thước mẫu.

Từ khóa: Hình thái và công thức răng hầu, Cyprinidae, Barbinae, Việt Nam.

Nhận bài ngày 10.11.2017; gửi phản biện, chỉnh sửa và duyệt đăng ngày 15.12.2017

Liên hệ tác giả: Tạ Thị Thủy; Email: ttthuy@daihocthudo.edu.vn

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Họ cá Chép (Cyprinidae) là họ có độ đa dạng lớn nhất, với khoảng 300 loài, chiếm gần 50% tổng số loài cá nước ngọt ở Việt Nam [1]. Các loài thuộc họ cá Chép đều không có răng ở hàm, thay vào đó chúng có răng ở cung hầu - do cung mang thứ 5 biến đổi thành [1, 1]. Cung hầu có từ 1 đến 4 hàng răng hầu, mỗi hàng có từ 1 đến 5 chiếc [1, 1, 2], thường khá ổn định ở các taxon khác nhau, do đó có thể được dùng làm tiêu chuẩn để định loại [1]. Tuy nhiên, hiện nay việc nghiên cứu về hình thái và công thức răng hầu của các loài thuộc họ cá Chép ở Việt Nam còn rất hạn chế. Ở Việt Nam phân họ cá Bống (Barbinae) có 108 loài, trong đó có 52 loài có số liệu về công thức răng hầu, 32 loài có mô tả sơ lược về răng hầu và

2 loài có sử dụng răng hầu trong khóa định loại [1]. Tuy nhiên, chưa loài nào có hình của răng hầu. Nghiên cứu này bổ sung công thức răng hầu và cung cấp tư liệu đầu tiên về hình răng hầu của các loài trong phân họ cá Bống thuộc họ cá Chép ở Việt Nam.

2. NỘI DUNG

2.1. Đối tượng nghiên cứu

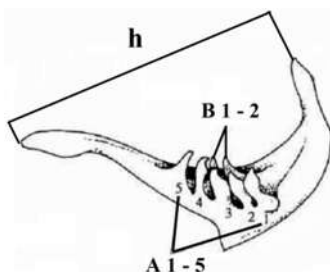
- Nghiên cứu này sử dụng 198 mẫu của 36 loài thuộc phân họ cá Bống thu tại các lưu vực sông khác nhau ở Việt Nam, được bảo quản trong dung dịch formalin 3 - 4% và lưu giữ trong phòng thí nghiệm bộ môn Động vật học, khoa Sinh học, trường Đại học Sư phạm Hà Nội.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

- Tách, làm sạch và bảo quản răng hầu theo Pravdin (1961) [1] và Eastman & Underhill (1973) [2]. Răng hầu đã tách được bảo quản trong dung dịch cồn 80 độ, ghi thông tin mẫu (chiều dài chuẩn SL, địa điểm và thời gian thu, công thức răng hầu).

- Đọc, đo và đếm răng hầu theo Pravdin (1961) [1] và Tadajewska (1998) [3] (Hình 1).

- Tên khoa học và thứ tự các loài sắp xếp theo Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) [1].

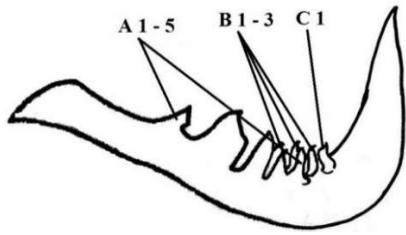


Hình 1: Mô tả hình thái cung hầu phải của loài cá *Abramis bjoerkna*, A₁₋₅. hàng răng chính, B₁₋₂. hàng răng thứ 2, h. chiều cao cung hầu, Ph. (công thức răng hầu) = 2.5-5.2 [4]

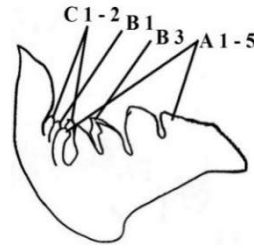
- Phác họa và đo cung hầu (h) được thực hiện trên kính lúp 2 mắt (Nikon 109494). Mỗi hình cung hầu có thông tin về tên loài (tên phổ thông và tên khoa học), SL (mm), Ph., h (mm). Số lượng răng của từng hàng cũng được chú thích trên hình (trừ răng bị gãy).

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN

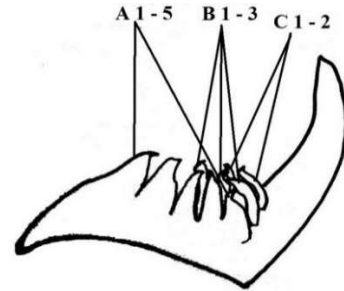
Hình thái và công thức răng hầu 36 loài, 13 giống thuộc phân họ cá Bống (Barbinae) được thể hiện ở các hình 2 - 37.



Hình 2: Cá ngựa vạch
(*Hampala macrolepidota*),
SL=91,4. Ph.=1.3.5–5.3.1.
h=10,7.



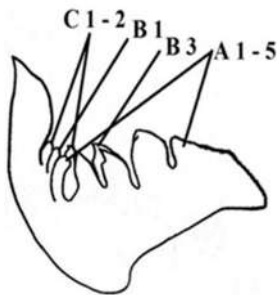
Hình 3: Cá ngựa chám
(*H. dispar*), SL=133,9.
Ph.=2.3.5–5.3.2. h=14,8.



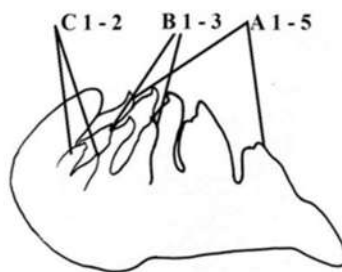
Hình 4: Cá ngựa bắc
(*Tor brevifilis*), SL=105,4.
Ph.=2.3.5–5.3.2. h=8,3.

Nhận xét: 1. Giống cá ngựa nam *Hampala* Van Hasselt, 1823 ở Việt Nam có 2 loài, trong đó có 1 loài (*H. macrolepidota*) có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung Ph. của loài *H. dispar* và hình răng hầu 2 loài so với nghiên cứu của Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) (Hình 2, 3).

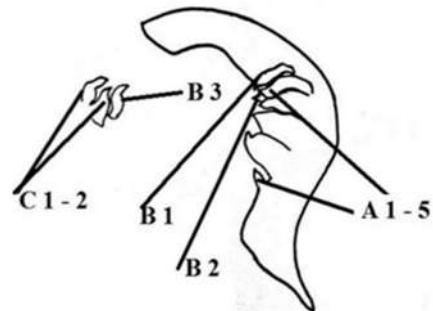
2. Giống cá ngựa gai *Tor* Gray, 1833 ở Việt Nam có 3 phân giống với 7 loài, trong đó có 4 loài có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung hình răng hầu loài (*T. brevifilis*) (Hình 4).



Hình 5: Cá púng mõm ngắn
(*Neolissochilus stracheyi*),
SL=126. Ph.=2.3.5–5.3.2.
h=15.



Hình 6: Cá mi
(*N. namlenensis*),
SL=135. Ph.=2.3.5–5.3.2.
h=15,5.

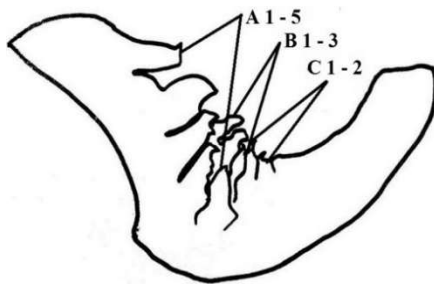


Hình 7: Cá học trò
(*Balantiocheilos melanopterus*),
SL=42,1. Ph.=2.3.5–5.3.2. h=4,5.

3. Giống cá púng *Neolissochilus* Rainboth, 1985 ở Việt Nam có 4 loài và răng hầu có 3 hàng, trong đó cả 4 loài đều có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung hình răng hầu của 2 loài (*N. stracheyi* và *N. namlenensis*) (Hình 5, 6). Trong đó, loài *N. stracheyi* có Ph.=2.3.5–5.3.2 (SL=82,5–126,1 mm) (Hình 5), nhưng theo Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) thì Ph.=2.3.4–4.3.2 (SL=207 mm) [1].

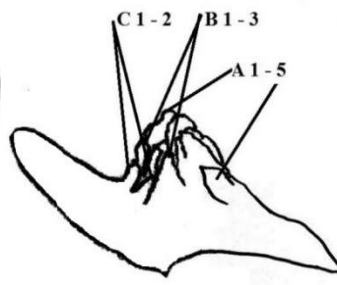
4. Giống cá học trò *Balantiocheilos* Bleeker, 1860 có 1 loài và răng hầu có 3 hàng. Tuy nhiên, loài này chưa được mô tả về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung công thức và hình răng hầu của loài *B. Melanopterus* (Hình 7).

5. Giống cá cóc *Cyclocheilichthys* Bleeker, 1859 ở Việt Nam có 6 loài nhưng chưa có loài nào được nghiên cứu mô tả về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung công thức và hình răng hầu của 3 loài (*C. enoplos*, *C. tapiensis* và *C. apogon*) (Hình 8 - 10).



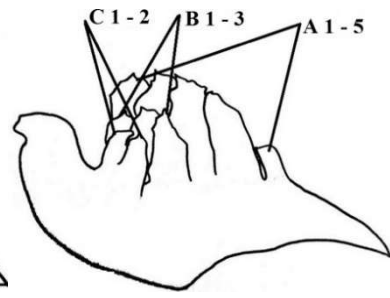
Hình 8: Cá cóc

(*Cyclocheilichthys enoplos*),
SL=153. Ph.=2.3.5-5.3.2. h=12,7.



Hình 9: Cá cây nam

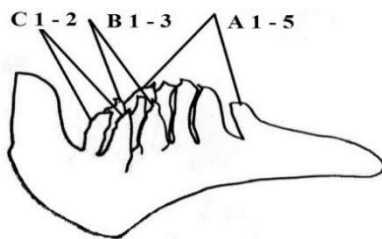
(*C. tapiensis*), SL=108.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=10,9.



Hình 10: Cá cóc đậm

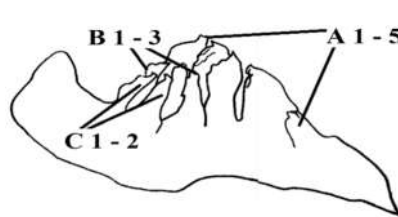
(*C. apogon*), SL=121.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=13.

6. Giống cá bống *Spinibarbus* Oshima, 1919 ở Việt Nam có 8 loài; răng hầu 3 hàng 2.3.5-5.3.2 hình dẹp bên và đỉnh hơi cong. Trong đó có 6 loài (*S. hollandi*, *S. vittatus*, *S. brevicephalus*, *S. denticulatus*, *S. nammauensis* và *S. sinensis*) có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung công thức răng hầu 1 loài (*S. babeensis*) và hình răng hầu của 4 loài (*S. sinensis*, *S. babeensis*, *S. hollandi*, *S. denticulatus*) (Hình 11 - 14).



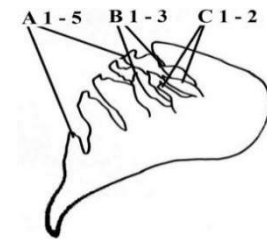
Hình 11: Cá thân

(*Spinibarbus sinensis*), SL=132.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=13,2.



Hình 12: Cá chày đất ba bẻ

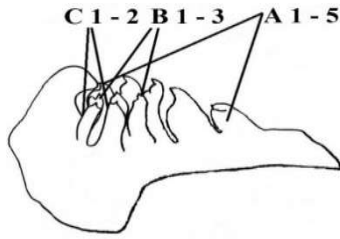
(*S. babeensis*), SL=200,9.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=20,2



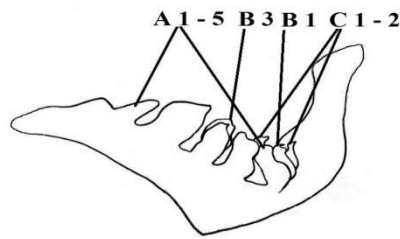
Hình 13: Cá chày đất

(*S. hollandi*), SL=143,8.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=15,8

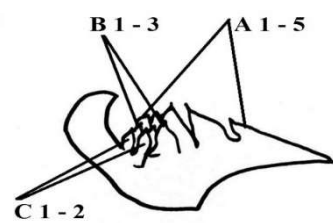
7. Giống cá đòng chám *Puntius* H. & B., 1922 ở Việt Nam có 4 loài, trong đó chỉ có 1 loài (*P. semifasciolatus*) có số liệu công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này mô tả công thức và hình răng hầu của 3 loài (*P. daruphani*, *P. brevis* và *P. semifasciolatus*) (Hình 15 - 17).



