

**TRƯỜNG ĐẠI HỌC QUY NHƠN**  
**QUY NHON UNIVERSITY**

**TẠP CHÍ KHOA HỌC**  
**JOURNAL OF SCIENCE**

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

**14 (1)**  

---

**2020**

**BÌNH ĐỊNH, 02/2020**



## MỤC LỤC

1. Nghiên cứu lý thuyết sự hấp phụ các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen lên bề mặt kaolinite  
**Nguyễn Thị Thủy, Nguyễn Ngọc Trí, Nguyễn Tiến Trung** ..... 6
2. Một cách nhìn mới về phân liên kết hydro C-H...N trong các phức của chloroform với hydrogen cyanite và dẫn xuất fluoride  
**Phan Đặng Hồng Nhung, Huỳnh Thanh Nam, Nguyễn Tiến Trung**..... 15
3. Chặn hàm tuyến tính của trạng thái cho hệ rời rạc có chậm và nhiễu bị chặn  
**Lưu Thị Hiệp, Phan Thanh Nam** ..... 26
4. Một phương pháp mới để thiết kế quan sát trạng thái cho hệ Glucose-Insulin có trễ  
**Đào Thị Hải Yến, Đinh Công Hường** ..... 37
5. Nghiệm liouvillian hữu tỷ của phương trình vi phân đại số cấp một giống không  
**Nguyễn Trí Đạt, Ngô Lâm Xuân Châu** ..... 47
6. Dạy và học các bài toán về ma trận với sự hỗ trợ của phần mềm maple  
**Lê Văn Thiện** ..... 54
7. Tối ưu vị trí và công suất nguồn điện phân tán nhằm nâng cao chất lượng điện áp trên lưới điện phân phối  
**Ngô Minh Khoa, Huỳnh Đức Hoàn** ..... 64
8. Thiết kế bộ điều khiển dòng điện dựa trên nền tảng FPGA  
**Đỗ Văn Cần** ..... 72
9. Ứng dụng công nghệ IoT thiết kế hệ thống giám sát điện năng: Áp dụng cho phụ tải điện hạ áp 220VAC  
**Hồ Văn Trình, Lê Văn Thơ, Ngô Minh Khoa** ..... 80
10. Đa dạng thành phần loài cá ở đầm Thị Nại, tỉnh Bình Định  
**Võ Văn Chí, Nguyễn Thị Phương Hiền** ..... 88



# A theoretical study on adsorption of organic molecules containing benzene ring onto kaolinite surface

Nguyen Thi Thuy, Nguyen Ngoc Tri, Nguyen Tien Trung\*

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

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

## ABSTRACT

In the present work, we performed calculations on adsorption of benzene's derivatives including benzaldehyde, benzoic acid, aniline, phenol, benzenesulfonic acid molecules on a kaolinite surface using density function theory method. The stable configurations of the molecules on H-slab of kaolinite were observed. Adsorption energies of complexes ranges from -2.99 to -24.79 kcal.mol<sup>-1</sup>. Stability of configurations is significantly contributed by O/N-H...O hydrogen bonds. The results show that the adsorption ability of these molecules on H-slab of kaolinite decreases in the order of -SO<sub>3</sub>H > -COOH > -OH > -CHO > -NH<sub>2</sub> functional groups. The DPE, PA, AIM and NBO results provide an insight into existence and role of O/N/C-H...O hydrogen bonds in stabilizing complexes.

**Keywords:** *Adsorption, organic molecules, kaolinite, surface, DFT.*

\*Corresponding author:

Email: [nguyentien trung@qnu.edu.vn](mailto:nguyentien trung@qnu.edu.vn)

# Nghiên cứu lý thuyết sự hấp phụ các phân tử hữu cơ chứa vòng benzen lên bề mặt kaolinite

Nguyễn Thị Thủy, Nguyễn Ngọc Trí, Nguyễn Tiên Trung\*

*Phòng thí nghiệm Hóa học tính toán và Mô phỏng, khoa Khoa học tự nhiên,  
Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam*

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

## TÓM TẮT

Trong nghiên cứu hiện tại, chúng tôi thực hiện các tính toán về sự hấp phụ các dẫn xuất của benzen như  $C_6H_5CHO$ ,  $C_6H_5COOH$ ,  $C_6H_5NH_2$ ,  $C_6H_5OH$ ,  $C_6H_5SO_3H$  lên bề mặt vật liệu kaolinite sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ. Các cấu trúc bền của sự hấp phụ các phân tử trên bề mặt H-slab của kaolinite đã được tìm thấy. Năng lượng hấp phụ của các phân tử hữu cơ trên bề mặt kaolinite trong khoảng -2,99 đến -24,79 kcal/mol. Độ bền các phức thu được do sự đóng góp đáng kể của các liên kết hydro kiểu O/N-H...O. Các kết quả thu được cho thấy khả năng hấp phụ các phân tử hữu cơ trên bề mặt H-slab của kaolinite giảm dần theo thứ tự các nhóm chức  $-SO_3H > -COOH > -OH > -CHO > -NH_2$ . Các phân tích về DPE, PA, NBO và AIM cung cấp một sự hiểu biết rõ ràng hơn về sự hình thành và vai trò của liên kết hydro O/N/C-H...O trong việc làm bền các phức thu được.

**Từ khóa:** *Hấp phụ, phân tử hữu cơ, kaolinite, bề mặt, DFT.*

## 1. MỞ ĐẦU

Sự phát triển mạnh mẽ của các ngành công nghiệp đã thải ra môi trường một lượng lớn chất hữu cơ chứa vòng benzen như benzaldehyde, axitbenzoic, aniline, phenol hay axit benzenesulfonic. Chúng là những chất độc hại, tồn tại lâu dài trong môi trường và khó xử lý, đặc biệt gây ra các ảnh hưởng xấu đến hệ thần kinh, bộ gen di truyền của các sinh vật và đối với hệ sinh thái của con người. Chính vì vậy việc tìm ra vật liệu có khả năng loại bỏ tốt các hợp chất hữu cơ trên là việc làm cần thiết và cấp bách hiện nay.<sup>1,2</sup>

Cao lanh có chứa loại khoáng kaolinite, là một trong những vật liệu chủ yếu được ứng dụng trong ngành công nghiệp lọc nước, khắc phục ô nhiễm đất và xúc tác do diện tích bề mặt cao của

nó, chi phí thấp và thân thiện với môi trường.<sup>1-3</sup> Trong những năm gần đây, các phản ứng cơ bản trên bề mặt kaolinite đã được các nhà khoa học quan tâm khảo sát. Gần đây, nghiên cứu khả năng hấp phụ của các hợp chất hữu cơ bao gồm một số thuốc nhuộm lên bề mặt kaolinite và oxit nhôm vô định hình đã được thực hiện bởi Harri và các cộng sự.<sup>4</sup> Kết quả cho thấy bề mặt hydro của kaolinite (H-slab) có khả năng hấp phụ tốt các chất hữu cơ hơn nhiều lần so với bề mặt oxy của nó (O-slab) và bề mặt oxit nhôm. Ngoài ra nhóm nghiên cứu của Chen đã khảo sát sự hấp phụ của các loại muối amin/amoni khác nhau của DDA (Dodecyl amin), MDA (N-methyldodecyl amin), DMDA (N, N-dimethyldodecyl amine) và DTAC (Dodecyl trimethyl ammonium clorua) lên trên bề mặt kaolinite trên cả hai phương diện tính toán lý thuyết bằng thuyết phiếm hàm mật

\*Tác giả liên hệ chính.

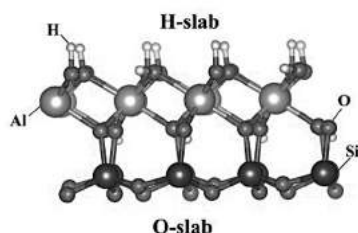
Email: nguyentientrung@qnu.edu.vn

độ (DFT) và thực nghiệm. Kết quả chỉ ra rằng các cation amin/amoni khác nhau có thể hấp phụ mạnh trên bề mặt hydro của kaolinite.<sup>5</sup>

Kaolinite là loại khoáng aluminosilicat 2 lớp nên khi xét đến cấu trúc bề mặt sẽ tồn tại hai kiểu: bề mặt giàu hydro (H-slab) và bề mặt giàu oxy (O-slab) như chỉ ra ở hình 1. Theo các nghiên cứu trước đây, bề mặt H-slab với mật độ hydro dày đặc, có khả năng tích điện dương lớn thuận lợi cho việc hấp phụ, tương tác với các hợp chất hữu cơ chứa các nhóm chức như -OH, -COOH.<sup>4-6</sup> Thêm vào đó, nghiên cứu của Johnson về sự hấp phụ của benzene, n-hexane, pyridine và 2-propanol trên hai bề mặt của kaolinite chỉ ra rằng bề mặt H-slab có khả năng hấp phụ tốt hơn bề mặt O-slab.<sup>7</sup> Do vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi chọn bề mặt H-slab để khảo sát sự hấp phụ các dẫn xuất benzen chứa các nhóm chức như -CHO, -COOH, -OH, -NH<sub>2</sub>, -SO<sub>3</sub>H. Việc chọn nhiều loại nhóm chức khác nhau với mục đích đánh giá cấu trúc hình học và độ bền của phức hình thành; khả năng tương tác của các nhóm chức với bề mặt vật liệu, bản chất và vai trò các tương tác hình thành trong quá trình hấp phụ.

## 2. PHƯƠNG PHÁP TÍNH

Cấu trúc hình học của các phân tử và bề mặt kaolinite được xem xét và tối ưu bằng chương trình VASP.<sup>8</sup> Kaolinite là một trong những khoáng sét phổ biến, có công thức hóa học là Al<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(OH)<sub>4</sub>, bao gồm một loạt các lớp không tích điện được kết nối với nhau bởi một mạng lưới các liên kết hydro giữa các mặt H-slab và O-slab, như chỉ ra ở hình 1.



**Hình 1.** Cấu trúc bề mặt của kaolinite (H-slab và O-slab)

Trong các tính toán cho hệ nghiên cứu, các cell được thiết kế với kích thước các chiều:

$a = 10,43 \text{ \AA}$ ;  $b = 9,06 \text{ \AA}$ ;  $c = 25,00 \text{ \AA}$ , trong đó khoảng không gian trống (vacuum space) khoảng  $15 \text{ \AA}$ , đủ lớn để bỏ qua các tương tác biên không cần thiết trong quá trình tối ưu. Năng lượng E-cutoff được khảo sát và chọn ở mức  $500 \text{ eV}$ , độ hội tụ được lấy ở mức  $1.10^{-6} \text{ eV}$  để thu được các giá trị năng lượng trong các tính toán có độ chính xác và tin cậy cao.<sup>9,10</sup>

Trong hệ nghiên cứu này, phiếm hàm Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) với sự gần đúng gradient tổng quát (GGA) cho thành phần tương quan trao đổi được sử dụng trong tất cả các tính toán.<sup>11</sup> Năng lượng hấp phụ ( $E_A$ ) và năng lượng tương tác ( $E_I$ ) được tính theo các biểu thức sau:  $E_A = E_{\text{surf-mol}} - (E_{\text{surf}} + E_{\text{mol}})$ ;  $E_I = E_{\text{surf-mol}} - (E_{\text{surf}}^* + E_{\text{mol}}^*)$ , trong đó  $E_{\text{surf-mol}}$ ,  $E_{\text{surf}}$  và  $E_{\text{mol}}$  tương ứng là năng lượng tối ưu của phức, bề mặt và phân tử;  $E_{\text{surf}}^*$  và  $E_{\text{mol}}^*$  là năng lượng điểm đơn của bề mặt và phân tử được tách ra từ phức và không tối ưu lại. Năng lượng biến dạng của phân tử hấp phụ ( $E_{D\text{-mol}}$ ) và bề mặt ( $E_{D\text{-surf}}$ ) trong quá trình hấp phụ được tính tương ứng là sự khác biệt giữa  $E_{\text{mol}}^*$  với  $E_{\text{mol}}$  và  $E_{\text{surf}}^*$  với  $E_{\text{surf}}$ .<sup>12</sup>

Bên cạnh đó, để hiểu rõ hơn về sự hình thành, bản chất và vai trò của các tương tác trên bề mặt, một số đại lượng nhiệt động như ái lực proton (PA) và năng lượng tách proton (DPE) cho các phân tử dẫn xuất benzen được phân tích, đánh giá. Thuyết nguyên tử trong phân tử (AIM) và sự tiếp cận orbital phân tử thích hợp (NBO) được sử dụng để đánh giá bản chất, vai trò của các tương tác hình thành giữa các phân tử hữu cơ với bề mặt H-slab. Các tính toán về DPE, PA cho các phân tử, phân tích AIM và NBO cho các phức được thực hiện tại mức lý thuyết B3LYP/6-31 + G(d,p) sử dụng Gaussian 09, AIM2000, NBO5.G.<sup>13-15</sup>

## 3. KẾT QUẢ THẢO LUẬN

### 3.1. Cấu trúc hình học bền

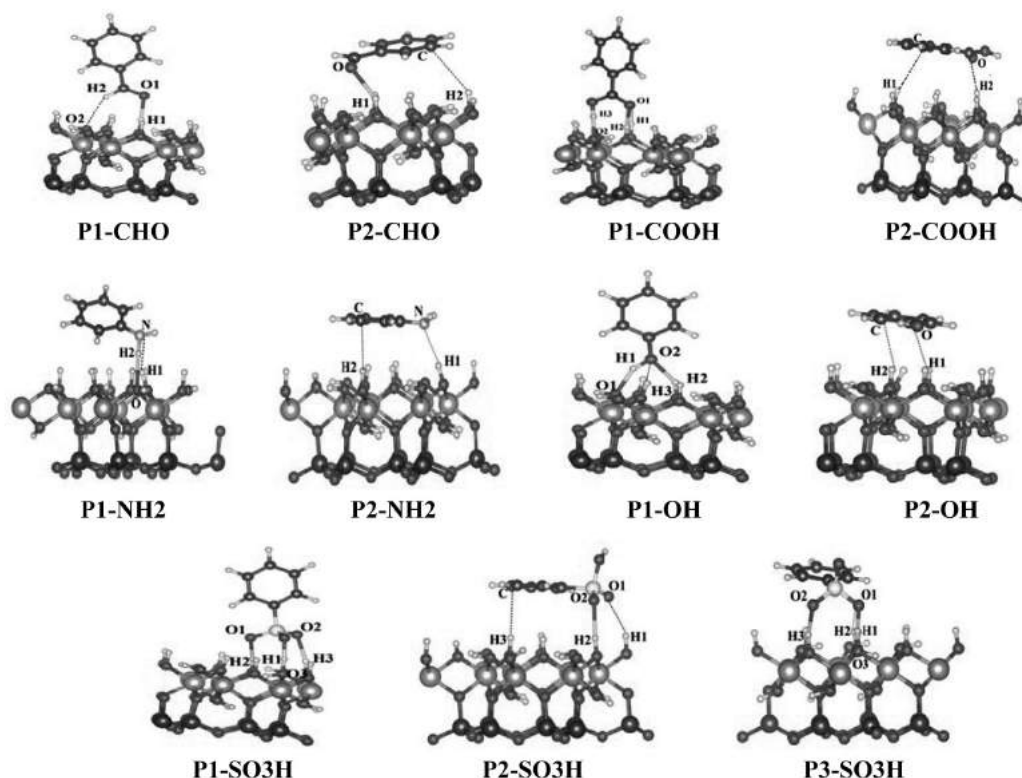
Kết quả tối ưu hình học cho thấy, các phân tử dẫn xuất benzen khi hấp phụ lên bề mặt H-slab theo hai xu hướng: i) thứ nhất là hình thành cấu trúc kiểu thẳng đứng với sự tương tác chủ yếu ở các nhóm chức (dạng **P1**) và ii) thứ hai là hình thành

cấu trúc kiểu song song với sự tương tác chủ yếu ở vòng benzen (dạng **P2**) như chỉ ra ở hình 2. Ở các phức dạng **P1**, độ bền phức do sự đóng góp của các liên kết hydro kiểu O/N/C-H...O. Ở các phức dạng **P2**, độ bền phức do sự đóng góp từ các liên kết hydro O/N/C-H...O và H... $\pi$  (vòng benzen).

Bảng 1 cho thấy các khoảng cách H...O, H...N, H...C/ $\pi$  (vòng benzen) trong các phức như chỉ ra ở hình 2 lần lượt trong khoảng 1,05-2,58 Å, 2,25-2,81 Å và 2,61-3,25 Å. Các giá trị này hầu hết đều nhỏ hơn tổng bán kính Van der Waals của 2 nguyên tử tham gia tương tác (bán kính Van der Waals của H, C, N, O lần lượt là 1,20 Å; 1,70 Å; 1,55 Å và 1,50 Å tương ứng). Do đó, chúng tôi dự đoán bước đầu có sự hình thành các liên kết hydro kiểu O/N/C-H...O và H... $\pi$  trong các phức khảo sát trên. Với phức **P1-NH<sub>2</sub>** sự tồn tại liên kết hydro H...N/C( $\pi$ ) mặc dù khoảng cách của H và N khoảng 2,81 Å và 2,61-3,25 Å ở các phức dạng **P2**, hơi lớn hơn tổng bán kính Van der Waals của hai nguyên tử N và H (2,75 Å và 2,9 Å), sẽ được chứng minh ở các phần phân tích bên dưới.

Bên cạnh đó, những thay đổi về độ dài các liên kết ở các nhóm chức trong quá trình hấp phụ được đưa ra trong bảng 1. Kết quả tính toán cho thấy độ dài các liên kết C-H, C=O, S=O, S-O, N-H, O-H trong các phân tử hữu cơ biến đổi khá nhỏ trong khoảng 0,00-0,06 Å. Một số liên kết C-O (trong C-O-H), S-O (trong S-O-H) bị rút ngắn lớn hơn, trong khoảng 0,01-0,13 Å.

Nhìn chung, sự hình thành các phức bền giữa các phân tử dẫn xuất benzen với bề mặt H-slab không làm thay đổi nhiều về cấu trúc hình học các phân tử ban đầu. Đáng chú ý, ở các phức **P1-SO<sub>3</sub>H** và **P2-SO<sub>3</sub>H**, khoảng cách tương tác H...O<sub>surf</sub> khoảng 1,05 và 1,06 Å rất gần với độ dài liên kết O-H trong phân tử hữu cơ ban đầu (0,98 Å), cho thấy nguyên tử H trong nhóm -SO<sub>3</sub>H có xu hướng dịch chuyển sang bề mặt kaolinite trong quá trình hấp phụ. Xu hướng dịch chuyển nguyên tử H linh động trong các liên kết phân cực mạnh ở phân tử hữu cơ sang bề mặt vật liệu cũng đã được tìm thấy trong nghiên cứu trước đây của nhóm chúng tôi.<sup>16</sup> Sự hình thành và vai trò của các liên kết hydro kiểu O/N/C-H...O trong các phức sẽ được phân tích chi tiết ở bên dưới.



**Hình 2.** Các cấu trúc bền của sự hấp phụ các phân tử hữu cơ trên bề mặt kaolinite (H-slab)



**Bảng 1.** Khoảng cách các tương tác, sự thay đổi độ dài các liên kết tham gia vào các tương tác trong các phức (đơn vị của khoảng cách là Å)

Phức	H...O	H...C/N	$\Delta r(C,S-O)$	$\Delta r(C,O,N-H)$	$\Delta r(C,S=O)$	$\Delta r(H-O)^c$
<b>P1-CHO</b>	1,77/2,58 <sup>a)</sup>	-	-	0,00	0,01	0,02
<b>P2-CHO</b>	2,07	3,12	-	-0,01	0,01	0,01
<b>P1-COOH</b>	1,72/1,61 <sup>a)/2,52</sup>	-	-0,03	0,06	0,02	0,02
<b>P2-COOH</b>	2,12	3,25	-0,01	0,00	0,01	0,01
<b>P1-NH<sub>2</sub></b>	1,92 <sup>a)</sup>	2,81 <sup>b)</sup>	-	0,02	-	0,01
<b>P2-NH<sub>2</sub></b>	-	3,18/2,25 <sup>b)</sup>	-	0,00	-	0,00
<b>P1-OH</b>	1,87/ 2,51/1,75 <sup>a)</sup>	-	0,00	0,03	0,03	0,01
<b>P2-OH</b>	2,38	2,61	0,01	0,00	-	0,00
<b>P1-SO<sub>3</sub>H</b>	1,05 <sup>a)/1,92/1,81</sup>	-	-0,13	-	-	0,02
<b>P2-SO<sub>3</sub>H</b>	2,05/2,33	2,84	-0,01	0,00	0,01	0,01
<b>P3-SO<sub>3</sub>H</b>	1,06 <sup>a)/1,80/2,13</sup>	-	-0,12	-	0,04	0,02

<sup>a)</sup> đối với khoảng cách O-H...O<sub>surf</sub> (surf: bề mặt), <sup>b)</sup> đối với khoảng cách H...N, <sup>c)</sup> đối với liên kết O-H của bề mặt

### 3.2. Phân tích về mặt năng lượng của quá trình hấp phụ

Để đánh giá quá trình hấp phụ của phân tử trên bề mặt H-slab, các giá trị năng lượng đặc trưng như năng lượng hấp phụ, năng lượng tương tác của các phức và năng lượng biến dạng của các phân tử, bề mặt được tính toán và tập hợp trong bảng 2.

**Bảng 2.** Năng lượng hấp phụ, năng lượng tương tác của các phức và năng lượng biến dạng của phân tử, bề mặt trong các quá trình hấp phụ (đơn vị kcal.mol<sup>-1</sup>)

Phức	E <sub>A</sub>	E <sub>I</sub>	E <sub>D-surf</sub>	E <sub>D-mol</sub>
<b>P1-CHO</b>	-7,70	-9,33	0,87	0,75
<b>P2-CHO</b>	-5,44	-6,85	0,83	0,59
<b>P1-COOH</b>	-16,23	-23,40	2,86	4,31
<b>P2-COOH</b>	-3,46	-4,61	0,65	0,50
<b>P1-NH<sub>2</sub></b>	-5,35	-6,78	0,82	0,61
<b>P2-NH<sub>2</sub></b>	-4,83	-5,87	0,81	0,24
<b>P1-OH</b>	-11,02	-15,07	1,71	2,34
<b>P2-OH</b>	-2,99	-3,63	0,54	0,10
<b>P1-SO<sub>3</sub>H</b>	-24,79	-99,17	14,56	59,82
<b>P2-SO<sub>3</sub>H</b>	-6,03	-7,60	1,42	0,15
<b>P3-SO<sub>3</sub>H</b>	-19,56	-94,18	16,65	57,97

Kết quả bảng 2 thấy rằng năng lượng hấp phụ của các phức thu được có giá trị trong khoảng -2,99 đến -24,79 kcal.mol<sup>-1</sup>, trong đó các phức dạng **P1** (tương tác ở các nhóm chức) có năng

lượng hấp phụ âm hơn nhiều so với các phức dạng **P2** (tương tác với vòng benzen). Do đó, các phức dạng **P1** bền hơn so với dạng **P2** trong quá trình hấp phụ các phân tử dẫn xuất vòng benzen lên bề mặt H-slab của kaolinite. Thêm vào đó, năng lượng tương tác ở các phức dạng **P1**, **P2** tính được trong khoảng -6,78 đến -99,17 kcal.mol<sup>-1</sup> và -3,63 đến -7,60 kcal.mol<sup>-1</sup>, tương ứng. Kết quả này một lần nữa khẳng định, các phức dạng **P1** bền hơn so với các phức dạng **P2**, hay nói cách khác các phân tử dẫn xuất vòng benzen khi tương tác với bề mặt H-slab của kaolinite ưu tiên cho sự hình thành các phức dạng **P1**.

Đối với các phức **P1-SO<sub>3</sub>H** và **P3-SO<sub>3</sub>H** năng lượng tương tác âm hơn rất nhiều so với phức **P2-SO<sub>3</sub>H** do nguyên tử H trong nhóm-SO<sub>3</sub>H có xu hướng dịch chuyển sang bề mặt kaolinite dẫn đến hình thành liên kết hydro O-H...O trở nên khá bền. Phức **P1-SO<sub>3</sub>H** bền hơn phức **P3-SO<sub>3</sub>H** do có sự đóng góp của nhiều liên kết O-H...O. Sự chuyển dịch nguyên tử H linh động ở liên kết O-H (trong nhóm axit -SO<sub>3</sub>H) trong phân tử hữu cơ sang bề mặt vật liệu trong quá trình hấp phụ để hình thành liên kết hydro O-H...O bền cũng được nhận định trong nghiên cứu trước đây của nhóm chúng tôi đối

với sự hấp phụ axit HCOOH lên bề mặt rutile-TiO<sub>2</sub>.<sup>16</sup> Sự dịch chuyển nguyên tử H từ phân tử sang bề mặt làm cho cấu trúc phân tử và bề mặt biến đổi nhiều so với cấu trúc ban đầu. Điều này được nhận thấy rõ ở năng lượng biến dạng E<sub>D-mol</sub> và E<sub>D-surf</sub> của 2 phức này. Các phức **P1-SO<sub>3</sub>H** và **P3-SO<sub>3</sub>H** có năng lượng biến dạng đối với phân tử (khoảng 60 kcal.mol<sup>-1</sup>) và bề mặt (khoảng 17 kcal.mol<sup>-1</sup>) lớn hơn nhiều so với các phức khác. Ở các phức của các dẫn xuất còn lại, năng lượng biến dạng chỉ khoảng 0,10 - 4,31 kcal.mol<sup>-1</sup>. Do vậy sự biến đổi cấu trúc ở các phân tử và bề mặt khá nhỏ trong quá trình hấp phụ, ngoại trừ ở các phức **P1-SO<sub>3</sub>H** và **P3-SO<sub>3</sub>H**.

Khi xét các phức bền nhất đối với mỗi dẫn xuất chứa các nhóm chức khác nhau thấy rằng, năng lượng hấp phụ và năng lượng tương tác biến đổi theo thứ tự các dẫn xuất thế -SO<sub>3</sub>H < -COOH < -OH < -CHO < -NH<sub>2</sub>. Do đó, độ bền các phức hình thành giữa các phân tử và bề mặt H-slab của kaolinite biến đổi theo thứ tự các dẫn xuất thế -SO<sub>3</sub>H > -COOH > -OH > -CHO > -NH<sub>2</sub>. Các phức bền này do sự đóng góp chính bởi các

liên kết hydro O/N/C-H...O hình thành trong quá trình tương tác giữa các nhóm chức với bề mặt H-slab. Kết quả cho thấy, các quá trình hấp phụ này được đánh giá như là các quá trình hấp phụ yếu và trung bình. Sự hấp phụ mạnh hơn diễn ra ở các dẫn xuất thế -SO<sub>3</sub>H, -COOH và -OH, so với ở các dẫn xuất -CHO, -NH<sub>2</sub>.

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

#### 3.3.1. Năng lượng tách proton (DPE) của các liên kết, ái lực proton (PA) và mật độ điện tích tại các nguyên tử của các phân tử hữu cơ

Để đánh giá mức độ ảnh hưởng độ phân cực liên kết O-H, C-H, N-H và mật độ điện tích tại các nguyên tử trong các phân tử hữu cơ đến sự hình thành, độ bền của các tương tác trong các phức chúng tôi tiến hành tính DPE của các liên kết O-H, C-H, N-H và PA tại các nguyên tử O, N tham gia vào các tương tác cũng như điện tích NBO cho các nguyên tử ở mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p). Các kết quả tính được tập hợp ở bảng 3.

**Bảng 3.** Điện tích (q, đơn vị e), giá trị PA và DPE (đơn vị kcal.mol<sup>-1</sup>) tại các nguyên tử, liên kết ở các nhóm chức trong các phân tử tính tại mức B3LYP/6-31+G(d,p)

Điện tích	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CHO	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COOH	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NH <sub>2</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> SO <sub>3</sub> H
q(O/N)	-0,542	-0,507/-0,732*	-0,873	-0,714*	-0,936/-0,907/-0,929*
q(H)	0,152	0,525	0,414	0,509	0,538
q(C/S)	0,393	0,802	-	-	2,367
<b>PA(O/N)</b>	203,2	195,7	210,4,	178,8	192,1
<b>DPE(C/O/N-H)</b>	404,3 <sup>a)</sup>	356,4 <sup>a)</sup>	383,7 <sup>a)</sup>	362,5 <sup>a)</sup>	341,1 <sup>a)</sup>
	397,4 <sup>b)</sup>	407,2 <sup>b)</sup>	409,5 <sup>b)</sup>	409,5 <sup>b)</sup>	391,0 <sup>b)</sup>
	401,8 <sup>c)</sup>	405,2 <sup>c)</sup>	415,3 <sup>c)</sup>	412,1 <sup>c)</sup>	394,9 <sup>c)</sup>
	400,2 <sup>d)</sup>	402,9 <sup>d)</sup>	416,7 <sup>d)</sup>	413,0 <sup>d)</sup>	391,0 <sup>d)</sup>

\**đối với nguyên tử O ở liên kết OH; <sup>a)</sup> chỉ liên kết C/O/N-H trong các nhóm chức; <sup>b),c),d)</sup> tương ứng với các liên kết C-H tại các vị trí octo-, meta- và para- trong vòng benzen*

Bảng 3 cho thấy các nguyên tử O(N) ở các nhóm chức có mật độ điện tích âm khá lớn (trong khoảng -0,507 đến -0,936 e), do đó chúng dễ dàng tương tác với bề mặt H-slab giàu điện tích dương để hình thành các liên kết

hydro O/N...H<sub>surf</sub> (surf: bề mặt) bền. Ngoài ra, mật độ điện tích dương tại các nguyên tử H trong các nhóm chức khá lớn (trong khoảng 0,152 - 0,538 e), do đó chúng cũng dễ dàng hình thành các liên kết hydro kiểu H...O<sub>surf</sub> trong

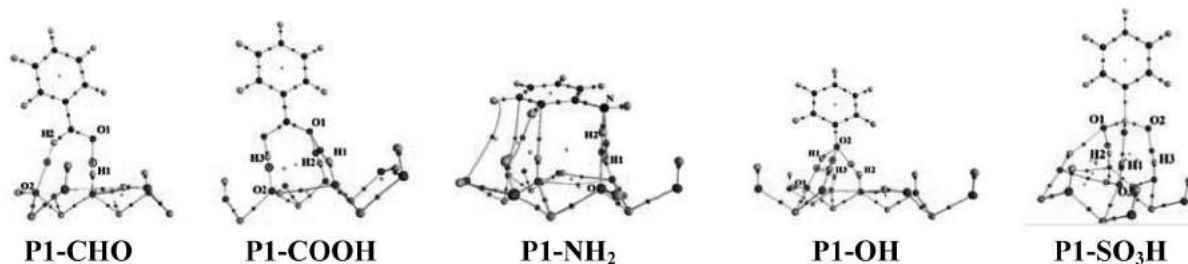
quá trình tạo phức. Phân tử  $C_6H_5SO_3H$  có nhóm  $-SO_3H$  với nhiều nguyên tử oxi có mật độ điện tích âm lớn nên có khả năng hình thành nhiều liên kết hydro  $O\cdots H$  bền với bề mặt H-slab của kaolinite. Kết quả tính cho thấy khả năng hình thành các liên kết hydro  $O\cdots H$  bền giảm theo thứ tự các dẫn xuất  $-SO_3H > -COOH > -OH > -CHO$  do sự giảm điện tích âm ở O và điện tích dương ở H. Điều này còn được giải thích thêm do sự biến đổi ái lực proton tại nguyên tử O cũng như khả năng tách proton trong các liên kết O-H (C-H) trong các nhóm chức. Bảng 3 thấy rằng, giá trị PA tại các nguyên tử O biến đổi trong khoảng từ 178,8 đến 203,2 kcal/mol theo trật tự  $-OH < -SO_3H < -COOH < -CHO$  nên khả năng hình thành các liên kết hydro  $O\cdots H_{surf}$  tăng theo trình tự này. Mặt khác DPE ở các liên kết O/C-H biến đổi lớn trong khoảng từ 341,1 đến 404,3 kcal.mol<sup>-1</sup> theo thứ tự  $-SO_3H < -COOH < -OH < -CHO$  dẫn đến độ bền liên kết hydro O/C-H $\cdots O_{surf}$  giảm theo trật tự  $-SO_3H > -COOH > -OH > -CHO$ . Đối với phân tử  $C_6H_5NH_2$ , mặc dù điện tích âm của N lớn hơn ở các nguyên tử O trong các dẫn xuất khác và ái lực proton (PA) tại N lớn, tuy nhiên khả năng tách proton ở liên kết N-H khó hơn (DPE khoảng 383,7 kcal/mol) so với các liên kết O-H. Kết quả, sự tương tác của nhóm  $-NH_2$  với bề mặt H-slab của kaolinite trở nên kém hơn so với ở các nhóm thế  $-SO_3H$ ,  $-COOH$  và  $-OH$ . Bên cạnh đó, các giá trị DPE của các liên kết C-H vòng benzen trong các dẫn xuất biến đổi nhỏ từ 391,0 đến 416,7 kcal.mol<sup>-1</sup> và đều lớn hơn so với ở các liên kết O-H, N-H ở các nhóm chức. Do đó, khả năng hình thành các

liên kết hydro  $H\cdots C$  ở vòng benzen kém hơn nhiều so với ở các nhóm chức.

### 3.3.2. Phân tích AIM cho các cấu trúc bền nhất

Để chứng minh sự tồn tại và độ bền các tương tác trong các phức cũng như chiều hướng biến đổi độ bền các phức thu được, chúng tôi thực hiện phân tích AIM ở mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p) cho các cấu trúc bền nhất ứng với mỗi dẫn xuất. Hình học topo của các phức được chỉ ra ở hình 3 và kết quả tính toán về mật độ electron ( $\rho(r)$ ), Laplacian của mật độ electron ( $\nabla^2\rho(r)$ ), tổng động năng và thế năng mật độ electron ( $H(r)$ ) tại các điểm tới hạn liên kết (BCP) được tập hợp trong bảng 4.

Sự hiện diện các điểm tới hạn liên kết (BCP) ở hình 3 và các giá trị của mật độ electron, Laplacian ở bảng 4 hầu hết thuộc khoảng giá trị cho sự hình thành các tương tác yếu không cộng hóa trị, minh chứng cho sự hình thành các liên kết hydro O/N/C-H $\cdots O$  trong các phức khảo sát.<sup>17</sup> Đáng chú ý, đối với phức **P1-SO<sub>3</sub>H**, giá trị  $\rho(r)$  tại BCP của  $H\cdots O_{surf}$  lớn hơn nhiều so các  $H\cdots O$  khác. Cùng với đó, các giá trị  $\nabla^2\rho(r)$  và  $H(r)$  tại BCP này đều có giá trị âm lớn (-1,252 au và -0,388 au tương ứng). Do đó liên kết hydro  $H\cdots O_{surf}$  trong phức **P1-SO<sub>3</sub>H** có bản chất cộng hóa trị và khá bền, bền hơn các liên kết hydro  $H\cdots O$  trong các phức khác. Điều này dẫn đến phức **P1-SO<sub>3</sub>H** trở nên bền nhất trong các hệ phức khảo sát. Kết quả này minh chứng rằng nguyên tử H linh động trong nhóm  $-SO_3H$  có xu hướng dịch chuyển đến bề mặt H-slab của kaolinite để hình thành liên kết hydro  $H\cdots O$  bền như nhận định ở các phần trên.



**Hình 3.** Hình học topo của các phức bền nhất đối với sự hấp phụ các phân tử hữu cơ lên bề mặt kaolinite (H-slab)

Khi xét chiều hướng biến đổi mật độ electron tại các BCP của các tương tác giữa các phân tử thấy rằng, các giá trị mật độ electron tại các BCP O/N/C-H...O trong khoảng từ 0,006 đến 0,264 au và giảm theo thứ tự các dẫn xuất  $-\text{SO}_3\text{H} > -\text{COOH} > -\text{OH} > -\text{CHO} > -\text{NH}_2$ . Điều này dẫn đến độ bền các tương tác cũng như độ bền các phức của các dẫn xuất thế benzen với bề

mặt H-slab biến đổi như trên. Bên cạnh đó, giá trị  $H(r)$  tại các BCP H...O âm nhỏ (-0,001 đến -0,005 au) hoặc xấp xỉ 0 (ngoại trừ ở **P1-SO<sub>3</sub>H** cho thấy các liên kết hydro này khá bền và có một phần bản chất cộng hóa trị. Với các BCP tại các tiếp xúc H...O khác và N...H, giá trị  $H(r)$  dương nhỏ (0,001 au), nên các liên kết hydro này không có bản chất cộng hóa trị.

**Bảng 4.** Các đại lượng đặc trưng của hình học topo các phức tính ở mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p)

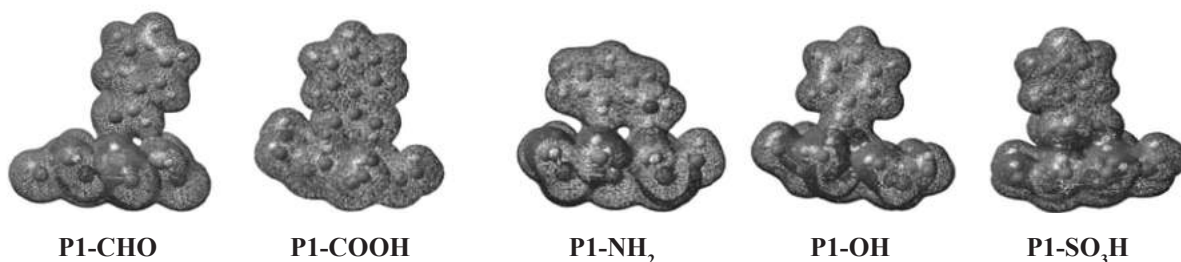
Phức	Tương tác	$\rho(r)$	$\nabla^2\rho(r)$	$H(r)$	EDT
<b>P1-CHO</b>	O1...H1	0,038	0,107	0,000	0,02
	H2...O2	0,008	0,026	0,001	
<b>P1-COOH</b>	H3...O2	0,056	0,144	-0,005	-0,28
	O1...H1	0,041	0,124	0,000	
	O1...H2	0,007	0,028	0,001	
<b>P1-NH<sub>2</sub></b>	N...H1	0,006	0,018	0,001	0,00
	H2...O	0,028	0,080	-0,001	
<b>P1-OH</b>	O2...H2	0,030	0,087	-0,001	0,00
	O2...H3	0,008	0,029	0,001	
	H1...O1	0,040	0,115	-0,001	
<b>P1-SO<sub>3</sub>H</b>	H1...O3	0,264	-1,252	-0,388	-0,76
	O1...H2	0,034	0,097	0,000	
	O2...H3	0,025	0,070	0,000	

**3.3.3. Phân tích NBO cho các cấu trúc bền nhất**

Sự tồn tại liên kết hydro trong các phức và độ bền khác nhau của chúng có thể được hiểu xa hơn qua phân tích giản đồ mật độ electron tổng (EDT) ở các phức, được tính tại mức lý thuyết B3LYP/6-31+G(d,p) và được hiển thị ở hình 4. Các giá trị mật độ electron trao đổi tổng được liệt kê trong bảng 4.

Hình 4 cho thấy có sự xen phủ mật độ electron giữa các vị trí nguyên tử tham gia trực tiếp vào các tương tác, minh chứng thêm cho sự hình thành các liên kết hydro O/N/C-H...O trong các phức khảo sát. Trị số chuyển mật độ electron tổng (EDT) tính được có dấu khác nhau chứng tỏ khuynh hướng khác nhau của quá trình chuyển electron giữa phân tử và bề mặt trong quá trình

hấp phụ. Các phức **P1-COOH**, **P1-SO<sub>3</sub>H** có EDT < 0, chứng tỏ sự chuyển electron từ bề mặt đến phân tử mạnh hơn chiều ngược lại. Đối với các phức **P1-CHO**, **P1-OH**, **P1-NH<sub>2</sub>** EDT có giá trị dương khá nhỏ, cho thấy sự chuyển mật độ electron từ phân tử đến bề mặt hơi mạnh hơn chiều ngược lại từ bề mặt đến phân tử. Đáng chú ý, đối với các phức **P1-COOH**, **P1-SO<sub>3</sub>H** giá trị EDT có trị số âm lớn, cho thấy sự chuyển electron từ bề mặt sang phân tử (orbital phản liên kết ở O-H) khá mạnh. Điều này dẫn đến xu hướng dịch chuyển nguyên tử H linh động ở các nhóm chức -COOH, -SO<sub>3</sub>H đến bề mặt H-slab và liên kết hydro O-H...O hình thành khá bền trong các phức này như phân tích ở các phần trên.



Hình 4. Giản đồ mật độ electron tổng của các phức tại B3LYP/6-31+G(d,p) (isovalue = 0,005 au)

#### 4. KẾT LUẬN

Nghiên cứu sự hấp phụ các phân tử  $C_6H_5CHO$ ,  $C_6H_5COOH$ ,  $C_6H_5NH_2$ ,  $C_6H_5OH$ ,  $C_6H_5SO_3H$  lên trên bề mặt hydro của kaolinite (H-slab) chúng tôi thu được 11 cấu trúc bền ứng với hai dạng sắp xếp đặc trưng: dạng thẳng đứng (**P1**, có sự tương tác chủ yếu giữa bề mặt với nhóm chức) và dạng song song (**P2**, có sự tương tác giữa bề mặt với vòng benzen). Năng lượng hấp phụ của các phân tử hữu cơ trên bề mặt H-slab tính được trong khoảng -2,99 đến -24,79 kcal/mol, trong đó các phức dạng **P1** có năng lượng âm hơn nhiều so với dạng **P2**. Các quá trình hấp phụ này được đánh giá là các quá trình hấp phụ yếu và trung bình. Bên cạnh đó, sự tương tác giữa các phân tử với bề mặt H-slab khá mạnh với năng lượng tương tác trong khoảng -3,63 đến -99,17 kcal/mol. Đáng chú ý, sự tương tác mạnh vượt trội ở các phức của dẫn xuất  $-SO_3H$  với sự hình thành các liên kết hydro  $O-H\cdots O_{surf}$  bền trong quá trình hấp phụ. Độ bền của các phức thu được giữa các dẫn xuất thế vòng benzen với bề mặt hydro của kaolinite được đóng góp chính bởi liên kết hydro kiểu  $O/N-H\cdots O$  và  $H\cdots C/\pi$  (vòng benzen). Kết quả nghiên cứu cho thấy, khả năng hấp phụ các phân tử trên bề mặt H-slab giảm theo thứ tự các dẫn xuất thế  $-SO_3H > -COOH > -OH > -CHO > -NH_2$ . Ngoài ra, sự tương tác giữa các phân tử này với bề mặt H-slab ưu tiên hình thành các phức **P1** hơn dạng **P2**.

**Lời cảm ơn.** Các tác giả cảm ơn sự hỗ trợ kinh phí từ dự án TEAM (do VLIR tài trợ), mã số ZEIN2016PR431 triển khai tại Trường Đại học Quy Nhơn (2016 - 2020).

#### TÀI LIỆU KHAM KHẢO

1. M. Asim, T. A. Khan, I. Ali. Low cost adsorbents for the removal of organic pollutantants from wastewater, *J. Env*, **2012**, *113*, 170–183.
2. S. Ismadji, F. E. Soetaredjo, A. Ayucitra. *Clay Materials for Environmental Remediation*, Springer Briefs in Green Chemistry for Sustainability, 2015.
3. J. P. Prates Ramalho, A. V. Dordio, A. J. Palace Carvalho. Adsorption of two phenoxyacid compounds on a clay surface: A theoretical study, *Adsorption*, **2013**, *19*, 937–944.
4. R. G. Harris, J. D. Wells, B. B. Johnson. Selective adsorption of dyes and other organic molecules to kaolinite and oxide surfaces, *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp*, **2001**, *180*, 131–140.
5. J. Chen, F. Fei Min, L. Liu, C. Liu, F. Lu. Experimental investigation and DFT calculation of different amine/ammonium salts adsorption on kaolinite, *Appl. Surf. Sci*, **2017**, *419*, 241–251.
6. S. Zhang, J. J. Sheng, Z. Qiu. Water adsorption on kaolinite and illite after polyamine adsorption, *J. Pet. Sci. Eng*, **2016**, *142*, 13–20.
7. E. R. Johnson and Otero-De-La-Roza, Alberto. Adsorption of organic molecules on kaolinite from the exchange-hole dipole moment dispersion model, *Journal of Chemical Theory and Computation*, **2012**, *8*, 5124–5131.
8. J. Hafner. Ab-Initio simulations of materials using VASP: Density-Functional Theory and beyond, *J. Comput. Chem*, **2008**, *29*, 2044–2078.
9. A. J. P. Carvalho, A. V. Dordio, J. P. P. Ramalho. A DFT study on the adsorption of benzodiazepines to vermiculite surfaces, *J. Mol. Model*, **2014**, *20*, 1–8.

10. P. Perdew, K. Burke. Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *77*, 3865–3868.
11. N. N. Tri, A. J. P. Carvalho, A. V. Dordio, M. T. Nguyen, N. T. Trung. Insight into the adsorption of chloramphenicol on a vermiculite surface, *Chem. Phys. Let.*, **2018**, *699*, 107–114.
12. M. J. Frisch, G. W. Trucks et al. Gaussian 09 (Revision B.01), *Wallingford. CT: Gaussian*, 2010.
13. V. Ponmalai, K. Nirmla. Study of Proper and Improper Hydrogen Bonding Using Bader's Atom in Molecules (AIM) Theory and NBO Analysis, *J. Mol. Struct.*, **2004**, *694*, 33–38.
14. C. Landis and F. Weinhold. Valency and bonding: A natural bond orbital donor acceptor perspective, *Cambridge University Press Cambridge, U.K.*, 2005.
15. F. Weinhold et al. NBO 5.G, Theoretical Chemistry Institute, *University of Wisconsin, Madison*, 2004.
16. Nguyen Ngoc Tri, Ho Quoc Dai, Nguyen Tien Trung. Insight into the adsorption of organic molecules on rutile TiO<sub>2</sub> (110) surface: A theoretical study, *Vietnam J. Chem.*, **2018**, *56*(6), 752-756.
17. R. F. W. Bader. Atoms in molecules: A quantum theory, *Oxford: Oxford University Press*, 1995.

# Một cách nhìn mới về phản liên kết hydro C-H $\cdots$ N trong các phức của chloroform với hydrogen cyanite và dẫn xuất fluoride

Phan Đặng Hồng Nhung<sup>1</sup>, Huỳnh Thanh Nam<sup>1,2</sup>, Nguyễn Tiến Trung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Phòng Hóa tính toán và mô phỏng, khoa Khoa học tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

<sup>2</sup>Khoa Khoa học vật liệu và kỹ thuật, Đại học Quốc gia Chungnam, Daejeon, Hàn Quốc

Ngày nhận bài: 21/08/2019; Ngày nhận đăng: 22/09/2019

## TÓM TẮT

Các tương tác không cộng hóa trị của liên kết hydro trong các phức của chloroform với hydrogen cyanite và dẫn xuất fluoride đã được nghiên cứu kỹ bằng cách quét bề mặt năng lượng thế năng. Các phức của cả hai hệ thống được nghiên cứu cho kết quả đều thuộc liên kết hydro chuyển dời xanh khi đạt cấu trúc hình học bền. Tất cả các hệ thống đều trải qua sự rút ngắn liên kết C-H khi ở khoảng cách xa. Ở khoảng cách N $\cdots$ H cụ thể, liên kết C-H của phân tử CHCl<sub>3</sub> trong các phức chất với FCN có xu hướng chuyển dời xanh nhiều hơn so với liên kết hydro trong phức CHCl<sub>3</sub> $\cdots$ HCN. Các phân tích SAPT2+ cho thấy tương tác tĩnh điện là thành phần chính giúp ổn định liên kết hydro C-H $\cdots$ N, nhưng không xác định được sự chuyển dời xanh của tần số kéo dài C-H sau khi tạo phức. Đáng chú ý, kết quả thu được cho thấy lực phân tán đóng vai trò quan trọng trong việc kiểm soát sự chuyển của liên kết hydro.

**Từ khóa:** Liên kết hydro, chuyển dời xanh, phân tán, tĩnh điện, SAPT2+.

---

\*Tác giả liên hệ chính.

Email: nguyentientrung@qnu.edu.vn

# An insight into improper hydrogen bond of C-H $\cdots$ N type in complexes of chloroform with hydrogen cyanide and its fluoro derivative

Phan Dang Hong Nhung<sup>1</sup>, Huynh Thanh Nam<sup>1,2</sup>, Nguyen Tien Trung<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of Computational Chemistry and Modelling, Faculty of Natural Science, Quy Nhon University, Vietnam

<sup>2</sup>Department of Materials Science and Engineering, Chungnam National University, Daejeon, Korea

Received: 21/08/2019; Accepted: 22/09/2019

## ABSTRACT

Non-covalent interactions in term of hydrogen bond in complexes of chloroform with hydrogen cyanide and its fluoride derivative were investigated thoroughly by scanning the potential energy surface. The complexes of both examined systems show blue-shift at their most stable geometries. All of systems experience the contraction in C-H bond length at long distances. At specific  $R_{N-H}$  distance, the C-H bond of  $CHCl_3$  molecule in complexes with FCN tends to be more blue-shifted than one in connection with HCN counterpart. The SAPT2+ analyses reveal that electrostatic interaction is the major component which stabilizes the C-H $\cdots$ N hydrogen bond, but does not determine the blue shift of C-H stretching frequency following complexation. Remarkably, the obtained results show that the dispersion force plays a crucial role in controlling the shifting of the hydrogen bond.

**Keywords:** Hydrogen bond, blue-shift, dispersion, electrostatic, SAPT2+.

## 1. INTRODUCTION

Hydrogen bond (H-bond) is inevitably a crucial non-covalent interaction acquiring massive attention during the past decades. In standard textbooks,<sup>1-3</sup> the bond is usually represented in the form of A-H $\cdots$ B. A is an atom or a group whose ability is to draw electron density from the hydrogen atom, and A-H plays as a proton donor, while B is a fragment with excessive electron cloud served as a proton acceptor. Initially, H-bond was characterized by an A-H lengthening, concomitant red-shift in its frequency and an enhancement in IR intensity. There are two well-recognized fashions which can thoroughly explain the underlying

mechanism of such bond. The first explanation is based on the effect of the electrostatic component in the presence of B,<sup>4,5</sup> while the alternative is developed on the contribution of charge transfer effect from B to A-H bond.<sup>6-11</sup>

However, the controversial debates have been triggered since the discovery of another type of interaction which bears totally opposite features than the above-mentioned bond. This interaction, which was later named improper or blue-shifting hydrogen bond, is associated with a contraction in A-H bond length, an increase in its stretching vibrational frequency and a decrease in spectroscopy intensity.<sup>12-17</sup> Up to now, although there have been a number of proposed arguments

\*Corresponding author:

Email: nguyentien trung@qnu.edu.vn



in order to explain the origin of this H-bond, no interpretation achieves consensus among scientists universally. Some authors proposed that the blue-shifting effect was derived from the reorganization of the host molecule. Such restructuring can be consequences of the charge transfer contribution,<sup>13</sup> or the rehybridization.<sup>18</sup> Meanwhile, others managed to justify the nature of H-bond as a balance of opposing interactions.<sup>19</sup> <sup>20</sup> For a long time, our group has pursued another way of explanation for this bond of interest. Among hydrogen bonded systems, we have paid more attention to the interactions of C-H donors with various proton acceptors. This is due to the fact that C-H type hydrogen bond is of great importance in biological systems,<sup>21-23</sup> gaining understanding about them, thus, can pave the way for having more insight into our bodies. Moreover, this type of H-bond is categorized into the pro-improper donor, according to Joseph and Jemmis,<sup>20</sup> whose shifts in C-H bond strongly depend on the nature of proton acceptors. In our article published in 2017,<sup>24</sup> we found that the stabilities of the complexes are influenced by the gas phase basicity of the donor,<sup>24</sup> and the polarization of the C-H bond. Specifically, the majority of the interactions between halofrom and acceptor proton Y are CHF<sub>3</sub> for blue-shifted hydrogen bond while CHBr<sub>3</sub> gives mainly red-shifted hydrogen bond. As for CHCl<sub>3</sub> gives both of H-bond types, therefore the polarity of the C-H bond in the CHX<sub>3</sub> monomers increases in substituted order of X in going to from F to Cl and then to Br. Thus, we carried out fixing the distance N...H and optimized the geometric parameters of the complexes. Besides, for a specific donor, the basicity is directly associated with the change in C-H bond length. Therefore, we held a belief that as the dependence of C-H bond length on the Lewis base's origin was clarified, they must be interactions from the acceptor, not internal changes in donor's structure, controlling the shift of the C-H covalent bond. It prompted a need to investigate the role of single interactions that contribute to the stability of a dimer upon complexation.

In the above study and another previous work,<sup>25</sup> we conducted SAPT calculations in order to decompose the total interaction energy into four physically meaningful forces, namely electrostatic, dispersion, induction, and exchange. This way of analysis has been proved to provide reliable energy decomposition results.<sup>26</sup> Furthermore, we reported some significant comments on the role of energy components to H-bond, especially the importance of dispersion in blue-shifting systems.<sup>25</sup> Hence, in this work, we utilized SAPT as a productive tool to examine the change in contributions of these interactions during the complex formation comprehensively and expected to shed light on the nature of blue-shifting hydrogen bond.

## 2. COMPUTATIONAL DETAILS

All the *ab initio* calculations were performed by the Gaussian 09 package.<sup>27</sup> For the purpose of the present work, we constrained the distance between a proton donor and an acceptor  $R_{N-H}$  ( $R_{N-H} = 1.7 - 3.5$  Å) and the  $C_{3v}$  symmetry. The remaining parts of complexes were optimized at MP2/6-311++G(3df,2pd) level of theory. Stretching frequencies are calculated at the same level in order to investigate the shift of C-H bond's stretching frequency. Single point energy (SPE) and basis set superposition error (BSSE) via the counterpoised correction of Boys and Bernadi<sup>28</sup> for all the monomers and complexes are obtained at the CCSD(T)/6-311++G(3df,2pd)//MP2/6-311++G(3df,2pd) level. Interaction energies are estimated as the difference in energy between complexes and their fragments, corrected for both of ZPE and BSSE ( $\Delta E^*$ ). Topological parameters of complexes at the bond critical points (BCPs) were computed using the AIM2000 software.<sup>29</sup>

The SAPT2+ calculations for the complexes were applied with the aug-cc-pVDZ basis set using Psi4 software.<sup>30</sup> The total intermolecular interaction energy was separated into five fundamental components which are so-called electrostatic ( $E_{\text{elst}}$ ), dispersion ( $E_{\text{disp}}$ ),

induction ( $E_{\text{ind}}$ ), exchange ( $E_{\text{exch}}$ ) and  $\delta E^{\text{HF}}$ , where  $\delta E^{\text{HF}}$  contributing to the interaction energy includes all third and higher-order induction and exchange-induction terms. The total intermolecular interaction energy is calculated as shown in equation:

$$E_{\text{SAPT2+}} = E_{\text{elst}} + E_{\text{ind}} + E_{\text{exch}} + E_{\text{disp}} + \delta E^{\text{HF}} \quad (1)$$

### III. RESULTS AND DISCUSSION

#### 3.1. Changes of the C-H bond length and its stretching frequency

The changes in C-H bond length and the corresponding stretching frequency in the two

complex systems are presented in Table 1. The  $\Delta r$  value is negative at large separation and decreases until the minimum is reached, then increases to positive ones, indicating that the C-H shortening occurs over the long distances and the elongation occurs at short range. The change of its stretching frequency further supports this observation as  $\Delta \nu$  value is positive at large distances and gradually increases until reaching its maximum value and then decreases to negative values. The shift from blue- to red-shifting when the proton acceptor comes closer is similar to some previous studies.<sup>20, 31, 32</sup>

**Table 1.** Changes in bond length ( $\Delta r(\text{C-H})$ , in Å), stretching vibrational frequency ( $\Delta \nu(\text{C-H})$  in  $\text{cm}^{-1}$ ) of the C-H bond and the interaction energy corrected by both ZPE and BSSE ( $\Delta E^*$  ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ))

$R_{\text{N-H}}$ (Å)	$\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCH}$			$\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCF}$		
	$\Delta r(\text{C-H})$	$\Delta \nu(\text{C-H})$	$\Delta E^*$	$\Delta r(\text{C-H})$	$\Delta \nu(\text{C-H})$	$\Delta E^*$
1.7	0.01599	-138.53	14.07	0.01412	-112.05	15.02
1.9	0.00497	-28.08	-3.15	0.00402	-14.30	-2.28
2.1	0.00063	12.24	-10.04	0.00014	19.40	-9.11
2.3	-0.00083	21.43	-12.00	-0.00107	25.07	-11.09
2.5	-0.00115	19.3	-11.68	-0.00126	21.06	-10.82
2.7	-0.00110	15.18	-10.57	-0.00116	15.97	-9.74
2.9	-0.00097	12.04	-9.04	-0.00100	12.97	-8.30
3.1	-0.00085	10.09	-7.61	-0.00087	10.26	-6.96
3.3	-0.00075	8.77	-6.38	-0.00076	8.92	-5.80
3.5	-0.00064	7.62	-5.36	-0.00067	7.80	-4.85

Table 1 shows that, at long distances, the C-H bond in  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCF}$  decreases much more than that of the  $\text{NCH}$ , and also fewer increases at short range. Specifically, the contraction of the C-H bond in  $\text{CHCl}_3$  increases from 0.00067 Å to 0.00126 Å when interacting with FCN. These values are about 0.00004-0.00023 Å more than those of the remaining system, where the C-H bond is shortened *ca.* 0.00064-0.00115 Å. In both systems, the C-H bond lengths reach minima at  $R_{\text{N-H}} = 2.5$  Å. The complexes, then, exhibit increases in C-H bond lengths when the acceptor comes closer. The  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCH}$  system shows an increase at *ca.* 0.00024-0.00187 Å more than the  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCF}$  system. Overall, the blue shift is more preferred in the FCN system as compared to the HCN one. The level of contraction and elongation of C-H

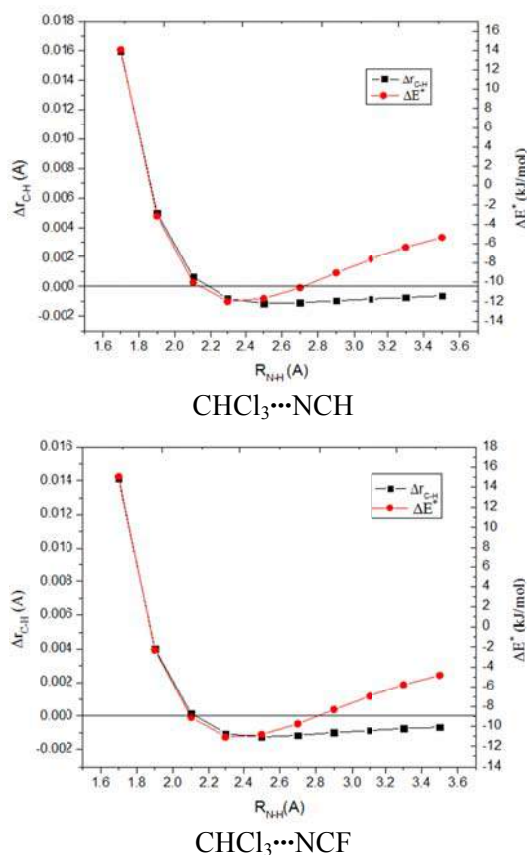
length bond is different, when the complexes are formed by the electrostatic energy and the ability to electron density transfer from  $n(\text{N})$  lone pair to the  $\sigma^*(\text{C-H})$  orbital. Both of factors depend on the increase of the gas phase basicity at the N site of these proton acceptors. Indeed, we calculated the proton affinities at N sites in two acceptors at  $\text{CCSD(T)/6-311++G(3df,2pd)}/\text{MP2/6-311++G(3df,2pd)}$  and the obtained results show that the PA values at N sites in FCN ( $679 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) is smaller than that in HCN ( $700 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ).

#### 3.2. Interaction energy, and its relation with $\text{N} \cdots \text{H}$ intermolecular distance

The interaction energies taken into account both ZPE and BSSE ( $\Delta E^*$ ) calculated at the  $\text{CCSD(T)/6-311++G(3df, 2pd)}/\text{MP2/6-311++G(3df, 2pd)}$  level are also gathered in Table 1. In

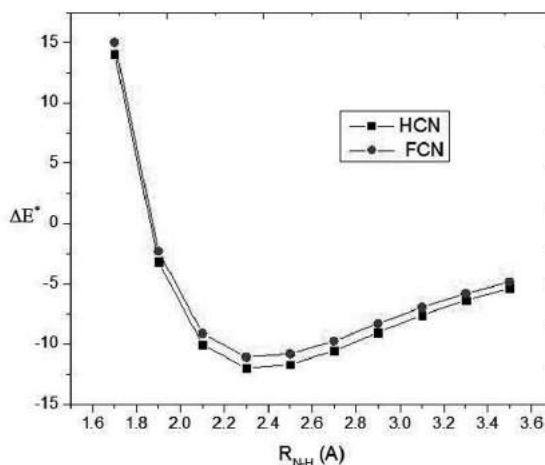
general, the interaction energies lie in the range from -5.36 to -12 kJ.mol<sup>-1</sup> and from -4.85 to -11.09 kJ.mol<sup>-1</sup> corresponding to the interactions of HCN and FCN with CHCl<sub>3</sub>. At the N...H distance is 2.3 Å which the interaction energies are the most negative for the two complexes.

In order to clearly see the relationship between the changes in the C-H bond length and the interaction energy, we plot correlations as shown in Figure 1. The most stable complexes experience blue-shifting with the intermolecular distance between the proton donor and proton acceptor to be in the range of 2.1 – 2.3 Å. Flexible optimization results at MP2/6-311++G(3df,2pd) level confirm this observation. Specifically, at the equilibrium geometries, the distance of N...H contacts is 2.21 Å in CHCl<sub>3</sub>...NCH and CHCl<sub>3</sub>...NCF dimers. This result is in accordance with a recent study investigating the interaction of two molecules in the Ar matrix.<sup>33</sup>



**Figure 1.** Relationship between the interaction energies and Δr(C-H) in the complexes: CHCl<sub>3</sub>...HCN and CHCl<sub>3</sub>...FCN

Additional examination on the effect of the interaction energy on the shift from blue- to red- shifting. We make a comparison based on the value of interaction energies among the checked systems as presented in Figure 2. Figure 2 indicates that the interaction energies are negative when the N...H distances are in the range of 1.9 ÷ 3.5 Å and they get the positive values with R<sub>N-H</sub> smaller than 1.9 Å. Namely, the interaction energies decrease until reaching its minimum value at long distance and then gradually increase at short range when the N...H distance continues decreasing. On the other hand, at the same distance, the durability of the CHCl<sub>3</sub>...FCN complexes is smaller than the CHCl<sub>3</sub>...HCN complexes, which is consistent with previous reports.<sup>24, 34-36</sup> The difference in the stability of the two systems can be due to the higher gas-phase basicity of HCN, whose effect was proposed in our previous study.<sup>24</sup>



**Figure 2.** Comparison of the interaction energy between two systems

### 3.3. AIM analysis

In an attempt to further understand the properties of C-H...N hydrogen bond in the complexes, we carried out QTAIM analysis for the complexes at MP2/6-311++G(3df,2pd). Results of topological geometries as given in Table 2 show that the bond critical point (BCP) appears at a very long distance. In general, when XCN comes closer to CHCl<sub>3</sub>, the electron density at the BCP of N...H contact in each system rises

linearly in the range of 0.0010-0.0519 au. There is virtually no significant difference in the electron density at the BCP of the intermolecular contact in the two systems with the same N...H

distance. Nevertheless, for the alike N...H distance the electron density at BCP of N...H contact is slightly larger for  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCH}$  than  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCF}$ .

**Table 2.** The topological parameters at BCPs of the N...H contacts at MP2/6-311++G(3df,2pd) and the individual hydrogen bond energy ( $E_{\text{HB}}$ )

$d_{\text{HB}}$ (Å)	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7	2.9	3.1	3.3	3.5	
$\text{CHCl}_3 \cdots \text{HCN}$	$\rho(r)$ (au)	0.0519	0.0326	0.0207	0.0134	0.0087	0.0057	0.0038	0.0025	0.0016	0.0010
	$\nabla^2(r)$ (au)	0.122	0.099	0.071	0.047	0.030	0.019	0.013	0.009	0.006	0.004
	H(r)	-0.0115	-0.0016	0.0014	0.0016	0.0012	0.0009	0.0007	0.0005	0.0004	0.0003
	$E_{\text{HB}}$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	-70.8	-36.9	-19.6	-11.0	-6.5	-3.9	-2.5	-1.5	-0.9	-0.6
$\text{CHCl}_3 \cdots \text{FCN}$	$\rho(r)$ (au)	0.0510	0.0319	0.0202	0.0131	0.0085	0.0056	0.0036	0.0024	0.0016	0.0010
	$\nabla^2(r)$ (au)	0.123	0.099	0.070	0.047	0.029	0.019	0.012	0.008	0.006	0.004
	H(r)	-0.0109	-0.0013	0.0015	0.0018	0.0013	0.0009	0.0007	0.0005	0.0004	0.0003
	$E_{\text{HB}}$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	-69.1	-35.9	-19.1	-10.7	-6.3	-3.8	-2.4	-1.5	-0.9	-0.5

The Laplacians ( $\nabla^2(r)$ ) and H(r) at BCPs fall within the criteria of the hydrogen bond formation. As a result, the C-H...N intermolecular interactions in the complexes are considered as hydrogen bonds. To be more specific,  $\nabla^2(r)$  of all systems is greater than 0. When the intermolecular distance of the two molecules decreases, the  $\nabla^2(r)$  increases from 0.004 to 0.122 au in  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCH}$  and from 0.004 to 0.123 au in  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{FCN}$ . H(r) at BCP of N...H contact in two systems gives a value larger than 0 at a distance larger than 2.0 Å, while for  $R_{\text{N-H}} = 1.7$  and  $R_{\text{N-H}} = 1.9$  Å, H(r) values are negative. Hence, it can be concluded that the interaction formed between proton donor and acceptor at distances of larger than 1.9 Å are weak hydrogen bonds and the others are moderate ones that take a part of covalent nature.