Hình 14: Cá bông
(*S. denticulatus*), $SL=237$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=24$.

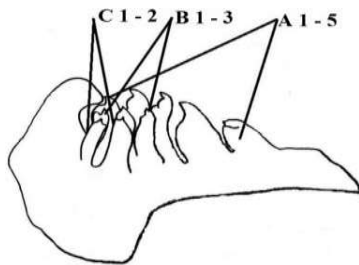


Hình 15: Cá mè vinh giả
(*Puntius daruphani*), $SL=112$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=15$.

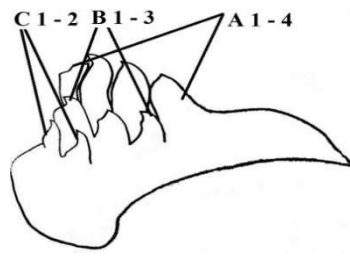


Hình 16: Cá gằm
(*P. brevis*), $SL=44$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=4,2$.

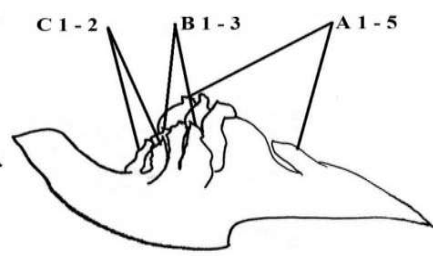
8. Giống cá đòng gai *Systemus* McClelland, 1839 ở Việt Nam có 7 loài, trong đó chỉ có 1 loài (*S. takhoaensis*) có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này mô tả công thức và hình răng hầu của 3 loài (*S. takhoaensis*, *S. orphoides* và *S. binotatus*) (Hình 18 - 20). Theo Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Văn (2001), loài *S. takhoaensis* có $Ph.=2.3.5-5.3.2$ ($SL=60 - 90$ mm) [1], tuy nhiên trong nghiên cứu này $Ph.=2.3.4-4.3.2$ ($SL=73$ mm) (Hình 18).



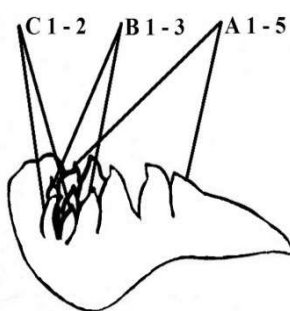
Hình 17: Cá đòng đòng
(*P. semifasciolatus*),
 $SL=64$. $Ph.=2.3.5-5.3.2$.
 $h=7,9$.



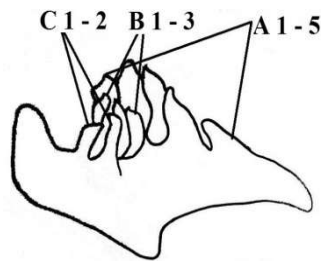
Hình 18: Cá đòng gai
(*Systemus takhoaensis*), $SL=73$.
 $Ph.=2.3.4-4.3.2$. $h=9,7$.



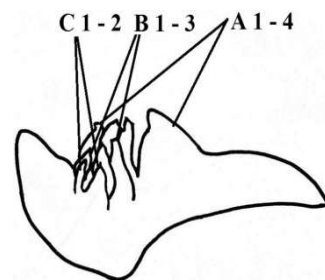
Hình 19: Cá đỏ mang
(*S. orphoides*), $SL=104,6$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=12,7$.



Hình 20: Cá trắng
(*S. binotatus*), $SL=55,8$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=5,8$.

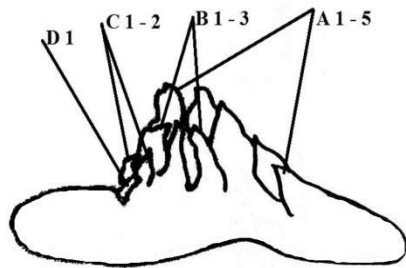


Hình 21: Cá mè vinh
(*Barbodes gonionotus*), $SL=135$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=14,2$.



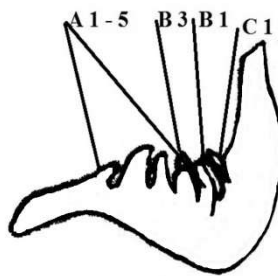
Hình 22: Cá he vàng
(*B. schwanenfeldi*), $SL=74$.
 $Ph.=2.3.4-4.3.2$. $h=11,3$.

9. Giống cá mè vinh *Barbodes* Bleeker, 1859 ở Việt Nam có 3 loài và răng hầu có 3 hàng, trong đó không có loài nào có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này mô tả công thức và hình răng hầu của 2 loài (*B. gonionotus* và *B. schwanenfeldi*) (Hình 21, 22).



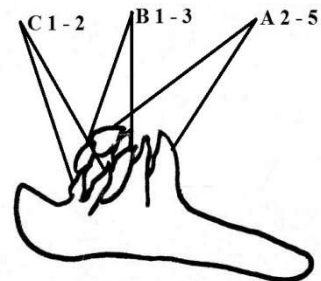
Hình 23: Cá hân

(*Acrossocheilus elongatus*), SL=131.
Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1. h=9,4.



Hình 24: Cá chất sọc

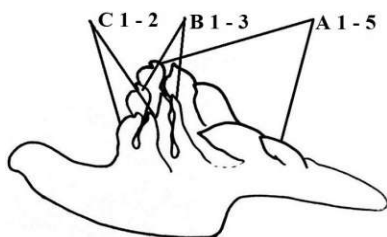
(*A. laocaiensis*), SL=45.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=4,8.



Hình 25: Cá chất hoa

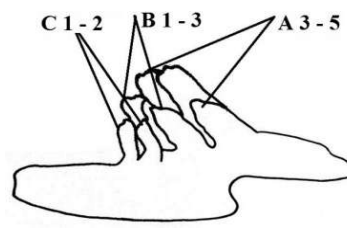
(*A. iridescens*), SL=71.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=5,2.

10. Giống cá chất *Acrossocheilus* Oshima, 1919 ở Việt Nam có 15 loài, trong đó có 9 loài có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này mô tả công thức và hình răng hầu của 6 loài (*A. elongatus*, *A. laocaiensis*, *A. iridescens*, *A. krempfi*, *A. macrosquamata* và *A. longibarbus*) (Hình 23 - 28). Trong đó, loài *A. elongatus* có Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1 (SL=131 mm) (Hình 23), còn trong nghiên cứu của Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) thì Ph.=2.3.5-5.3.2) [1] và loài *A. krempfi* có Ph.=2.3.5-5.3.2 (SL=45 - 135 mm) (Hình 26), trong nghiên cứu của Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) thì Ph.=2.3.4-4.3.2 (SL=46 - 232 mm) [2]. Ngoài ra, nghiên cứu này bổ sung công thức răng hầu của loài *A. macrosquamata* (Hình 27).



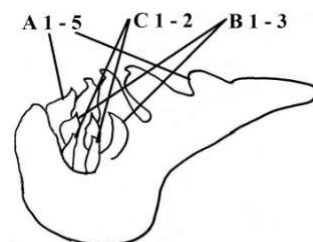
Hình 26: Cá chất trắng

(*A. krempfi*), SL=122.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=10,3.



Hình 27: Cá chất vẩy to

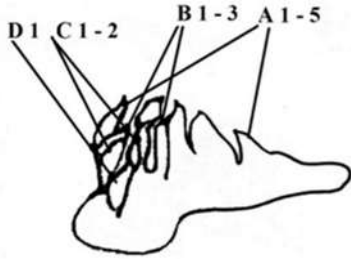
(*A. macrosquamata*), SL=128,1.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=10,5.



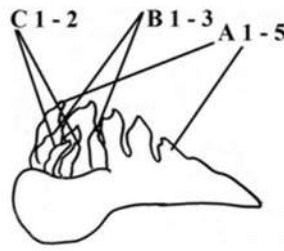
Hình 28: Cá chất râu

(*A. longibarbus*), SL=91,4.
Ph.=2.3.5-5.3.2. h=8,6.

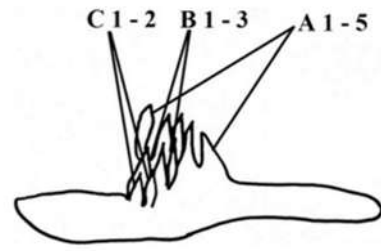
11. Giống cá sinh *Varicorhinus* Rüppell, 1935 ở Việt Nam có 20 loài và phân loài trong 2 phân giống, trong đó có 10 loài có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này mô tả công thức và hình răng hầu của 6 loài (Hình 29 - 34). Bổ sung công thức răng hầu của 1 loài: *Varicorhinus* sp. (Hình 34). Nghiên cứu này nêu sự sai khác về răng hầu của 4 loài so với Nguyễn Văn Hào và Ngô Sỹ Vân (2001) [1].



Hình 29a: Cá phệng
(*Varicorhinus (Scaphesthes)*
microstomus), $SL=78,4$.
 $Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1$. $h=5,5$.

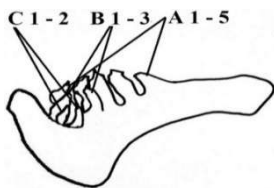


Hình 29b: Cá phệng
(*V.(S.)microstomus*), $SL=90,5$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=6,1$.

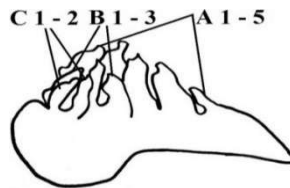


Hình 30: Cá đát trắng
(*V.(S.) argentatus*), $SL=61,5$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=4,2$.

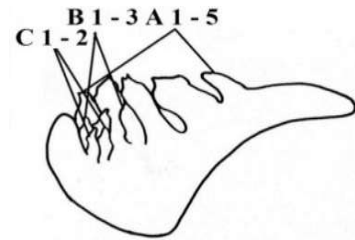
- Loài *V. (S.) microstomus*: theo Nguyễn Văn Hảo và Ngô Sỹ Vân (2001), $Ph.=2.3.5-5.3.2$ ($SL=100 - 130$ mm) [1], nhưng theo nghiên cứu này, răng hầu có sự thay đổi theo kích thước: đối với mẫu $SL=75 - 78,8$ mm thì $Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1$ và $SL=82,3 - 127$ mm thì $Ph.=2.3.5-5.3.2$ (Hình 29a - b). Loài *V. (S.) argentatus*: theo Nguyễn Văn Hảo và Ngô Sỹ Vân (2001), $Ph.=2.3.4-4.3.2$ ($SL=152$ mm) [1], nhưng theo nghiên cứu này, $Ph.=2.3.5-5.3.2$ ($SL=54,7 - 99,0$ mm) (Hình 30).



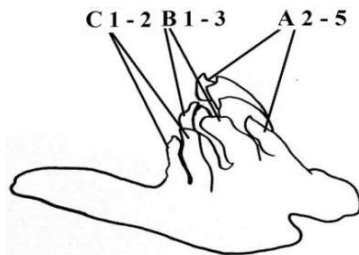
Hình 31: Cá biên
(*V.(Onychostoma)*
ovalis), $SL=44,1$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=3,7$.



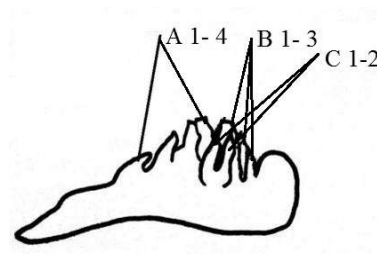
Hình 32: Cá sinh gai
(*V.(O.) laticeps*), $SL=119,1$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=7,4$.



Hình 33: Cá sinh thường
(*V.(O.) gerlachi*), $SL=135,8$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=8,9$.



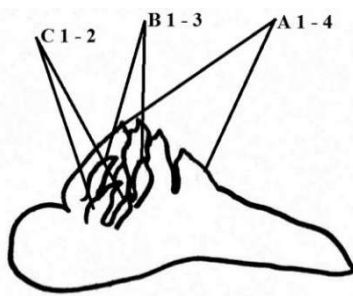
Hình 34: Cá sinh
(*Varicorhinus (O.)* sp.), $SL=170$.
 $Ph.=2.3.5-5.3.2$. $h=9,8$.