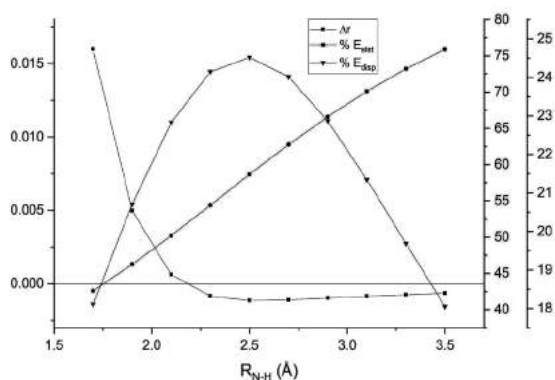
### 3.4. Role of energy component

To elucidate the role of each energy component in the red- or blue-shifting of hydrogen bond in the complexes, SAPT2+ analyzes at the aug-cc-pVDZ basis set were performed for the optimized

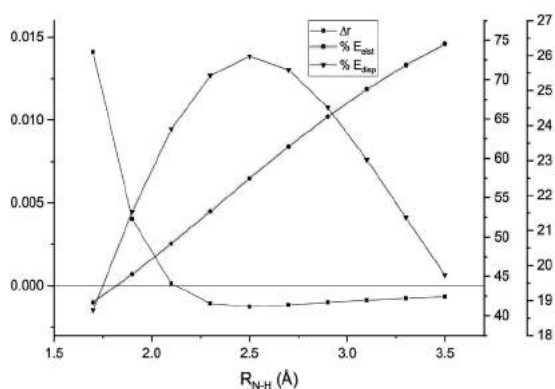
structures at the MP2/6-311++G(3df,2pd) level. The value of the energy components as well as the contribution percentage to the stability of the complexes at each specified distance are shown in Table S1-S2 in Supporting Information. In all of the energy components, there are three main energy components, including electrostatic, dispersion and induction, contribute to stability of complexes, whereas exchange interaction causes a decrease in complex durability.

Two examined systems share similar patterns in the contributions of interaction forces. The electrostatic energy component plays a dominant role in the stabilization of these complexes, especially at large distances. Thus, for the  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{NCH}$  system, as  $R_{\text{N-H}}$  decreases, the electrostatic energy decreases from -4.90 to -62.6 kJ.mol<sup>-1</sup>, which accounts for 47-76% of the total stabilizing energy. Meanwhile, this type of forces is responsible for about 46-75% in the intermolecular interactions of  $\text{CHCl}_3$  with NCF. For further analysis, we plot the correlations of the contribution percentage of

energy components and the changes in C-H bond length with respect to the intermolecular distance. Particularly, those of electrostatic and dispersion component are presented in Figure 3, and that of induction term is illustrated in Figure S1 of Supporting Information.



a



b

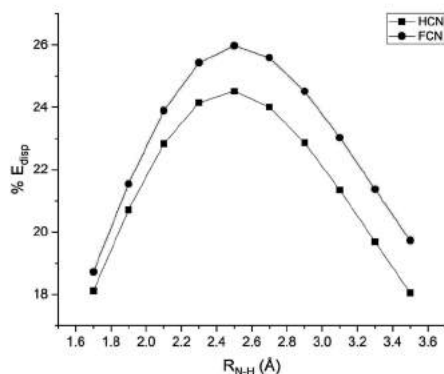
**Figure 3.** Relationship between  $\%E_{\text{elst}}$ ,  $\%E_{\text{disp}}$  and  $\Delta r$  in: a)  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{HCN}$  and b)  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{FCN}$

As shown in Figure 3, while the  $\Delta r$  significantly fluctuates during the formation of complexes, the contribution percentage of the electrostatic component in stabilizing energy decreases monotonously. This indicates that such correlation gives no clue to determine when the interaction turns from blue- to red-shifting hydrogen bond. In other words, even though playing a pivotal role in stabilizing the complexes, electrostatic is not the key factor that identify the shift of hydrogen bond.

Similar circumstances were seen in Figure S1. The induction energy increases linearly in both of its values and its percentage contribution to the stabilizing energy. In studied complexes, the induction energy contributes from 5-7% at  $R_{\text{N-H}} = 3.5 \text{ \AA}$  to 32-33% at  $R_{\text{N-H}} = 1.7 \text{ \AA}$ . Although this force is also proposed to be partly responsible for the red-shifting behaviors to some extent,<sup>24</sup> it, here, shows no significant relationship with changes in the shift of C-H stretching vibrational frequencies. Therefore, we can assume that the role of this interaction in controlling the change of the C-H bond is minor and can be ignorable.

Remarkably, we can see a direct connection when considering the relationship between dispersion energy and the change in the C-H bond length. It is obvious from Figure 3 that when the contribution percentage of dispersion interaction increases, the shortening of the C-H bond length increases as well and vice versa. The former trend occurs when the donor-acceptor range decreases from 3.5 to 2.5  $\text{\AA}$  in the complexes of HCN and FCN, while the latter happens in the remaining regions, where the two fragments come closer. Also, there are coincident extreme points obtained in dispersion contribution line and the C-H bond length variation line in all systems, indicating that the blue-shifting effect reaches its maximum when the participation of dispersion in the stabilizing energy is highest. Thus, it is reasonable to conclude the vital importance of the dispersion in the blue-shifting hydrogen bond.

Further examination on the effect of the dispersion term on the shift of hydrogen bonds is considered. We make a comparison based on the contribution of such interaction among the examined systems, which is demonstrated in Figure 4.



**Figure 4.** Comparison of the %  $E_{disp}$  between two systems

In the  $\text{CHCl}_3 \cdots \text{HCN}$  complexes, the highest percentage of dispersion component is about 24%. Meanwhile, the largest participation of dispersion term reaches at around 27% in the complexes of FCN. The contribution of dispersion energy, thus, increases in the order of  $\text{HCN} < \text{FCN}$  proton acceptor. Remarkably, this order is of great consistency with the pattern of the increase of blue-shifting effect, which has been well described in Section 3.1. Again, it is evident that the greater the dispersion interaction is, the higher the blue-shifting of the hydrogen bond is.

#### 4. CONCLUDING REMARKS

The stable complexes of chloroform with cyanide derivatives  $\text{XCN}$  ( $X = \text{H}, \text{F}$ ) were thoroughly examined at the  $\text{CCSD(T)/6-311++G(3df,2pd)//MP2/6-311++G(3df,2pd)}$  level of theory. The stability of the complex of chloroform with hydrogen cyanite is larger than its fluoro derivative at the same donor-acceptor distance. The obtained results show that the change from blue- to red-shift of C-H stretching frequency in the  $\text{C-H} \cdots \text{N}$  hydrogen bond increases in order of  $\text{FCN} < \text{HCN}$  derivative, which results from the increase in the gas phase basicity at N site. The SAPT2+ analysis indicates that the electrostatic term of *ca.* 47-76% predominates over both the induction and dispersion terms in stabilization energy of complexes. The electrostatic and induction terms do not drive the change of C-H bond length or the shift from blue- to red-shifting

hydrogen bond. However, it is noteworthy that dispersion term plays an important role in change from blue- to red- shifting hydrogen bond for the complexes of  $\text{CHCl}_3$  with HCN and FCN. Our work will prompt further exploration of the role of dispersion energy in the red- and blue-shifting hydrogen bond for a better understand of the types of bond.

#### REFERENCES

1. G. Gilli and P. Gilli. *The nature of the hydrogen bond: outline of a comprehensive hydrogen bond theory*, Oxford University Press, 2009.
2. G. A. Jeffrey. *An introduction to hydrogen bonding*, Oxford University Press, New York, 1997.
3. S. Scheiner. *Hydrogen bonding: a theoretical perspective*, Oxford University Press, 1997.
4. L. Pauling. *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell university press Ithaca, New York, 1960.
5. K. Morokuma. Why do molecules interact? The origin of electron donor-acceptor complexes, hydrogen bonding and proton affinity, *Accounts of Chemical Research*, **1977**, *10*, 294-300.
6. P. Kollman, J. McKelvey, A. Johansson and S. Rothenberg. Theoretical studies of hydrogen-bonded dimers. Complexes involving HF,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{PH}_3$ , HCN, HNC, HCP,  $\text{CH}_2\text{NH}$ ,  $\text{H}_2\text{CS}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CF}_3$ , H,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ , F- and  $\text{H}_3\text{O}^+$ , *Journal of the American Chemical Society*, **1975**, *97*, 955-965.
7. M. S. Gordon and J. H. Jensen. Understanding the Hydrogen Bond Using Quantum Chemistry, *Accounts of chemical research*, **1996**, *29*, 536-543.
8. T. K. Ghanty, V. N. Staroverov, P. R. Koren and E. R. Davidson. Is the Hydrogen Bond in Water Dimer and Ice Covalent?, *Journal of the American Chemical Society*, **2000**, *122*, 1210-1214.
9. C. F. Guerra, F. M. Bickelhaupt and E. J. Baerends. Hydrogen Bonding in Mimics of Watson-Crick Base Pairs Involving C-H Proton Donor and F Proton Acceptor Groups:

- A Theoretical Study, *ChemPhysChem*, **2004**, *5*, 481-487.
10. S. J. Grabowski. What Is the Covalency of Hydrogen Bonding?, *Chemical Reviews*, **2011**, *111*, 2597-2625.
  11. C. L. Perrin. Are Short, Low-Barrier Hydrogen Bonds Unusually Strong?, *Accounts of chemical research*, **2010**, *43*, 1550-1557.
  12. P. Hobza, V. Špirko, H. L. Selzle and E. W. Schlag. Anti-Hydrogen Bond in the Benzene Dimer and Other Carbon Proton Donor Complexes, *The Journal of Physical Chemistry A*, **1998**, *102*, 2501-2504.
  13. P. Hobza and Z. Havlas. Blue-Shifting Hydrogen Bonds, *Chemical reviews*, **2000**, *100*, 4253-4264.
  14. E. Diana and P. L. Stanghellini. Proper and Improper Hydrogen Bonds in Metalloorganic Crystal Architecture: Experimental Evidence in [CoCp<sub>2</sub>]<sup>+</sup> and [FeCp<sub>2</sub>]<sup>+</sup> Salts, *Journal of the American Chemical Society*, **2004**, *126*, 7418-7419.
  15. S. J. Grabowski. *Hydrogen bonding: new insights*, Springer, 2006.
  16. P. Hobza, V. r. Špirko, Z. Havlas, K. Buchhold, B. Reimann, H.-D. Barth and B. Brutschy. Anti-hydrogen bond between chloroform and fluorobenzene, *Chemical physics letters*, **1999**, *299*, 180-186.
  17. B. J. van der Veken, W. A. Herrebout, R. Szostak, D. N. Shchepkin, Z. Havlas and P. Hobza. The Nature of Improper, Blue-Shifting Hydrogen Bonding Verified Experimentally, *Journal of the American Chemical Society*, **2001**, *123*, 12290-12293.
  18. I. V. Alabugin, M. Manoharan, S. Peabody and F. Weinhold. Electronic Basis of Improper Hydrogen Bonding: A Subtle Balance of Hyperconjugation and Rehybridization, *Journal of the American Chemical Society*, **2003**, *125*, 5973-5987.
  19. X. Li, L. Liu and H. B. Schlegel. On the Physical Origin of Blue-Shifted Hydrogen Bonds, *Journal of the American Chemical Society*, **2002**, *124*, 9639-9647.
  20. J. Joseph and E. D. Jemmis. Red-, Blue-, or No-Shift in Hydrogen Bonds: A Unified Explanation, *Journal of the American Chemical Society*, **2007**, *129*, 4620-4632.
  21. O. h. O. Brovarets', Y. P. Yurenko and D. M. Hovorun. Intermolecular CH...O/N H-bonds in the biologically important pairs of natural nucleobases: a thorough quantum-chemical study, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, **2014**, *32*, 993-1022.
  22. O. h. O. Brovarets', Y. P. Yurenko and D. M. Hovorun. The significant role of the intermolecular CH...O/N hydrogen bonds in governing the biologically important pairs of the DNA and RNA modified bases: a comprehensive theoretical investigation, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, **2015**, *33*, 1624-1652.
  23. S. Scheiner, T. Kar and Y. Gu. Strength of the CaH...O Hydrogen Bond of Amino Acid Residues, *Journal of Biological Chemistry*, **2001**, *276*, 9832-9837.
  24. N. Thi Hong Man, P. Le Nhan, V. Vo, D. Tuan Quang and N. Tien Trung. An insight into C-H...N hydrogen bond and stability of the complexes formed by trihalomethanes with ammonia and its monohalogenated derivatives, *International Journal of Quantum Chemistry*, **2017**, *117*, 25338.
  25. P. N. Khanh, V. T. Ngan, N. T. H. Man, N. T. A. Nhung, A. K. Chandra and N. T. Trung. An insight into Csp-H... $\pi$  hydrogen bonds and stability of complexes formed by acetylene and its substituted derivatives with benzene and borazine, *RSC Advances*, **2016**, *6*, 106662-106670.
  26. A. J. Stone. Natural Bond Orbitals and the Nature of the Hydrogen Bond, *The Journal of Physical Chemistry A*, **2017**, *121*, 1531-1534.
  27. R. Gaussian09. Inc., Wallingford CT, 2009.
  28. S. F. Boys and F. d. Bernardi. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors, *Molecular Physics*, **1970**, *19*, 553-566.

29. F. Biegler-König, J. Schonbohm, R. Derdau, D. Bayles, and R.F.W. Bader, *AIM 2000*, Version 1, (Bielefeld Germany), 2000.
30. J. M. Turney, A. C. Simmonett, R. M. Parrish, E. G. Hohenstein, F. A. Evangelista, J. T. Fermann, B. J. Mintz, L. A. Burns, J. J. Wilke and M. L. Abrams. Psi4: an open-source ab initio electronic structure program, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, **2012**, 2, 556-565.
31. J. Joy, E. D. Jemmis and K. Vidya. Negative hyperconjugation and red-, blue- or zero-shift in X-Z...Y complexes, *Faraday discussions*, **2015**, 177, 33-50.
32. C. Wang, D. Danovich, S. Shaik and Y. Mo. A Unified Theory for the Blue- and Red-Shifting Phenomena in Hydrogen and Halogen Bonds, *Journal of chemical theory and computation*, **2017**, 13, 1626-1637.
33. B. Behera and P. K. Das. Blue-Shifted Hydrogen Bonding in the Gas Phase CH/D<sub>3</sub>CN...HCCl<sub>3</sub> Complexes, *The Journal of Physical Chemistry A*, **2019**, 123, 1830-1839.
34. M. Hippler. Quantum chemical study and infrared spectroscopy of hydrogen-bonded CHCl<sub>3</sub>-NH<sub>3</sub> in the gas phase, *The Journal of chemical physics*, **2007**, 127.
35. M. Hippler, S. Hesse and M. A. Suhm. Quantum-chemical study and FTIR jet spectroscopy of CHCl<sub>3</sub>-NH<sub>3</sub> association in the gas phase, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2010**, 12, 13555-13565.
36. A. Allerhand and P. Von Rague Schleyer. A Survey of C-H Groups as Proton Donors in Hydrogen Bonding, *Journal of the American Chemical Society*, **1963**, 85, 1715-1723.



## Linear functional state bounding for linear discrete-time systems with delays and bounded disturbances

Luu Thi Hiep, Phan Thanh Nam\*

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

*Received: 08/10/2019; Accepted: 09/11/2019*

### ABSTRACT

This paper presents an extended result on linear functional state bounding for linear discrete-time systems with delays and bounded disturbances. Based on the Lyapunov method, a sufficient condition for the existence of a linear functional state bounding is derived in terms of linear matrix inequalities which can be solved by many existing numerical algorithms. To increase the effectiveness of the derived condition, we propose to use an augmented Lyapunov-Krasovskii functional and its derivative is estimated by using the discrete-time Wirtinger-based inequality combined with a reciprocally convex inequality. Lastly, a numerical example is considered to illustrate the effectiveness of the obtained result.

**Keywords:** *State bounding, discrete time-delay systems, bounded disturbances, Lyapunov-Krasovskii functional.*

---

\*Corresponding author:  
Email: phanthanhnam@qnu.edu.vn

# Chặn hàm tuyến tính của trạng thái cho hệ rời rạc có chậm và nhiều bị chặn

Lưu Thị Hiệp, Phan Thanh Nam\*

*Khoa Toán và Thống kê, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam*

*Ngày nhận bài: 08/10/2019; Ngày nhận đăng: 09/11/2019*

## TÓM TẮT

Bài báo trình bày một kết quả mở rộng về chặn hàm tuyến tính trạng thái cho lớp hệ rời rạc có chậm và nhiều bị chặn. Dựa vào phương pháp hàm Lyapunov, một điều kiện đủ cho sự tồn tại chặn cho một hàm tuyến tính có dạng xác định trước của trạng thái hệ thống được thiết lập dưới dạng các bất đẳng thức ma trận tuyến tính và giải được bằng các thuật toán số. Để tăng tính hữu hiệu của điều kiện đưa ra, một lớp hàm Lyapunov-Krasovskii mở rộng được thiết kế để sử dụng và đạo hàm của nó được đánh giá dựa vào hai bất đẳng thức được phát triển gần đây gồm: bất đẳng thức Wirtinger rời rạc và bất đẳng thức ma trận lỗi cải tiến. Cuối cùng, một ví dụ số được nghiên cứu để minh họa tính hữu hiệu của kết quả thu được.

**Từ khóa:** *Chặn trạng thái, hệ rời rạc có chậm, nhiều bị chặn, hàm Lyapunov-Krasovskii.*

## 1. GIỚI THIỆU

Bài toán tìm chặn trạng thái/bao tập đạt được cho các hệ thống có nhiều bị chặn được nghiên cứu đầu tiên từ những năm 1960 và đang là hướng nghiên cứu quan trọng trong lý thuyết điều khiển với những ứng dụng rộng rãi trong ước lượng trạng thái, thiết kế điều khiển.<sup>1-15</sup> Trong các hệ điều khiển, thông tin/dữ liệu điều khiển và hệ thống được truyền tải qua các băng tầng kết nối. Do đó, chậm thời gian không thể tránh khỏi trong các hệ điều khiển thực tế và các lớp hệ có chậm thời gian đã thu hút sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu trong và ngoài nước.<sup>3-23</sup> Bài toán tìm chặn trạng thái/bao tập đạt được mở rộng lần đầu tiên lên hệ có chậm lần đầu tiên trong<sup>3</sup> và được phát triển mạnh mẽ trong những năm gần đây.<sup>4-15</sup> Tập đạt được của một hệ động lực có nhiều là tập tất cả các trạng thái mà hệ có thể đạt được xuất phát từ điểm gốc<sup>3,14</sup> và nói chung là không thể tìm chính xác được tập đạt được. Do đó, người ta quan tâm đến việc tìm một tập đóng nhỏ nhất có thể bao

tập đạt được của hệ thống. Một trong những cách tiếp cận phổ biến cho bài toán bao tập đạt được cho hệ có chậm là dựa vào phương pháp hàm Lyapunov và bất đẳng thức ma trận tuyến tính. Bằng cách cải tiến các lớp hàm Lyapunov, nhiều kết quả về bao tập đạt được đã được công bố.<sup>4-9,14,15</sup> Để cải tiến phương pháp hàm Lyapunov, trong những năm gần đây, nhiều phát triển quan trọng đã được công bố và tập trung chủ yếu vào việc mở rộng hoặc cải tiến các bất đẳng thức Wirtinger và bất đẳng thức lỗi.<sup>16-23</sup>

Để thu được bao tập đạt được nhỏ nhất, bên cạnh việc phát triển phương pháp hàm Lyapunov, thì một số kỹ thuật đánh giá trạng thái cũng được đề xuất, như chặn từng thành phần của trạng thái,<sup>9,12,13</sup> chặn hàm tuyến tính trạng thái.<sup>8,11</sup> Lấy ý tưởng chặn hàm tuyến tính trạng thái cho hệ vi phân từ,<sup>8,11</sup> trong bài báo này chúng tôi mở rộng cho lớp hệ rời rạc. Hơn nữa, chúng tôi cũng đề xuất sử dụng một lớp hàm Lyapunov mở rộng với đạo hàm của nó được đánh giá thông qua bất đẳng thức Wirtinger bộ

\*Tác giả liên hệ chính:

Email: phanthanhnam@qnu.edu.vn

một và hai<sup>17</sup> và bất đẳng thức ma trận lùi cải tiến.<sup>21</sup> Kết quả là một điều kiện đủ cho sự tồn tại một chặn trên của hàm giá trị tuyệt đối của hàm tuyến tính trạng thái được đưa ra dưới dạng các bất đẳng thức ma trận tuyến tính và có thể giải được bằng nhiều thuật toán số hiện nay. Cuối cùng, một ví dụ số được xem xét để minh họa tính hữu hiệu của kết quả đưa ra.

*Kí hiệu:*  $\mathbb{R}^n$  là không gian Euclide  $n$ -chiều;  $\mathbb{R}^{n \times m}$  là tập những ma trận cấp  $n \times m$ ;  $I_n$  là ma trận đơn vị cấp  $n \times n$ ;  $A^T$  là ma trận chuyển vị của  $A$ ;  $*$  là phần tử đối xứng trong một ma trận đối xứng;  $Sym\{X\} = X + X^T$ ;  $P > 0$  là một ma trận đối xứng xác định dương.

## 2. BÀI TOÁN NGHIÊN CỨU VÀ CÁC BỔ ĐỀ BỔ TRỢ

Xét hệ rời rạc sau

$$\begin{cases} x(k+1) = Ax(k) + A_d x(k-h(k)) \\ \quad + B\omega(k), \quad k > 0, \\ x(k) \equiv 0, \quad k = -h_2, \dots, 0, \end{cases} \quad (1)$$

trong đó  $x(k) \in \mathbb{R}^n$  là vectơ trạng thái,  $A, A_d \in \mathbb{R}^{n \times n}$  và  $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$  là những ma trận đã biết, chậm biến thiên  $h(k)$  biến đổi trong một khoảng đã biết  $[h_1, h_2]$ , tức là,

$$0 \leq h_1 \leq h(k) \leq h_2, \quad (2)$$

trong đó  $h_1, h_2$  là những số nguyên đã biết. Vectơ nhiễu  $\omega(k) \in \mathbb{R}^p$  được giả thiết là bị chặn:

$$\omega^T(k)\omega(k) \leq \omega_m^2, \quad \forall k \geq 0, \quad (3)$$

trong đó  $\omega_m$  là một thực dương biết.

Tập đạt được cho hệ có chậm (1) có nhiều bị chặn (3) được định nghĩa như sau:

$$\mathcal{R}_x := \{x(k) \in \mathbb{R}^n | x(k), \omega(k) \text{ thỏa (1) và (3)}\}. \quad (4)$$

Xét hàm tuyến tính sau:

$$z(k) = Ux(k), \quad (5)$$

trong đó  $U \in \mathbb{R}^{1 \times n}$  là một ma trận khác không đã cho. Mục đích bài báo này là:

(i) đưa ra một chặn trên có thể nhỏ nhất,  $\gamma$ , của giá trị tuyệt đối của hàm  $z(k)$ , tức là,  $|z(k)| \leq \gamma, \forall k = 1, 2, \dots$ ;

(ii) áp dụng kết quả (i) thiết lập một tập đa diện bao tập đạt được (4).

Bổ đề về hàm Lyapunov mở rộng, bất đẳng thức Wirtinger rời rạc,<sup>17</sup> bất đẳng thức lùi phụ thuộc chậm<sup>21</sup> và giá trị nhỏ nhất của một hàm hai biến lõm<sup>10</sup> cần thiết cho việc đưa ra kết quả chính của bài báo.

**Bổ đề 2.1.** <sup>9</sup> Cho  $V$  là một hàm xác định dương và  $V(0) = 0$ . Nếu tồn tại một số  $r > 1$  sao cho

$$\Delta V(k) + (1-r^{-1})V(k) - \frac{1-r^{-1}}{\omega_m^2} \omega^T(k)\omega(k) \leq 0, \quad (6)$$

thì  $V(k) < 1, \forall k \geq 0$ .

**Bổ đề 2.2.** <sup>17</sup> Cho một ma trận cấp  $n \times n$  xác định dương  $R$ , ba số nguyên không âm đã cho  $a, b, k$  thỏa mãn  $a < b \leq k$ , một hàm vectơ  $x(\cdot) \in \mathbb{R}^n$  và kí hiệu  $y(k) = x(k+1) - x(k)$ , ta có

$$\begin{aligned} i) \quad \sum_{s=k-b}^{k-a-1} y^T(s)Ry(s) &\geq \frac{1}{b-a} (\Omega_{a,b}^0)^T R \Omega_{a,b}^0 \\ &+ \frac{3}{b-a} (\Omega_{a,b}^1)^T R \Omega_{a,b}^1 \\ &+ \frac{5}{b-a} (\Omega_{a,b}^2)^T R \Omega_{a,b}^2, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} ii) \quad \sum_{s=-b}^{-a-1} \sum_{u=k+s}^{k-a-1} y^T(u)Ry(u) &\geq 2(\Omega_{a,b}^3)^T R \Omega_{a,b}^3 \\ &+ 4(\Omega_{a,b}^4)^T R \Omega_{a,b}^4, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} iii) \quad \sum_{s=-b}^{-a-1} \sum_{u=k-b}^{k+s} y^T(u)Ry(u) &\geq 2(\Omega_{a,b}^5)^T R \Omega_{a,b}^5 \\ &+ 4(\Omega_{a,b}^6)^T R \Omega_{a,b}^6. \end{aligned} \quad (9)$$

trong đó

$$\Omega_{a,b}^0 = x(k-a) - x(k-b),$$

$$\Omega_{a,b}^1 = x(k-a) + x(k-b) - \frac{2}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u),$$

$$\Omega_{a,b}^2 = x(k-a) - x(k-b)$$

$$+ \frac{6}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u)$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{12}{(b-a+2)(b-a+1)} \sum_{s=-b}^{-a} \sum_{u=k+s}^{k-a} x(u) \\
 \Omega_{a,b}^3 &= x(k-a) - \frac{1}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u), \\
 \Omega_{a,b}^4 &= x(k-a) + \frac{2}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u) \\
 & - \frac{6}{(b-a+2)(b-a+1)} \sum_{s=-b}^{-a} \sum_{u=k+s}^{k-a} x(u), \\
 \Omega_{a,b}^5 &= x(k-b) - \frac{1}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u), \\
 \Omega_{a,b}^6 &= x(k-b) - \frac{4}{b-a+1} \sum_{u=k-b}^{k-a} x(u) \\
 & + \frac{6}{(b-a+2)(b-a+1)} \sum_{s=-b}^{-a} \sum_{u=k+s}^{k-a} x(u).
 \end{aligned}$$

**Bổ đề 2.3.** <sup>21</sup> Cho hai ma trận cấp  $n \times n$ ,  $\mathcal{R}_1 > 0$ ,  $\mathcal{R}_2 > 0$ , hai vectơ  $\bar{\omega}_1, \bar{\omega}_2 \in \mathbb{R}^n$  và một số  $\alpha \in (0, 1)$ . Nếu tồn tại hai ma trận cấp  $n \times n$ ,  $X_1 = X_1^T, X_2 = X_2^T$  và hai ma trận cấp  $n \times n$ ,  $Y_1, Y_2$  sao cho

$$\begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 - X_1 & Y_1 \\ Y_1^T & \mathcal{R}_2 \end{bmatrix} \geq 0, \quad \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 & Y_2 \\ Y_2^T & \mathcal{R}_2 - X_2 \end{bmatrix} \geq 0, \quad (10)$$

thì bất đẳng thức sau đúng

$$\mathfrak{S}(t) \geq \begin{bmatrix} \bar{\omega}_1 \\ \bar{\omega}_2 \end{bmatrix}^T \mathfrak{S}_1(t) \begin{bmatrix} \bar{\omega}_1 \\ \bar{\omega}_2 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

trong đó

$$\mathfrak{S}(t) = \frac{1}{\alpha} \bar{\omega}_1^T \mathcal{R}_1 \bar{\omega}_1 + \frac{1}{1-\alpha} \bar{\omega}_2^T \mathcal{R}_2 \bar{\omega}_2, \quad (12)$$

$$\mathfrak{S}_1(t) = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 + (1-\alpha)X_1 & \alpha Y_1 + (1-\alpha)Y_2 \\ * & \mathcal{R}_2 + \alpha X_2 \end{bmatrix}. \quad (13)$$

**Bổ đề 2.4.** <sup>10</sup> Một hàm đã cho  $f : [a, b] \times [c, d] \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $(x, y) \mapsto f(x, y)$ . Giả sử rằng  $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \geq 0$ ,  $\forall (x, y) \in [a, b] \times [c, d]$  và  $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \geq 0$ ,  $\forall (x, y) \in [a, b] \times [c, d]$ . Khi đó, ta có

$$\begin{aligned}
 & \max_{(x,y) \in [a,b] \times [c,d]} f(x, y) = \\
 & \max\{f(a, c), f(a, d), f(b, c), f(b, d)\}. \quad (14)
 \end{aligned}$$