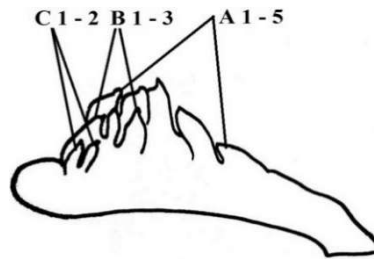
Hình 35: Cá pang
(*Scaphiodonichthys macracanthus*),
 $SL=66$. $Ph.=2.3.4-4.3.2$. $h=4,9$.

- Loài *V. (O.) ovalis ovalis*: theo Nguyễn Văn Hảo và Ngô Sỹ Vân (2001), $Ph.=2.3.4-4.3.2$ ($SL=214 - 284$ mm) [1], trong nghiên cứu này, $Ph.=2.3.5-5.3.2$ ($SL=44,1 - 62,6$ mm)

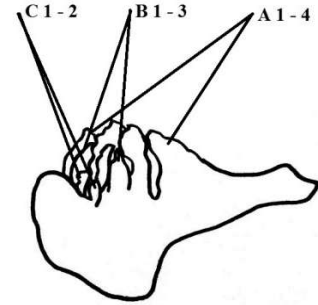
(Hình 31). Loài *V. (O.) gerachi*: theo Nguyễn Văn Hảo và Ngô Sỹ Vân (2001), Ph.=2.3.4-4.3.2 (SL=97 - 174 mm) [1], trong nghiên cứu này, Ph.=2.3.5-5.3.2 (SL=51,6 - 170,0 mm) (Hình 33).



Hình 36a: Cá mọm phong thê (*S. microcorpus*), SL=61,9. Ph.=2.3.4-4.3.2. h=4,5.



Hình 36b: Cá mọm phong thê (*V. (O.) microcorpus*), SL=116,9. Ph.=2.3.5-5.3.2. h=7,3.



Hình 37: Cá lai xước (*Mystacoleucus greenwayi*), SL=57,4. Ph.=2.3.4-4.3.2. h=5,3.

12. Giống cá mọm *Scaphiodonichthys* Vinciguerra, 1890 ở Việt Nam có 4 loài và cả 4 loài đều có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung hình răng hầu của 2 loài (*S. macracanthus* và *S. microcorpus*) (Hình 35, 36a - b). Theo Nguyễn Văn Hảo và Ngô Sỹ Vân (2001), loài *S. microcorpus*, Ph.=1.3.4-4.3.1 (SL=70 - 133 mm) [1], theo nghiên cứu này, Ph.=2.3.4-4.3.2 (SL=59,5 - 99,0 mm) (Hình 36a) và Ph.=2.3.5-5.3.2 (SL=116,9) (Hình 36b).

13. Giống cá xước *Mystacoleucus* Günther, 1868 ở Việt Nam có 4 loài, trong đó có 3 loài (*M. chilopterus*, *M. marginatus* và *M. lepturus*) có số liệu về công thức răng hầu [1]. Nghiên cứu này bổ sung công thức và hình răng hầu của loài *M. greenwayi* (Hình 37).

- Trong tổng số 36 loài, có 33 loài có công thức răng hầu 3 hàng, trong đó: 28 loài có Ph.=2.3.5-5.3.2; 4 loài (*Systemus takhoaensis*, *Barbodes schwanenfeldi*, *S. macracanthus* và *Mystacoleucus greenwayi*) có Ph.=2.3.4-4.3.2 và 1 loài (*Hampala macrolepidota*) có Ph.=1.3.5-5.3.1. Một loài (*Acrossocheilus elongatus*) có răng hầu 4 hàng (Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1) (Hình 23). Hai loài có công thức răng hầu thay đổi theo kích thước, đó là; loài *Varicorhinus (S.) microstomus* (SL=75,0 - 78,8 mm, Ph.=1.2.3.5-5.3.2.1; SL=82,3 - 127,0 mm, Ph.=2.3.5-5.3.2) (Hình 29a - b) và loài *Scaphiodonichthys microcorpus* (SL=59,5 - 99,0 mm, Ph.=2.3.4-4.3.2; SL=116,9 mm, Ph.=2.3.5-5.3.2) (Hình 36a - b).

- Trong tổng số 13 giống, hầu hết các loài trong cùng 1 giống có công thức răng hầu giống nhau, trừ một số giống sau: *Hampala*, *Systemus*, *Barbodes*, *Acrossocheilus*, *Varicorhinus* và *Scaphiodonichthys*.

- Hình thái răng hầu có sự khác nhau giữa các loài trong cùng một giống và giữa các loài trong các giống khác nhau (Hình 2-37).

4. KẾT LUẬN

Đây là nghiên cứu đầu tiên đưa ra hình răng hầu của 36 loài, thuộc 13 giống trong phân họ cá Bống (Barbinae) thu được tại các lưu vực sông ở Việt Nam, bổ sung công thức răng hầu cho 19 loài và nêu được sự sai khác của 9 loài so với các nghiên cứu trước. Công thức răng hầu khá ổn định (chủ yếu 3 hàng với 30 loài có Ph.=2.3.5–5.3.2), nhưng hình thái răng hầu có sự khác nhau giữa các loài và kích thước mẫu vật.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Văn Hào, Ngô Sỹ Vân (2001), *Cá nước ngọt Việt Nam* tập 1. Nxb Nông nghiệp, Hà Nội, tr.237-252.
2. Pravdin I. F., (1973), *Hướng dẫn nghiên cứu cá*, (Phạm Thị Minh Giang dịch), Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 278 tr.
3. Eastman J. T., Underhill J. C., (1973), “Intraspecific variation in the pharyngeal tooth formulae of some cyprinid fishes”, *Copeia* (1), pp.45-53.
4. Tadajewska M., (1998), “Pharyngeal teeth and shape of the ossa pharyngeal inferior during development of *Abramis brama* and *Blicca bjoerkna*” (L) (Cyprinidae). *Cybiurn* 22 (2), pp.123-147.

MORPHOLOGICAL DIVERSITY OF PHARYNGEAL TEETH OF BARB FISH (CYPRINIDAE: BARBINAЕ) IN VIETNAM

Abstract: The morphological pharyngeal teeth of 36 species from Barbinae was examined based on 198 specimens collected from various locations in Vietnam. The results showed that the 2.3.5–5.3.2 formula was found to exist in 28 species, the 2.3.4–4.3.2 formula in 4 species, i.e., *S. takhoaensis*, *B. schwanenfeldi*, *S. macracanthus* and *M. greenwayi*, and the 1.3.5–5.3.1 formula was present only in *H. macrolepidota*. One species had formula of 1.2.3.5–5.3.2.1, i.e., *A. elongatus*. Variations in the tooth formula with size of fish were found in 2 species, i.e., *V. (S.) microstomus* and *S. microcorpus*. No differentiations of tooth formula were found in most of species among its congener, with the exception of *Hampala*, *Systemus*, *Barbodes*, *Acrossocheilus*, *Varicorhinus* and *Scaphiodonichthys*. The sketches of pharyngeal teeth indicated that there were visible differences in morphology among species and sizes.

Keywords: Genome, assembly, DASR. Morphology and formula of pharyngeal teeth, Cyprinidae, Barbinae, Viet Nam.

IMPACTS OF DROUGHT ON CULTIVATION IN BINH THUAN PROVINCE IN THE CONTEXT OF CLIMATE CHANGE - PROJECT ASSESSMENT BY INTEGRATING GIS AND SWOT - AHP

Bui Thanh Huong

Hanoi Metropolitan University

***Abstract:** By integrating GIS with SWOT – AHP, project assessment map of impacts of drought on cultivation in Binh Thuan were established with differentiation of regions. According to the type of desert, farming activities are most strongly affected in sandy desert area, then comes the salt desert area and rocky deserts. In desert soils, low levels have more impact and will change if people pay attention to the process of rehabilitation of degraded lands. Results show that only 1/5 the area of the province (36 communes in 7 coastal districts) have to face the negative effects of drought and desertification; 1/4 total area (26 communes in 5 districts north of the province) are threatened by land degradation. Based on climate change scenarios in 2050 of MONRE, the number of communes affected by desert sands will increase, but the level of influence is somewhat relieved if synchronous system solutions and suitable adaptation are deployed.*

***Keywords:** GIS and SWOT – AHP, project assessment, drought, cultivation, Binh Thuan province.*

Email: btthuong@daihocthudo.edu.vn

Received 24 September 2017

Accepted for publication 25 December 2017

1. INTRODUCTION

Desertification is the natural process which is not popular in Vietnam but typical in Binh Thuan province. The province is in the extreme of Southern Central of Vietnam, having 781246 ha and 1,2 million people. It is the rule-wise interactions of natural conditions, of which, Binh Thuan's position is the most important factor that causes this typical phenomenon. Many researches shown that in the context of climate change (CC), drought and desertification will increase.

Drought impacted strongly on agriculture, the major sector which accounts for about 20% gross domestic product (GDP) of the province. According to the statistical bureau of Binh Thuan Department of Agriculture and Rural Development, there are about 150000 ha

land desertification, accounting for 1/5 natural area of the province, threatening 20 – 25% cultivation area. In the context of CC, impact levels of drought on agriculture will increase.

If before the year 2000, drought in Binh Thuan only appeared in the autumn paddy, to date it happens to both winter paddy and spring paddy. Therefore, to research the impacts of drought and desertification on cultivation in the province to classify the impact levels by region and propose the prioritized solutions adapting to drought and desertification, are an urgent task, practically supporting agricultural planning in the context of CC in Binh Thuan.

Scope of the research is the mainland area of Binh Thuan province. Time period of research was limited from 1960 to 2010 (the hydro meteorological time), up to 2050 (the CC scenario); from 1995 to 2010 (socioeconomic time).

With purpose of projecting impacts of drought on cultivation in Binh Thuan province in the context of CC, the research built 2 maps: impacts of drought on cultivation in Binh Thuan in 1995 – 2010 and projecting impacts of drought on agriculture in Binh Thuan in 2050 by integrating SWOT – AHP and GIS.

2. METHODS

- SWOT analysis (alternatively SWOT matrix) is an acronym for *strengths*, *weaknesses*, *opportunities* and *threats*, applied for synthesis assessment about physical and socioeconomic features relating to drought in Binh Thuan and identify the indicators impacting of drought on agriculture in this one in the context of CC.

- AHP analysis: to identify important degree for each factors estimated by SWOT;

- Geographical Informative System (GIS) integrated with SWOT – AHP to build 2 maps project assessment impacts of drought on cultivation in Binh Thuan province in the context of CC. Base on SWOT matrix, each factor was assigned values following communes (2: appear much, 1: appear less; 0: not appear). That will establish data for building 2 maps project assessment impacts of drought on cultivation in Binh Thuan province in term CC following the formula:

$$SW = \sum_{i=0}^n A_{si} * S_i - \sum_{i=0}^n A_{wi} * W_i \quad (1)$$

SW: indicator assessing status of level impact; A_{si} : important degree of indicator s_i ; A_{wi} : important degree of indicator w_i ; S_i : level appearance of the indicator s_i ; W_i : level appearance of the indicator w_i . Levels appearance are stipulated like: appear much (2), appear less (1); not appear (0).

$$OT = \sum_{i=0}^n A_{oi} * O_i - \sum_{i=0}^n A_{ti} * T_i \quad (2)$$

OT: indicator projecting level impact; Aoi: important degree of indicatoroi; Ati: important degree of indicatoriti; Oi: level appearance of the indicatoroi; Ti: level appearance of the indicatoriti. Levels appearance are stipulated like: appear much (2), appear less (1); not appear (0).

The research steps as follow:

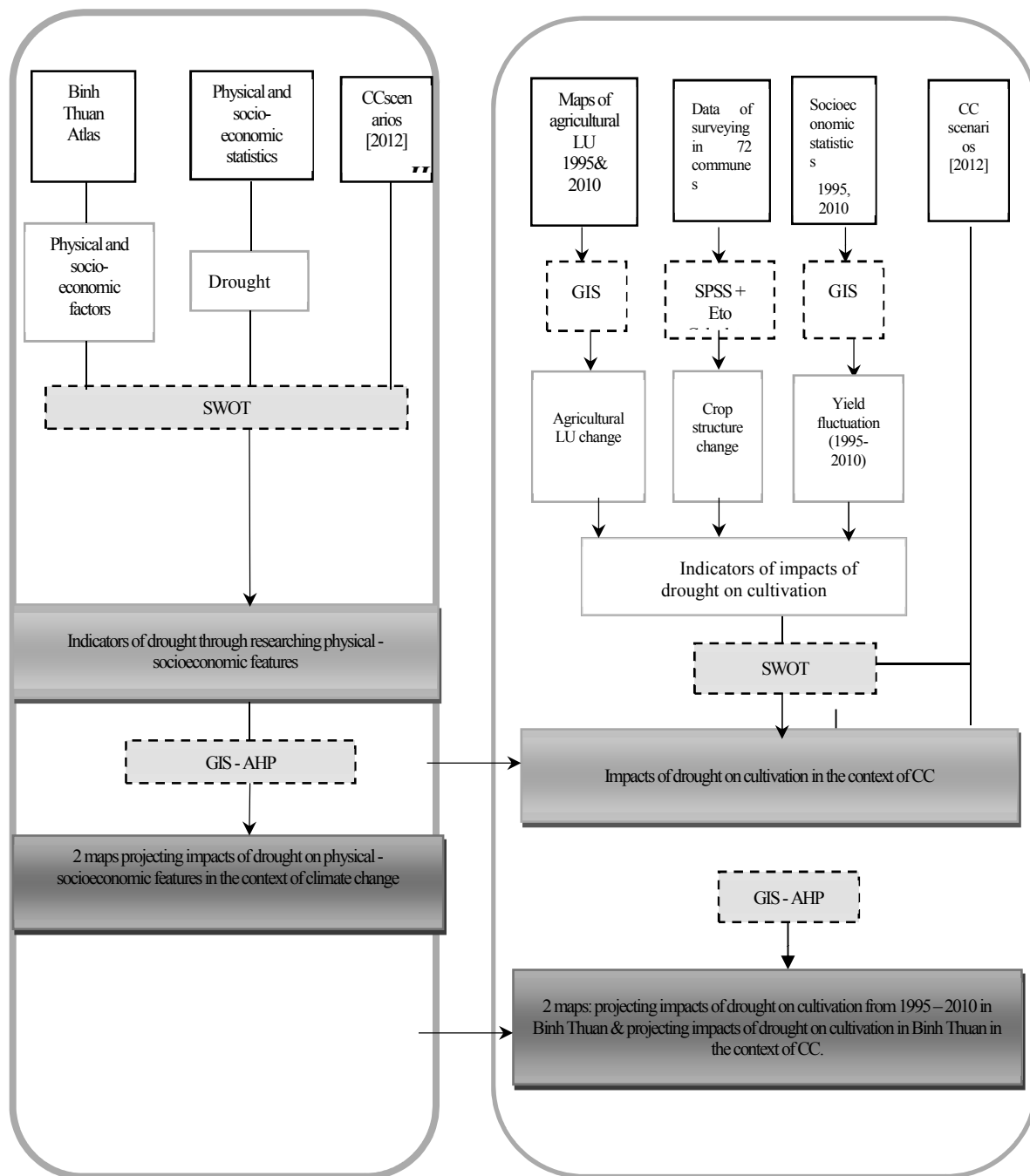


Figure 1: The research steps

The results are classified as follow:

$SW (OT) > 1,2$: Level 1 – no impact
$1,0 < SW (OT) \leq 1,2$: Level 2 – very less impact
$0,8 < SW (OT) \leq 1,0$: Level 3 – less impact
$0,6 < SW (OT) \leq 0,8$: Level 4 – moderate impact
$0,4 < SW(OT) \leq 0,6$: Level 5 – fairly strong impact
$0,2 < SW (OT) \leq 0,4$: Level 6 – strong impact
$SW (OT) \leq 0,2$: Level 7 – very strong impact

3. RESULTS

3.1. In the whole province

Table 1. Indicator system of effects of drought on cultivation by SWOT analysis

Strengths	Weaknesses
<p>(S1): Underground water is at medium-level reserves and is stable in some areas.</p> <p>(S2): Rainfall during the rainy season is relatively high in the West and Southwest of the province.</p> <p>(S3): Evergreen forests and perennial crops are high in concentration and have good quality.</p> <p>(S4): People in Binh Thuan have experience coping with drought and desertification.</p> <p>(S5): The process of urbanization and industrialization is attracting scientific and technological investment.</p> <p>(S6): Irrigation systems and irrigation techniques meet water requirements.</p> <p>(S7): Yields of multiple crops are adaptive to increasing drought and desertification</p> <p>(S8): Current land use is adaptive to drought and desertification</p>	<p>(W1): Average annual rainfall is low, strongly changed from season to season.</p> <p>(W2): average annual evaporation is high (over 1400mm).</p> <p>(W3): Drought period in a year which is unsuitable to crop is long.</p> <p>(W4): Sandy desert and the phenomenon of flying and flowing sand encroach field, rivers and lakes.</p> <p>(W5): poor ground water sources in some places</p> <p>(W6): Land is severely degraded, barren deserts appear.</p> <p>(W7): Typically, dry tropical vegetation appears.</p> <p>(W8): Human severely impact on natural resources (deforestation of watershed, coastal mining, excessive cultivation, soil contamination ...).</p> <p>(W9): Potential crop yield is reduced on sandy soil and clay soil (if only consider meteorological and soil conditions).</p> <p>(W10): Perennial crop yields are declined in the desert region</p>

Opportunities	Threats
<p>(O1): Rainfall in wet season increases in the south coastal region.</p> <p>(O2): Irrigation systems will have multiple positive changes.</p> <p>(O3): land use planning for agriculture will contribute to the sustainable exploitation of natural resources.</p> <p>(O4): The people will gradually change in thinking to cope with drought and desertification, and acquire modern technology.</p> <p>(O5): The province will have many reforestation projects, particularly in coastal protective forests.</p> <p>(O6): The province will have more regional projects contributing to ecotourism economic growth associated with sustainable development.</p> <p>(O7): Area of crops adapted to drought and desertification will be extended.</p> <p>(O8): The number of drought-tolerant plants and will be planted in dry periods of a year.</p>	<p>(T1): Barren desert will expand (Figure 2:19).</p> <p>(T2): Sandy desert will expand (Figure 2:19).</p> <p>(T3): The degraded land will increase (Figure 2:17).</p> <p>(T4): Salt desert will expand (Figure 2:19).</p> <p>(T5): Dry-season rainfall will decrease, while the dry season will last longer.</p> <p>(T6): Agricultural drought area will expand (Figure 2.16).</p> <p>(T7): The pressures of the dense population and the urbanization process on environmental resources.</p> <p>(T8): Many potential paddy rice area has not been used</p> <p>(T9): Paddy land is decreased and converted to other land.</p> <p>(T10): The rate of communes planting winter crop tends to decline slightly.</p>

3.2. Projecting effects of drought and desertification on cultivation based on climate change scenarios using AHP (Analytic Hierarchy Process)

By expert method through interviewing expert, the author has analyzed and synthesized the expertise to find the important degree of each factor by AHP analysis to classify the factors in the indicator system (table 2,3,4,5).

In fact, the positive effects of the natural – socioeconomic condition (the strengths (S) - table 2) reduced the increase in the negative impacts of drought and desertification on cultivation, of which, forest cover and irrigation systems are rated as most important by the experts. Without these two factors, drought and desertification could be more severe, leading to many consequences, especially for agricultural production. Expanded deserts, areas with less irrigation, crop yields would be more precarious than yields in the research period. Along with the rehabilitation of degraded lands, crop yields tend to increase slightly, particularly for crops adapting to dry and hot conditions

Based on climate change scenarios for 2050, the slightly-increasing rainfall in rainy season (less than 4%) in some areas of the province will affect the change of positive impacts of these factors on cultivation and desertification of the province in the future. In particular, the role of irrigation projects, afforestation projects in combination with land-use planning will be positive factors that limit the negative impact of drought on cultivation.

Table 2. Important degree of strengths group in the period 1995 - 2010 base on experts

	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	Important degree	Classification
S1	1	1	0,2	0,33	0,5	0,2	0,25	0,25	0,039	7
S2	1	1	0,2	0,33	0,5	0,2	0,25	0,25	0,039	7
S3	5	5	1	2	3	1	2	2	0,229	1
S4	3	3	0,5	1	2	0,5	0,5	0,5	0,106	5
S5	2	2	0,33	0,5	1	0,5	0,5	0,5	0,076	6
S6	5	5	1	2	2	1	2	2	0,220	2
S7	4	4	0,5	2	2	0,5	1	1	0,146	3
S8	4	4	0,5	2	2	0,5	1	1	0,146	3
Eigenvector=8,120614					CR=0,012298					

Table 3. Important degree of weaknesses group in the period 1995 - 2010 base on experts

	W1	W2	W3	W4	W5	W6	W7	W8	W9	W10	Important degree	Classification
W1	1	2	2	2	2	2	3	2	3	3	0,196	1
W2	0,5	1	1	1	1	2	2	1	2	2	0,116	3
W3	0,5	1	1	1	1	1	2	1	2	2	0,107	6
W4	0,5	1	1	1	2	2	2	1	2	2	0,124	2
W5	0,5	1	1	0,5	1	2	2	1	2	2	0,107	5
W6	0,5	0,5	1	0,5	0,5	1	1	0,5	1	1	0,067	7
W7	0,33	0,5	0,5	0,5	0,5	1	1	0,5	1	1	0,059	8
W8	0,5	1	1	1	1	2	2	1	2	2	0,113	3
W9	0,33	0,5	0,5	0,5	0,5	1	1	0,5	1	1	0,058	8
W10	0,33	0,5	0,5	0,5	0,5	1	1	0,5	1	1	0,058	8
Eigenvector = 10,11093						CR= 0,008311						

Table 4. Important degree of opportunities group in 2050 base on experts

	O1	O2	O3	O4	O5	O6	O7	O8	Important degree	Classification
O1	1	1	2	2	1	2	2	2	0,180	1
O2	1	1	2	2	1	2	2	2	0,180	1
O3	0,5	0,5	1	2	0,5	2	2	1	0,118	4
O4	0,5	0,5	0,5	1	0,5	1	1	0,5	0,075	6
O5	1	1	2	2	1	2	2	2	0,180	1
O6	0,5	0,5	0,5	1	0,5	1	1	0,5	0,075	6
O7	0,5	0,5	0,5	1	0,5	1	1	0,5	0,075	6
O8	0,5	0,5	1	2	0,5	2	2	1	0,118	4
Eigenvector = 8,135967						CR= 0,013863				

Table 5. Important degree of threats group in 2050 base on experts

	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	T10	Important degree	Classification
T1	1	2	2	3	2	2	3	3	2	3	0,200	1
T2	0,5	1	1	3	1	1	3	3	2	2	0,137	2
T3	0,5	1	1	2	1	1	2	2	2	2	0,121	3
T4	0,33	0,33	0,5	1	0,5	0,5	1	1	0,5	1	0,055	8
T5	0,5	1	1	2	1	1	2	2	1	2	0,111	4
T6	0,5	1	1	2	1	1	2	2	1	2	0,111	4
T7	0,33	0,33	0,5	1	0,5	0,5	1	1	0,5	1	0,055	8
T8	0,33	0,33	0,5	1	0,5	0,5	1	1	0,5	1	0,055	8
T9	0,5	0,5	0,5	2	1	1	2	2	1	2	0,098	6
T10	0,33	0,5	0,5	1	0,5	0,5	1	1	0,5	1	0,057	7
Eigenvector = 10,104963						CR = 0,007864						

3.3. Mapping the impact of drought on cultivation in the context of climate change

3.3.1. Map of projection of impact's drought on cultivation in Binh Thuan in the period 1995-2010

Results from the map of projection of impact's drought on cultivation in Binh Thuan in the period 1995-2010 (Figure 2) show that: the impact level of drought on cultivation can be categorized into 7 levels. Communes that have impact from level 5 to level 7 are severely impacted by drought and desertification, accounting for 20% area of the entire province, concentrating in 36 communes from 7 coastal districts of Binh Thuan. In these area, the indicators of drought are clear, cultivation activities have suffered many damages caused by dryness and sand dunes. Communes which have to suffer level 3 and level 4 are moderately affected by drought, accounting for 30.6% area of the entire province, concentrating in 26 communes from 5 northern districts of Binh Thuan. In these areas, indicators of drought are relatively clear, cultivation activities are threatened by soil degradation and local drought in dry season. Communes which have impact of level 1 and level 2 are less affected by drought, accounting for 51.3% area of the entire province. There are 43 communes (from 7 districts) in the south and west of Binh Thuan.