### 3. CHẶN HÀM TUYẾN TÍNH TRẠNG THÁI

Những kí hiệu sau cần để đưa ra kết quả chính:

$$\begin{aligned}
 h_{12} &= h_2 - h_1, \quad \mu = \max\{|\mu_1|, |\mu_2|\}, \\
 \alpha &= \frac{h(k) - h_1}{h_{12}}, \quad \beta = \frac{h_2 - h(k)}{h_{12}}, \\
 \nu_{a,b}(k) &= \frac{1}{b-a+1} \sum_{s=k-b}^{k-a} x(s), \\
 \sigma_{a,b}(k) &= \frac{1}{(b-a+1)(b-a+2)} \times \\
 & \sum_{s=-b}^{-a} \sum_{u=k+s}^{k-a} x(u), \\
 \xi^T(k) &= \text{col}\{x(k), x(k-h_1), x(k-h(k)), \\
 & x(k-h_2), \nu_{0,h_1}(k), \nu_{h_1,h(k)}(k), \\
 & \nu_{h(k),h_2}(k), \sigma_{0,h_1}(k), \sigma_{h_1,h(k)}(k), \\
 & \sigma_{h(k),h_2}(k), x(k-h_1+1), \\
 & x(k-h_2+1), \tilde{\omega}(k)\}, \\
 e_i &= [0_{n \times (i-1)n} \quad I_n \quad 0_{n \times (13-i)n}]^T, \\
 & i = 1, \dots, 13, \\
 \tilde{\omega}(k) &= \begin{bmatrix} \omega(k) \\ 0_{(n-p) \times 1} \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} B & 0_{n \times (n-p)} \end{bmatrix}, \\
 e_s &= A e_1^T + A_d e_3^T + B_1 e_{13}^T, \\
 \eta_0(k) &= \text{col}\{x(k), x(k-h_1), x(k-h_2), \\
 & \sum_{s=k-h_1}^{k-1} x(s)\}, \\
 \eta_1(k) &= \text{col}\{\eta_0(k), \sum_{s=k-h_2}^{k-h_1-1} x(s), \\
 & \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} x(u)\}, \\
 \eta_2(k, s) &= \text{col}\{y(s), x(s), \sum_{u=s}^{k-1} y(u)\}, \\
 \eta_3(k, s) &= \text{col}\{y(s), x(s), \sum_{u=s}^{k-h_1-1} y(u)\}, \\
 \Pi_0 &= [e_s^T \quad e_{11}^T \quad e_{12}^T \quad (h_1+1)e_5^T - e_2^T]^T, \\
 \Pi_1 &= [e_1^T \quad e_2^T \quad e_4^T \quad (h_1+1)e_5^T - e_1^T]^T,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(h_2 - h(k) + 1)e_7^T + (h(k) - h_1 + 1)e_6^T \\ & - e_3^T - e_2^T\} \\ & (h_1 + 1)(h_1 + 2)e_8^T - (h_1 + 1)e_1^T]^T, \\ \Pi_2 &= [e_s^T - e_1^T \quad e_{11}^T - e_2^T \quad e_{12}^T - e_4^T \\ & \quad e_1^T - e_2^T \quad e_2^T - e_4^T \quad (h_1 + 1)(e_1^T - e_5^T)]^T, \\ \Pi_3 &= [e_s^T - e_1^T \quad e_1^T \quad 0]^T, \\ \Pi_4 &= [e_{11}^T - e_2^T \quad e_2^T \quad e_1^T - e_2^T]^T, \\ \Pi_5 &= [0 \quad 0 \quad e_s^T - e_1^T]^T, \\ \Pi_6 &= [e_s^T - e_{11}^T \quad (h_1 + 1)e_5^T - e_2^T \\ & \quad h_1 e_1^T - (h_1 + 1)e_5^T + e_2^T]^T, \\ \Pi_7 &= [e_{11}^T - e_2^T \quad e_2^T \quad 0]^T, \\ \Pi_8 &= [e_{12}^T - e_4^T \quad e_4^T \quad e_2^T - e_4^T]^T, \\ \Pi_9 &= [0 \quad 0 \quad e_{11}^T - e_2^T]^T, \\ \Pi_{10} &= [e_{11}^T - e_{12}^T \quad \{(h_2 - h(k) + 1)e_7^T \\ & \quad + (h(k) - h_1 + 1)e_6^T - e_3^T - e_4^T\} \\ & \quad \{h_{12}e_2^T - (h_2 - h(k) + 1)e_7^T \\ & \quad - (h(k) - h_1 + 1)e_6^T + e_3^T + e_4^T\}]^T, \\ \rho_1 &= [e_1^T - e_2^T \quad \sqrt{3}(e_1^T + e_2^T - 2e_5^T) \\ & \quad \sqrt{5}(e_1^T - e_2^T + 6e_5^T - 12e_8^T)]^T, \\ \rho_2 &= [e_2^T - e_3^T \quad \sqrt{3}(e_2^T + e_3^T - 2e_6^T) \\ & \quad \sqrt{5}(e_2^T - e_3^T + 6e_6^T - 12e_9^T)]^T, \\ \rho_3 &= [e_3^T - e_4^T \quad \sqrt{3}(e_3^T + e_4^T - 2e_7^T) \\ & \quad \sqrt{5}(e_3^T - e_4^T + 6e_7^T - 12e_{10}^T)]^T, \\ \rho_4 &= [\sqrt{2}(e_1^T - e_5^T) \quad 2(e_1^T + 2e_5^T - 6e_8^T)]^T, \\ \rho_5 &= [\sqrt{2}(e_2^T - e_5^T) \quad 2(e_2^T - 4e_5^T + 6e_8^T)]^T, \\ \rho_6 &= [\sqrt{2}(e_2^T - e_6^T) \quad 2(e_2^T + 2e_6^T - 6e_9^T)]^T, \\ \rho_7 &= [\sqrt{2}(e_3^T - e_7^T) \quad 2(e_3^T + 2e_7^T - 6e_{10}^T)]^T, \\ \rho_8 &= [\sqrt{2}(e_3^T - e_6^T) \quad 2(e_3^T - 4e_6^T + 6e_9^T)]^T, \\ \rho_9 &= [\sqrt{2}(e_4^T - e_7^T) \quad 2(e_4^T - 4e_7^T + 6e_{10}^T)]^T, \\ \rho_{10} &= [\rho_2^T \quad \rho_3^T]^T, \quad \rho_{11} = e_s - e_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= \begin{bmatrix} \tilde{R}_2 + (1 - \alpha)X_1 & \alpha Y_1 + (1 - \alpha)Y_2 \\ * & \tilde{R}_2 + \alpha X_2 \end{bmatrix}, \\ \tilde{R}_1 &= \text{diag}\{R_i, R_i, R_i\}, \quad i = 1, 2, \\ \tilde{Z}_j &= \text{diag}\{Z_j, Z_j, Z_j\}, \quad j = 3, 4, \\ \tilde{Z}_l &= \text{diag}\{Z_l, Z_l\}, \quad l = 1, 2, 3, 4. \end{aligned}$$

**Định lý 3.1.** Giả sử tồn tại hai số thực  $r > 1$ ,  $\beta > 0$ , một ma trận cấp  $6n \times 6n$ ,  $P > 0$ , hai ma trận cấp  $3n \times 3n$ ,  $Q > 0$ ,  $S > 0$ , sáu ma trận cấp  $n \times n$ ,  $R_1 > 0$ ,  $R_2 > 0$ ,  $Z_1 > 0$ ,  $Z_2 > 0$ ,  $Z_3 > 0$ ,  $Z_4 > 0$ , hai ma trận đối xứng cấp  $3n \times 3n$ ,  $X_i$ ,  $i = 1, 2$ , hai ma trận cấp  $3n \times 3n$ ,  $Y_i$ ,  $i = 1, 2$ , sao cho những bất đẳng thức ma trận tuyến tính sau đúng

$$\begin{bmatrix} \tilde{R}_2 + \tilde{Z}_3 - X_1 & Y_1 \\ * & \tilde{R}_2 + \tilde{Z}_4 \end{bmatrix} > 0, \quad (15)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{R}_2 + \tilde{Z}_3 & Y_2 \\ * & \tilde{R}_2 + \tilde{Z}_4 - X_2 \end{bmatrix} > 0, \quad (16)$$

$$\tilde{\Omega}(h(k)) < 0, \quad \forall h(k) \in \{h_1, h_2\}, \quad (17)$$

thì giá trị tuyệt đối của  $z(k)$  bị chặn trên bởi  $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ , tức là,  $|z(k)| \leq \frac{1}{\sqrt{\beta}} := \gamma$ ,  $\forall k = 1, 2, \dots$ , trong đó

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}(h(k)) &= \Psi_1(h(k)) - \Psi_2(h(k)), \\ \Psi_1(h(k)) &= \beta e_s^T U^T U e_s - \beta r^{-1} e_1^T U^T U e_1 \\ & \quad + \text{Sym}\{\Pi_1^T P \Pi_2 + \Pi_6^T Q \Pi_5 + r^{-h_1} \Pi_{10}^T S \Pi_9\} \\ & \quad + \Pi_2^T P \Pi_2 + (1 - r^{-1}) \Pi_1^T P \Pi_1 + \Pi_3^T Q \Pi_3 \\ & \quad - r^{-h_1} \Pi_4^T Q \Pi_4 + \frac{r^{-h_1} - 1}{r^{-1} - 1} \Pi_5^T Q \Pi_5 \\ & \quad + r^{-h_1} \Pi_7^T S \Pi_7 - r^{-h_2} \Pi_8^T S \Pi_8 \\ & \quad + \frac{r^{-h_2} - r^{-h_1}}{r^{-1} - 1} \Pi_9^T S \Pi_9 + h_{11}^2 \rho_{11}^T R_1 \rho_{11} \\ & \quad + h_{12}^2 \rho_{11}^T R_2 \rho_{11} + \frac{h_1(h_1 + 1)}{2} \rho_{11}^T (Z_1 + Z_2) \rho_{11} \\ & \quad + \frac{h_{12}(h_{12} + 1)}{2} \rho_{11}^T (Z_3 + Z_4) \rho_{11} - \frac{1 - r^{-1}}{\omega_m^2} I_p \\ \Psi_2(h(k)) &= r^{-h_1} \rho_1^T \tilde{R}_1 \rho_1 + r^{-h_1} \rho_4^T \tilde{Z}_1 \rho_4 \\ & \quad + r^{-h_1} \rho_5^T \tilde{Z}_2 \rho_5 + r^{-h_2} \rho_6^T \tilde{Z}_3 \rho_6 \\ & \quad + r^{-h_2} \rho_7^T \tilde{Z}_3 \rho_7 + r^{-h_2} \rho_8^T \tilde{Z}_4 \rho_8 \\ & \quad + r^{-h_2} \rho_9^T \tilde{Z}_4 \rho_9 + r^{-h_2} \rho_{10}^T \Theta_1 \rho_{10}. \end{aligned}$$

Chứng minh. Xét hàm Lyapunov-Krasovskii sau:

$$V(k) = \sum_{i=0}^5 V_i(k) \quad (18)$$

trong đó

$$\begin{aligned} V_0(k) &= \beta x^T(k) U^T U x(k), \\ V_1(k) &= \eta_1^T(k) P \eta_1(k), \\ V_2(k) &= \sum_{s=k-h_1}^{k-1} r^{1+s-k} \eta_2^T(k, s) Q \eta_2(k, s) \\ &\quad + \sum_{s=k-h_2}^{k-h_1-1} r^{1+s-k} \eta_3^T(k, s) S \eta_3(k, s), \\ V_3(k) &= h_1 \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} r^{1+u-k} y^T(u) R_1 y(u) \\ &\quad + h_{12} \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} r^{1+u-k} y^T(u) R_2 y(u), \\ V_4(k) &= \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=s}^{-1} \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{1+v-k} y^T(v) Z_1 y(v) \\ &\quad + \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=-h_1}^s \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{1+v-k} y^T(v) Z_2 y(v), \\ V_5(k) &= \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=s}^{-h_1-1} \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{1+v-k} y^T(v) Z_3 y(v) \\ &\quad + \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=-h_2}^s \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{1+v-k} y^T(v) Z_4 y(v), \end{aligned}$$

Theo giả thiết ta có

$$V(k) \geq V_0(k) \geq \beta |z(k)|^2, \quad k = 1, 2, \dots \quad (19)$$

Tính sai phân của  $V$ , ta thu được

$$\begin{aligned} \Delta V_0(k) &= V_0(k+1) - V_0(k) \\ &\quad + (1 - r^{-1})V_0(k) + (r^{-1} - 1)V_0(k) \\ &= V_0(k+1) - r^{-1}V_0(k) + (r^{-1} - 1)V_0(k) \\ &= \beta x^T(k+1) U^T U x(k+1) \\ &\quad - r^{-1} \beta x^T(k) U^T U x(k) \\ &\quad + (r^{-1} - 1)V_0(k) \\ \Delta V_1(k) &= \Delta \eta_1^T(k) P \Delta \eta_1(k) + 2 \Delta \eta_1^T(k) P \eta_1(k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\quad + (1 - r^{-1})\eta_1^T(k) P \eta_1(k) \\ &\quad + (r^{-1} - 1)V_1(k), \\ \Delta V_2(k) &= V_2(k+1) - V_2(k) \\ &\quad + (1 - r^{-1})V_2(k) + (r^{-1} - 1)V_2(k) \\ &= \sum_{s=k-h_1+1}^k r^{s-k} \eta_2^T(k+1, s) Q \eta_2(k+1, s) \\ &\quad + \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} r^{s-k} \eta_3^T(k+1, s) S \eta_3 \\ &\quad (k+1, s) - r^{-1}V_2(k) + (r^{-1} - 1)V_2(k). \end{aligned}$$

Hai vectơ  $\eta_2(k+1, s)$ ,  $\eta_3(k+1, s)$  được viết lại như sau:

$$\eta_2(k+1, s) = \bar{\eta}_2(k) + \eta_2(k, s) \quad (20)$$

$$\eta_3(k+1, s) = \bar{\eta}_3(k) + \eta_3(k, s) \quad (21)$$

trong đó

$$\bar{\eta}_2(k) = [0 \ 0 \ y^T(k)]^T, \quad \bar{\eta}_3(k) = [0 \ 0 \ y^T(k-h_1)]^T.$$

Sử dụng (20) và (21), ta có

$$\begin{aligned} \Delta V_2(k) &= \sum_{s=k-h_1+1}^k r^{s-k} \bar{\eta}_2^T(k) Q \bar{\eta}_2(k) \\ &\quad + \sum_{s=k-h_1+1}^k r^{s-k} \eta_2^T(k, s) Q \eta_2(k, s) \\ &\quad + 2 \sum_{s=k-h_1+1}^k r^{s-k} \eta_2^T(k, s) Q \bar{\eta}_2(k) \\ &\quad + \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} r^{s-k} \bar{\eta}_3^T(k) S \bar{\eta}_3(k) \\ &\quad + \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} r^{s-k} \eta_3^T(k, s) S \eta_3(k, s) \\ &\quad + 2 \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} r^{s-k} \eta_3^T(k, s) S \bar{\eta}_3(k) \\ &\quad - \sum_{s=k-h_1}^{k-1} r^{s-k} \eta_2^T(k, s) Q \eta_2(k, s) \\ &\quad - \sum_{s=k-h_2}^{k-h_1-1} r^{s-k} \eta_3^T(k, s) S \eta_3(k, s) \\ &\quad + (r^{-1} - 1)V_2(k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{r^{-h_1} - 1}{r^{-1} - 1} \bar{\eta}_2^T(k) Q \bar{\eta}_2(k) + \eta_2^T(k, k) Q \eta_2(k, k) \\
 &\quad - r^{-h_1} \eta_2^T(k, k - h_1) Q \eta_2(k, k - h_1) \\
 &\quad + 2 \sum_{s=k-h_1+1}^k r^{s-k} \eta_2^T(k, s) Q \bar{\eta}_2(k) \\
 &\quad + \frac{r^{-h_2} - r^{-h_1}}{r^{-1} - 1} \bar{\eta}_3^T(k) S \bar{\eta}_3(k) \\
 &\quad + r^{-h_1} \eta_3^T(k, k - h_1) S \eta_3(k, k - h_1) \\
 &\quad - r^{-h_2} \eta_3^T(k, k - h_2) S \eta_3(k, k - h_2) \\
 &\quad + 2 \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} r^{s-k} \eta_3^T(k, s) S \bar{\eta}_3(k) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_2(k) \\
 &\leq \frac{r^{-h_1} - 1}{r^{-1} - 1} \bar{\eta}_2^T(k) Q \bar{\eta}_2(k) + \eta_2^T(k, k) Q \eta_2(k, k) \\
 &\quad - r^{-h_1} \eta_2^T(k, k - h_1) Q \eta_2(k, k - h_1) \\
 &\quad + 2 \sum_{s=k-h_1+1}^k \eta_2^T(k, s) Q \bar{\eta}_2(k) \\
 &\quad + \frac{r^{-h_2} - r^{-h_1}}{r^{-1} - 1} \bar{\eta}_3^T(k) S \bar{\eta}_3(k) \\
 &\quad + r^{-h_1} \eta_3^T(k, k - h_1) S \eta_3(k, k - h_1) \\
 &\quad - r^{-h_2} \eta_3^T(k, k - h_2) S \eta_3(k, k - h_2) \\
 &\quad + 2r^{-h_1} \sum_{s=k-h_2+1}^{k-h_1} \eta_3^T(k, s) S \bar{\eta}_3(k) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_2(k),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta V_3(k) &= V_3(k+1) - V_3(k) \\
 &\quad + (1 - r^{-1}) V_3(k) + (r^{-1} - 1) V_3(k) \\
 &= h_1 \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s+1}^k r^{u-k} y^T(u) R_1 y(u) \\
 &\quad + h_{12} \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s+1}^k r^{u-k} y^T(u) R_2 y(u) \\
 &\quad - h_1 \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} r^{u-k} y^T(u) R_1 y(u) \\
 &\quad - h_{12} \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} r^{u-k} y^T(u) R_2 y(u) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_3(k) \\
 &= h_1^2 y^T(k) R_1 y(k) + h_{12}^2 y^T(k) R_2 y(k)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &- h_1 \sum_{s=k-h_1}^{k-1} r^{s-k} y^T(s) R_1 y(s) \\
 &\quad - h_{12} \sum_{s=k-h_2}^{k-h_1-1} r^{s-k} y^T(s) R_2 y(s) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_3(k) \\
 &\leq h_1^2 y^T(k) R_1 y(k) + h_{12}^2 y^T(k) R_2 y(k) \\
 &\quad - r^{-h_1} h_1 \sum_{s=k-h_1}^{k-1} y^T(s) R_1 y(s) \\
 &\quad - r^{-h_2} h_{12} \sum_{s=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(s) R_2 y(s) \\
 &\quad - r^{-h_2} h_{12} \sum_{s=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(s) R_2 y(s) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_3(k),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta V_4 &= V_4(k+1) - V_4(k) \\
 &\quad + (1 - r^{-1}) V_4(k) + (r^{-1} - 1) V_4(k) \\
 &= \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=s}^{-1} \sum_{v=k+u+1}^k r^{v-k} y^T(v) Z_1 y(v) \\
 &\quad + \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=-h_1}^s \sum_{v=k+u+1}^k r^{v-k} y^T(v) Z_2 y(v) \\
 &\quad - \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=s}^{-1} \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{v-k} y^T(v) Z_1 y(v) \\
 &\quad - \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=-h_1}^s \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{v-k} y^T(v) Z_2 y(v) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_4(k) \\
 &= \frac{h_1(h_1 + 1)}{2} y^T(k) (Z_1 + Z_2) y(k) \\
 &\quad - \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} r^{u-k} y^T(u) Z_1 y(u) \\
 &\quad - \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k+s} r^{u-k} y^T(u) Z_2 y(u) \\
 &\quad + (r^{-1} - 1) V_4(k) \\
 &\leq \frac{h_1(h_1 + 1)}{2} y^T(k) (Z_1 + Z_2) y(k) \\
 &\quad - r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} y^T(u) Z_1 y(u)
 \end{aligned}$$

$$-r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k-h_1}^{k+s} y^T(u)Z_2y(u) + (r^{-1} - 1)V_4(k),$$

$$-r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k-h(k)}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) + (r^{-1} - 1)V_5(k).$$

Do đó, ta thu được

$$\begin{aligned} \Delta V_5(k) &= V_5(k+1) - V_5(k) \\ &+ (1 - r^{-1})V_5(k) + (r^{-1} - 1)V_5(k) \\ &= \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=s}^{-h_1-1} \sum_{v=k+u+1}^k r^{v-k}y^T(v)Z_3y(v) \\ &+ \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=-h_2}^s \sum_{v=k+u+1}^k r^{v-k}y^T(v)Z_4y(v) \\ &- \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=s}^{-h_1-1} \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{v-k}y^T(v)Z_3y(v) \\ &- \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=-h_2}^s \sum_{v=k+u}^{k-1} r^{v-k}y^T(v)Z_4y(v) \\ &+ (r^{-1} - 1)V_5(k) \\ &= \frac{h_{12}(h_{12} + 1)}{2}y^T(k)(Z_3 + Z_4)y(k) \\ &- \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-h_1-1} r^{u-k}y^T(u)Z_3y(u) \\ &- \sum_{s=-h_2}^{-h_1-1} \sum_{u=k-h_2}^{k+s} r^{u-k}y^T(u)Z_4y(u) \\ &+ (r^{-1} - 1)V_5(k) \\ &\leq \frac{h_{12}(h_{12} + 1)}{2}y^T(k)(Z_3 + Z_4)y(k) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k+s}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2}(h_2 - h(k)) \sum_{u=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2}(h_2 - h(k)) \sum_{u=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k-h_2}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \\ &- r^{-h_2}(h(k) - h_1) \sum_{u=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_4y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k-h_2}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \\ &- r^{-h_2}(h(k) - h_1) \sum_{u=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_4y(u) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta V(k) &+ (1 - r^{-1})V(k) \\ &- \frac{1 - r^{-1}}{\omega_m^2}\omega^T(k)\omega(k) \\ &\leq \xi^T(t)\Psi_1(h(k))\xi(t) \\ &- r^{-h_1}h_{11} \sum_{s=k-h_1}^{k-1} y^T(s)R_1y(s) \\ &- r^{-h_2}h_{12} \sum_{s=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(s)R_2y(s) \\ &- r^{-h_2}h_{12} \sum_{s=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(s)R_2y(s) \\ &- r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} y^T(u)Z_1y(u) \\ &- r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k-h_1}^{k+s} y^T(u)Z_2y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k+s}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2}(h_2 - h(k)) \sum_{u=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k-h_2}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \\ &- r^{-h_2}(h(k) - h_1) \sum_{u=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_4y(u) \\ &- r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k-h(k)}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \end{aligned}$$

Bằng việc sử dụng bất đẳng thức trong Bổ đề



2.2 với  $\alpha = \frac{h(k)-h_1}{h_{12}}$ ,  $\beta = \frac{h_2-h(k)}{h_{12}}$ , ta có

$$\begin{aligned} & -r^{-h_1}h_1 \sum_{s=k-h_1}^{k-1} y^T(s)R_1y(s) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_1^T r^{-h_1} \tilde{R}_1 \rho_1\} \xi(k), \\ & -r^{-h_2}h_{12} \sum_{s=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(s)R_2y(s) \\ & \leq -r^{-h_2} \frac{1}{\alpha} \xi^T(k)\{\rho_2^T \tilde{R}_2 \rho_2\} \xi(k), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2}h_{12} \sum_{s=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(s)R_2y(s) \\ & \leq -r^{-h_2} \frac{1}{\beta} \xi^T(k)\{\rho_3^T \tilde{R}_2 \rho_3\} \xi(k), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2}(h_2 - h(k)) \sum_{s=k-h(k)}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ & \leq -r^{-h_2} \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right) \xi^T(k)\{\rho_2^T \tilde{Z}_3 \rho_2\} \xi(k), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2}(h(k) - h_1) \sum_{s=k-h_2}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_4y(u) \\ & \leq -r^{-h_2} \left(\frac{1}{\beta} - 1\right) \xi^T(k)\{\rho_3^T \tilde{Z}_4 \rho_3\} \xi(k), \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k+s}^{k-1} y^T(u)Z_1y(u) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_4^T r^{-h_1} \tilde{Z}_1 \rho_4\} \xi(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_1} \sum_{s=-h_1}^{-1} \sum_{u=k-h_1}^{k+s} y^T(u)Z_2y(u) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_5^T r^{-h_1} \tilde{Z}_2 \rho_5\} \xi(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k+s}^{k-h_1-1} y^T(u)Z_3y(u) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_6^T r^{-h_2} \tilde{Z}_3 \rho_6\} \xi(k), \end{aligned}$$

$$-r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k+s}^{k-h(k)-1} y^T(u)Z_3y(u)$$

$$\leq \xi^T(k)\{-\rho_7^T r^{-h_2} \tilde{Z}_3 \rho_7\} \xi(k),$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2} \sum_{s=-h(k)}^{-h_1-1} \sum_{u=k-h(k)}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_8^T r^{-h_2} \tilde{Z}_4 \rho_8\} \xi(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -r^{-h_2} \sum_{s=-h_2}^{-h(k)-1} \sum_{u=k-h_2}^{k+s} y^T(u)Z_4y(u) \\ & \leq \xi^T(k)\{-\rho_9^T r^{-h_2} \tilde{Z}_4 \rho_9\} \xi(k), \end{aligned}$$

Từ (22)-(25), sử dụng Bổ đề 2.3, ta có

$$\begin{aligned} & r^{-h_2} \xi^T(k) \left\{ -\frac{1}{\alpha} \rho_2^T (\tilde{R}_2 + \tilde{Z}_3) \rho_2 - \frac{1}{\beta} \rho_3^T (\tilde{R}_2 \right. \\ & \left. + \tilde{Z}_4) \rho_3 + \begin{bmatrix} \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \tilde{Z}_3 & 0 \\ 0 & \tilde{Z}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix} \right\} \xi(k) \\ & \leq \xi^T(k) \left\{ -r^{-h_2} \rho_{10}^T \Theta_1 \rho_{10} \right\} \xi(k). \end{aligned}$$

Từ trên, ta thu được

$$\begin{aligned} & \Delta V(k) + (1 - r^{-1})V(k) - \frac{1 - r^{-1}}{\omega_m^2} \omega^T(k)\omega(k) \\ & \leq \xi^T(k)\bar{\Omega}(h(k))\xi^T(k) < 0. \end{aligned}$$

Áp dụng Bổ đề 2.1, ta có  $V(k) < 1, \forall k \geq 0$ . Kết hợp bất đẳng thức này với (19), ta thu được:

$$|z(k)| \leq \frac{1}{\sqrt{\beta}}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (26)$$

Định lý được chứng minh.  $\square$

**Nhận xét 3.1.** (i) Định lý 3.1 đưa ra chặn hàm tuyến tính trạng thái  $z(k) = Ux(k)$ . Điều này kéo theo rằng tập đạt được của hệ thống được bao bởi một dải xác định bởi hai nửa không gian có cùng pháp véc tơ  $U$ . Do đó, bằng cách chọn một số hữu hạn các véc tơ  $U$  và giao các dải chặn hàm tuyến tính trạng thái tương ứng, ta sẽ thu được một đa diện lồi bao tập đạt được của hệ thống.

(ii) Nếu ta chọn  $U$  là các véc tơ đơn vị thứ  $i$  trong  $\mathbb{R}^n$ , tức là

$$U = [0 \ 0 \ \overset{\text{vi trí } i}{1} \ 0 \ \dots \ 0] \in \mathbb{R}^{1 \times n}$$

thì ta sẽ thu được chặn từng thành phần  $x_i(k)$ ,  $i = 1, \dots, n$  của vec tơ trạng thái  $x(t)$ . Và kết quả là ta thu được một hình hộp bao tập đạt được của hệ thống.

(iii) Nếu thay tích  $U^T U$  bằng một ma trận xác định dương  $P_0$ , thì Định lý 3.1, ta sẽ cho điều kiện đủ để bao tập đạt được bằng hình elipxoit  $\epsilon(P_0, 1) = \{x \in \mathbb{R}^n : x^T P_0 x \leq 1\}$ . Giao hình đa diện thu được ở (i) với elipxoit  $\epsilon(P_0, 1)$ , ta thu được một bao tập đạt được nhỏ hơn.

#### 4. VÍ DỤ SỐ

**Ví dụ 4.1.** Xét hệ (1) với những ma trận sau:

$$A = \begin{bmatrix} 0.8 & -0.01 \\ -0.5 & 0.09 \end{bmatrix}, \quad A_d = \begin{bmatrix} -0.02 & 0 \\ -0.1 & -0.01 \end{bmatrix},$$

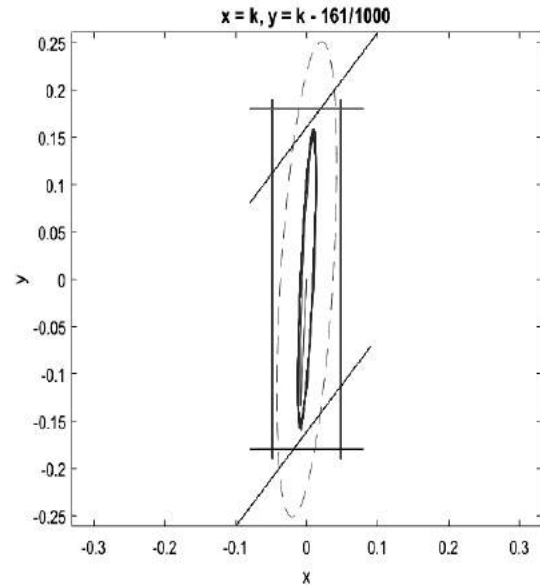
$$B = \begin{bmatrix} 0.01 \\ 0.15 \end{bmatrix}, \quad h(k) \in [0, 15] \text{ và } \omega(k) = \sin(7k).$$

Trong ví dụ này chúng tôi tìm chặn cho 3 hàm tuyến tính trạng thái  $|z_i(k)| = |U_i x(k)|$ ,  $i = 1, 2, 3$  với  $U_1 = [1 \ 0]$ ,  $U_2 = [0 \ 1]$  và  $U_3 = [-1 \ 1]$ . Giải LMIs (15)-(17) của Định lý 3.1, các chặn trên cho ba hàm tuyến tính thu được là:  $|z_1(k)| \leq 0.048$  tại  $r = 1.17$ ,  $|z_2(k)| \leq 0.180$  tại  $r = 169.6$ ,  $|z_3(k)| \leq 0.161$  tại  $r = 112.75$ . Bảng 1 chỉ ra rằng các chặn thu được bởi phương pháp đã trình bày nhỏ hơn các chặn thu được bởi phương pháp trong<sup>9</sup>. Hơn nữa, phương pháp trong<sup>9</sup> là không khả thi với trường hợp thứ ba. Điều này chứng tỏ phương pháp đưa ra của chúng tôi là hữu hiệu hơn phương pháp trong<sup>9</sup>.

**Bảng 1.** Các chặn tính được

Phương pháp	$ z_1(k) $	$ z_2(k) $	$ z_3(k) $
Định lý 3.1 <sup>9</sup>	0.060	0.48	-
Định lý 3.1	0.048	0.18	0.161

Mặt khác, Hình 1 cũng chỉ ra rằng khi lấy giao của hình elipxoit với 3 dải (dải đứng chặn  $z_1 = x_1$ , dải ngang chặn  $z_2 = x_2$  và dải xiên chặn  $z_3$ , ta thu được một tập nhỏ hơn hình elipxoit bao tập đạt được của hệ thống.



**Hình 1.** Quỹ đạo hệ thống và các chặn

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. J. Abegor, K. Nagpal, K. Poolla. A linear matrix inequality approach to peak-to-peak gain minimization, *Int. J. Robust Nonlinear Control*, **1996**, *6*, 899-927.
2. C. Durieu, E. Walter, B. Polyak. Multi-input multi-output ellipsoidal state bounding, *J. Optim. Theory Appl.*, **2001**, *111*, 273-303.
3. E. Fridman, U. Shaked. On reachable sets for linear systems with delay and bounded peak inputs, *Automatica*, **2003**, *39*, 2005-2010.
4. J.H. Kim. Improved ellipsoidal bound of reachable sets for time-delayed linear systems with disturbances, *Automatica*, **2008**, *44*, 2940-2943.
5. O.M. Kwon, S.M. Lee, J.H. Park. On the reachable set bounding of uncertain dynamic systems with time-varying delays and disturbances, *Inf. Sci.*, **2011**, *181*, 3735-3748.
6. P.T. Nam, P.N. Pathirana. Further result on reachable set bounding for linear uncertain polytopic systems with interval time-varying delays, *Automatica*, **2011**, *47*, 1838-1841.

7. Z. Feng, W.X. Zheng. Improved reachable set estimation of discrete-time systems with time-varying delay, *Optim Control Appl Meth.*, **2017**, 38(6), 1081-1090.
8. P.T. Nam, P.N. Pathirana, H. Trinh. Linear functional state bounding for perturbed time-delay systems and its application, *IMA J. Math. Control Inf.*, **2015**, 32(2), 245-255.
9. N.D. That, P.T. Nam, Q.P. Ha. Reachable set bounding for linear discrete-time systems with delays and bounded disturbances, *J. Optim. Theory Appl.*, **2013**, 157, 96-107.
10. H. Trinh, P.T. Nam, P.N. Pathirana, H.P. Le. On backwards and forwards reachable sets bounding for perturbed time-delay systems, *Appl. Math. Comput.*, **2015**, 269, 664-673.
11. P.T. Nam, P.N. Pathirana, H. Trinh. Convergence within a polyhedron: controller design for time-delay systems with bounded disturbances, *IET Control Theory Appl.*, **2015**, 6(9), 905-914.
12. P.T. Nam, P.N. Pathirana, H. Trinh. Reachable set bounding for nonlinear perturbed time-delay systems: The smallest bound, *Applied Mathematics Letters*, **2015**, 43(9), 68-71.
13. P.T. Nam, H. Trinh, P.N. Pathirana. Minimization of state bounding for perturbed positive systems with delays, *SIAM Journal on Control and Optimization*, **2018**, 56(3), 1739-1755.
14. Z. Zuo, D.W.C. Ho, Y. Wang. Reachable set bounding for delayed systems with polytopic uncertainties: the maximal Lyapunov-Krasovskii functional approach, *Automatica*, **2010**, 46, 949-952.
15. Z. Zuo, Y. Fu, Y. Wang. Results on reachable set estimation for linear systems with both discrete and distributed delays, *IET Control Theory Appl.*, **2012**, 6, 2346-2350.
16. P.T. Nam, P.N. Pathirana, H. Trinh. Discrete Wirtinger-based inequality and its application, *J. Frankl. Inst.*, **2015**, 352(5), 1893-1905.
17. P.T. Nam, H. Trinh, P.N. Pathirana. Discrete inequalities based on multiple auxiliary functions and their applications to stability analysis of time-delay systems, *J. Frankl. Inst.*, **2015**, 352(12), 5810-5831.
18. A. Seuret, F. Gouaisbaut, E. Fridman. Stability of discrete-time systems with time-varying delays via a novel summation inequality, *IEEE Trans. Autom. Control*, **2015**, 60, 2740-2745.
19. S.Y. Lee, J.M. Park, P.G. Park. Bessel summation inequalities for stability analysis of discrete-time systems with time-varying delays, *Int. J. Robust Nonlinear Control*, **2018**, 29(2), 473-491.
20. P.G. Park, J. Ko, C. Jeong. Reciprocally convex approach to stability of systems with time-varying delays, *Automatica*, **2011**, 47(1), 235-238.
21. A. Sueret, F. Gouaisbaut. Delay-dependent reciprocally convex combination lemma, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01257670/.2017>, 2017.
22. A. Seuret, K. Liu, F. Gouaisbaut. Generalized reciprocally convex combination lemmas and its application to time-delay systems, *Automatica*, **2018**, 95, 488-493.
23. X.M. Zhang, Q.L. Han, A. Seuret, F. Gouaisbaut. An improved reciprocally convex inequality and an augmented Lyapunov-Krasovskii functional for stability of linear systems with time-varying delay, *Automatica*, **2017**, 84, 221-226



# Một phương pháp mới để thiết kế quan sát trạng thái cho hệ Glucose-Insulin có trễ

Đào Thị Hải Yến<sup>1</sup>, Đinh Công Hương<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Phú Yên, Phú Yên, Việt Nam

<sup>2</sup> Khoa Toán và Thống kê, Trường Đại học Quy Nhơn, Bình Định, Việt Nam

Ngày nhận bài: 02/12/2019; Ngày nhận đăng: 07/02/2020

## TÓM TẮT

Bài báo này trình bày một phương pháp mới để thiết kế một bộ quan sát trạng thái cho một lớp hệ Glucose-Insulin phi tuyến với hai độ trễ thời gian. Dựa vào tính dương của nghiệm, chúng tôi đã đề xuất một phép biến đổi tọa độ mới để đưa mô hình đang xem xét về một hệ quan sát được. Trong hệ tọa độ mới này, các độ trễ của hệ đã cho xuất hiện trong véc tơ đầu vào và véc tơ đầu ra mà không xuất hiện trong véc tơ trạng thái. Hệ quả là chúng ta dễ dàng thiết kế được bộ quan sát để ước lượng thông tin của biến trạng thái. Các kết quả minh họa số được trình bày trong bài báo cho thấy tính hiệu quả của phương pháp đề xuất.

**Từ khóa:** Quan sát trạng thái, phép biến đổi trạng thái, hệ trễ thời gian.

---

\*Tác giả liên hệ chính:

Email: [dingconghuong@qnu.edu.vn](mailto:dingconghuong@qnu.edu.vn)

# A new method for designing observers of nonlinear time-delay Glucose-Insulin system

Dao Thi Hai Yen<sup>1</sup>, Dinh Cong Huong<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Natural Sciences, Phu Yen University, Phu Yen, Vietnam

<sup>2</sup>Faculty of Mathematics and Statistics, Quy Nhon University, Binh Dinh, Vietnam

Received: 02/12/2019; Accepted: 07/02/2020

## ABSTRACT

This paper presents a novel method for designing a state observer of a class of nonlinear Glucose-Insulin (GI) systems with two time delays. Based on the positivity of its solutions, we suggested a new state transformation to transform the model into a new observable form. In this new form, the time delays in the system description appear in the input and out put vectors, but not in the state vector. As a result, a state observer can be easily designed. Simulation results are given to illustrate the effectiveness of the suggested method.

**Keywords:** State observers, state transformations, time-delay systems.

## 1. INTRODUCTION

Diabetes is a world-wide epidemic. In the treatment of diabetes, it is essential to monitor glucose and insulin levels in diabetic patients so that appropriate treatment such as insulin injections can be implemented to maintain satisfactory blood glucose levels. Blood glucose levels can be readily measured by using a glucose-oxidase-based amperometric sensor. The sensor utilizes glucose in interstitial fluid under the skin to indirectly reflect the blood sugar level. Whereas, insulin measurements are slower, harder to obtain and less accurate than glucose measurements. Thus, model-based state observers have been proposed in order to estimate insulin levels.<sup>1-2</sup> The contribution of this paper is in the design of a novel state observer to estimate insulin levels in diabetic patients.

In this paper, we consider a general nonlinear time-delay GI model of the following form

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(x(t), x(t - \tau)) + Bu(t) \\ &\quad + g(y(t), y(t - \tau_g)), t \geq 0, \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} x(\theta) &= \phi(\theta), \theta \in [-\tau_{\max}, 0], \\ \tau_{\max} &= \max\{\tau, \tau_g\}, \end{aligned} \tag{2}$$

$$y(t) = Cx(t) = x_1(t), \tag{3}$$

where  $x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{bmatrix}$  is the state vector,  $x_1(t)$

and  $x_2(t)$  are the blood glucose and insulin levels, respectively,  $x_3(t)$  and  $x_4(t)$  are the insulin mass in the accessible and not-accessible subcutaneous depot, respectively. The control input  $u(t)$  is the subcutaneous insulin delivery rate while the output variable is defined as the measured glucose levels,  $x_1(t)$ . In (1)-(3),

$$f(x(t), x(t - \tau)) = \begin{bmatrix} -a_1x_1(t)x_2(t - \tau) \\ -a_2x_2(t) + a_3x_4(t) \\ -a_4x_3(t) \\ a_5x_3(t) - a_6x_4(t) \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ a_7 \\ 0 \end{bmatrix}, C = [1 \ 0 \ 0 \ 0], a_i \ (i = 1, 2, \dots, 7) \text{ are positive parameters, } \phi(\theta) =$$

\*Corresponding author:

Email: dinhconghuong@qnu.edu.vn

$\begin{bmatrix} \phi_1(\theta) & \phi_2(\theta) & \phi_3(\theta) & \phi_4(\theta) \end{bmatrix}^T$  is a continuous initial function,  $\phi_i(\theta)$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) are positive functions,  $\phi_i(t) > 0$ , and

$$g(y(t), y(t - \tau_g)) = \begin{bmatrix} g_1(y(t), y(t - \tau_g)) \\ g_2(y(t), y(t - \tau_g)) \\ g_3(y(t), y(t - \tau_g)) \\ g_4(y(t), y(t - \tau_g)) \end{bmatrix}$$

is a function depending on the output  $y(t)$  and  $y(t - \tau_g)$  with  $g_1(y(t), y(t - \tau_g)) > 0$  for all  $t \geq 0$ . In our model,  $\tau > 0$  and  $\tau_g > 0$  are known constant time delays. As defined in<sup>3</sup>,  $\tau_g$  is the apparent delay with which the pancreas varies secondary insulin release in response to varying plasma glucose concentrations, while  $\tau$  is the delay with which insulin acts in stimulating glucose uptake by peripheral tissues.<sup>4</sup>

Note that, when  $\tau = 0$ , and by letting  $a_1 = K_{xgi}$ ,  $a_2 = K_{xi}$ ,  $a_3 = \frac{1}{V_I t_{max, I}}$ ,  $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{1}{t_{max, I}}$ ,  $a_7 = 1$  and

$$g(y(t), y(t - \tau_g)) = \begin{bmatrix} \frac{T_{gh}}{V_G} \\ \left( \frac{x_1(t - \tau_g)}{G^*} \right)^\gamma \\ \frac{T_{iGmax}}{V_I} \frac{1}{1 + \left( \frac{x_1(t - \tau_g)}{G^*} \right)^\gamma} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

for all  $t \geq 0$ , our model (1)-(3) is reduced to the same GI model as considered in.<sup>3</sup> However, to our knowledge, a direct observer design procedure for (1)-(3) has not yet been reported in the literature as there are some difficulties in dealing with the nonlinear delayed term  $x_1(t)x_2(t - \tau)$  in the model.

Recently, the authors of the work<sup>5</sup> proposed an observer design for a nonlinear minimal dynamic model of glucose disappearance and insulin kinetics. They transformed the model into a nonlinear observer normal form and then estimated the state variables that are not directly available from the system, i.e. the remote compartment insulin utilization, the plasma insulin deviation and the infusion rate. However, the results of the work<sup>5</sup> only dealt with nonlinear

term  $x_1(t)x_2(t)$ , that is,  $\tau = 0$  in the model. So far, the results of<sup>5</sup> has not been extended to the time-delay model of the form (1)-(3). This motivates the present study.

## 2. STATE TRANSFORMATION

In this section, we present a novel procedure for designing a state observer of the nonlinear time-delay model (1)-(3). In our design procedure, we propose a two-stage process to transform (1)-(3) into a new observable form where the nonlinear term  $x_1(t)x_2(t - \tau)$  is injected into the output and input of the system. To achieve this, we first utilize the concept of diffeomorphism on the output<sup>5</sup> by defining a new output  $\bar{y}(t) = -\ln(y(t))$  for the system (1)-(3). To ensure such a diffeomorphism can take place, we show that  $x_1(t) > 0$  for all  $t \geq 0$  for the model (1)-(3) (i.e., in order for  $\ln(y(t))$  to exist, it is necessary that  $y(t) > 0, \forall t \geq 0$ ). In the second stage of the process, we introduce a novel state transformation to transform the system into a novel observable form where a state observer can be easily designed.

First, let us prove that  $x_1(t) > 0$  for all  $t \geq 0$ . Indeed, if there exists a  $t_0 > 0$  such that  $x_1(t_0) = 0$ , then according to the continuity of the solution of a differential equation,  $\dot{x}_1(t_0) \leq 0$ , which is a contradiction since we have

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t_0) &= -a_1 x_1(t_0) x_2(t_0 - \tau) \\ &\quad + g_1(y(t_0), y(t_0 - \tau_g)) \\ &= g_1(0, y(t_0 - \tau_g)) > 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Hence, we can conclude that  $x_1(t) > 0$  for all  $t \geq 0$ . With this fact, we can now utilize the concept of diffeomorphism on the output.<sup>5</sup> For this, let us divide both sides of the first equation of (1) by  $-x_1(t)$  and let a new output be defined as  $\bar{y}(t) = \xi(t) = -\ln(y(t))$ . Then (1)-(3) is equivalent to the following

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}}(t) &= A\tilde{x}(t) + A_d\tilde{x}(t - \tau) \\ &\quad + Bu(t) + \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)), \end{aligned}$$

$$t \geq 0, \tag{5}$$

$$\tilde{x}(\theta) = \tilde{\phi}(\theta), \theta \in [-\tau_{\max}, 0], \tag{6}$$

$$\bar{y}(t) = C\tilde{x}(t) = \xi(t), \tag{7}$$

where

$$\tilde{x}(t) = \begin{bmatrix} \xi(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{bmatrix},$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a_2 & 0 & a_3 \\ 0 & 0 & -a_4 & 0 \\ 0 & 0 & a_5 & -a_6 \end{bmatrix},$$

$$A_d = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\tilde{\phi}(\theta) = \begin{bmatrix} -\ln(\phi_1(\theta)) \\ \phi_2(\theta) \\ \phi_3(\theta) \\ \phi_4(\theta) \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned} \mu(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) &= \\ &= \begin{bmatrix} -g_1(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g))e^{\bar{y}(t)} \\ g_2(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\ g_3(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\ g_4(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

As we know, in many practical applications, the states of the considered systems are not easily obtained due to technical or economic reasons. In this case, the estimation of actual states and output feedback control law are very necessary. Therefore, the problem of designing state observers for dynamical systems has attracted considerable attention in the literature (see, for example,<sup>6-8</sup>). On the other hand, since time delay is often encountered in many practical control systems<sup>9</sup>, the problem of designing a state observer to estimate the state vector of a time-delay system is an important research topic and it has received considerable research attention in the literature. In particular, state

observers have important applications in realisation of state-feedback control, system supervision, fault diagnosis of dynamic processes, and general control and diagnosis issues from available information.<sup>10-12,13</sup>

From (5)-(7), we can proceed to design a state observer to estimate the unknown state vector,  $\tilde{x}(t)$ . In the literature, there are well-known state observer design methods<sup>6-8,14</sup> for various time-delay systems of the type (5)-(7). These methods aim at designing an asymptotic state observer,  $\hat{\tilde{x}}(t)$ , such that it converges with any prescribed convergence rate to  $\tilde{x}(t)$ , i.e.,  $\hat{\tilde{x}}(t) \rightarrow \tilde{x}(t)$ . However, based on these methods<sup>6-8,14</sup>, it is not possible to design a satisfactory state observer for the system (5)-(7). This is due to the fact that the matrix pair  $(A, C)$  is not observable<sup>14</sup> as well as there are some fixed poles in the observer error dynamics.<sup>6-8</sup> These stable fixed poles are very close to zeros and thus resulted in a very slow convergent rate for the designed state observers. Recognizing this difficulty, in this paper, we present a new type of state observer, and referred to it as a "delayed" state observer. In this regard, the designed state observer will be able to estimate a delayed version of the state vector instead of the instantaneous state vector, which is impossible based on existing observer design methods.<sup>6-8,14</sup>

Accordingly, in the following, we consider the general form of system (5)-(7), where  $\tilde{x} = \begin{bmatrix} \xi(t) & \tilde{x}_2(t) & \dots & \tilde{x}_n(t) \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^n$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $A_d \in \mathbb{R}^{n \times n}$  and  $C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$ . We will present a new state transformation which transforms the considered system into an observable form where the time-delay term  $A_d\tilde{x}(t-\tau)$  will be injected into the input and output of the transformed system. This will then allow a delayed state observer to be easily designed.

For  $m, n \in \mathbb{N}$ ,  $n > 1$  and an arbitrary matrix  $M \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ ,  $M^T$  denotes the transpose of  $M$ ,  $0_{m,n}$  denotes the  $m \times n$  zero matrix,  $M = \begin{bmatrix} [M]_L & [M]_R \end{bmatrix}$ , where  $[M]_L \in \mathbb{R}$  and



$[M]_R \in \mathbb{R}^{1 \times (n-1)}$  are sub-matrices of  $M$ .

We define a new change of coordinates as follows

$$z(t) = \begin{bmatrix} z_1(t) \\ \vdots \\ z_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_1 & N_1 \\ \vdots & \vdots \\ M_n & N_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}(t) \\ \tilde{x}(t - \tau) \end{bmatrix}, \tag{8}$$

where matrices  $M_i, N_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) are generated by the following algorithm

$$M_1 = C, \quad N_1 = 0, \tag{9}$$

$$M_{i+1} = M_i A - \alpha_i M_i, \tag{10}$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1,$$

$$N_{i+1} = M_i A_d + N_i A - \beta_i M_i, \tag{11}$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1,$$

where  $\alpha_i$  and  $\beta_i$  are scalars to be determined later.

**Theorem 1.** For some scalars  $\gamma_i$  ( $i = 2, 3, \dots, n$ ),  $\alpha_j$  and  $\beta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n - 1$ ), if the following equations hold

$$[N_i A_d]_R = 0, \quad i = 2, \dots, n, \tag{12}$$

$$[M_n A - \sum_{i=2}^n \gamma_i M_i]_R = 0, \tag{13}$$

$$[M_n A_d + N_n A - \sum_{i=2}^n \gamma_i N_i]_R = 0, \tag{14}$$

then the change of coordinate (8) transforms the system (5)-(7) into the following form

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= \bar{A}z(t) + \bar{B}u(t) + \bar{B}_1 u(t - \tau) \\ &+ \Gamma \bar{y}(t) + \Gamma_1 \bar{y}(t - \tau) \\ &+ \Gamma_2 \bar{y}(t - 2\tau) \\ &+ \Gamma_3 \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\ &+ \Gamma_4 \bar{\mu}(\bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)), \quad t \geq \tau, \end{aligned} \tag{15}$$

$$\bar{y}(t) = \bar{C}z(t), \tag{16}$$

where

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & \gamma_2 & \gamma_3 & \dots & \gamma_n \end{bmatrix},$$

$$\bar{B} = \begin{bmatrix} M_1 B \\ M_2 B \\ \vdots \\ M_{n-1} B \\ M_n B \end{bmatrix}, \quad \bar{C}^T = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\bar{B}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ N_2 B \\ \vdots \\ N_{n-1} B \\ N_n B \end{bmatrix}, \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \\ \Gamma(n, 1) \end{bmatrix},$$

$$\Gamma(n, 1) = \left[ M_n A - \sum_{j=2}^n \gamma_j M_j \right]_L,$$

$$\Gamma_1 = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_{n-1} \\ \Gamma_1(n, 1) \end{bmatrix}, \quad \Gamma_1(n, 1) =$$

$$\left[ M_n A_d + N_n A - \sum_{j=2}^n \gamma_j N_j \right]_L,$$

$$\Gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ [N_2 A_d]_L \\ \vdots \\ [N_{n-1} A_d]_L \\ [N_n A_d]_L \end{bmatrix},$$

$$\Gamma_3 = \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix}, \quad \Gamma_4 = \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ \vdots \\ N_{n-1} \\ N_n \end{bmatrix}.$$

**Proof:** For  $i = 1, 2, \dots, n - 1$ , by taking the derivatives of (8) and using (10)-(12), we obtain

$$\dot{z}_i(t) = \begin{bmatrix} M_i & N_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\tilde{x}}(t) \\ \dot{\tilde{x}}(t - \tau) \end{bmatrix}^T$$

$$\begin{aligned}
 &= M_i A \tilde{x}(t) + (M_i A_d + N_i A) \tilde{x}(t - \tau) \\
 &\quad + M_i B u(t) + N_i B u(t - \tau) \\
 &\quad + [N_i A_d]_L \bar{y}(t - 2\tau) + M_i \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\
 &\quad + N_i \bar{\mu}(\bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)) \\
 &= z_{i+1}(t) + M_i B u(t) + N_i B u(t - \tau) \\
 &\quad + \alpha_i \bar{y}(t) + \beta_i \bar{y}(t - \tau) + [N_i A_d]_L \bar{y}(t - 2\tau) \\
 &\quad + M_i \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\
 &\quad + N_i \bar{\mu}(\bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)). \tag{17}
 \end{aligned}$$

Next, for  $i = n$  and from (13)-(14), we have

$$\begin{aligned}
 \dot{z}_n(t) &= M_n A \tilde{x}(t) + (M_n A_d + N_n A) \tilde{x}(t - \tau) \\
 &\quad + M_n B u(t) + N_n B u(t - \tau) \\
 &\quad + [N_n A_d]_L \bar{y}(t - 2\tau) \\
 &\quad + M_n \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\
 &\quad + N_n \bar{\mu}(\bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)) \\
 &= \sum_{i=2}^n \gamma_i z_i(t) + M_n B u(t) + N_n B u(t - \tau) \\
 &\quad + [N_n A_d]_L \bar{y}(t - 2\tau) \\
 &\quad + [M_n A - \sum_{j=2}^n \gamma_j M_j]_L \bar{y}(t) \\
 &\quad + [M_n A_d + N_n A - \sum_{j=2}^n \gamma_j N_j]_L \bar{y}(t - \tau) \\
 &\quad + M_n \bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau_g)) \\
 &\quad + N_n \bar{\mu}(\bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)). \tag{18}
 \end{aligned}$$

Finally, note that  $N_1 = 0$ , therefore (17) and (18) can now be expressed in the form (15)-(16). This completes the proof of Theorem 1.

**Remark 1.** In the Appendix, we provide an algorithm (Algorithm 1) which allows us to solve for the unknowns  $\gamma_i$  ( $i = 2, 3, \dots, n$ ),  $\alpha_j$  and  $\beta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n - 1$ ) as defined in Theorem 1.

**Remark 2.** Once, a transformed system as described by (15)-(16) has been obtained, we can easily apply any Luenberger-typed state observers design method (see, for example,<sup>8</sup>) to design a state observer to estimate  $z(t)$  since the matrix pair  $(\bar{A}, \bar{C})$  is now observable. After a satisfactory state observer  $z(t)$  has been designed, we can use the method of backward state transformations reported in.<sup>12,13</sup>

### 3. APPLICATION TO THE GI MODEL

#### 3.1. State transformation

In this section, we will apply the results obtained in the previous section to the GI model (5)-(7). By following the steps (Step 1-Step 4) of Algorithm 1, we obtain

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, N_1 = 0_{1,4}, \\
 M_2 &= 0_{1,4}, N_2 = \begin{bmatrix} 0 & a_1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\
 M_3 &= 0_{1,4}, N_3 = \begin{bmatrix} 0 & -a_1 a_2 & 0 & a_1 a_3 \end{bmatrix}, \\
 M_4 &= \begin{bmatrix} \frac{a_2 a_4 a_6}{2} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\
 N_4 &= \begin{bmatrix} 0 & a_1 a_2^2 & a_1 a_3 a_5 & -a_1 a_3 (a_2 + a_4) \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Hence, we obtain the following state transformations

$$\begin{aligned}
 z_1(t) &= \xi(t), \\
 z_2(t) &= a_1 x_2(t - \tau), \\
 z_3(t) &= -a_1 a_2 x_2(t - \tau) + a_1 a_3 x_4(t - \tau), \\
 z_4(t) &= \frac{a_2 a_4 a_6}{2} \xi(t) + a_1 a_2^2 x_2(t - \tau) \\
 &\quad + a_1 a_3 a_5 x_3(t - \tau) \\
 &\quad - a_1 a_3 (a_2 + a_6) x_4(t - \tau)
 \end{aligned}$$

and a transformed system of the forms (15)-(16) is obtained, where

$$\begin{aligned}
 \bar{A} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{bmatrix}, \bar{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ a_1 a_3 a_5 \end{bmatrix}, \\
 \bar{C} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \gamma_1 = -\frac{a_2 a_4 a_6}{2}, \\
 \gamma_2 &= -(a_2 a_6 + a_2 a_4 + a_4 a_6), \\
 \gamma_3 &= -(a_2 + a_4 + a_6), \\
 \bar{B}_1 &= 0_{4,1}, \Gamma = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{a_2 a_4 a_6}{2} \\ \frac{a_2 a_4 a_6 (a_2 + a_4 + a_6)}{2} \end{bmatrix}, \\
 \Gamma_3 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{a_2 a_4 a_6}{2} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \Gamma_1 = 0_{4,1},
 \end{aligned}$$

$$\Gamma_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 \\ 0 & -a_1 a_2 & 0 & a_1 a_3 \\ 0 & a_1 a_2^2 & a_1 a_3 a_5 & -a_1 a_3 (a_2 + a_6) \end{bmatrix}.$$

### 3.2. Observer design

Since the matrix pair  $(\bar{A}, \bar{C})$  is observable, it is easy to design a state observer to estimate any linear function of the state vector  $z(t)$ . Let

$$h(t) = \begin{bmatrix} h_1(t) \\ h_2(t) \\ h_3(t) \end{bmatrix} = Fz(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} z(t)$$

be a vector that is required to be estimated. To reconstruct the state function,  $h(t)$ , we consider a functional observer of order 3 as follows:

$$\begin{aligned} \hat{h}(t) &= \omega(t) + E\bar{y}(t), \\ \dot{\omega}(t) &= N\omega(t) + J\bar{y}(t) + Hu(t - \tau) \\ &\quad + L\bar{\mu}(\bar{y}(t), \bar{y}(t - \tau), \bar{y}(t - \tau - \tau_g)), \\ &\quad t \geq \tau_{\max}, \end{aligned} \tag{19}$$

where  $\omega(t) \in \mathbb{R}^3$ ,  $\hat{h}(t) \in \mathbb{R}^3$  is the estimate of  $h(t)$ ,  $E, N, J, H$  and  $L$  are observer parameters to be determined. Let us define the following error vectors  $\epsilon(t)$  and  $e(t)$  as

$$\epsilon(t) = \omega(t) - Lz(t), \tag{21}$$

$$e(t) = \hat{h}(t) - Fz(t). \tag{22}$$

Based on<sup>8</sup>,  $\hat{h}(t)$  converges asymptotically to  $Fz(t)$  if the following conditions are satisfied

$$N \text{ is Hurwitz,} \tag{23}$$

$$NL + J\bar{C} - L\bar{A} = 0, \tag{24}$$

$$H - L\bar{B} = 0, \tag{25}$$

$$F - E\bar{C} - L = 0. \tag{26}$$

Accordingly, for the given matrices  $\bar{A}$ ,  $\bar{C}$ , and  $\bar{B}$  as above, we can easily solve (23)-(26) to obtain the following matrices:  $N = \bar{A}_{22} + L_1\bar{A}_{12}$ ,  $L_1$  is chosen such that  $N$  is Hurwitz,  $E = -L_1$ ,  $J = -NL_1$ ,  $H = L\bar{B}$ , where  $L = \begin{bmatrix} L_1 & L_2 \end{bmatrix}$ ,

$$\bar{A}_{12} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \bar{A}_{22} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{bmatrix} \text{ and}$$

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Note that the matrix pair  $(\bar{A}_{22}, \bar{A}_{12})$  is observable and thus  $L_1$  can be easily found to ensure that  $N$  is stable with any prescribed eigenvalues.

Upon  $\hat{h}(t)$  has been obtained, then based the method of backward state transformations (Case 2) reported in<sup>13</sup>, we obtain

$$\hat{x}_2(t - \tau) = \frac{1}{a_1} \hat{h}_1(t), \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \hat{x}_3(t - \tau) &= \frac{1}{a_1 a_3 a_5} [a_2 a_6 \hat{h}_1(t) + (a_2 + a_6) \hat{h}_2(t) \\ &\quad + \hat{h}_3(t) - \frac{a_2 a_4 a_6}{2} \bar{y}(t)], \end{aligned} \tag{28}$$

$$\hat{x}_4(t - \tau) = \frac{1}{a_1 a_3} [a_2 \hat{h}_1(t) + \hat{h}_2(t)]. \tag{29}$$

### 3.3. Simulation results

In order to obtain simulation results, we consider the nonlinear time-delay GI model (1)-(3) with a set of parameters, the initial conditions and the input  $u(t)$  are as follows:  $a_1 = 3.11 \times 10^{-5}$ ,  $a_2 = 1.211 \times 10^{-2}$ ,  $a_3 = \frac{1}{0.25 \times 55}$ ,  $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{1}{55}$ ,  $a_7 = 1$ ,  $\tau = 3$  min,  $g(y(t), y(t - \tau_g)) = \begin{bmatrix} \frac{3}{187} & \frac{1.573}{0.25} \frac{\left(\frac{x_1(t - \tau_g)}{9}\right)^{3.205}}{1 + \left(\frac{x_1(t - \tau_g)}{9}\right)^{3.205}} & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$ ,

$\tau_g = 4$  min,  $x_1(\theta) = 10.66$ ,  $x_2(\theta) = 49.29$ ,  $x_3(\theta) = 0$ ,  $x_4(\theta) = 0$  for all  $\theta \in [-4, 0]$ ,  $\omega_1(\zeta) = 20e^{-0.07t}$ ,  $\omega_2(\zeta) = 2e^{-t}$ ,  $\omega_3(\zeta) = 5e^{-t}$  for all  $t \geq 0$ ,  $\zeta \in [-8, 0]$  and

$$u(t) = \begin{cases} \sin t + 50, & 0 \leq t \leq 100, \\ \sin t + 3, & 100 < t \leq 180. \end{cases}$$

Let us now apply the reduced-order state observer (19)-(20) for this example. The eigenvalues of matrix  $N$  are chosen as, say,  $\lambda_1 = -0.05$ ,  $\lambda_2 = -0.07$ ,  $\lambda_3 = -0.08$ , hence we obtain  $L =$

$$\begin{bmatrix} -0.1515 & 1 & 0 & 0 \\ -0.0050 & 0 & 1 & 0 \\ 0.0001 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, J = \begin{bmatrix} 0.0180 \\ -0.0008 \\ 0 \end{bmatrix}, E =$$

$$\begin{bmatrix} 0.1515 \\ 0.0050 \\ -0.0001 \end{bmatrix} \text{ and } H = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.4112 \times 10^{-5} \end{bmatrix}.$$

Figure 1 shows the responses of  $x_2(t)$  and its delayed-estimation, i.e.,  $\hat{x}_2(t-3)$ , while, Figure 2 shows the responses of  $x_2(t-3)$  and its estimation, i.e.,  $\hat{x}_2(t-3)$ . It is clear from Figure 2 that the designed observer able to track the delayed version of the state vector, as expected.

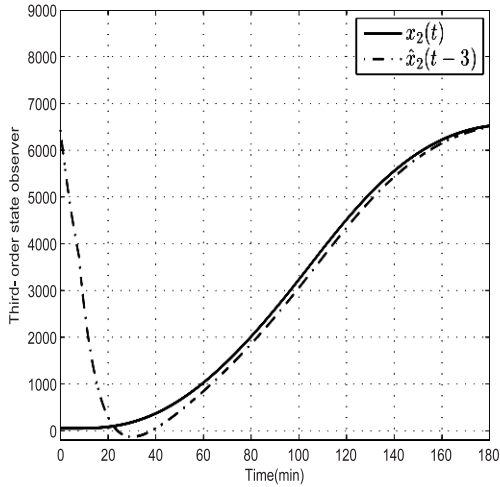


Figure 1. Responses of  $x_2(t)$  and  $\hat{x}_2(t-3)$

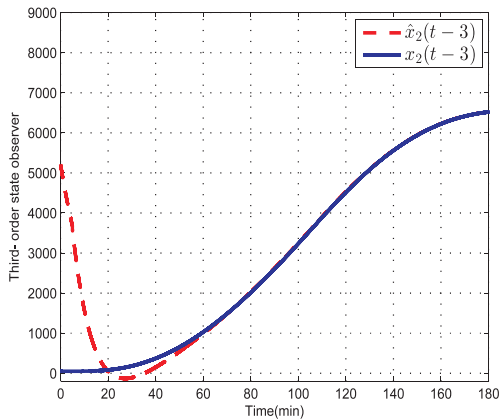


Figure 2. Responses of  $\hat{x}_2(t-3)$  and  $x_2(t-3)$

#### 4. CONCLUSION

In this paper, we have presented a novel procedure for designing a state observer of a general nonlinear time-delay GI model. The reported result is significant as the two-stage design process transforms a nonlinear time-delay model into a new observable form which allows a third-order

delayed state observer to be easily designed. Simulation results have been given to illustrate the effectiveness of our results.

#### Appendix: An algorithm for solving unknown parameters according to Theorem 1.

In the following development, we will provide a procedure for solving the unknowns  $\gamma_i$  ( $i = 2, 3, \dots, n$ ),  $\alpha_j$  and  $\beta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n-1$ ) as defined in Theorem 1. Let us denote the following recursive matrices

$$\begin{aligned} X_1^i &= [M_1 A^i]_R, \quad \bar{X}_1^i = [M_1 A^{i-1} A_d]_R, \quad (30) \\ Y_1^i &= \left[ \sum_{j=1}^i M_1 A^{j-1} A_d A^{i-j} A_d \right]_R, \\ \bar{Y}_1^i &= \left[ \sum_{j=1}^{i+1} M_1 A^{j-1} A_d A^{i+1-j} \right]_R, \quad (31) \end{aligned}$$

for  $i = 1, 2, \dots, n-1$ .