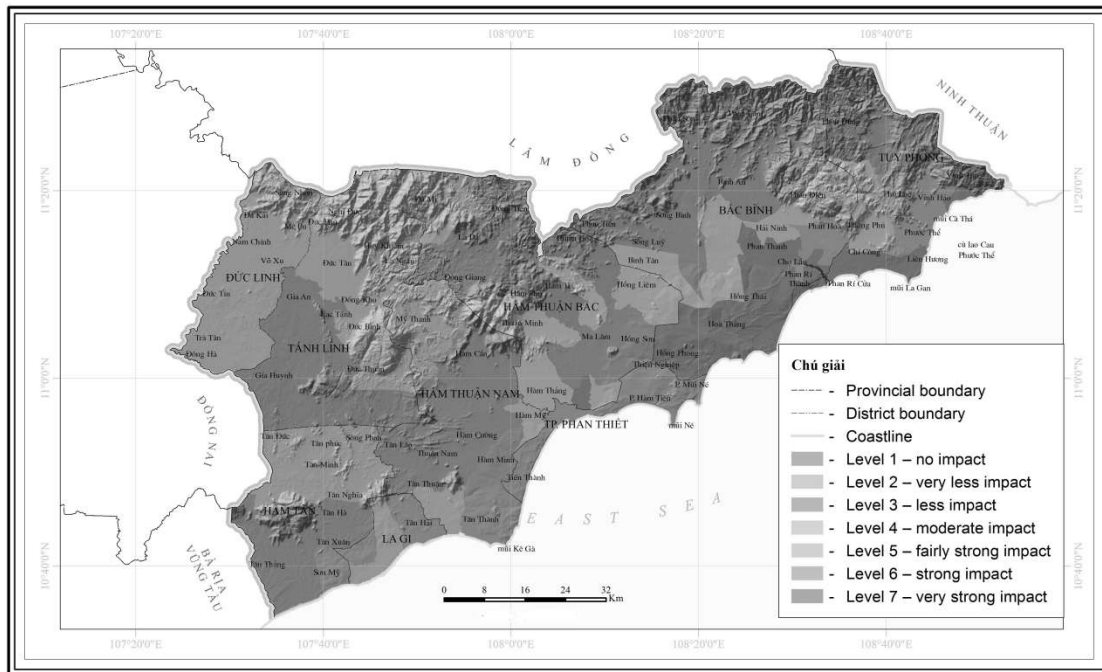


Figure 2. Map of impact levels of drought on cultivation in BinhThuan province base on communes in the period 1995 – 2015 (down scaling from 1:800.000)

Despite being one of the two driest provinces in the country, the impact level of drought to farming activities is not severe thanks to the large coverage of forest in the southwest and west of the province as well as the invested irrigation system and the proper mitigation solutions. Only 1/5 of the province's area has to endure the negative impact of drought on cultivation activities, concentrating mainly on the coastal sandy deserts. Nevertheless, 1/4 of the province's area are under threat by soil degradation, requiring more investment for the farming activities in Binh Thuan. Prediction map of the impact of drought on cultivation in Binh Thuan.

3.3.2. Map of projection of impact's drought on cultivation in Binh Thuan in 2050

To 2050, the impact degree of drought on cultivation are categorized into 7 levels. Communes that are severely affected drought (from level 5 to level 7) accounts for 20.7% the province's area, concentrating in 40 communes from 7 coastal districts of Binh Thuan. Area which have Level 6 and 7 tends to reduce thanks to the effort to increase the protective coastal forest, to develop the irrigation system and widen the vegetation cover. However, the area of impact level 5 increases due to the transformation of area of level 3, level 4. Communes with cultivation activities moderately affected by drought (level 3, level 4) tend to reduce from 26 communes to 23 communes, accounting for 18.3% the province's area. The number of communes that are less affected by drought (level 1, level 2) is 43, concentrating in the south and southwest of the district, accounting for 51.4% the province's area.

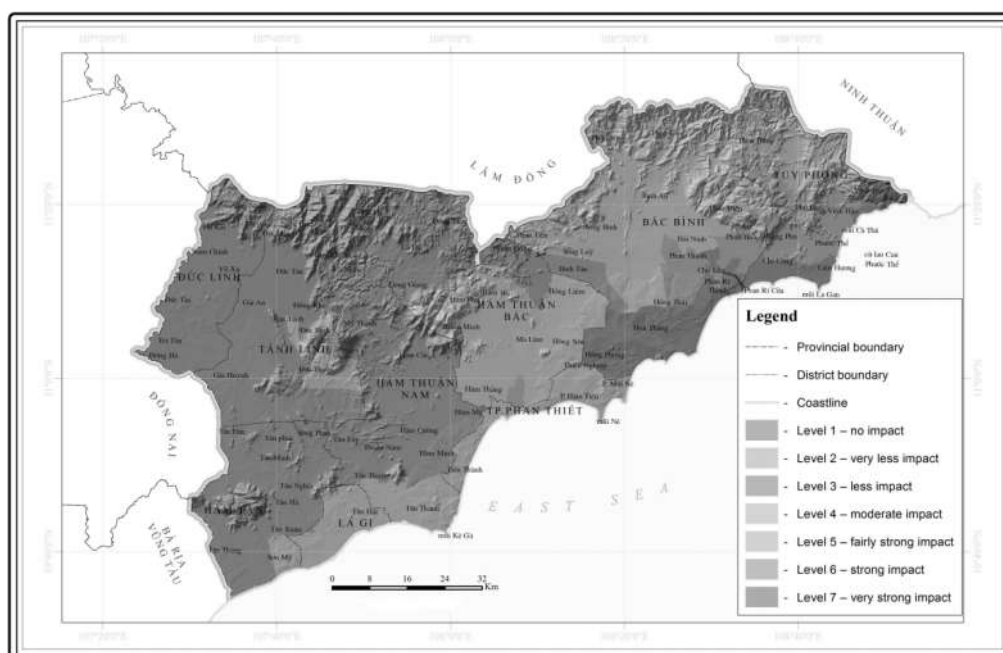
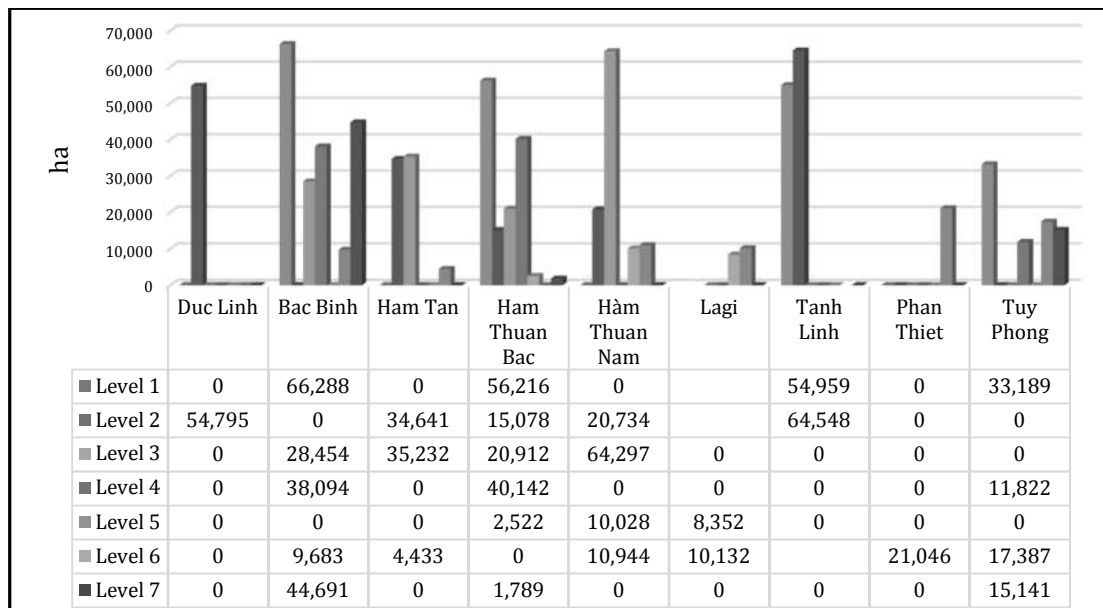
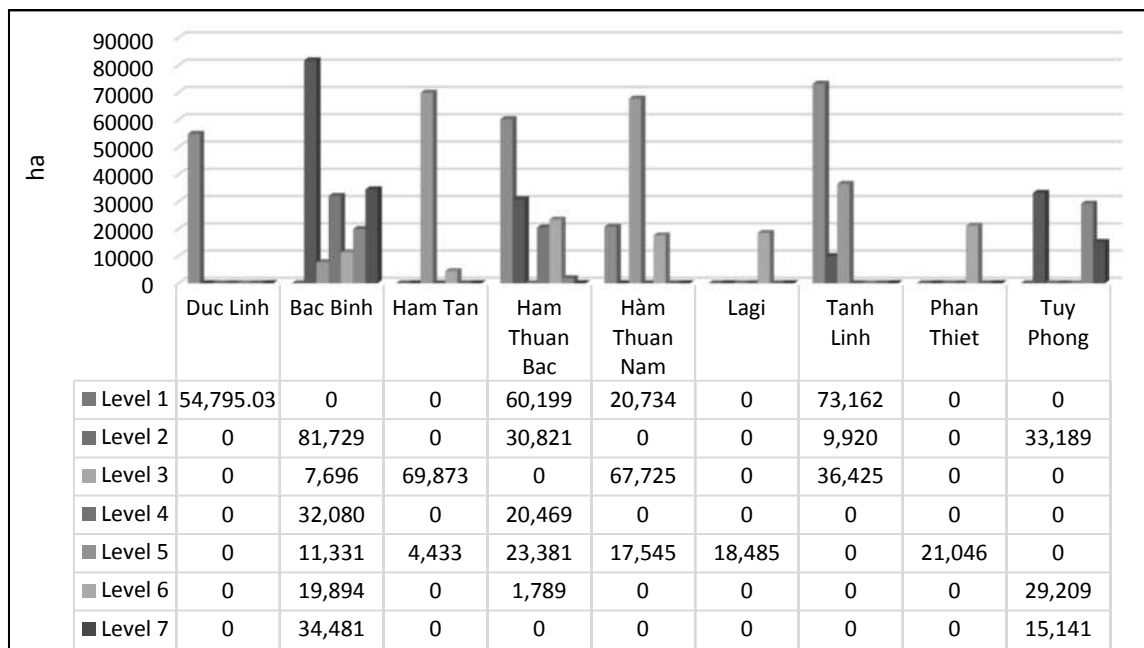


Figure 3. Map of impact levels of drought on cultivation in Binh Thuan province base on communes in 2050 (down scaling from 1:800.000)



Calculate from figure 2

Figure 4. Area of impact levels of drought on cultivation in Binh Thuan province base on communes in the period 1995 – 2015



Calculate from figure 3

Figure 5: Area of impact levels of drought on cultivation in Binh Thuan province base on communes in 2050

4. CONCLUSION

Studies on the effect of drought on cultivation is popular in the world but not much in Vietnam, especially in the context of climate change. From indicator system of drought in agriculture which was established on the basis of relationship between drought and agriculture, with the general geographic and ecological and environmental resources approach by using the method groups, evaluations on the impact of drought on farming activities not only show the negative and positive effects temporally (in the past, present and future according to the climate change scenario) but also spatially (categorizing effects based on communal groups). SWOT – AHP, one of the new research methods, which was used in this article, has proven to be scientifically reliable.

Maps about assessing the status and projecting the impacts of drought on cultivation in Binh Thuan are based on the differentiation of regions. According to the type of desert, farming activities are most strongly affected in sandy desert area, then comes the salt desert area and rocky deserts. In desert soils, low levels have more impact and will change if people pay attention to the process of rehabilitation of degraded lands. Results show that only 1/5 the area of the province (36 communes in 7 coastal districts) have to face the negative effects of drought and desertification; 1/4 total area (26 communes in 5 districts north of the province) are threatened by land degradation.

Integrating GIS with SWOT – AHP open the synthesis and analysis methodology for researching geography. Qualitative and semi - quantitative assessment will be solve better with GIS and SWOT – AHP.