First, we consider (12) and by using (30)-(31), we obtain the following recursive equations

$$\begin{cases} \beta_1 \bar{X}_1^1 = Y_1^1, \\ \alpha_1 Y_1^1 + \beta_1 \bar{X}_1^2 + \beta_2 \bar{X}_1^1 = Y_1^2, \\ \alpha_1 Y_1^2 + \alpha_2 Y_1^1 + \beta_1 \bar{X}_1^3 + \beta_2 \bar{X}_1^2 + \beta_3 \bar{X}_1^1 = Y_1^3, \\ \vdots \\ \alpha_1 Y_1^{n-2} + \alpha_2 Y_1^{n-3} + \dots + \alpha_{n-2} Y_1^1 + \beta_1 \bar{X}_1^{n-1} \\ + \beta_2 \bar{X}_1^{n-2} + \dots + \beta_{n-1} \bar{X}_1^1 = Y_1^{n-1}. \end{cases} \quad (32)$$

Equation (32) can be expressed in the following compact form

$$\chi_n X_n = Y_n, \quad (33)$$

where

$$\begin{aligned} \chi_n &= \begin{bmatrix} \chi_n^1 & \chi_n^2 \end{bmatrix}, \\ X_n &= \begin{bmatrix} X_n^1 \\ X_n^2 \end{bmatrix}, \quad Y_n = \begin{bmatrix} Y_1^1 & Y_1^2 & \dots & Y_1^{n-1} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

with  $\chi_n^1, \chi_n^2, X_n^1$  and  $X_n^2$  are as defined below

$$\chi_n^1 = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \dots & \beta_{n-1} \end{bmatrix},$$

$$X_n^1 = \begin{bmatrix} \bar{X}_1^1 & \bar{X}_1^2 & \bar{X}_1^3 & \dots & \bar{X}_1^{n-1} \\ 0_{1,n-1} & \bar{X}_1^1 & \bar{X}_1^2 & \dots & \bar{X}_1^{n-2} \\ 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & \bar{X}_1^1 & \dots & \bar{X}_1^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & \dots & \bar{X}_1^1 \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} & -\beta_1 X_1^{n-1} - \beta_2 X_1^{n-2} - \dots \\ & -\beta_{n-1} X_1^1, \end{aligned} \quad (40)$$

$$\chi_n^2 = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_{n-2} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} Z_n^1(k, n-1) &= X_1^{k-1} - \alpha_1 X_1^{k-2} - \dots - \alpha_{k-2} X_1^1, \\ Z_n^2(k, n-1) &= \bar{Y}_1^{k-2} - \alpha_1 \bar{Y}_1^{k-3} - \dots \\ & -\alpha_{k-3} \bar{Y}_1^1 - \alpha_{k-2} \bar{X}_1^1 \\ & -\beta_1 X_1^{k-2} - \beta_2 X_1^{k-3} \\ & - \dots - \beta_{k-2} X_1^1. \end{aligned} \quad (41)$$

$$X_n^2 = \begin{bmatrix} 0_{1,n-1} & Y_1^1 & Y_1^2 & \dots & Y_1^{n-2} \\ 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & Y_1^1 & \dots & Y_1^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & 0_{1,n-1} & \dots & Y_1^1 \end{bmatrix}. \quad (42)$$

From (33), a solution for  $\chi_n$  exists if and only if

$$\text{rank} \begin{bmatrix} X_n \\ Y_n \end{bmatrix} = \text{rank} \begin{bmatrix} X_n \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Next, to determine the remaining unknowns  $\alpha_{n-1}$  and  $\gamma_j$  ( $j = 2, 3, \dots, n$ ), let us look at the solvability of equations (13)-(14). Substituting (10) - (11) into (13) - (14), using (30) - (31) and after some rearranging, we obtain the following equation expressed in a compact vector-matrix form

$$\zeta_n Z_n = T_n, \quad (35)$$

where

$$\zeta_n = \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} & \gamma_2 & \gamma_3 & \gamma_4 & \dots & \gamma_n \end{bmatrix}, \quad (36)$$

$$Z_n = \begin{bmatrix} X_1^1 & \bar{X}_1^1 \\ X_1^1 & \bar{X}_1^1 \\ Z_n^1(3, n-1) & Z_n^2(3, n-1) \\ \vdots & \vdots \\ Z_n^1(n, n-1) & Z_n^2(n, n-1) \end{bmatrix}, \quad (37)$$

$$T_n = \begin{bmatrix} T_n^1 & T_n^2 \end{bmatrix}. \quad (38)$$

In (37)-(38),  $T_n^1, T_n^2, Z_n^1(k, n-1)$  and  $Z_n^2(k, n-1)$  ( $k = 3, 4, \dots, n$ ) are defined as follows

$$T_n^1 = X_1^n - \alpha_1 X_1^{n-1} - \dots - \alpha_{n-2} X_1^2, \quad (39)$$

$$T_n^2 = \bar{Y}_1^{n-1} - \alpha_1 \bar{Y}_1^{n-2} - \dots - \alpha_{n-2} \bar{Y}_1^1$$

It is clear from (39)-(42),  $Z_n$  and  $T_n$  are two known constant matrices since  $\beta_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n-1$ ) and  $\alpha_\ell$  ( $\ell = 1, 2, \dots, n-2$ ) have already been derived from the solution to equation (33). From (35), a solution for  $\zeta_n$  always exists if and only if

$$\text{rank} \begin{bmatrix} Z_n \\ T_n \end{bmatrix} = \text{rank} \begin{bmatrix} Z_n \end{bmatrix}. \quad (43)$$

Accordingly, we present an effective algorithm to transform a general  $n$ -order time-delay system ( $n \geq 3$ ) with single output into the observable form (15)-(16).

**Algorithm 1**

*Step 1:* Obtain matrices  $X_n$  and  $Y_n$  according to (33). Check if condition (34) is satisfied or not. If so, obtain  $\chi_n$  where  $\chi_n = Y_n X_n^+$ , where  $X_n^+$  denotes the Moore-Penrose inverse of  $X_n$ .

*Step 2:* Substitute  $\beta_k$  ( $k = 1, 2, \dots, n-1$ ) and  $\alpha_\ell, \alpha_\ell$  ( $\ell = 1, 2, \dots, n-2$ ) into (37)-(38) and obtain  $Z_n$  and  $T_n$ . Check if condition (35) is satisfied or not. If so, obtain  $\zeta_n = T_n Z_n^+$ , where  $Z_n^+$  denotes the Moore-Penrose inverse of  $Z_n$ .

*Step 3:* From (9)-(11), obtain matrices  $M_i$  and  $N_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) and hence the state transformation (8). Finally, obtain a transformed system according to (15)-(16).

## REFERENCES

1. A. Germani, P. Pepe. A state observer for a class of nonlinear systems with multiple discrete and distributed time delays, *European Journal of Control*, **2005**, *11*, 196-205.
2. P. Palumbo, P. Pepe, P. Panunzi, A. De Gaetano. Time-delay model-based control of the glucose -insulin system, by means of a state observer, *European Journal of Control*, **2012**, *6*, 591-606.
3. P. Palumbo, P. Pepe, S. Panunzi, A. De Gaetano. *Glucose control by subcutaneous insulin administration: a DDE modelling approach*, In: Proceedings the 18<sup>th</sup> IFAC World Congress Milano (Italy), August 28 - September 2, 1471-1476, 2011.
4. P. Palumbo, S. Panunzi, A. De Gaetano. Qualitative behavior of a family of delay differential models of the glucose insulin system, *Discrete and Continuous Dynamical Systems-series B*, **2007**, *7*, 399-424.
5. D. Boutat, M. Darouach, H. Voos. *Observer design for a nonlinear minimal model of glucose disappearance and insulin kinetics*, In: Proceedings of the 7<sup>th</sup> international conference on Bio-inspired Systems and signal processing BIOSIGNALS, Angers, France, 3-6 March, 21-26, 2014.
6. M. Hou, P.C. Muller. Design of observers for linear systems with unknown inputs, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **1992**, *37*, 871-875.
7. M. Darouach, M. Zasadzinski, S.J. Xu. Full-order observers for linear systems with unknown inputs, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **1994**, *39*, 606-609.
8. H. Trinh, T. Fernando. *Functional Observers for Dynamical Systems*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2012.
9. K. Gu, V.L. Kharitonov, J. Chen. *Stability of time-delay systems*, Birkhäuser Boston, 2003.
10. P.T. Nam, P.N. Pathirana, H. Trinh.  $\epsilon$ -bounded state estimation for time-delay systems with bounded disturbances, *Int. J. Control*, **2014**, *87*, 1747-1756.
11. D.C. Huong, H. Trinh, H.M. Tran, T. Fernando. Approach to fault detection of time-delay systems using functional observers, *Electronics Letters*, **2014**, *50*, 1132-1134.
12. D.C. Huong, H. Trinh. Method for computing state transformations of time-delay systems, *IET Control Theory & Applications*, **2015**, *9*, 2405-2413.
13. D.C. Huong, H. Trinh. New state transformations of time-delay systems with multiple delays and their applications to state observer design, *Journal of the Franklin Institute*, **2016**, *353*, 3487-3523.
14. M. Hou, P. Zitek, R.J. Patton. An observer design for linear time-delay systems, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **2002**, *47*, 121-125.

## Nghiệm liouvillian hữu tỷ của phương trình vi phân đại số cấp một giống không

Nguyễn Trí Đạt<sup>1,\*</sup>, Ngô Lâm Xuân Châu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Khoa Cơ bản, Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

<sup>2</sup>Khoa Toán và Thống kê, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

Ngày nhận bài: 22/11/2019; Ngày nhận đăng: 22/12/2019

### TÓM TẮT

Chúng tôi đưa ra một điều kiện cần và đủ để phương trình vi phân đại số cấp một, hệ số hằng  $f(y, y') = 0$  có nghiệm liouvillian hữu tỷ, trong đó  $f(X, Y) = 0$  là một đường cong đại số hữu tỷ (giống không) trên trường số phức  $C$ . Bài viết được xây dựng trên ba ý chính: mỗi đường cong đại số hữu tỷ luôn có phép tham số riêng, một cặp  $(X(t), X'(t))$  luôn là tham số riêng của một đường cong đại số hữu tỷ nào đó, và điều kiện để phương trình vi phân cấp một  $y' = f(y)$  có nghiệm liouvillian trên  $C$ .

**Từ khóa:** Nghiệm liouvillian, phép tham số hóa, đường cong hữu tỷ, phương trình vi phân đại số.

---

\*Tác giả liên hệ chính:

Email: tridat.nguyen@ut.edu.vn

# Rational liouvillian solution of algebraic ordinary differential equations of order one in genus zero

Nguyen Tri Dat<sup>1,\*</sup>, Ngo Lam Xuan Chau<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Basic Sciences, Ho Chi Minh City University of Transport, Vietnam

<sup>2</sup>Faculty of Mathematics and Statistics, Quy Nhon University, Vietnam

Received: 22/11/2019; Accepted: 22/12/2019

## ABSTRACT

We study a necessary and sufficient condition for having a rational liouvillian solution of the autonomous algebraic ordinary differential equation  $f(y, y') = 0$ , where  $f(X, Y) = 0$  defines a rational algebraic curve (genus zero) over complex field  $\mathbb{C}$ . This article based on three ideas: every rational algebraic curve has proper parametrization, pair  $(X(t), X'(t))$  is a proper parametrization of a certain algebraic curve, and the condition of differential equation of order one  $y' = f(y)$  has liouvillian solution over  $\mathbb{C}$ .

**Keywords:** Liouvillian solution, parametrization, rational algebraic curve, algebraic differential equation.

## 1. INTRODUCTION

Let  $\mathbb{C}$  be an algebraically closed field of characteristic zero and view  $\mathbb{C}$  as a differential field with the trivial derivation  $c' = 0$  for all  $c \in \mathbb{C}$ . Let

$$C(X) = \left\{ \frac{P(X)}{Q(X)}, P(X), Q(X) \in \mathbb{C}[X], Q(X) \neq 0 \right\}$$

be a field of rational functions in one variable  $X$ . We are interested in the non-constant liouvillian solutions of the following differential equation of order one given by  $f(y, y') = 0$ , where  $f(X, Y) = 0$  is a rational algebraic curve.

Combining some results of parametrization of algebraic curve of genus zero, and a result of necessary and sufficient condition for the explicit differential equation,<sup>1</sup>  $y' = R(y)$  with  $R(y) \in \mathbb{C}(y)$  has a non-constant solution  $y$  which is liouvillian over  $\mathbb{C}$ , we show a result of necessary and sufficient condition for the implicit differential equation  $f(y, y') = 0$  having a non-constant rational liouvillian over  $\mathbb{C}$  through parametrization.

## 2. PRELIMINARIES

### 2.1. Definitions

A derivation of the field  $k$ , denote by  $'$  is an additive endomorphism of  $k$  that satisfies the Leibniz law  $(xy)' = x'y + xy'$  for every  $x, y$  in  $k$ . A field equipped with a derivation map is called a *differential field*.

Let  $E$  be a differential field extension of  $k$  and let  $'$  denote the derivation on  $E$ . We say that  $E$  is a *liouvillian extension* of  $k$  if  $E = k(t_1, t_2, \dots, t_n)$  and there is a tower of differential field  $k = k_0 \leq k_1 \leq \dots \leq k_n = E$  such that for each  $i$ ,  $k_i = k_{i-1}(t_i)$  and either  $t_i' \in k_{i-1}$  or  $t_i'/t_i \in k_{i-1}$  or  $t_i$  is algebraic over  $k_{i-1}$ . A solution of a differential equation over  $k$  is said to be liouvillian over  $k$  if the solution belongs to some liouvillian extension of  $k$ . Whenever we write  $k \leq E$  as differential field, we mean that  $E$  is a differential field extension of  $k$  and we write  $y \in E - k$  to mean that  $y \in E$  and  $y$  is not in  $k$ .

Let  $f(X, Y) \in \mathbb{C}(X, Y)$  be an irreducible polynomial in two variables over the algebraically closed field  $\mathbb{C}$ . The set  $L = \{(a, b) \in \mathbb{C}^2 \setminus f(a, b) = 0\}$  defines an *algebraic curve* over  $\mathbb{C}$ .

\*Corresponding author.

Email: dtridat.nguyen@ut.edu.vn



A *rational parametrization* of the algebraic curve  $f(X, Y) = 0$  is a pair of rational functions  $X(t), Y(t) \in \mathbb{C}(t)$  if two following conditions are satisfied:

- i) For almost all  $t_0$  the point  $(X(t_0), Y(t_0)) \in L$ .
- ii) For almost all point  $(x_0, y_0) \in L$  there exists  $t_0 \in \mathbb{C}$  such that  $(X(t_0), Y(t_0)) = (x_0, y_0)$ .

An algebraic curve  $f(X, Y) = 0$  is said to be *rational or rational algebraic curve* if it admits a rational parametrization.

A rational parametrization  $(X(t), Y(t))$  of the algebraic curve  $f(X, Y) = 0$  is said to be *proper* if for almost all point  $(x_0, y_0) \in L$ , there is a unique  $t_0 \in \mathbb{C}$  such that  $(X(t_0), Y(t_0)) = (x_0, y_0)$ .

Rational function  $X(t) \in \mathbb{C}(t)$  is called *rational liouvilian solution* of  $f(y, y') = 0$  over  $\mathbb{C}$  if three following conditions are satisfied:

- i)  $X(t)$  belongs to liouvilian extension of  $\mathbb{C}$ .
- ii)  $X(t), X'(t) \in \mathbb{C}(t)$ .
- iii)  $f(X(t), X'(t)) = 0$ .

With  $X'(t) \in \mathbb{C}(t)$ , so  $X'(t) = \frac{\partial X}{\partial t} t' \in \mathbb{C}(t)$ , and we obtain  $t' \in \mathbb{C}(t)$ . Write  $X(t) = \frac{P(t)}{Q(t)}$ ,  $P(t), Q(t) \in \mathbb{C}[t]$ , we have  $X(t)Q(t) - P(t) = 0$ . Hence  $t$  is algebraic over  $\mathbb{C}(X(t))$ . So we obtain  $t$  belongs to some liouvilian extension field of  $\mathbb{C}$ . Since  $t$  is liouvilian, the differential field  $\mathbb{C}(t)$  is contained in some liouvilian extension field of  $\mathbb{C}$ . If we say that  $X(t)$  is a *non-constant rational liouvilian solution* of differential equation  $f(y, y') = 0$  over  $\mathbb{C}$ , this means  $X'(t) \neq 0$ . So  $t' \neq 0$ , and  $t$  is obviously transcendental over  $\mathbb{C}$ . We refer the reader two books for basic theory of differential fields and rational algebraic curves.<sup>2,3</sup>

**2.2 Some results**

For the reader's convenience and for easy reference, we record some basic results

concerning liouvilian extensions and rational algebraic curves in the following these lemmas and theorems.<sup>1,3-5</sup>

**Lemma 1.** Algebraic curve  $f(X, Y) = 0$  can be parametrized if and only if it has genus zero.<sup>3</sup>

**Lemma 2.** Every rational curve can be properly parametrized.<sup>3</sup>

**Lemma 3.** Let  $(X_1(t), Y_1(t))$  be a proper parametrization of rational algebraic curve  $f(X, Y) = 0$ . Then for any proper parametrization  $(X_2(t), Y_2(t))$  of  $f(X, Y) = 0$  there exists  $R(t) = (at + b) / (ct + d) \in \mathbb{C}(t)$  such that  $(X_2(t), Y_2(t)) = (X_1(R(t)), Y_1(R(t)))$ .<sup>3</sup>

**Lemma 4.** Let  $(X_1(t), Y_1(t)), (X_2(t), Y_2(t))$  be two proper parametrizations of rational algebraic curve  $f(X, Y) = 0$ . The differential equation  $t' = \frac{Y_1(t)}{\frac{\partial X_1}{\partial t}}$  has liouvilian solution if and only if the differential equation  $t' = \frac{Y_2(t)}{\frac{\partial X_2}{\partial t}}$  has liouvilian solution.<sup>4</sup>

**Theorem 1.** If  $(X(t), X'(t))$  is a rational parametrization of algebraic curve  $f(X, Y) = 0$  then it is a proper parametrization.<sup>5</sup>

**Theorem 2.** Let  $\mathbb{C}$  be complex field and  $c' = 0$  for all  $c \in \mathbb{C}$ . If  $E$  is a liouvilian extension field of  $\mathbb{C}$  then there is an element  $z \in E - \mathbb{C}$  such that  $z' = 1$  or  $z' = az$  for some  $a \in \mathbb{C} - 0$ .<sup>1</sup>

**3. MAIN RESULT**

**Theorem 3.** Let  $f(X, Y) = 0$  be a rational algebraic curve with proper parametrization  $(X_1(t), Y_1(t))$ . The differential equation  $f(y, y') = 0$  has a non-constant rational solution  $X(t) \in \mathbb{C}(t)$  which is liouvilian over  $\mathbb{C}$  if and only if there is an element  $z \in \mathbb{C}(t)$  such that  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{\partial t}$  or  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{\partial t} / az$ ,  $a \in \mathbb{C} - 0$ .

**Proof.**

**(Necessary)** If  $y = X(t)$  is a non-constant rational liouvilian solution of differential equation  $f(y, y') = 0$ , then following Theorem 1 this means  $(X(t), X'(t))$  is a proper parametrization of algebraic curve. Following

Lemma 4, there exists a non-constant liouvillian solution of differential equation  $t' = \frac{Y_1(t)}{\frac{\partial X_1}{\partial t}}$ . So we obtain  $C(t, t')$  is contained in some liouvillian extension field of  $C$ . Following Theorem 2, there is an element  $z \in C(t) - C$  such that  $z' = 1$  or  $z' = az$ . Since  $z' = \frac{\partial z}{\partial t} t'$ , we obtain  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{\partial t}$  or  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{az}$ ,  $a \in C - 0$ .

**(Sufficient)** If there is an element  $z \in C(t)$  such that  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{\partial t}$ , then we consider differential field  $(C(x), ')$  with  $x' = a \in C - 0$ . Set  $z(t) = \frac{x}{a}$ , we obtain  $z' = 1$ , and  $t$  is algebraic over  $C(x)$ .

Since  $\frac{X_1'(t)}{Y_1(t)} = \frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} t' = \frac{\partial z}{\partial t} t' = z' = 1$ , then  $X_1'(t) = Y_1(t)$ . From  $f(X_1(t), Y_1(t)) = 0$ , it means  $f(X_1(t), X_1'(t)) = 0$ . Since  $X_1(t) \in C(t)$  and  $t$  is algebraic over  $C(x)$ , we obtain  $X_1(t)$  is a non-constant rational liouvillian solution over  $C$ .

If there is an element  $z \in C(t)$  such that  $\frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} = \frac{\partial z}{az}$ , then we consider differential field  $(C(x), ')$  with  $x' = ax \in C - 0$ . Set  $z = z(t) = x$ , we obtain  $z' = az$ , and  $t$  is algebraic over  $C(x)$ . Since  $\frac{X_1'(t)}{Y_1(t)} = \frac{\frac{\partial X_1}{\partial t}}{Y_1(t)} t' = \frac{\partial z}{az} t' = \frac{z'}{az} = 1$ , one obtain  $X_1'(t) = Y_1(t)$ . Repeating previous argument, we conclude  $y = X_1(t)$  is a non-constant rational liouvillian solution.

**4. EXAMPLES**

**Example 1.** Consider the differential equation

$$f(y, y') := -9y^2 + 30y - 12y'^2 + 36y' - 25 + y^3 = 0 \quad (1)$$

The corresponding algebraic curve

$$f(X, Y) := -9X^2 + 30X - 12Y^2 + 36Y - 25 + Y^3 = 0 \quad (2)$$

has a proper rational parametrization

$$(X(t), Y(t)) = \left( \frac{(4t-1)(164t^2-58t+5)}{3(6t-1)^3}, \frac{4t^2}{(6t-1)^2} \right).$$

We have  $\frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)} = \frac{34t^2-12t+1}{(t(6t-1))^2}$ . Set  $z = \frac{1}{3(6t-1)} - \frac{1}{t} \in C(t)$ , then  $\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)}$ . Following Theorem 3  $X(t)$  is a non-constant rational liouvillian solution of equation (1).

**Example 2.** Consider the differential equation

$$f(y, y') := -9y^2 + 36yy' - 36y^2 + 216y^3 - 432y'y^2 + 288y'^2y - 64y^3 = 0 \quad (3)$$

The corresponding algebraic curve

$$f(X, Y) := -9Y^2 + 36XY - 36X^2 + 216X^3 - 432YX^2 + 288Y^2X - 64Y^3 = 0 \quad (4)$$

has a proper rational parametrization

$$(X(t), Y(t)) = \left( \frac{9}{8} \frac{t(4t^2-4t+1)}{27t^3-54t^2+36t-8}, \frac{9}{8} \frac{(4t^2-4t+1)}{27t^3-54t^2+36t-8} \right).$$

We have

$$\frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)} = -\frac{2(3t-1)}{(2t-1)(3t-2)}. \text{ Set } z = \frac{2t-1}{(3t-2)^2} \in C(t), \text{ then } \frac{\frac{\partial z}{\partial t}}{z} = \frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)}. \text{ So } X(t) \text{ is a non-constant rational liouvillian solution of equation (3).}$$

**Example 3.** Differential equation

$$y^2 + y'^2 = 1 \quad (5)$$

has a rational liouvillian solution over  $C$ .

$$\text{Algebraic curve } X^2 + Y^2 = 1 \quad (6)$$

has proper parametrization  $(X(t), Y(t)) =$

$$\left( \frac{2t}{t^2+1}, \frac{-t^2+1}{t^2+1} \right). \text{ We have } \frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)} = \frac{2}{t^2+1}.$$

Set  $i = \sqrt{-1}$  and  $z = \frac{t-i}{t+i} \in C(t)$ , since  $\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{2i}{(i+t)^2}$ , we obtain  $\frac{\frac{\partial X}{\partial t}}{Y(t)} = \frac{\frac{\partial z}{\partial t}}{iz} = \frac{2}{t^2+1}$ . So  $X(t)$  is a non-constant rational liouvillian solution of equation (5).

**Example 4.** Differential equation

$$f(y, y') := y^5 - 3y^2y' + y^2y'^3 - y^2 = 0 \quad (7)$$

has no non-constant rational liouvillian solution.

Algebraic curve

$$f(X, Y) := Y^5 - 3X^2Y + X^2Y^3 - X^2 = 0 \quad (8)$$

has a proper parametrization

$$(X(t), Y(t)) = \left( \frac{t^5}{t^2+1}, \frac{t^2}{t^2+1} \right).$$

We have  $\frac{\partial X}{\partial t} = 2t^2 - 6 + \frac{6}{t^2+1}$ . If there

exists  $z \in C(t)$  such that  $\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial t}$ , one can

write  $z = \frac{r(t)}{s(t)}$ ,  $r(t), s(t) \in C[t]$ . Since

$\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{1}{a} \left( \frac{\partial r}{\partial t} - \frac{\partial s}{\partial t} \right)$ ,  $\deg\left(\frac{\partial r}{\partial t}\right) < \deg(r(t))$  and  $\deg\left(\frac{\partial s}{\partial t}\right) < \deg(s(t))$ . So there is not an

element  $z$  such that  $\frac{\partial z}{\partial t} = 2t^2 - 6 + \frac{6}{t^2+1}$ .

If  $\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial t}$ , one can write  $z = \frac{r(t)}{s(t)}$ , with  $r(t), s(t) \in C[t]$  and  $\gcd(r(t), s(t)) = 1$ , where  $\gcd$  is abbreviated word of “greatest

common divisor”. Then we have  $\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\frac{\partial r}{\partial t}s - r\frac{\partial s}{\partial t}}{s^2} = \frac{2t^4 - 4t^2}{t^2+1}$ . So we obtain  $s(t)$  divides  $(t^2 + 1)$ .

Rewrite  $s(t) = q(t)(t^2 + 1)^k, k \geq 1$ , with  $\gcd(t^2 + 1, q(t)) = 1$ . Then we have

$$\frac{\partial r}{\partial t} q(t) \cdot (t^2 + 1)^k - \left( \frac{\partial q}{\partial t} (t^2 + 1)^k + \right.$$

$$\left. 2t(t^2 + 1)^{k-1} q(t)r(t) \right) = (2t^4 -$$

$4t^2)q^2(t)(t^2 + 1)^{2k-1}$ . So  $q(t), r(t)$  divides  $(t^2 + 1)$ . This is a contradiction. Hence there is

not an element  $z$  such that  $\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial t}$ . Following

Theorem 3, differential equation (7) has no non-constant rational liouvillian solution.

## 5. CONCLUSION

In this article, we focus on rational liouvillian solution of differential equation  $f(y, y') = 0$ , with form  $y = X(t) \in C(t)$  and  $t' \in C(t)$ . This means  $y, y'$  belongs to some certain differential field  $C(t)$  through parametrization. In the future, we hope to develop some techniques to find condition for differential equation  $f(y, y') = 0$  having a liouvillian solution in other forms.

## REFERENCES

1. Varadharaj Ravi Srinivasan. Liouvillian solutions of first order nonlinear differential equations, *Journal of Pure and Applied Algebra*, **2017**, 221(2), 411- 421.
2. Antoine Chambert-Loir. *A field guide to algebra*, Springer, NewYork, 2000.
3. J. Rafael Sendra, Franz Winkler, Sonia Pérez-Díaz. *Rational Algebraic Curves: A Computer Algebra Approach*, Springer- Verlag, Berlin Heidelberg, 2008.
4. Ngô Lâm Xuân Châu, Lê Minh Dương and Hà Trọng Thi. Liouvillian solutions of algebraic ordinary differential equations of order one in genus zero, *Tạp chí khoa học Đại học Quy Nhơn*, **2018**, 12(3), 5-12.
5. Ruyong Feng, Xiaoshan Gao. *Rational General Solutions of Algebraic Ordinary Differential Equations*, ISSAC'04 Proceedings of the 2004 international symposium on Symbolic and algebraic computation, 2014.



## Teach and learn matrix problems with the help of maple software

Le Van Thien \*

*Kon Tum Community College, Vietnam*

*Received: 12/12/2019; Accepted: 06/02/2020*

### ABSTRACT

The objective of this paper is to introduce related instruction packages in maple math software to solve matrix problems, matrix determinants, and thereby build “program segments” to solve specific problems such as: product of matrix, total matrix, matrix power, matrix displacement, inverse matrix, matrix class, matrix determinant. Simultaneously, it also creates a “calculation window” to guide, illustrate, provide some important knowledge and solve problems with an aim to assisting students, teachers and lecturers more conveniently in getting accessed to the matrix problem. Since then, we can improve the quality of teaching and learning, and at the same time apply the achievements of information technology to support the innovation of teaching and learning methods under the current policy of the Party and the State.

**Keywords:** *Teaching and learning about mathematical operations on matrices; maple math software, instruction packages, calculation procedures.*

---

\*Corresponding author.

Email: lethienkt2010@gmail.com

# Dạy và học các bài toán về ma trận với sự hỗ trợ của phần mềm maple

Lê Văn Thiện\*

Trường Cao đẳng Cộng đồng Kon Tum, Việt Nam

Ngày nhận bài: 12/12/2019; Ngày nhận đăng: 06/02/2020

## TÓM TẮT

Mục tiêu của bài viết này là giới thiệu các gói lệnh liên quan trong phần mềm toán học maple để giải các bài toán trên ma trận, định thức ma trận và từ đó xây dựng các “đoạn chương trình” giải các bài toán cụ thể như: Tích ma trận, tổng ma trận, lũy thừa ma trận, chuyển vị ma trận, ma trận nghịch đảo, hạng ma trận, định thức ma trận. Đồng thời tạo ra “cửa sổ tính toán” để hướng dẫn, minh họa, cung cấp một số kiến thức quan trọng và giải quyết vấn đề nhằm giúp học sinh, sinh viên cũng như giảng viên thuận lợi hơn trong việc tiếp cận bài toán về ma trận. Từ đó có thể nâng cao chất lượng dạy và học, đồng thời vận dụng những thành tựu của công nghệ thông tin nhằm hỗ trợ đổi mới phương pháp dạy và học theo chủ trương của Đảng và Nhà nước hiện nay.

**Từ khóa:** Dạy và học các bài toán về ma trận; phần mềm toán học maple, các gói lệnh, thủ tục tính toán.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các bài toán về đại số tuyến tính nói chung và bài toán về ma trận nói riêng đã từ lâu được đưa vào giảng dạy ở các trường Đại học, Cao đẳng cho các khối ngành khoa học tự nhiên, kỹ thuật, kinh tế, nông lâm,... là những bài toán được xem là khô khan và khó. Thực tế khi giảng dạy môn Toán cao cấp (trong đó có các bài toán về ma trận) cho sinh viên các lớp. Tôi nhận thấy trong quá trình học tập, sinh viên gặp nhiều khó khăn để nắm bắt được các khái niệm, các định lý, các thuật toán... trong toán học. Vì vậy việc hiểu và tính toán chính xác kết quả của các bài toán như: Xác định cơ sở và chiều của không gian, tính định thức, tìm ma trận nghịch đảo, tìm hạng ma trận, giải hệ phương trình tuyến tính,... là việc làm không hề đơn giản đối với sinh viên.

Do đó, ứng dụng một phần mềm vào giảng dạy và học tập những môn học được coi là khô

khan và khó như môn Toán là việc làm cấp thiết. Có ý nghĩa thiết thực trong việc giảng dạy của giảng viên và học tập của sinh viên hiện nay.

Trong bài viết này, Tác giả xin nêu vấn đề về “dạy và học các bài toán ma trận với sự hỗ trợ của phần mềm”. Cụ thể, ứng dụng phần mềm Maple 18 để đưa ra các gói lệnh, lập trình các đoạn code, chỉ ra phương pháp giải các bài toán trên ma trận. Sau đó ứng dụng gói maplet tạo ra giao diện tính toán trực quan cho người sử dụng.

## 2. NỘI DUNG

### 2.1. Phần mềm Toán học

Maple là một phần mềm Toán học do Đại học Tổng hợp Waterloo (Canada) xây dựng và đưa vào sử dụng năm 1985. Sau nhiều lần cải tiến và phát triển qua nhiều phiên bản khác nhau và ngày càng được hoàn thiện, hiện nay đã có phiên bản Maple 19.

\*Tác giả liên hệ chính.

Email: lethienkt2010@gmail.com

Với phần mềm Maple, chúng ta có thể: Thực hiện các tính toán với khối lượng lớn, với thời gian nhanh và độ chính xác cao. Sử dụng các gói chuyên dụng của Maple để giải quyết các bài toán cụ thể như: vẽ đồ thị (gói plots), hình học giải tích (gói geometry), đại số tuyến tính (gói linalg), Giải tích (gói student), phương trình vi phân (gói DEtools), lý thuyết số (gói numtheory), Dữ liệu rời rạc (gói DiscreteTransforms),...

## 2.2. Sử dụng phần mềm maple trong dạy và học các bài toán về ma trận và định thức ma trận

### 2.2.1. Cách tạo ma trận

Để làm việc với ma trận, trước tiên ta cần nạp gói lệnh LinearAlgebra. Đầu tiên chúng ta gọi gói lệnh này bằng lệnh with. Gói này bao gồm các lệnh:

> restart;

> with (LinearAlgebra);

Muốn tạo một ma trận ta sử dụng một trong các lệnh sau đây :

- Cho m danh sách n phần tử L1, L2,..., Lm khi đó hàm matrix ([L1,L2,...,Lm]) trả về ma trận m hàng, n cột.

Ví dụ:

restart;

> with (linalg):

>

A := matrix( [ [ 1, 2, 3 ], [ 4, 5, 6 ], [ 7, 8, 9 ] ] );

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

- Cho danh sách m\*n phần tử L khi đó hàm matrix(m,n,L) trả về ma trận m hàng, n cột.

Ví dụ:

>

B := matrix(3, 4, [ 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 ] );

$$B := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}$$

- Cho hàm 2 biến f(i, j) khi đó hàm matrix(m, n, f) trả về ma trận m hàng, n cột với f là hàm hai biến f(i, j), (i = 1,...,m; j = 1,...,n).

Ví dụ:

f := (i, j) → i + 2·j - 1;

f := (i, j) → i + 2j - 1

> C := matrix(3, 4, f);

$$C := \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 8 \\ 3 & 5 & 7 & 9 \\ 4 & 6 & 8 & 10 \end{bmatrix}$$

Ta cũng có thể nhập ma trận trực tiếp từ menu Matrix/Insert Matrix.

$$> A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 4 & 8 & 9 \end{bmatrix};$$

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 4 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

### 2.2.2. Kích thước và thành phần ma trận

- Hàm rowdim(M) trả về số hàng của ma trận M.

- Hàm coldim(M) trả về số cột của ma trận M.

- M [i,j] là phần tử nằm ở hàng i, cột j (phần tử thứ (i,j) của ma trận M...

Ví dụ.