REFERENCES

1. Bui Thi Thanh Huong, (2014), Impacts of drought and desertification on agriculture in Binh Thuan province in the context of climate change. PhD thesis of Graduate University of Science and Technology.
2. Doorenbos, J. and A.H. Kassam (1979), Yield response to water, FAO Irrigation and Drainage Paper N° 33, FAO, Rome, Italy, 193 pp.
3. Nguyen Van Cu et al, (2001), Research, identify reasons and measurements to combat desertification in the southern Central of Vietnam (case study Ninh Thuan province and Binh Thuan province) National Project KHCN-07-01.
4. Gobin Anne (2012), Impact of heat and drought stress on arable crop production in Belgium.
5. Kurttila, M.,Pesonen, J.Kangas, M. and Kajanus, M. (2000), Utilizing the analytic hierarchy process (AHP) in SWOT analysis – a hybrid method and its application to forest – certification case, Forest policy and Economics, Vol 1, pp.41-52.

6. Lucc Hen et al, (2011), Impact of Global Climate Change and Desertification on the Environment and Society in Southern Centre of Vietnam (Case Study in Binh Thuan Province. VITO, Mol, Belgium.
7. Ministry of Natural Resources and Environment (2012), Climate change scenario
8. Sanjay Nari (2010), SWOT analysis and confrontation matrix, Centre for promotion of import from developing countries.
9. Thomas L. Saaty (1990), “How to make decision: The Analytic Hierarchy process”, European Journal of Operational Research 48(1990) 9-26 North Holland.
10. Pham Quang Vinh et al, (2011), Impact of Global Climate Change and Desertification on the Environment and Society in Southern Centre of Vietnam (Case Study in Binh Thuan Province. IG, Vietnam and Belgium.

ẢNH HƯỞNG CỦA HẠN HÁN ĐẾN TRỒNG TRỌT Ở TỈNH BÌNH THUẬN TRONG BỐI CẢNH BĐKH – ĐÁNH GIÁ DỰ TÍNH BẰNG TÍCH HỢP GIS VÀ SWOT - AHP

Tóm tắt: *Bản đồ đánh giá thực trạng ảnh hưởng của hạn hán đến hoạt động trồng trọt và dự tính những ảnh hưởng của hạn hán đến trồng trọt vào 2050 ở tỉnh Bình Thuận được thành lập trên cơ sở phân vùng các mức độ đánh giá bằng cách tích hợp GIS và phân tích SWOT – AHP. Hoạt động trồng trọt bị ảnh hưởng mạnh ở vùng hoang mạc cát, sau đó là các vùng hoang mạc muối, hoang mạc đá. Kết quả tính toán chỉ ra rằng, 1/5 diện tích tỉnh Bình Thuận (36 xã của 7 huyện ven biển) phải đối mặt với nhiều tác động tiêu cực của hạn hán; 1/4 diện tích (26 xã ở 5 huyện phía Bắc của tỉnh) bị đe dọa bởi thoái hóa đất xuất phát từ tình trạng thiếu nước kéo dài. Dự tính theo kịch bản biến đổi khí hậu của Bộ Tài nguyên và Môi trường, số xã chịu ảnh hưởng mạnh bởi hạn hán ở Bình Thuận sẽ gia tăng do lượng mưa mùa khô được dự đoán sẽ giảm tính đến thời điểm 2050.*

Từ khóa: *GIS và SWOT – AHP, đánh giá dự tính, hạn hán, trồng trọt, tỉnh Bình Thuận.*

ĐÁNH GIÁ ẢNH HƯỞNG Ô NHIỄM MÔI TRƯỜNG ĐẾN SỨC KHỎE CỘNG ĐỒNG TẠI LÀNG ĐÔNG HỒ, XÃ SONG HỒ, HUYỆN THUẬN THÀNH, TỈNH BẮC NINH

Nguyễn Bích Ngọc¹, Ngô Thanh Sơn²

¹Trường đại học Tài nguyên và Môi trường Hà Nội

²Trường đại học Thủ đô Hà Nội

Tóm tắt: Bài viết trình bày sự cần thiết của việc đánh giá ảnh hưởng, rủi ro đối với sức khỏe cộng đồng do ô nhiễm môi trường gây ra. Dựa vào số liệu quan trắc phân tích các thông số ô nhiễm để đánh giá chất lượng môi trường nước tại làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh. Sử dụng phương pháp đánh giá rủi ro môi trường để tính toán hệ số rủi ro môi trường và hệ số rủi ro sức khỏe tại khu vực làng nghề. Kết quả tính toán của bài viết sẽ là cơ sở khoa học quan trọng để đề xuất giải pháp, định hướng quy hoạch phát triển bền vững làng nghề, bảo vệ môi trường sống cho người dân địa phương.

Từ khóa: Ô nhiễm, chất lượng nước, rủi ro môi trường, rủi ro sức khỏe, làng nghề

Nhận bài ngày 20.11.2017; gửi phản biện, chỉnh sửa và duyệt đăng ngày 20.12.2017

Liên hệ tác giả: Ngô Thanh Sơn; Email: ntson@daihocthudo.edu.vn

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Tình trạng ô nhiễm môi trường ngày càng nghiêm trọng tại các làng nghề Việt Nam hiện nay khiến cho việc đánh giá những rủi ro môi trường, rủi ro sức khỏe cộng đồng trở nên cần thiết và cấp bách.

Làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh là một làng sản xuất hàng mã với quy mô khá lớn trong cả nước. Cùng với sự gia tăng nhanh chóng nhu cầu cúng bái, lễ chùa..., hoạt động sản xuất của làng nghề này cũng ngày một phát triển mạnh mẽ. Chất lượng cuộc sống người dân địa phương được cải thiện, nâng cao, nhưng kèm theo nó là tình trạng ô nhiễm nước mặt nghiêm trọng mà ai cũng có thể nhận thấy rất rõ khi mới chỉ đặt chân đến cổng làng. Để có những chiến lược, chính sách phát triển làng nghề bền vững, kết hợp bảo vệ môi trường (BVMT), đảm bảo sức khỏe cộng đồng cần có những đánh giá

khoa học về thực trạng và tác động của ô nhiễm môi trường đến sức khỏe cộng đồng dân cư tại làng Đông Hồ, đây là hoạt động thực tế và cần thiết hiện nay.

2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

Đối tượng nghiên cứu: Ảnh hưởng của hoạt động sản xuất hàng mã đến sức khỏe người dân tại làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh

Phạm vi nghiên cứu: Làng Đông Hồ thuộc xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh nổi tiếng với nghề làm tranh dân gian in từ các bản khắc gỗ lên trên giấy dó, nhưng từ năm 1990 đến nay, làng có khoảng 300 hộ gia đình chạy dần theo nghề sản xuất hàng mã.

Địa hình khu vực khá bằng phẳng, có độ dốc <math>< 3^0</math>. Khí hậu có 4 mùa rõ rệt, nhiệt độ bình quân năm là 23,3°C. Lượng mưa trung bình hàng năm khoảng 1400 - 1600mm nhưng phân bố không đồng đều, mưa tập trung chủ yếu từ tháng 5 đến tháng 10 (chiếm 80% tổng lượng mưa cả năm). Độ ẩm không khí trung bình năm là 82%. Nguồn nước dồi dào từ sông Đuống chảy qua (2km) và hệ thống ao hồ, kênh mương đáp ứng đủ nhu cầu sử dụng của người dân.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Phương pháp kế thừa số liệu: Thu thập, thống kê và tổng hợp thông tin cần thiết từ những tài liệu, các báo cáo, các công trình nghiên cứu liên quan đến bài viết.

2.2.2. Phương pháp lấy mẫu tại hiện trường

Qua khảo sát thực địa tiến hành lấy các mẫu nước mặt, nước thải và nước ngầm tại khu vực làng Đông Hồ, cụ thể như sau:

Bảng 1. Vị trí các điểm lấy mẫu nước tại làng Đông Hồ

TT	Ký hiệu	Tọa độ vị trí lấy mẫu	TT	Ký hiệu	Tọa độ vị trí lấy mẫu
1	Nước mặt (M1)	21 ⁰ 23'19.67"N 105 ⁰ 55'68.25"E	5	Nước giếng (N2)	21 ⁰ 23'17.88"N 105 ⁰ 55'36.00"E
2	Nước mặt (M2)	21 ⁰ 23'40.72"N 105 ⁰ 55'25.99"E	6	Nước thải (T1)	21 ⁰ 23'38.81"N 105 ⁰ 55'24.00"E
3	Nước mặt (M3)	21 ⁰ 23'34.02"N 105 ⁰ 55'26.35"E	7	Nước thải (T2)	21 ⁰ 23'27.93"N 105 ⁰ 55'46.44"E
4	Nước giếng (N1)	21 ⁰ 23'17.38"N 105 ⁰ 55'14.34"E	8	Nước thải (T3)	21 ⁰ 23'32.27"N 105 ⁰ 55'29.05"E

Kỹ thuật lấy mẫu theo TCVN 5994:1995 (ISO 5667-4:1987) – Chất lượng nước – Lấy mẫu. Hướng dẫn lấy mẫu ở hồ, ao tự nhiên và nhân tạo và bảo quản ngay tại hiện trường theo TCVN 6663-3:2008 (ISO 5667 – 3:2003)

2.2.3. Phương pháp phân tích trong phòng thí nghiệm

1. Xác định chỉ số pemanganat theo TCVN 6186: 1996
2. Xác định COD bằng phương pháp chuẩn độ dicromat theo TCVN6491:1999
3. Xác định tổng Fe trong nước bằng phương pháp trắc quang dùng thuốc thử 1,1 phenantrolin
4. Xác định Mn, Pb, Cu bằng phương pháp AAS theo TCVN 6139:1996
5. Xác định BOD₅ bằng phương pháp pha loãng và cấy có bổ sung allythioure
6. Xác định NO₃⁻ bằng phương pháp trắc quang dùng thuốc thử axit sunfosalixylic
7. Xác định coliform theo TCVN 6187-2:1996 (ISO 9308-2:1990)
8. Xác định hàm lượng TSS theo TCVN 6625:2000 (ISO 11923:1997)
9. Xác định Clo bằng phương pháp chuẩn độ Morh

2.2.4. Phương pháp đánh giá rủi ro môi trường tại làng nghề

Sử dụng phương pháp đánh giá rủi ro môi trường theo mô hình dự báo:

Bước 1: Xác định tác nhân gây hại

Bước 2: Xác định hệ số rủi ro

Hệ số rủi ro được tính toán theo công thức 2.1 dưới đây

$$RQ = \frac{MEC}{PNEC} \quad (2.1)$$

PNEC: Giá trị ngưỡng của các thông số theo QCVN

RQ: là hệ số rủi ro

MEC: Giá trị nồng độ các thông số đo đạc được

Bước 3: Đánh giá rủi ro

- RQ > 1: Tác nhân gây hại cần được quan tâm và có biện pháp quản lý hạn chế và khắc phục.

- RQ < 1: Tác nhân chưa gây hại ở mức nghiêm trọng

Bước 4: Đề xuất quản lý rủi ro

2.2.5. Phương pháp đánh giá rủi ro sức khỏe cộng đồng dân cư tại làng nghề

Bước 1: Nhận diện mối nguy hại

- Phương pháp nhận diện mối nguy hại:

- + Sắp xếp các dữ liệu về thành phần môi trường và tuyến phơi nhiễm.
- + Lập bảng giá trị trung bình nồng độ và khoảng nồng độ.
- + Liệt kê liều lượng tham chiếu RfD (với chất không gây ung thư).

+ Xác định hệ số rủi ro theo công thức:

$$R_{ij} = C_{ij} \times T_{ij} \quad (T: \text{trị số độc hại}) \quad (2.2)$$

- Với chất không gây ung thư: $T_{ij} = 1/RfD$

+ Hệ số rủi ro tổng cộng: $R_j = \text{tổng các hệ số rủi ro } R_{ij}$

+ Xếp hạng các hợp chất hóa học theo hệ số rủi ro cho từng tuyến phơi nhiễm.

+ Lựa chọn các hóa chất sao cho tổng hệ số rủi ro của các hóa chất này chiếm 99% hệ số rủi ro tổng cộng.

Bước 2: Đánh giá độc tính

- Thu thập những nghiên cứu có liên quan trước đó

- Tiến hành lấy mẫu phân tích thành phần, hàm lượng các chất trong môi trường

- Khảo sát, lấy ý kiến người dân.