>

A := matrix( [ [ 3, -2, 8, 1 ], [ 5, 2, -4, 2 ], [ 7, 8, 9, 4 ], [ 0, -2, 1, 7 ] ] );

$$A := \begin{bmatrix} 3 & -2 & 8 & 1 \\ 5 & 2 & -4 & 2 \\ 7 & 8 & 9 & 4 \\ 0 & -2 & 1 & 7 \end{bmatrix}$$

> with (linalg) : rowdim ( A );

4

> coldim( A );

4

> a11 := A[ 1, 1 ];

a11 := 3

> a42 := A[ 4, 2 ];

a42 := -2

### 2.2.3. Các phép toán cơ bản trên ma trận

Trong phần này ta sẽ thực hiện một số phép toán cơ bản trên ma trận như:

- Phép cộng (+), trừ (-) hai ma trận:  $A+B$   
 $A - B$ ;

- Phép nhân ma trận với một số thực  $A*a$ ;

- Phép nhân 2 ma trận:  $A.B$ ;

- Phép lấy lũy thừa:  $A^n$ ;

- Phép lấy chuyển vị : transpose (A);

*a. Phép cộng hai ma trận*

- Phương pháp

Cho hai ma trận A và B có cùng cỡ mxn  
 Tổng của hai ma trận A và B là một ma trận có  
 cỡ mxn và được tìm theo maple như sau:

Bước 1: nhập ma trận A

Bước 2: nhập ma trận B

Bước 3: Tìm ma trận tổng bằng lệnh  $A + B$  hoặc lệnh  $matadd(A,B)$ .

- Ví dụ:

Tìm tổng của hai ma trận sau:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}; B = \begin{bmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \\ 4 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

Giải

> restart;

> with (linalg) :

$$> A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}; B := \begin{bmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \\ 4 & 2 & 3 \end{bmatrix};$$

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$

$$B := \begin{bmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \\ 4 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

> C := A + B;

$$C := \begin{bmatrix} 8 & 10 & 12 \\ 11 & 15 & 17 \\ 10 & 9 & 11 \end{bmatrix}$$

> C := matadd(A, B);

$$C := \begin{bmatrix} 8 & 10 & 12 \\ 11 & 15 & 17 \\ 10 & 9 & 11 \end{bmatrix}$$

*b. Phép nhân ma trận với một số*

- Phương pháp:

Tích của một số a bất kì với một ma trận A cỡ m x n là một ma trận cỡ m x n và có các phần tử bằng tích của a với các phần tử của ma trận A được tìm theo maple bằng lệnh  $scalarmul(A, a)$  hoặc  $A*a$ .

- Ví dụ

> restart;

> with(linalg) :

>

A := matrix( [[ 1, 2, 3], [2, 3, 5], [6, 7, 2]]);

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 5 \\ 6 & 7 & 2 \end{bmatrix}$$

> C := scalarmul(A, 2);

$$C := \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 4 & 6 & 10 \\ 12 & 14 & 4 \end{bmatrix}$$

*c. Phép nhân ma trận*

- Phương pháp

Cho ma trận A có cỡ mxp, ma trận B có cỡ pxn. Tích của hai ma trận A và B theo thứ tự là ma trận C có cỡ mxn được tìm theo Maple như sau:

Bước 1: Nhập ma trận A.

Bước 2: Nhập ma trận B.

Bước 3: Tìm ma trận tích A.B bằng lệnh  $evalm(A*B)$  hoặc lệnh  $multiply(A, B)$ .

\* Ghi chú :

- Để thực hiện được phép nhân hai ma trận A và B theo thứ tự thì số hàng của ma trận B phải bằng số cột của ma trận A.

- Phép nhân ma trận không có tính giao hoán.

- Ví dụ:

>

restart; with(linalg):

A := matrix( [[ 2, 3, 4], [1, 3, 2]]);

B := matrix( [[ 1, 3], [2, 4], [4, 1]]);



$$A := \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

$$B := \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}$$

> C := multiply(A, B);

$$C := \begin{bmatrix} 24 & 22 \\ 15 & 17 \end{bmatrix}$$

> E := multiply(B, A);

$$E := \begin{bmatrix} 5 & 12 & 10 \\ 8 & 18 & 16 \\ 9 & 15 & 18 \end{bmatrix}$$

Như vậy, ma trận C là tích của ma trận A với ma trận B và E là ma trận tích của ma trận B với ma trận A, ta thấy  $C \neq E$ , hay phép nhân ma trận không có tính chất giao hoán.

#### d. Phép chuyển vị của ma trận

Ta sử dụng lệnh transpose(A);

Ví dụ:

>

A := matrix([ [x, y, z], [a, b, c], [3, 5, 6] ]);

$$A := \begin{bmatrix} x & y & z \\ a & b & c \\ 3 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

> C := transpose(A);

$$C := \begin{bmatrix} x & a & 3 \\ y & b & 5 \\ z & c & 6 \end{bmatrix}$$

#### e. Lũy thừa ma trận

Toán tử  $A^n$  cho phép ta lũy thừa bậc n của ma trận A. Hàm evalm tính toán giá trị các lũy thừa ma trận.

> A := matrix([ [x, y], [a, b] ]);

$$A := \begin{bmatrix} x & y \\ a & b \end{bmatrix}$$

> B := A<sup>2</sup>;

$$B := A^2$$

> evalm(B);

$$\begin{bmatrix} x^2 + ya & xy + yb \\ ax + ba & ya + b^2 \end{bmatrix}$$

#### 2.2.4. Định thức ma trận

- Phương pháp

- Bước 1: Nhập ma trận vuông A.

- Bước 2: Tính định thức của ma trận A bằng lệnh det(A).

Ví dụ:

Cho ma trận  $A := \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & -3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 4 & 2 & 5 \\ -2 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}$  Tính det(A).

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & -3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 4 & 2 & 5 \\ -2 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Giải

> restart;

> with( linalg ) :

>

A := matrix([ [2, 3, 0, -3, 4], [1, 2, 4, -3, 1], [0, 1, 4, 2, 5], [-2, 4, 5, 2, 1], [4, 3, 2, -1, 1] ]);

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & -3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & 4 & 2 & 5 \\ -2 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

> dthuc := det(A);

dthuc := -2321

#### 2.2.5. Ma trận nghịch đảo

- Phương pháp tìm ma trận nghịch đảo

Bước 1. Nhập ma trận vuông A.

Bước 2. Tính det(A).

- Nếu  $\det(A) = 0$  thì A là ma trận suy biến.

- Nếu  $\det A \neq 0$  thì tồn tại  $A^{-1}$

Bước 3. Lập ma trận phụ hợp  $P = C^t$ , với  $C[i, j] = (-1)^{i+j} \det(M_{ij})$ ,  $M_{ij}$  là ma trận được lập thành từ ma trận A bằng cách bỏ đi hàng i và cột j.

Bước 4. Tìm ma trận nghịch đảo

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} P.$$

Xét ví dụ

Cho ma trận vuông

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 2 \\ 4 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

tìm ma trận nghịch đảo của ma trận A (nếu có).

Giải:

> restart;

> with(linalg) :

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 2 \\ 4 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix};$$

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 2 \\ 4 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

> d := det(A);

d := 50

Ta có  $\det(A) = 50 \neq 0$  nên tồn tại ma trận nghịch đảo  $A^{-1}$ . Ta đi tìm ma trận phụ hợp P

Ta có:

$$C := \begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} & C_{1,3} & C_{1,4} \\ C_{2,1} & C_{2,2} & C_{2,3} & C_{2,4} \\ C_{3,1} & C_{3,2} & C_{3,3} & C_{3,4} \\ C_{4,1} & C_{4,2} & C_{4,3} & C_{4,4} \end{bmatrix};$$

>  $M_{11} := \text{delcols}(\text{delrows}(A, 1..1), 1..1);$

$$M_{11} := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

>  $C[1, 1] := (-1)^{1+1} \cdot \det(M_{11});$

$C_{1,1} := -6$

>  $M_{12} := \text{delcols}(\text{delrows}(A, 1..1), 2..2);$

$$M_{12} := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \\ 4 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

>  $C[1, 2] := (-1)^{1+2} \cdot \det(M_{12});$

$C_{1,2} := 2$

>  $M_{13} := \text{delcols}(\text{delrows}(A, 1..1), 3..3);$

$$M_{13} := \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 3 & 2 & 2 \\ 4 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

>  $C[1, 3] := (-1)^{1+3} \cdot \det(M_{13});$

$C_{1,3} := 8$

>  $M_{14} := \text{delcols}(\text{delrows}(A, 1..1), 4..4);$

$$M_{14} := \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 0 \\ 4 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

>  $C[1, 4] := (-1)^{1+4} \cdot \det(M_{14});$

$C_{1,4} := 7$

Tương tự như trên, ta tính các  $C_{ij}$  còn lại. Cuối cùng ta được ma trận C;

$$\begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} & C_{1,3} & C_{1,4} \\ C_{2,1} & C_{2,2} & C_{2,3} & C_{2,4} \\ C_{3,1} & C_{3,2} & C_{3,3} & C_{3,4} \\ C_{4,1} & C_{4,2} & C_{4,3} & C_{4,4} \end{bmatrix};$$

$$\begin{bmatrix} -6 & 2 & 8 & 7 \\ 2 & 16 & 14 & -19 \\ -4 & 18 & -28 & 13 \\ 16 & -22 & 12 & -2 \end{bmatrix}$$

$$P := \text{transpose} \left( \begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} & C_{1,3} & C_{1,4} \\ C_{2,1} & C_{2,2} & C_{2,3} & C_{2,4} \\ C_{3,1} & C_{3,2} & C_{3,3} & C_{3,4} \\ C_{4,1} & C_{4,2} & C_{4,3} & C_{4,4} \end{bmatrix} \right);$$

$$P := \begin{bmatrix} -6 & 2 & -4 & 16 \\ 2 & 16 & 18 & -22 \\ 8 & 14 & -28 & 12 \\ 7 & -19 & 13 & -2 \end{bmatrix}$$

Ma trận nghịch đảo của ma trận A là:

$$AI := \frac{1}{\det(A)} \cdot P;$$

$$AI := \frac{1}{50} P$$

> MatranND := evalm(AI);

$$\text{MatranND} := \begin{bmatrix} -\frac{3}{25} & \frac{1}{25} & -\frac{2}{25} & \frac{8}{25} \\ \frac{1}{25} & \frac{8}{25} & \frac{9}{25} & -\frac{11}{25} \\ \frac{4}{25} & \frac{7}{25} & -\frac{14}{25} & \frac{6}{25} \\ \frac{7}{50} & -\frac{19}{50} & \frac{13}{50} & -\frac{1}{25} \end{bmatrix}$$

Ta có thể tìm ma trận phụ hợp của ma trận A trực tiếp bằng lệnh `adjoint(A)` như sau:

> P := `adjoint(A)`;

$$P := \begin{bmatrix} -6 & 2 & -4 & 16 \\ 2 & 16 & 18 & -22 \\ 8 & 14 & -28 & 12 \\ 7 & -19 & 13 & -2 \end{bmatrix}$$

Và tính ma trận nghịch đảo trực tiếp bằng lệnh `inverse(A)` (đối với ma trận không suy biến);

> `MatranND := inverse(A)`;

$$\text{MatranND} := \begin{bmatrix} -\frac{3}{25} & \frac{1}{25} & -\frac{2}{25} & \frac{8}{25} \\ \frac{1}{25} & \frac{8}{25} & \frac{9}{25} & -\frac{11}{25} \\ \frac{4}{25} & \frac{7}{25} & -\frac{14}{25} & \frac{6}{25} \\ \frac{7}{50} & -\frac{19}{50} & \frac{13}{50} & -\frac{1}{25} \end{bmatrix}$$

### 2.3. Hạng của ma trận

- Phương pháp tìm hạng ma trận

Như ta đã biết, hạng của ma trận bậc thang chính bằng số hàng khác không của ma trận bậc thang và các phép biến đổi sơ cấp không làm thay đổi hạng của ma trận. Vì vậy, để tìm hạng của ma trận A (`rank(A)`) ta dùng các phép biến đổi sơ cấp trên ma trận đưa ma trận A về ma trận bậc thang tương ứng B. Khi đó, hạng của ma trận A bằng hạng của ma trận bậc thang B và bằng số hàng khác không của ma trận bậc thang B.

Trong phần này ta sẽ sử dụng lệnh `Gausselim(A)` để biến đổi ma trận A về dạng ma trận bậc thang B.

Ta cũng có thể tìm hạng của ma trận A một cách trực tiếp bằng lệnh `rank(A)`.

Xét ví dụ:

Ví dụ 1: Tìm hạng của ma trận sau:

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 4 & 3 & 4 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 6 & 7 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

Giải

> `restart`;

> `with(linalg)` :

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 4 & 3 & 4 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 6 & 7 & 5 & 5 \end{bmatrix};$$

$$A := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 4 & 3 & 4 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 & 5 & 2 \\ 5 & 5 & 6 & 7 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

> `B := gausselim(A)`;

$$B := \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & -2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -5 & 5 & \frac{5}{2} & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Ta thấy ma trận B có 4 hàng khác không, vậy `rank(A) = rank(B) = 4`.

Ta cũng có thể tìm hạng của ma trận A một cách trực tiếp bằng lệnh `rank(A)` như sau:

> `r := rank(A)`;

`r := 4`

Vậy ma trận A cho trên có hạng bằng 4.

Việc tìm hạng của ma trận theo toán học thông thường sẽ gặp nhiều khó khăn nếu các phần tử trong ma trận cần tìm hạng có tham số, khi đó việc tính toán sẽ phức tạp và rất dễ nhầm lẫn. Tuy nhiên, với sự hỗ trợ của Maple thì những khó khăn trên sẽ được khắc phục dễ dàng.

Ví dụ 2. Tìm hạng của ma trận sau theo  $\lambda$  ( $\lambda \in \mathbb{R}$ ).

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 7 & 3 & 5 & 8 \\ 3 & 7 & 11 & 5 & 8 & 12 \\ 4 & 9 & 14 & 6 & 10 & 15 \\ 5 & 11 & 17 & 7 & 12 & \lambda \end{bmatrix}$$

Giải:

> restart;

> with( linalg) :

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 7 & 3 & 5 & 8 \\ 3 & 7 & 11 & 5 & 8 & 12 \\ 4 & 9 & 14 & 6 & 10 & 15 \\ 5 & 11 & 17 & 7 & 12 & \lambda \end{bmatrix}$$

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 7 & 3 & 5 & 8 \\ 3 & 7 & 11 & 5 & 8 & 12 \\ 4 & 9 & 14 & 6 & 10 & 15 \\ 5 & 11 & 17 & 7 & 12 & \lambda \end{bmatrix}$$

> B := gausselim(A);

$$B := \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda - 18 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Từ ma trận bậc thang B ta có:

- Nếu  $\lambda = 18$  thì  $\text{rank}(A) = \text{rank}(B) = 3$ .

- Nếu  $\lambda \neq 18$  thì  $\text{rank}(A) = \text{rank}(B) = 4$ .

### 3. SỬ DỤNG CÁC GÓI LỆNH MAPLET TRONG MAPLE:

Trong phần này, ta sẽ sử dụng gói lệnh Maplet của Maple để viết các thủ tục (chương trình) giải các bài toán về ma trận như: lũy thừa của một ma trận, tích của 2 ma trận, định thức của ma trận, ma trận nghịch đảo, hạng của ma trận,... và thực hiện chúng trên cửa sổ giao diện được tạo ra.

Sau đây là một số thủ tục tính toán:

> restart;

**with(Maplets[Elements]):**

**with(LinearAlgebra):**

mtA := proc () // Thủ tục nhập ma trận A

global A;

try

while true do A :=

Student[LinearAlgebra][MatrixBuilder]();

if RowDimension(A) <> ColumnDimension(A)

then Maplets[Examples][Message]("Số hàng của mt A phải bằng số cột của mt A.\n Mời bạn lại.") else break;

end if

end do;

catch: A := Matrix(3)

end try; Maplets[Tools][Set]((nhA)(value) = A)

end proc; // Kết thúc thủ tục

mtB := proc () // Thủ tục nhập ma trận B

global B;

try

while true do B :=

Student[LinearAlgebra][MatrixBuilder]();

if RowDimension(B) <> ColumnDimension(A) then Maplets[Examples][Message]("Số hàng của mt A phải bằng số cột của mt B.\n Mời bạn nhập lại.") else break;

end if;

end do;

catch: B := Matrix(3)

end try; Maplets[Tools][Set]((nhB)(value) = B)

end proc; // Kết thúc thủ tục

MTNghich := proc () // Thủ tục tìm ma trận nghịch đảo  $A^{-1}$

local temp;

try

temp := MatrixInverse(A);

Maplets[Tools][Set]((kq)(value) = temp)

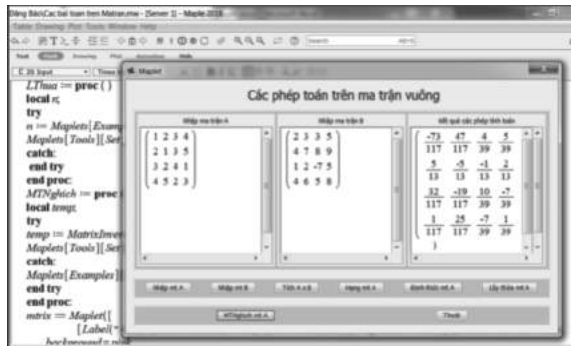
catch: Maplets[Examples][Message]("Ma tran suy bien")

end try

end proc; // kết thúc thủ tục

Các thủ tục tính toán khác, ta lập tương tự.

Khi thực hiện tính toán, ta đặt con trỏ vào vị trí bất kì trong đoạn chương trình và nhấn Enter sẽ xuất hiện một giao diện Maplet cho phép ta thực hiện phép toán cơ bản của ma trận. Trên giao diện này ta sẽ thấy kết quả trực quan và sinh động hơn.



## 4. TỔ CHỨC THỰC NGHIỆM SƯ PHẠM

### 4.1. Các bước tiến hành

Trong quá trình thực hiện việc sử dụng phần mềm Maple vào giảng dạy một số bài học tại trường Cao Đẳng Kinh Tế - Kỹ thuật Kon Tum (trước đây) nay là Trường Cao đẳng Cộng đồng Kon Tum tôi đã tiến hành thực nghiệm như sau:

- Nghiên cứu phần mềm Maple và tài liệu nhằm hỗ trợ trong việc soạn giảng.
- Soạn giảng và trình chiếu trên phần mềm Maple.
- Chuẩn bị trang thiết bị trang thiết bị phục vụ giảng dạy.
- Quá trình thực hiện giảng dạy tôi đã kết hợp giữa bảng phấn và trình chiếu.
- Thông qua việc dạy thử nghiệm một số lớp và được các đồng nghiệp, các sinh viên dự giờ đóng góp ý kiến và rút kinh nghiệm.

### 4.2. Tiến hành dạy thực nghiệm với bài toán tìm ma trận nghịch đảo

Dạy thực nghiệm bài ma trận nghịch đảo kết hợp giữa giảng dạy bảng phấn và bài soạn giảng trình chiếu trực tiếp trên phần mềm Maple với một số lớp CĐKT K05A, CĐKT K05B, CĐQTKD K05, THPT K05, CĐQTKD K06 CĐLS K10, CĐ LSK11, CĐLS K12...

#### Tóm tắt quá trình giảng dạy:

##### **GV:**

- Viết bảng phấn nêu khái niệm về ma trận con, ma trận phụ hợp.
- Các bước tìm ma trận nghịch đảo.
- Giải một số ví dụ cụ thể để minh họa.

##### **SV:**

- Lắng nghe, theo dõi và nêu ý kiến thắc mắc nếu chưa rõ vấn đề.

- Áp dụng lý thuyết vừa học, giải một số bài tập về ma trận nghịch đảo vào vở và có thể lên bảng giải cho các bạn theo dõi.

##### **GV và SV:**

- Sử dụng phần mềm Maple giải tuần tự các bước cùng theo dõi quá trình tính toán bằng máy và so sánh với cách giải bằng tay.

- Kiểm tra kết quả tính toán và các bước thực hiện

- Minh họa một số bài toán trên của số Maple

- Tóm tắt nội dung bài học
- Làm thêm một số bài tập củng cố

### 4.3. Kết quả thực nghiệm:

Sau khi dạy xong mỗi lớp tôi đã tiến hành khảo sát ý kiến của sinh viên và cho làm bài kiểm tra để biết kết quả.

**Nhận xét kết quả:** Qua giảng dạy thử và kiểm tra một số lớp ở trường. Thông qua kết quả kiểm tra đánh giá và khảo sát thăm dò ý kiến của các sinh viên dự lớp cũng như ý kiến đóng góp của đồng nghiệp. Tôi rút ra kết quả thực nghiệm trong các giờ dạy như sau:

- Sinh viên có hứng thú hơn trong quá trình theo dõi, học tập của mình. Đồng thời có sự chủ động, tích cực hơn trong học tập cũng như giải quyết các tình huống, các bài toán đặt ra.

- Đa số sinh viên tiếp thu tốt nội dung bài học, khắc phục được tình trạng sai sót trong quá trình tính toán, nhất là với những bài toán ma trận có cấp  $n$  ( $n > 4$ ).

- Trong một giờ giảng dạy giáo viên có thể giải quyết được rất nhiều bài toán cho kết quả nhanh chóng, chính xác. Đồng thời, có thể cho sinh viên nhận dạng được nhiều cách giải bài toán khác nhau với sự hỗ trợ của phần mềm Maple.

Từ đó, tôi nhận thấy rằng việc sử dụng công nghệ thông tin vào trong dạy học nói chung, sử dụng phần mềm toán học Maple trong dạy học toán nói riêng là cần thiết. Nếu người dạy vận dụng một cách mềm dẻo và linh hoạt khi dạy thì bài giảng sẽ hiệu quả hơn.

## 5. KẾT LUẬN

Bài viết đã trình bày vắn tắt quá trình dạy và

học các bài toán về ma trận với sự hỗ trợ của phần mềm maple.

- Kinh nghiệm cho thấy đối với những bài toán ma trận có cấp lớn ( $n > 4$ ) thì việc tính bằng tay sẽ phức tạp và mất nhiều thời gian. Nhưng nếu sử dụng maple sẽ giải quyết nhanh chóng và chính xác.

- Nếu ta viết một chương trình phức tạp thì trước hết ta viết và chạy từng lệnh một để xem kết quả thế nào, khi thấy kết quả tốt ta nhóm các lệnh trên thành một chương trình hoàn chỉnh.

- Hướng nghiên cứu tiếp theo tác giả sẽ được áp dụng cho các bài toán về hệ phương trình tuyến tính, bài toán về xác suất thống kê.

Hy vọng qua bài viết này sẽ giúp cho giáo viên và học sinh, sinh viên có thêm phương pháp và tư duy mới về ứng dụng các phần mềm vào hỗ trợ dạy và học toán học hiện nay.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Trần Quốc Chiến. *Giáo trình phần mềm toán học MAPLE*, Đại học Đà Nẵng, 2008.
2. Phạm Đức Châu. *Sử dụng Maple trong toán sơ cấp và toán cao cấp*, Nxb Khoa học và kỹ thuật Hà Nội, 2005.
3. Phạm Huy Điền. *Tính toán lập trình và Giảng dạy học toán trên Maple*, Nxb khoa học và kỹ thuật Hà Nội, 2002.
4. Phạm Huy Điền. *Dạy và học toán cùng máy tính*, Nxb Giáo dục, 2007.
5. Phạm Minh Hoàng. *Maple và Các bài toán ứng dụng*, Nxb Khoa học và kỹ thuật Hà Nội, 2008.
6. Ngô Thu Hương. *Toán cao cấp 2*, Nxb Đại học khoa học tự nhiên, 2002.
7. Nguyễn Chánh Tú. *Bài giảng Maple*, ĐHSPT Huế, 2005.
8. K. H. Rosen. *Triển khai toán rời rạc với Maple*, Nxb Giao thông Vận tải, 2008.
9. Nguyễn Đình Trí. *Toán cao cấp, T1, 2, 3*, Nxb Giáo dục, 2000.
10. Lê Anh Vũ. *Đại số tuyến tính*, Nxb Giáo dục, 1997.
11. M.B. Monagan K.O.Geddes, K.M.Heal, G.Labahn, S.M.VorKoette J.Mccarron, P.DeMarco. *Maple Introductory Programming Guide*, Maplesoft, a division WaterlooMaple, 2007.
12. Martha L. Abell and James P. Braselton. *Maple By Example*, Academic press, 2005.

# Optimizing locations and capacities of distributed generation for improving voltage quality of distribution networks

Ngo Minh Khoa\*, Huynh Duc Hoan

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

*Received: 25/10/2019; Accepted: 26/11/2019*

## ABSTRACT

This paper presents an optimization method for determining locations and capacities of distributed generation types in order to reduce total loss and improve voltage quality of distribution networks. The location and active power of distributed generations are determined in such a way that the total loss of active power in the network is the smallest while it still ensures constraint conditions of power balances, voltage limits at the nodes and the current limits allowed on its branches. The IEEE 33-bus test network is used to verify the proposed method in this paper. The simulation results show that when the distributed generations with optimal position and capacity are connected to the network, the total loss is reduced and voltage quality of the grid is improved significantly.

**Keywords:** *Distribution network, distributed generation, voltage quality, power quality, optimization method.*

---

\*Corresponding author.

Email: ngominhkhao@qnu.edu.vn

# Tối ưu vị trí và công suất nguồn điện phân tán nhằm nâng cao chất lượng điện áp trên lưới điện phân phối

Ngô Minh Khoa\*, Huỳnh Đức Hoàn

*Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam*

*Ngày nhận bài: 25/10/2019; Ngày nhận đăng: 26/11/2019*

## TÓM TẮT

Bài báo trình bày phương pháp tối ưu để xác định vị trí và công suất của các loại nguồn điện phân tán nhằm cực tiểu tổn thất công suất tác dụng và nâng cao chất lượng điện áp trên lưới điện phân phối. Vị trí và công suất tối ưu của nguồn điện phân tán được xác định sao cho tổng tổn thất công suất tác dụng trên lưới điện là nhỏ nhất mà vẫn đảm bảo các điều kiện ràng buộc về cân bằng công suất, giới hạn điện áp tại các nút và giới hạn về dòng điện cho phép trên các nhánh của lưới điện. Lưới điện IEEE 33 nút được sử dụng để kiểm chứng phương pháp được trình bày trong bài báo này. Kết quả mô phỏng cho thấy sau khi đầu nối các nguồn điện phân tán với vị trí và công suất tối ưu đã làm giảm tổn thất công suất tác dụng đáng kể và nâng cao chất lượng điện áp của lưới điện.

**Từ khóa:** *Lưới điện phân phối, nguồn điện phân tán, chất lượng điện áp, chất lượng điện năng, phương pháp tối ưu.*

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngày nay với sự phát triển của nguồn năng lượng tái tạo, yếu tố về môi trường, sự phát triển của các công nghệ mới, chất lượng điện năng, độ tin cậy hệ thống điện... sự ra đời các nguồn điện phân tán (DG) là thiết thực cho nhu cầu năng lượng đối với một xã hội phát triển, hiện đại nhằm bổ sung và đáp ứng nhanh chóng nhu cầu sử dụng điện cho các khách hàng.<sup>1</sup> Tuy nhiên, việc đầu nối tích hợp các DG vào lưới điện phân phối (LĐPP) lại nổi lên một số vấn đề cần quan tâm đó là: Trạng thái ổn định và sự kiểm soát dòng điện ngắn mạch trên lưới; chất lượng điện năng, điều khiển điện áp; tính ổn định và khả năng của DG dưới tác động của các nhiễu loạn; vấn đề bảo vệ rơle và chế độ vận hành khi lưới bị cô lập. Các vấn đề này có thể gây ra các hạn chế nhất định đến việc sử dụng nhiều DG tích

hợp vào LĐPP.<sup>2</sup> Bài báo này tập trung vào việc nghiên cứu lựa chọn vị trí và công suất tối ưu của các DG nhằm giảm tổn thất công suất tác dụng (CSTD) đến mức nhỏ nhất đồng thời cải thiện chất lượng điện áp (CLĐA) trên LĐPP.

Có nhiều phương pháp được sử dụng để tối ưu vị trí và công suất DG trên LĐPP đã được đề xuất trong nhiều công trình đã công bố. Tối ưu vị trí và công suất DG bằng cách sử dụng giải thuật di truyền để cực tiểu tổn thất CSTD trên lưới điện.<sup>3-5</sup> Xác định vị trí tối ưu của DG và tự bù bằng phương pháp tối ưu bày đàn để cực tiểu hóa tổn thất CSTD có xét đến chỉ số ổn định điện áp.<sup>6</sup> Phương pháp tối ưu dựa trên công thức tính chính xác tổn thất CSTD được trình bày trong<sup>7,8</sup> để tối ưu vị trí và công suất của DG, tuy nhiên trong các công trình đó, các điều kiện ràng buộc về điện áp không được khảo sát. Việc so sánh các

\*Tác giả liên hệ chính.

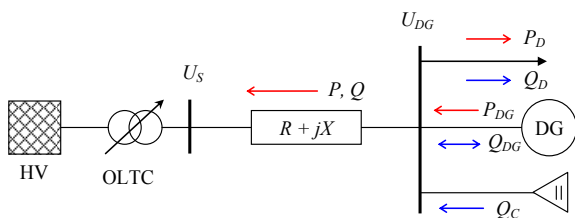
Email: ngominhkhoa@qnu.edu.vn



ưu điểm và nhược điểm của các phương pháp tối ưu vị trí và công suất của các DC dựa trên phương pháp độ nhạy được phân tích khá rõ ràng trong tài liệu.<sup>9</sup> Trong đó, các tác giả đã đề xuất phương pháp để xác định công suất tối ưu của DG với hệ số công suất tối ưu, nhưng cũng chỉ khảo sát cho DG loại III.<sup>10</sup> DG có thể được phân loại như sau.<sup>2</sup> Loại I: DG chỉ có khả năng phát ra CSTD, chẳng hạn như pin quang điện, pin nhiên liệu,... Loại II: DG chỉ có khả năng phát ra công suất phản kháng (CSPK) để cải thiện CLĐA trên lưới, chẳng hạn như: tụ bù CSPK, máy bù đồng bộ. Loại III: DG có khả năng phát ra cả CSTD và CSPK, ví dụ như máy phát đồng bộ. Loại IV: DG có khả năng phát ra CSTD nhưng lại tiêu thụ CSPK, ví dụ như máy phát tuabin gió sử dụng máy phát điện không đồng bộ. Trong bài báo này, các loại DG nêu trên được khảo sát để tối ưu vị trí và công suất phát ra nhằm cực tiểu hóa tổng tổn thất CSTD trên lưới điện mà vẫn thỏa mãn các ràng buộc về cân bằng công suất, giới hạn về điện áp và giới hạn về dòng điện cho phép trên các nhánh của lưới điện. Phương pháp đề xuất trong bài báo này sẽ được các tác giả đánh giá và kiểm chứng trên lưới điện IEEE 33 nút.