Bước 3: Đánh giá phơi nhiễm

Các đối tượng môi trường và tuyến ô nhiễm lựa chọn đánh giá phơi nhiễm đến sức khỏe gồm:

1. Phơi nhiễm qua đường tiêu hóa do sử dụng nước ngầm làm nước ăn uống.

2. Phơi nhiễm ngẫu nhiên với đất/cạn bản ô nhiễm qua đường tiêu hóa.

3. Phơi nhiễm qua da trong suốt quá trình tiếp xúc với nước ô nhiễm.

Công thức tính toán phơi nhiễm qua đường tiêu hóa do sử dụng nước ăn uống

$$ING_{dw} = \frac{C_w \times IR \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (2.3)$$

Ký hiệu	Tên	Giá trị		
		Người lớn	Trẻ em 6-12 tuổi	Trẻ em 0-6 tuổi
ING_{dw}	Lượng chất ăn vào (mg/kg.ngày)	Theo kết quả tính toán		
C_w	Nồng độ hóa chất trong nước (mg/l)	Theo kết quả quan trắc		
IR	Tốc độ tiêu thụ nước (lít/ngày)	2	2	1
EF	Mức độ phơi nhiễm thường xuyên (ngày/năm)	365		
ED	Khoảng thời gian phơi nhiễm (năm)	30	6	4
Bw	Trọng lượng cơ thể (kg)	70	29	16
AT	Thời gian phơi nhiễm trung bình với chất gây ung thư (ngày)	70 x 365	70 x 365	70 x 365
	Thời gian phơi nhiễm trung bình với chất không gây ung thư (ngày)	ED x 365	Ed x 365	Ed x 365

Bước 4: Đặc tính của rủi ro

Công thức tính toán đối với chất không gây ung thư

$$HI = \frac{CDI}{RfD} \quad (2.4)$$

HI: hệ số rủi ro

CDI: là liều lượng hóa chất đi vào cơ thể liên tục mỗi ngày (mg/kg.ngày)

RfD: Liều lượng tham chiếu (mg/kg.ngày)

Bước 5: Đề xuất giải pháp quản lý rủi ro**3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN****3.1. Đánh giá hiện trạng môi trường tại làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh*****Kết quả đánh giá hiện trạng môi trường nước mặt***

Kết quả phân tích hàm lượng các thông số trong môi trường nước mặt tại làng Đông Hồ được thống kê ở bảng 3.1 và so sánh với QCVN 08-MT:2015/BTNMT (cột B1).

Bảng 3.1. Kết quả phân tích hàm lượng các thông số trong nước mặt tại làng Đông Hồ

STT	Vị trí	Đơn vị	M1	M2	M3	QCVN 08:2015
	Thông số					
1	pH		7,0	6,8	6,7	5.5-9
2	DO	mg/l	0,5	0,59	0,53	≥4
3	TSS	mg/l	34	92	27	50
4	BOD ₅	mg/l	328,5	358,5	321,5	15
5	COD	mg/l	1280	1320	1180	30
6	Cl ⁻	mg/l	141,81	212,71	210,71	600
7	NO ₃	mg/l	8,5	7,74	3,7	10
8	Pb	mg/l	0,13	0,08	0,02	0,05
9	Coliform	MPN/100ml	7500	9000	7000	7500

Kết quả phân tích cho thấy giá trị DO thấp hơn rất nhiều so với quy chuẩn, tất cả các giá trị BOD₅ và giá trị COD tại các điểm lấy mẫu nước mặt đều vượt quá quy chuẩn cho phép rất nhiều lần: giá trị BOD vượt từ 21 – 23 lần, giá trị COD vượt từ 39 - 44 lần. Đặc biệt là hàm lượng chì trong nước vượt so với quy chuẩn cho phép khoảng từ 1,6 – 2,6 lần;

Như vậy, nguyên nhân chủ yếu gây ô nhiễm nguồn nước mặt tại làng Đông Hồ là do các chất hữu cơ khó phân hủy sinh học. Do thành phần nước thải sản xuất có chứa nhiều bột hồ, cặn phẩm màu và một phần vụn giấy qua các công đoạn sản xuất hàng mã. Đặc biệt tại điểm M2 – nơi tiếp nhận nước thải làng nghề đồ xuống mương nước dẫn ra ruộng.

Kết quả đánh giá chất lượng nước ngầm

Kết quả hàm lượng các thông số trong nước ngầm tại làng Đông Hồ được thống kê trong bảng 3.2 và so sánh với QCVN 09:2015/BTNMT: Quy về chất lượng nước dưới đất.

Bảng 3.2. Bảng kết quả hàm lượng các thông số trong nước ngầm tại khu vực nghiên cứu

STT	Vị trí	Đơn vị	N1	N2	QCVN 09:2015
	Thông số				
1	pH		6,5	6,8	5,5 – 8,5
2	Chi số penmanganat	mg/l	125	145	4
3	Cl ⁻	mg/l	317,27	329,07	250
4	NO ₃	mg/l	6,4	8,3	15
5	Mn	mg/l	0,1	0,4	0,5
6	Cu	mg/l	0	0,01	1
7	Pb	mg/l	0,01	0,01	0,01
8	Tổng Fe	mg/l	1	1,5	5
9	Coliform	MPN/100ml	2	3	3

Qua bảng 3.2 cho thấy, nước giếng lấy tại làng Đông Hồ có giá trị penmanganat, Clorua, rất cao và đều vượt QCVN: giá trị penmanganat vượt từ 31,3 - 36,3 lần, giá trị Cl⁻ vượt 1,8 lần.

Như vậy, có thể thấy tác nhân gây ảnh hưởng đến nước ngầm tại làng nghề Đông Hồ là do các chất hữu cơ, chất tẩy rửa chủ yếu từ nước thải sinh hoạt của người dân. Đặc biệt là ở giếng đào (N2) có khả năng ô nhiễm kim loại nặng và vi sinh cao hơn so với giếng khoan (N1).

Kết quả phân tích hàm lượng các thông số trong nước thải.

Kết quả phân tích hàm lượng các thông số trong các mẫu nước thải được thống kê ở bảng 3.3 và trị số sánh với QCVN 40:2011/BTNMT cột B.

Bảng 3.3. Bảng kết quả hàm lượng các thông số trong nước thải tại khu vực nghiên cứu

STT	Vị trí	Đơn vị	T1	T2	T3	QCVN 40:2011
	Thông số					
1	pH		6,1	6,0	6,2	5,5 – 9
3	TSS	mg/l	233	68	435	100
4	BOD ₅	mg/l	428,5	276,5	435,5	50
5	COD	mg/l	1720	1080	1560	150
6	Cl ⁻	mg/l	567,24	744,51	460,88	1000
7	Mn	mg/l	0,3	0,6	0,3	1
8	Cu	mg/l	0,47	0,4	0,5	2
9	Pb	mg/l	0,51	0,5	0,55	0,5
10	Coliform	MPN/100ml	6700	7500	6500	5000

Qua bảng kết quả phân tích hàm lượng các thông số ô nhiễm ta thấy hầu hết các thông số trong 3 mẫu nước thải đều có giá trị cao và vượt quy chuẩn cho phép nhiều lần: Giá trị BOD₅ vượt từ 5,53 – 8,71 lần, COD vượt từ 7,2 – 11,5 lần và hàm lượng TSS vượt khoảng 2,33 – 4,35 lần. Hàm lượng kim loại nặng trong nước thải chủ yếu là Pb vượt khoảng 1,1 lần. Giá trị coliform cao nhất vượt 1,5 lần.

Nhận xét chung

Từ kết quả phân tích trên, có thể đưa ra những đánh giá chung về chất lượng môi trường nước làng Đông Hồ, huyện Thuận Thành tỉnh Bắc Ninh như sau: hầu hết các thông số DO, BOD₅, COD, Pb và Coliform trong các mẫu nước mặt, nước ngầm và nước thải tại làng nghề đều có giá trị cao đạt đến ngưỡng ô nhiễm và vượt quy chuẩn cho phép nhiều lần, điều này sẽ gây ra những ảnh hưởng không nhỏ đến sức khỏe người dân trong làng khi sử dụng. Do đó cần sớm có những biện pháp kiểm soát, xử lý nước.

3.2. Đánh giá rủi ro môi trường tại làng nghề sản xuất hàng mã.

3.2.1. Đối với nước mặt

Kết quả đánh giá rủi ro môi trường với nước mặt được thống kê tính được như sau:

Bảng 3.4. Kết quả tính hệ số rủi ro môi trường của các thông số trong nước mặt

STT	Thông số	MEC _{max}	MEC _{gm}	PNEC	RQ _{max}	RQ _{gm}
1	NO ₃ ⁻	8,50	7,64	10	0,85	0,76
2	DO	0,50	0,54	4	0,125	0,135
3	BOD ₅	358,50	336,17	15	23,90	22,41
4	COD	1320	1280	30	44,00	42,67
5	TSS	92	51	50	1,84	1,02
6	Coliform	9000	7833,3	7500	1,20	1,04
7	Pb	0,13	0,08	0,05	2,6	1,6
8	Cl ⁻	212,71	188,41	600	0,35	0,31

Nguồn PNEC: cột B1-QCVN 08:2015/BTNMT

Theo kết quả tính toán, hầu hết hệ số rủi ro môi trường của các thông số ô nhiễm đều lớn hơn 1, dao động từ 1 đến 42 ở giá trị rủi ro trung bình (RQ_{gm}) đặc trưng cho toàn khu vực làng nghề. Từ kết quả bảng 3.4 ta có thể sắp xếp các tác nhân rủi ro theo thứ tự ưu tiên như sau:

Bảng 3.5 Kết quả so sánh hệ số rủi ro môi trường của các thông số ô nhiễm trong nước mặt tại khu vực nghiên cứu

Loại rủi ro		Tác nhân gây rủi ro
Rủi ro chung	RQ _{gm} > 1	Pb > COD > BOD > TSS > Coliform
Rủi ro cục bộ	RQ _{max} > 1	Pb > COD > BOD > TSS > Coliform
Rủi ro chấp nhận được	RQ _{max} < 1	Cl ⁻ > NO ₃ ⁻ > DO

3.3.2. Đối với nước ngầm

Kết quả đánh giá rủi ro môi trường đối với nước ngầm được thống kê như sau:

Bảng 3.6. Kết quả tính hệ số rủi ro môi trường của các thông số ô nhiễm trong nước ngầm tại khu vực nghiên cứu

STT	Thông số	MEC _{max}	MEC _{gm}	PNEC	RQ _{max}	RQ _{gm}
1	Cl ⁻	329,07	323,17	250	1,32	1,29
2	NO ₃ ⁻	8,3	7,35	15	0,55	0,49
3	Mn	0,4	0,25	0,5	0,8	0,5
4	Pb	0,01	0,01	0,01	1	1
5	Tổng Fe	1,5	1,25	5	0,3	0,25
6	Coliform	3	2,5	3	1	0,83

Nguồn PNEC: QCVN 09:2015/BTNMT

Từ kết quả tính bảng 3.6 ta thấy hệ số rủi ro của thông số đáng quan tâm gồm: Cl⁻ là cao nhất với RQ_{max} = 1,32 > 1, thứ hai là hệ số rủi ro của Pb và Coliform với RQ_{max} = 1

Bảng 3.7. Kết quả so sánh hệ số rủi ro môi trường của các thông số trong nước ngầm

Loại rủi ro		Tác nhân gây rủi ro
Rủi ro chung	RQ _{gm} > 1	Pb > Cl ⁻
Rủi ro cục bộ	RQ _{max} > 1	Pb > Cl ⁻ > Coliform
Rủi ro chấp nhận được	RQ _{max} < 1	Mn > NO ₃ ⁻ > Fe

Bảng 3.7 cho thấy các thông số Pb, Cl⁻ và Coliform đều là các tác nhân gây rủi ro trên diện rộng, cần có biện pháp quản lý kịp thời. Ngoài ra, Fe, NO₃⁻ và Mn là các tác nhân gây rủi ro chấp nhận được nhưng cũng cần có biện pháp quản lý, kiểm soát và xử lý trong tương lai.

Như vậy, đối với chất lượng nước tại làng Đông Hồ thì vấn đề quan tâm nhất chính là vấn đề ô nhiễm nghiêm trọng bởi các tác nhân chính là Pb, BOD₅, COD và Cl⁻ với mức độ gây rủi ro của các tác nhân là rất lớn và trong tương lai còn có xu hướng gia tăng nếu hoạt động bảo vệ môi trường không được quản lý tốt, đảm bảo sự phát triển bền vững.

3.4. Đánh giá rủi ro sức khỏe cộng đồng dân cư tại làng Đông Hồ

3.4.1. Nhận diện môi nguy hại

Từ kết quả bảng 3.2 lựa chọn nồng độ các chất nghiên cứu ở các mẫu có hàm lượng cao nhất để sử dụng cho mô hình đánh giá rủi ro sức khỏe cộng đồng

Hệ số rủi ro qua đường ăn uống khi đối với người dân làng Đông Hồ như sau:

Bảng 3.8. Hệ số rủi ro qua con đường ăn uống

STT	Thông số	C_{ij}	RfD	R_{ij}	Xếp hạng
1	Fe	1,5	0,005	300	1
2	Mn	0,4	0,009	44,4	3
3	Pb	0,01	0,0001	100	2
4	NO_3^-	8,3	1,6	5,2	4

3.4.2. Đánh giá độc tính

Theo kết quả quan trắc có thể nhận thấy, kết quả quan trắc mẫu nước ngầm tại làng Đông Hồ có hàm lượng các chất hữu cơ rất cao, cần phải xử lý và có biện pháp giảm thiểu. Hàm lượng Mn, Pb, NO_3^- , Fe trong nước ngầm cao nhưng vẫn nằm trong giới hạn cho phép.

Theo kết điều tra các hộ gia đình ở khu vực sản xuất hàng mã cho thấy: 100% các hộ gia đình được hỏi đều sử dụng nước ngầm cho sinh hoạt, ăn uống hàng ngày. 18% các hộ dân được hỏi cho biết ở khu vực này nhiều người mắc các bệnh về đường tiêu hóa, 35% mắc các bệnh về da, đặc biệt là trẻ em.

Như vậy, theo kết quả đánh giá sơ bộ sức khỏe người dân làng Đông Hồ chịu tác động của hàm lượng các chất ô nhiễm có trong nước ngầm, đặc biệt là chất hữu cơ và kim loại nặng.

3.4.3. Đánh giá phơi nhiễm

Phơi nhiễm qua đường tiêu hóa đối với nguồn nước dùng trong sinh hoạt bị ô nhiễm

Sử dụng công thức 2.3 và số liệu trong bảng 3.2 để tính toán. Giá trị nồng độ đo được dùng là giá trị hàm lượng lớn nhất của chất đó trong các mẫu phân tích.

Bảng 3.9. Nồng độ các chất phơi nhiễm qua đường tiêu hóa do uống nước ô nhiễm

STT	Thông số	INGs (mg/kg.ngày)		
		Người lớn	Trẻ 6-12 tuổi	Trẻ 0-6 tuổi
1	Mn	0,01	0,03	0,03
2	Fe	0,04	0,1	0,09
3	Pb	0,0003	0,0007	0,0006
4	NO_3^-	0,24	0,29	0,52

3.4.4. Đánh giá rủi ro

Từ các kết quả tính được ở bảng 3.9, đặc tính rủi ro đối với các chất không gây ung thư trong môi trường nước ngầm tại khu vực nghiên cứu được thống kê ở bảng dưới đây

Bảng 3.10. Đặc tính rủi ro của các chất không gây ung thư trong môi trường nước ngầm khi phơi nhiễm qua đường ăn uống

Đối tượng	RfD (mg/kg.ngày)	CDI (tiêu hóa) (mg/kg.ngày)	HI (Tiêu hóa)	Ảnh hưởng
Mn				
Người lớn	0,005	0,01	2	Có ảnh hưởng
Trẻ 6 - 12t		0,03	6	Có ảnh hưởng
Trẻ 0 - 6t		0,03	6	Có ảnh hưởng
Fe				
Người lớn	0,009	0,04	4,4	Có ảnh hưởng
Trẻ 6 - 12t		0,1	11,1	Có ảnh hưởng
Trẻ 0 - 6t		0,09	10	Có ảnh hưởng
Pb				
Người lớn	0,0001	0,0003	3	Có ảnh hưởng
Trẻ 6 - 12t		0,0007	7	Có ảnh hưởng
Trẻ 0 - 6t		0,0006	6	Có ảnh hưởng
NO₃⁻				
Người lớn	1,6	0,24	0,15	Không ảnh hưởng
Trẻ 6 - 12t		0,29	0,18	Không ảnh hưởng
Trẻ 0 - 6t		0,52	0,33	Không ảnh hưởng

Như vậy, đối với các thông số kim loại nặng (Fe, Pb, Mn) đều có kết quả đánh giá có tính rủi ro cao, có khả năng ảnh hưởng đối với sức khỏe người dân làng Đông Hồ khi thường xuyên sử dụng nguồn nước.

3.4.5. Quản lý rủi ro

Các biện pháp quản lý rủi ro

- Công cụ pháp lý

Lập ngân sách bảo vệ môi trường: Mỗi tháng địa phương có thể thu từ 10-15 nghìn đồng một hộ, số tiền này là hợp lý với thu nhập của người dân.

Lập đội chuyên trách về vệ sinh môi trường chuyên phụ trách việc thu gom rác thải và nạo vét khơi thông kênh mương, cống rãnh hàng ngày.

- Công cụ giáo dục, truyền thông

Tổ chức các buổi nói chuyện, trao đổi, lấy ý kiến nhân dân. Tổ chức tập huấn về môi trường để giúp nhân dân hiểu được sự quan trọng của môi trường, nắm bắt được cơ bản về luật môi trường để tránh vi phạm.

Phát động phong trào vệ sinh toàn làng, xã định kỳ: một tuần một lần. Quét dọn, nạo vét cống rãnh khơi thông dòng chảy tránh tình trạng tù đọng nước thải.

- Công cụ kỹ thuật

Hỗ trợ, đầu tư xây dựng hệ thống cấp nước sạch cho địa phương.

Cần nhanh chóng xây dựng hệ thống thu gom tập trung nước thải từ hoạt động sản xuất

Xây dựng bể chứa nước thải tập chung, áp dụng công nghệ xử lý phù hợp trước khi thải ra môi trường như hiện nay và có nguồn kinh phí để duy trì hoạt động này.

4. KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

Kết quả tính toán của bài viết đã chỉ ra được những rủi ro môi trường đối với làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh là vấn đề ô nhiễm nước mặt và nước ngầm. Hệ số rủi ro cho thấy các thành phần môi trường này có nguy cơ cao gây ảnh hưởng đến sức khỏe người dân bởi các tác nhân chính là kim loại nặng (Pb), BOD và COD. Đánh giá về mức độ rủi ro do các chất có trong môi trường nước phân tích được tại làng Đông Hồ, xã Song Hồ, huyện Thuận Thành: Rủi ro đến sức khỏe khi sống trong vùng đất ô nhiễm ở mức cao đối với cả người lớn và trẻ em. Điều này đòi hỏi sự cần thiết có các giải pháp bảo vệ môi trường và bảo vệ sức khỏe con người.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Lê Thị Hồng Trân (2008), *Đánh giá rủi ro sức khỏe và đánh giá rủi ro sinh thái*, Nxb Khoa học và Kỹ thuật.
2. Nguyễn Hào Quang (2014), "Đánh giá rủi ro sức khỏe đối với vấn đề ô nhiễm Asen (As) trong nước ngầm ở thành phố Hồ Chí Minh", *Tạp chí Khoa học – Đại học Quốc gia Hà Nội: Các Khoa học Trái đất và Môi trường*, Tập 30, Số 1 (2014) 50-57.
3. QCVN 40:2011/BTNMT, *Quy chuẩn kỹ thuật quốc gia về nước thải công nghiệp*.
4. UBND xã Song Hồ, "Báo cáo tình hình kinh tế xã hội xã Song Hồ, huyện Thuận Thành, tỉnh Bắc Ninh năm 2015, định hướng phát triển 2020".
5. MPP-EAS, 1999b, *Eo biển Malacca*, Đánh giá rủi ro chi tiết, Báo cáo kỹ thuật

**EVALUATING THE EFFECT OF ENVIRONMENTAL
POLLUTION ON HUMAN HEALTH AT DONG HO VILLAGE,
SONG HO COMMUNE, THUAN THANH DISTRICT, BAC NINH
PROVINCE**

***Tóm tắt:** The paper presents the need for assessing the impact and risk to public health caused by environmental pollution. Based on observation data to analyze the parameters of pollutants to assess the water quality in Dong Ho village, Song Ho commune, Thuan Thanh district, Bac Ninh province. Using the environmental risk assessment method to calculate the environmental risk coefficient and health risk coefficient in the craft village. Calculated results of the article will be an important scientific basis for proposing solutions and orientations for sustainable development of craft villages and environmental protection for local people.*

***Từ khóa:** Pollution, water quality, environmental risks, health risks, handicraft villages.*

THẺ LỆ GỬI BÀI

1. *Tạp chí Khoa học* là ấn phẩm của Trường ĐH Thủ đô Hà Nội, công bố các công trình nghiên cứu và bài viết tổng quan trong nhiều lĩnh vực khoa học. Tạp chí được xuất bản định kì, mỗi số về một lĩnh vực cụ thể: Khoa học Xã hội và Giáo dục; Khoa học Tự nhiên và Công nghệ.
2. Tác giả có thể gửi toàn văn bản thảo bài báo cho Tổng biên tập, Phó Tổng biên tập hoặc biên tập viên theo địa chỉ email ghi ở dưới. Tất cả bản thảo bài báo gửi công bố đều được thẩm định về nội dung khoa học bởi các nhà khoa học chuyên ngành có uy tín. Tạp chí không nhận đăng các bài đã công bố trên các ấn phẩm khác và không trả lại bài nếu không được duyệt đăng. Tác giả bài báo chịu hoàn toàn trách nhiệm về pháp lí đối với nội dung kết quả nghiên cứu được đăng tải.
3. Bố cục bài báo cần được viết theo trình tự sau: *tóm tắt* (nêu ý tưởng và nội dung tóm tắt của bài báo); *mở đầu* (tổng quan tình hình nghiên cứu, tính thời sự của vấn đề, đặt vấn đề); *nội dung* (phương pháp, phương tiện, nội dung nghiên cứu đã thực hiện); *kết luận* (kết quả nghiên cứu, hướng nghiên cứu tiếp theo) và *tài liệu tham khảo*.

Bài báo toàn văn không dài quá 10 trang đánh máy trên khổ giấy A4, phông chữ Times New Roman (Unicode), cỡ chữ (Size) 12 thống nhất cho toàn bài, lề trái 3 cm, lề phải 2 cm, cách trên, cách dưới 2.5 cm, giãn dòng (Multiple) 1.25. Các thuật ngữ khoa học và đơn vị đo lường viết theo quy định hiện hành của Nhà nước; các công thức, hình vẽ cần được viết theo các ký hiệu thông dụng; tên hình vẽ đặt dưới hình, tên bảng, biểu đồ đặt trên bảng. Khuyến khích các bài sử dụng chương trình LaTeX với khoa học tự nhiên, công thức hóa học có thể dùng ACD/Chem Sketch hoặc Science Helper for Word. Bài báo phải có tóm tắt bằng tiếng Việt và tiếng Anh. *Tóm tắt* viết không quá 10 dòng. *Tóm tắt tiếng Việt* đặt sau tiêu đề bài báo và tên tác giả, *tóm tắt tiếng Anh* gồm cả tiêu đề bài báo đặt sau *tài liệu tham khảo*. Các tên nước ngoài được ghi bằng kí tự Latinh. Cuối bài có ghi rõ cơ quan công tác, số điện thoại, địa chỉ email của tác giả.

4. Phần *Tài liệu tham khảo* xếp theo thứ tự xuất hiện trong bài báo và sắp xếp theo mẫu dưới đây:
 1. John Steinbeck (1994), *Chùm nho phần nộ* (Phạm Thủy Ba dịch, tập 2), Nxb Hội nhà văn, H., tr.181.
 2. Bloom, Harold (2005), *Bloom's guides: John Steinbeck's The Grapes of Wrath*, New York: Chelsea House, pp.80-81.
 3. W.A Farag, V.H Quintana, G Lambert-Torres (1998), "A Genetic-Based Neuro-Fuzzy Approach to odelling and Control of Dynamical Systems", *IEEE Transactions on neural Networks Volume: 9 Issue: 5*, pp.756-767.

Phòng Tạp chí - Trường Đại học Thủ đô Hà Nội
Số 98, Dương Quảng Hàm, Cầu Giấy, Hà Nội
Tel: 04.3.767.1409; Fax: 04.3. 833.5426
Email: tapchikhoahoc@daihocthudo.edu.vn