**2. TỐI ƯU VỊ TRÍ VÀ CÔNG SUẤT DG**

Thông thường, điện áp trên LĐPP truyền thống được vận hành ổn định, tuy nhiên khi có DG đầu nối vào lưới thì trào lưu công suất và điện áp sẽ bị ảnh hưởng. Để có thể phát được CSTD lên lưới thì máy phát phải vận hành với giá trị điện áp cao hơn so với điện áp các nút lân cận khác.<sup>11,12</sup> Điều này có thể được giải thích bằng cách sử dụng mô hình LĐPP hai nút có DG được đầu nối ở phía cuối nguồn. Bởi vì hướng trào lưu công suất bị đảo ngược, do đó điện áp tại điểm đầu nối DG sẽ tăng cao hơn so với điện áp nút nguồn.<sup>11</sup>



**Hình 1.** Ảnh hưởng của DG đến LĐPP.

Trong Hình 1, DG được đầu nối vào nút ở phía cuối nguồn nơi có điện áp là ( $U_{DG}$ );  $P_{DG}$  và  $Q_{DG}$  là CSTD và CSPK được phát ra bởi DG;  $P_D$  và  $Q_D$  là CSTD và CSPK của tải và  $Q_C$  là CSPK phát ra của thiết bị bù. DG, tải và thiết bị bù được nối với hệ thống điện truyền tải cao áp thông qua đường dây có tổng trở là  $R + jX$  và máy biến áp điều áp dưới tải OLTC. Độ tăng điện áp dọc theo đường dây được xác định như sau:

$$\Delta U = U_{DG} - U_s \approx \frac{RP + XQ}{U_{DG}} \tag{1}$$

trong đó:  $P = P_{DG} - P_D$  và  $Q = Q_C - Q_D \pm Q_{DG}$  là CSTD và CSPK truyền tải trên đường dây;  $U_s$  là điện áp ở đầu nguồn (phía hạ áp của máy biến áp điều áp dưới tải OLTC). Nếu  $U_{DG}$  được biểu diễn dưới dạng hệ đơn vị tương đối, thì phương trình (1) được viết lại là:

$$\Delta U = U_{DG} - U_s \approx R(P_{DG} - P_D) + X(Q_C - Q_D \pm Q_{DG}) \tag{2}$$

Nguồn điện phân tán DG phát ra CSTD ( $+P_{DG}$ ) và có thể phát hoặc tiêu thụ CSPK ( $\pm Q_{DG}$ ), trong khi đó tải tiêu thụ cả CSTD ( $-P_D$ ) và CSPK ( $-Q_D$ ) và các thiết bị bù trên LĐPP phát ra một lượng CSPK ( $+Q_C$ ). Gần đây, các máy phát điện đồng bộ cỡ nhỏ, máy phát điện tuabin gió cỡ nhỏ và hệ thống pin mặt trời được ứng dụng rộng rãi như là các DG trên LĐPP. Đối với các máy phát điện đồng bộ phát ra CSTD và có thể phát hoặc tiêu thụ CSPK phụ thuộc vào giá trị đặt của hệ thống kích từ của máy phát. Đối với máy phát tuabin gió cũng phát ra CSTD nhưng có thể phát hoặc tiêu thụ CSPK là phụ thuộc vào tốc độ gió<sup>11,12</sup>. Hệ thống pin mặt trời được sử dụng để phát ra CSTD tại một hệ số công suất nhất định nhưng có thể sinh ra dòng điện hài bơm vào lưới tùy thuộc vào chất lượng của bộ inverter.<sup>3</sup> Do đó, hướng trào lưu công suất trên lưới điện phụ thuộc vào giá trị CSTD và CSPK của các phụ tải so với CSTD và CSPK do các DG phát ra và tổng tổn thất công suất trên lưới điện. Như vậy ta thấy các DG có ảnh hưởng đáng kể đến trào lưu công suất và CLĐA trên LĐPP, do đó một cách tổng quát để có thể lựa chọn vị trí và công suất

của các DG nhằm nâng cao CLĐA trên LĐPP, các tác giả trong bài báo này tiến hành khảo sát một mô hình LĐPP tổng quát có  $N$  nút. Khi đó, hàm mục tiêu được lựa chọn trong bài báo này là hàm tổng tổn thất CSTD trên lưới điện như sau:

$$\text{Minimize } P_L = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \alpha_{ij} (P_i P_j + Q_i Q_j) + \beta_{ij} (Q_i P_j - P_i Q_j) \right] \quad (3)$$

trong đó:  $\alpha_{ij} = \frac{r_{ij}}{U_i U_j} \cos(\delta_i - \delta_j) \quad (4)$

$$\beta_{ij} = \frac{r_{ij}}{U_i U_j} \sin(\delta_i - \delta_j) \quad (5)$$

$$Z_{ij} = r_{ij} + jx_{ij} \quad (6)$$

Với:  $Z_{ij}$  là phần tử  $(i,j)$  trong ma trận tổng trở nút  $Z_{bus}$ ;  $r_{ij}$ ,  $x_{ij}$  là điện trở và điện kháng của phần tử  $Z_{ij}$ ;  $U_i$ ,  $\delta_i$  là biên độ và góc pha của điện áp tại nút  $i$ ;  $U_j$ ,  $\delta_j$  là biên độ và góc pha của điện áp tại nút  $j$ ;  $P_i$ ,  $Q_i$  là CSTD và CSPK bơm vào tại nút  $i$ ;  $P_j$ ,  $Q_j$  là CSTD và CSPK bơm vào tại nút  $j$ .

Trong bài toán cực tiểu hàm mục tiêu (3) cần phải thỏa mãn các điều kiện ràng buộc sau đây:

i) Ràng buộc về cân bằng công suất:

$$P_{Gi} - P_{Di} = \sum_{j=1}^N U_i U_j \left[ \begin{array}{l} G_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) \\ + B_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) \end{array} \right] \quad (7)$$

$\forall i = 1, 2, 3, \dots, N$

$$Q_{Gi} - Q_{Di} = \sum_{j=1}^N U_i U_j \left[ \begin{array}{l} G_{ij} \sin(\delta_i - \delta_j) \\ - B_{ij} \cos(\delta_i - \delta_j) \end{array} \right] \quad (8)$$

$\forall i = 1, 2, 3, \dots, N$

trong đó:  $P_{Gi}$ ,  $Q_{Gi}$  là CSTD và CSPK phát tại nút  $i$ ;  $P_{Di}$ ,  $Q_{Di}$  là CSTD và CSPK tải tại nút  $i$ ;  $G_{ij}$  và  $B_{ij}$  là điện dẫn tác dụng và CSPK của nhánh giữa nút  $i$  và  $j$ .

ii) Ràng buộc về điện áp tại các nút:

$$U_{\min} \leq U_i \leq U_{\max} \quad \forall i = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

trong đó:  $U_{\min}$ ,  $U_{\max}$  là điện áp cho phép nhỏ nhất và lớn nhất.

iii) Ràng buộc về dòng điện trên các nhánh:

$$I_i \leq I_{i\max} \quad \forall i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (10)$$

trong đó:  $I_{i\max}$  là dòng điện lớn nhất cho phép chạy trên nhánh thứ  $i$ .

Khảo sát công thức tính chính xác tổng tổn thất CSTD trên lưới điện (3), tổng tổn thất CSTD nhỏ nhất nếu vi phân riêng phần của (3) theo giá trị công suất bơm vào nút bằng zero. Do đó, vi phân riêng phần của (3) theo CSTD bơm vào nút được xác định như sau:

$$\frac{\partial P_L}{\partial P_i} = 2\alpha_{ii} P_i + 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\alpha_{ij} P_j - \beta_{ij} Q_j) = 0 \quad (11)$$

$$P_i = -\frac{1}{\alpha_{ii}} \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\alpha_{ij} P_j - \beta_{ij} Q_j) \right] = 0 \quad (12)$$

trong đó:  $P_i$  là CSTD bơm vào nút  $i$ , được xác định bởi:

$$P_i = P_{DG_i} - P_{Di} \quad (13)$$

Thay (13) vào (12), ta được:

$$P_{DG_i} = P_{Di} - \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\alpha_{ij} P_j - \beta_{ij} Q_j) \right] \quad (14)$$

Tương tự đối với CSPK, ta có:

$$\frac{\partial P_L}{\partial Q_i} = 2\alpha_{ii} Q_i + 2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\alpha_{ij} Q_j + \beta_{ij} P_j) = 0 \quad (15)$$

trong đó:  $Q_i$  là CSPK bơm vào nút và được xác định:

$$Q_i = Q_{DG_i} - Q_{Di} \quad (16)$$

Do đó:

$$Q_{DG_i} = Q_{Di} - \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\alpha_{ij} Q_j + \beta_{ij} P_j) \right] \quad (17)$$

Như vậy, phương trình (14) cho phép xác định CSTD phát tối ưu của DG loại I và (17) cho phép xác định CSPK phát tối ưu của DG loại II tại mỗi nút. Nếu DG loại I được đầu nối tại nút  $i$  làm cho tổng tổn thất CSTD trên lưới nhỏ nhất so với DG cùng loại được đầu nối tại bất kỳ một nút nào khác trên lưới, thì nút  $i$  là vị trí tối ưu để đặt DG loại I. Tương tự, nếu DG loại II được đầu nối tại nút  $j$  làm cho tổn thất CSTD trên lưới nhỏ

nhất so với DG cùng loại được đấu nối tại bất kỳ một nút nào khác trên lưới, thì nút  $j$  là vị trí tối ưu để đặt DG loại II. Trong trường hợp vị trí tối ưu đặt DG loại I và vị trí tối ưu đặt DG loại II cùng chung tại một nút  $i$ , thì (14) và (17) được sử dụng để xác định công suất và hệ số công suất tối ưu của DG loại III được đấu nối tại nút  $i$ . Bất kỳ công suất của DG loại III khác với  $P_{DGi}$  và  $Q_{DGi}$  tại nút  $i$ , sẽ có tổn thất công suất lớn hơn. Khi đó, hệ số công suất tối ưu (OPF) của DG loại III được xác định theo (18):

$$OPF = \frac{P_{DGi}}{\sqrt{P_{DGi}^2 + Q_{DGi}^2}} \quad (18)$$

Nếu vị trí tối ưu của DG loại I và II khác nhau lần lượt tại  $i$  và  $j$  tương ứng, thì có thể xem DG loại III được đấu nối tại nút  $i$  với giá trị CSTD và CSPK phát của nó được tính toán theo (14) và (17) tương ứng. Trong trường hợp này, hệ số công suất của DG loại III cũng được xác định theo (18).

Vị trí đấu nối DG mà làm cho tổn thất CSTD trên lưới nhỏ nhất được xem là vị trí tối ưu nếu thỏa mãn các ràng buộc như đã trình bày ở trên. Thủ tục tính toán xác định vị trí và công suất tối ưu các loại DG được mô tả như sau:

*Bước 1:* Chạy trào lưu công suất ở chế độ cơ bản (không có DG).

*Bước 2:* Tính toán tổn thất công suất ở chế độ cơ bản bằng cách sử dụng (3).

*Bước 3:* Sử dụng (14) và (17) xác định công suất của các loại DG khác nhau tại mỗi nút ngoại trừ nút cân bằng để cực tiểu tổn thất CSTD trên lưới.

*Bước 4:* Kiểm tra các điều kiện ràng buộc (7)-(10) sau khi đấu nối DG được xác định ở *Bước 3* tại mỗi nút.

*Bước 5:* Lựa chọn vị trí đấu nối DG có tổn thất CSTD nhỏ nhất mà vẫn thỏa mãn các ràng buộc.

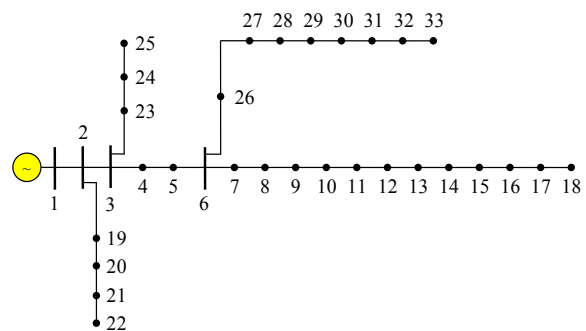
*Bước 6:* Sử dụng (18) xác định hệ số công suất tối ưu nếu sử dụng DG loại III.

*Bước 7:* Chạy trào lưu công suất sau khi đấu nối DG tại vị trí và công suất tối ưu.

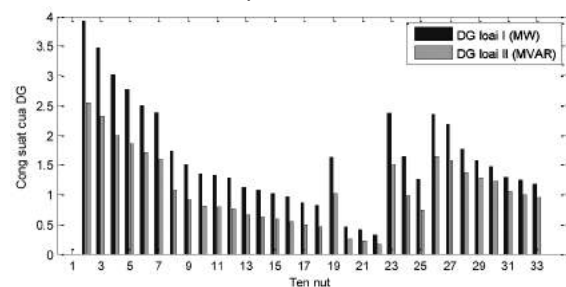
*Bước 8:* Tính toán độ giảm tổn thất CSTD sau khi đấu nối DG vào lưới.

### 3. KẾT QUẢ MÔ PHỎNG

Phương pháp được đề xuất để tối ưu vị trí và công suất của DG trong bài báo này được các tác giả lập trình bằng ngôn ngữ Matlab và được kiểm chứng, đánh giá cho một lưới điện mẫu. Trong mục này, bài báo trình bày kết quả mô phỏng trên lưới điện mẫu IEEE 33 nút có sơ đồ nối điện như Hình 2 đồng thời bộ dữ liệu nút và dữ liệu nhánh của nó được cho trong Phụ lục 1 và 2. Thực hiện các bước tính toán của giải thuật đề xuất đã trình bày ở Mục 2 để xác định công suất tối ưu của DG loại I theo (14) và DG loại II theo (17) tại các nút trên lưới, kết quả này được thể hiện trong biểu đồ Hình 3. Qua kết quả như trên Hình 3 cho ta thấy tại các nút từ nút 2 đến nút 33 có các giá trị công suất tối ưu của DG loại I và DG loại II thay đổi theo vị trí các nút trên lưới điện. Từ kết quả này, công suất của DG loại III bao gồm công suất tác dụng  $P_{DGi}$  và công suất phản kháng  $Q_{DGi}$  cũng được xác định theo (14) và (17) như trong Mục 2.



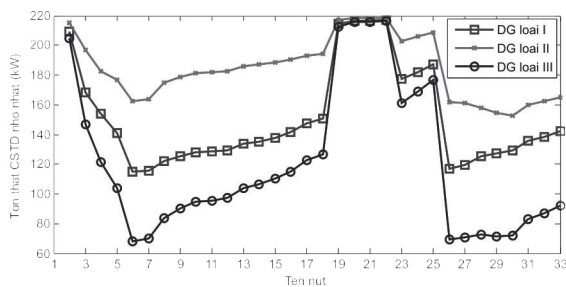
**Hình 2.** Sơ đồ lưới điện IEEE 33 nút.



**Hình 3.** Công suất tối ưu của DG loại I và II tại các nút trên lưới điện mẫu IEEE 33 nút.

Sau khi đấu nối lần lượt DG loại I, II và III tại các nút trên lưới ta thấy tổng tổn thất CSTD nhỏ nhất ứng với DG loại I đấu nối tại nút 6,

DG loại II tại nút 30 và DG loại III tại nút 6 như trong Hình 4. Ta thấy vị trí tối ưu của DG loại I và II để tổn thất công suất nhỏ nhất là không trùng nhau, do đó ta khảo sát 4 phương án: đầu nối DG loại I tại nút 6, đầu nối DG loại II tại nút 30, đầu nối DG loại III tại nút 6 và đầu nối đồng thời DG loại I tại nút 6 còn DG loại II tại nút 30. Kết quả tổng tổn thất CSTD trên lưới của 4 phương án này được thể hiện ở Bảng 1. Từ kết quả Bảng 1 cho thấy rằng khi đầu nối đồng thời DG loại I và II tại các vị trí khác nhau (DG loại I tại nút 6 và DG loại II tại nút 30) thì tổng tổn thất CSTD giảm từ 67,85 kW (đối với DG loại III tại nút 6) xuống còn 58,89 kW.



Hình 4. Tổng tổn thất CSTD khi đầu nối DG loại I, II hoặc III tại các nút.

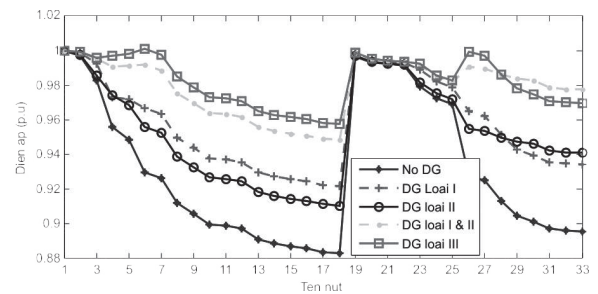
Bảng 1. Kết quả tối ưu vị trí và công suất của DG và tổn thất CSTD trên lưới.

Vị trí DG	Loại DG	Công suất DG tối ưu			Tổn thất CSTD (kW)		Độ giảm tổn thất CSTD (%)
		(MW)	(MVar)	(MVA; cosφ)	Không DG	Có DG	
Nút 6	I	2,49	-	-	219,14	114,91	47,57
Nút 30	II	-	1,71	-		152,98	30,19
Nút 6	III	-	-	3,02; 0,82		67,85	69,04
Nút 6 và 30	I & II	2,49	1,71	-		58,89	73,13

Bảng 2. CLĐA sau khi đầu nối DG.

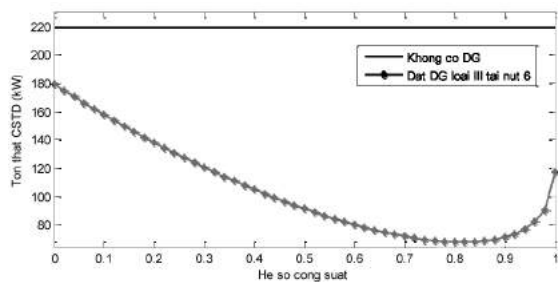
Loại và vị trí của DG	Điện áp (pu) @ nút trước khi có DG		Điện áp (pu) @ nút sau khi có DG	
	Min	Max	Min	Max
Loại I (nút 6)	0,88@18	1,00@1	0,92@18	1,00@1
Loại II (nút 30)			0,91@18	1,00@1
Loại I (nút 6) và loại II (nút 30)			0,94@18	1,00@1
Loại III (nút 6)			0,96@18	1,00@6

CLĐA trên lưới điện được cải thiện đáng kể sau khi đã đầu nối DG với vị trí và công suất tối ưu như Hình 5. Ở chế độ cơ bản (chưa có DG) điện áp nhỏ nhất là 0,88 p.u (nút 18) và điện áp lớn nhất là 1 p.u tại nút 1. Sau khi đầu nối DG loại III (3,02 MVA; cosφ = 0,82) tại nút 6 thì điện áp nhỏ nhất là 0,96 p.u tại nút 18 và điện áp lớn nhất là 1,00 p.u tại nút 6. Kết quả các trường hợp còn lại được thể hiện trong Bảng 2. Rõ ràng chỉ có trường hợp đầu nối DG loại III tại nút 6 là có điện áp trên lưới vẫn đảm bảo điều kiện ràng buộc về điện áp. Vậy phương án này là phương án được lựa chọn để tối ưu vị trí và công suất DG trên lưới điện mẫu IEEE 33 nút.



Hình 5. CLĐA trên lưới khi đầu nối các loại DG với vị trí và công suất tối ưu.

Ngoài ra, bài báo cũng đã khảo sát sự ảnh hưởng hệ số công suất của DG đến tổn thất CSTD trên LĐPP. Giả thiết đầu nối DG loại III với công suất không đổi là 3,02 MVA và tiến hành thay đổi hệ số công suất của nó, ta thấy tổn thất CSTD trên lưới sẽ thay đổi như Hình 6. Qua đó ta thấy tổng tổn thất CSTD đạt cực tiểu ứng với hệ số công suất tối ưu được xác định bởi (18).



**Hình 6.** Ảnh hưởng của hệ số công suất của DG loại III tại nút 6 đến tổn thất CSTD.

#### 4. KẾT LUẬN

Bài báo đã trình bày phương pháp tối ưu vị trí và công suất của các loại DG nhằm cực tiểu hóa tổng tổn thất CSTD đồng thời nâng cao được CLĐA trên LĐPP. Phương pháp đề xuất trong bài báo xác định giá trị tối ưu của vị trí và công suất của các loại DG bằng phương pháp giải tích bởi công thức từ mô hình bài toán tối ưu có ràng buộc. Phương pháp này được đánh giá và kiểm chứng trên lưới điện IEEE 33 nút, kết quả mô phỏng cho thấy dấu nổi DG loại III tại nút 6 đã làm giảm tổn thất CSTD trên lưới so với trường hợp không có DG đồng thời đã nâng cao CLĐA của lưới điện. Ngoài ra, bài báo cũng đã khảo sát sự ảnh hưởng hệ số công suất của DG đến tổn thất CSTD trên lưới điện. Qua đó ta thấy tồn tại một hệ số công suất của DG làm cho tổn thất CSTD trên lưới nhỏ nhất.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. R. C. Dugan, M. F. McGranaghan, S. Santosa, H.W. Beaty. *Electric Power Systems Quality*, New York: McGraw-Hill, 2002.
2. T. Ackermann, G. Andersson, L. Soder. Distributed generation: A definition, *Electric Power Systems Research*, **2001**, 57(3), 195-204.
3. S. Biswas<sup>1</sup>, S. K. Goswami. Genetic Algorithm based Optimal Placement of Distributed Generation Reducing Loss and Improving Voltage Sag Performance, *ACEEE Int. J. on Electrical and Power Engineering*, **2011**, 2(1).

4. T. N. Shukla, S. P. Singh, K. B. Naik. *Allocation of distributed generation using GA for minimum system losses*, Fifteenth National Power Systems Conference (NPSC), Bombay, 2008.
5. S. M. Sajjadi, M. R. Haghifam, J. Salehi. Simultaneous placement of distributed generation and capacitors in distribution networks considering voltage stability index, *International Journal of Electrical Power and Energy Systems*, **2013**, 46, 366-375.
6. Karar Mahmoud, Naoto Yorino, Abdella Ahmed. Optimal Distributed Generation Allocation in Distribution Systems for Loss Minimization, *IEEE Transactions on Power Systems*, **2018**, 31(2), 960-969.
7. D. Q. Hung, N. Mithulanathan, R. C. Bansal. Analytical expressions for DG allocation in primary distribution networks, *IEEE Transactions on Energy Conversion*, **2010**, 25(3), 814-820.
8. V. V. S. N. Murthy, Ashwani Kumar. Comparison of optimal DG allocation methods in radial distribution systems based on sensitivity approaches, *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, **2013**, 53, 450-467.
9. C. L. Masters. Voltage rise: The big issue when connecting embedded generation to long 11 kV overhead lines, *Power Engineering Journal*, **2002**, 16(1), 5-12.
10. C. T. Su, C. F. Chang, J. P. Chiou. Distribution network reconfiguration for loss reduction by ant colony search algorithm, *Electric Power Systems Research*, **2005**, 75(2), 190-199.
11. M. E. Baran, I. M. El-Markabi. A multiagent-based dispatching scheme for distributed generators for voltage support on distribution feeders, *IEEE Transactions on Power Systems*, **2007**, 22(1), 52-59.
12. C. M. Hird, H. Leite, N. Jenkins, H. Li. Network voltage controller for distributed generation, *IEE Proceedings - Generation, Transmission and Distribution*, **2004**, 151(2), 150-156.

**PHỤ LỤC**

**Phụ lục 1.** Dữ liệu nút của lưới điện IEEE 33 nút.

Nút	P (kW)	Q (kVAr)	Nút	P (kW)	Q (kVAr)
1	0	0	18	90	40
2	100	60	19	90	40
3	90	40	20	90	40
4	120	80	21	90	40
5	60	30	22	90	40
6	60	20	23	90	50
7	200	100	24	420	200
8	200	100	25	420	200
9	60	20	26	60	25
10	60	20	27	60	25
11	45	30	28	60	20
12	60	35	29	120	70
13	60	35	30	200	600
14	120	80	31	150	70
15	60	10	32	210	100
16	60	20	33	60	40
17	60	20			

**Phụ lục 2.** Dữ liệu nhánh của lưới điện IEEE 33 nút.

Nút đi	Nút đến	R (p.u)	X (p.u)	Nút đi	Nút đến	R (p.u)	X (p.u)
1	2	0,005753	0,002976	17	18	0,045671	0,035813
2	3	0,03076	0,015667	2	19	0,010232	0,009764
3	4	0,022836	0,1163	19	20	0,093851	0,084567
4	5	0,023778	0,01211	20	21	0,02555	0,029849
5	6	0,051099	0,044112	21	22	0,04423	0,058481
6	7	0,01168	0,038608	3	23	0,028152	0,019236
7	8	0,106779	0,077061	23	24	0,056028	0,044243
8	9	0,064264	0,04617	24	25	0,055904	0,043743
9	10	0,064888	0,04617	6	26	0,012666	0,006451
10	11	0,012266	0,004056	26	27	0,017732	0,009028
11	12	0,02336	0,007724	27	28	0,066074	0,058256
12	13	0,091592	0,072063	28	29	0,050164	0,043712
13	14	0,033792	0,04448	29	30	0,031664	0,016128
14	15	0,036874	0,032818	30	31	0,060795	0,060084
15	16	0,046564	0,034004	31	32	0,019373	0,02258
16	17	0,080424	0,107378	32	33	0,021276	0,033081

## Current controller design based on FPGA

Do Van Can\*

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

*Received: 12/11/2019; Accepted: 15/12/2019*

### ABSTRACT

In closed-loop control systems for motors, a current controller is usually designed as the inner loop while the others are the speed and the position controllers. Therefore, the current controller usually does not need boundary conditions. Most of these controllers are currently operated on software, resulting in lots of computational volumes, complex algorithms and slow responses. To overcome these drawbacks, the current controller should be hardened to increase the responsiveness and reduce the load on the CPU. The goal of this paper is to present the allowance of FPGA technology for users to design hardening of the flow controller regardless of the CPU scan cycles. Experimental and simulation results show that the design of current controllers based on FPGA response meets the response requirements.

**Keywords:** *Current controller, FPGA, motor control, hardware, software.*

---

\*Corresponding author.

Email: [dovancan@qnu.edu.vn](mailto:dovancan@qnu.edu.vn)

# Thiết kế bộ điều khiển dòng điện dựa trên nền tảng FPGA

Đỗ Văn Căn\*

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

Ngày nhận bài: 12/11/2019; Ngày nhận đăng: 15/12/2019

## TÓM TẮT

Trong hệ thống điều khiển vòng kín cho động cơ, khâu điều khiển dòng điện thường được thiết kế là vòng trong cùng, bên ngoài là các vòng tốc độ và vị trí. Vì vậy, vòng điều khiển dòng điện đáp ứng đầu ra thường không cần các điều kiện biên. Hầu hết các bộ điều khiển hiện nay, ba vòng này được thực hiện trên phần mềm, dẫn đến khối lượng tính toán nhiều, thuật toán phức tạp và làm quá trình đáp ứng chậm. Do đó, bộ điều khiển dòng được thực hiện cứng hoá nhằm tăng khả năng đáp ứng và giảm tải cho CPU là mục tiêu bài báo này. Công nghệ FPGA cho phép người dùng có thể thiết kế cứng hóa bộ điều khiển dòng mà không phụ thuộc vào vòng quét CPU. Kết quả mô phỏng và thực nghiệm cho thấy bộ điều khiển dòng điện trên FPGA đáp ứng được yêu cầu đề ra.

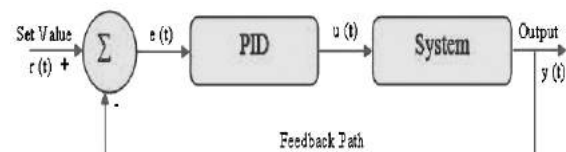
**Từ khóa:** Bộ điều khiển dòng, FPGA, điều khiển động cơ, phần cứng, phần mềm.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong các hệ truyền động điện, bộ điều khiển dòng điện được thiết kế ở vòng trong cùng, bên ngoài là các mạch vòng tốc độ và vị trí.<sup>1-3</sup> Trước đây điều khiển dòng điện phần lớn được thực hiện bằng các thuật toán phần mềm dựa trên lõi vi xử lý.<sup>1,2,4</sup> Trong những năm gần đây, FPGA đã được ứng dụng vào lĩnh vực điều khiển. Nhiều nghiên cứu đã sử dụng FPGA nhằm giải quyết các yêu cầu tốc độ, tính đồng thời cho các cấu trúc điều khiển.<sup>5-7</sup> Các công trình nghiên cứu trên cho thấy vẫn còn vài hạn chế trong điều khiển như thuật toán phức tạp, xử lý nhiều vòng lặp, chất lượng điều khiển phụ thuộc vào thuật toán lập trình và không cho phép thay đổi tái cấu trúc các thuật toán mới trên bộ điều khiển hiện có. Bên cạnh đó FPGA bước đầu sử dụng trong nghịch lưu đa bậc,<sup>8</sup> điều khiển hiện đại ADRC<sup>9</sup> và nhiều ứng dụng khác...<sup>6,10,11,12</sup> Các kết quả mô phỏng của các bài báo trên cho thấy bước đầu đưa FPGA vào ứng dụng trong điều khiển. Kết

quả mô phỏng<sup>13</sup> cho thấy hiệu quả tốt khi đề xuất FPGA thay cho DSP. Còn tài liệu<sup>12</sup> cũng hướng đến sử dụng FPGA cho điều khiển động cơ. Tuy nhiên, việc lựa chọn vòng điều khiển nào trên phần cứng, phần mềm để mang lại hiệu quả nhất; hay các kết quả thực nghiệm trên phần cứng chưa được đề cập cụ thể trong các tài liệu trên.

Để tiếp tục triển khai hướng đi của các công trình trên, tác giả đề xuất thiết kế bộ điều khiển dòng điện trên phần cứng dựa trên nền tảng FPGA nhằm tăng khả năng đáp ứng dòng điện và giảm tải cho CPU khi thực hiện điều chỉnh tự động.<sup>14</sup> Dựa trên kiến trúc khâu điều khiển dòng điện là PID được sử dụng trong các bộ điều khiển hiện nay mô tả như **Hình 1**:<sup>15-18</sup>



**Hình 1.** Đề xuất cấu trúc khâu điều khiển dòng điện theo tài liệu<sup>17</sup>

\*Tác giả liên hệ chính.

Email: dovancan@qnu.edu.vn



**2. NỘI DUNG NGHIÊN CỨU**

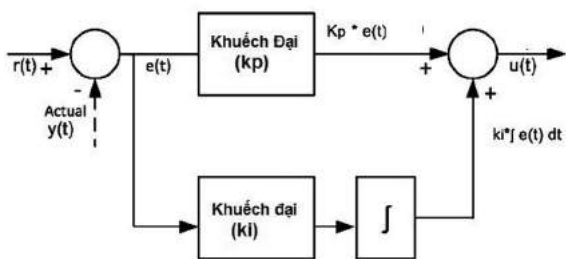
**2.1. Đề xuất khâu điều chỉnh dòng điện**

Cũng như những công trình trước đây khâu điều khiển dòng điện thường được lựa chọn PI (1) và chúng được thiết kế bằng thuật toán mềm.<sup>1,15</sup> Trong bài viết này, tác giả sử dụng nguyên lý phương trình sai phân để xây dựng khâu điều khiển dòng điện PI (**Hình 2**) từ mô tả (1):

$$u(t) = k_p * e(t) + k_i * \int_0^t e(\tau) d\tau \quad (1)$$

Trong đó:

$$\text{Sai lệch } e(t) = e(t) = r(t) - y(t)$$



**Hình 2.** Sơ đồ khối khâu PI thực hiện theo phương trình sai phân (1)

Thực hiện số hóa trong miền z của phương trình (1) ta có:

$$U(z) = \left[ k_p + \frac{k_i}{1 - z^{-1}} \right] E(z) \quad (2)$$

$$U(z) - z^{-1}U(z) = [k_p - z^{-1}k_p + k_i]E(z) \quad (3)$$

Phương trình sai phân của bộ điều khiển như sau:

$$u(k) = u(k-1) + k_p e(k) - k_p e(k-1) + k_i e(k) \quad (4)$$

Như vậy, khâu PI số được nhiều công trình nghiên cứu sử dụng làm bộ điều khiển dòng điện trong các ứng dụng phần mềm và mô tả theo phương trình sai phân (4). Vì vậy, cấu trúc này được lựa chọn thiết kế bộ điều khiển dòng điện trên phần cứng của FPGA cho động cơ.

**2.2. Xây dựng khâu điều chỉnh dòng điện**

Áp dụng cho hệ thống điều khiển dòng điện từ phương trình tổng quát PID số (5).<sup>4,5</sup>

$$D(z) = \frac{U(z)}{E(z)} = K_p \left[ 1 + \frac{T}{\tau_i(1 - z^{-1})} + \tau_d \frac{(1 - z^{-1})}{T} \right] \quad (5)$$

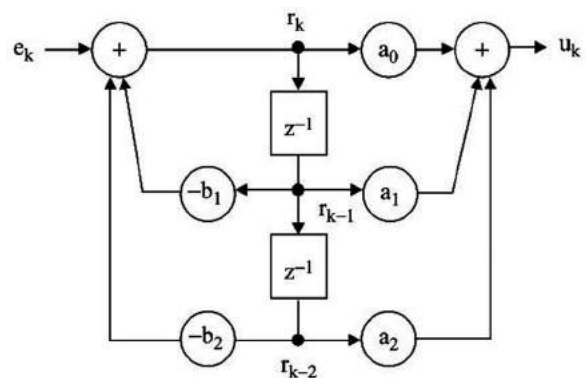
Viết lại dưới dạng (6) và mô tả **Hình 3**:

$$D(z) = \frac{a_0 + a_1 z^{-1} + a_2 z^{-2}}{1 + b_1 z^{-1} + b_2 z^{-2}} \quad (6)$$

Trong đó:

$$a_0 = K_p \left( 1 + \frac{T}{\tau_i} + \frac{\tau_d}{T} \right); \quad a_1 = K_p \left( 1 + \frac{2\tau_d}{T} \right);$$

$$a_2 = K_p \frac{\tau_d}{T}; \quad b_1 = -1; \quad b_2 = 0$$



**Hình 3.** Sơ đồ khối khâu PID số tổng quát

Từ (4), ta có phương trình sai phân tổng quát sau:

$$u(k) = u(k-1) + a_0 e(k) + a_1 e(k-1) + a_2 e(k-2) \quad (7)$$

Thực hiện tương tự cho các cấu trúc điều khiển kinh điển.

$$D(z) = \frac{U(z)}{E(z)} = \frac{\sum_{j=0}^n a_j z^{-j}}{1 + \sum_{j=1}^n b_j z^{-j}} \quad (8)$$

$$u(k) = \sum_{j=0}^n a_j e(k-j) - \sum_{j=1}^n b_j u(k-j) \quad (9)$$

Đặt:  $M_1 = -b_1 r(k-1) - b_2 r(k-2);$

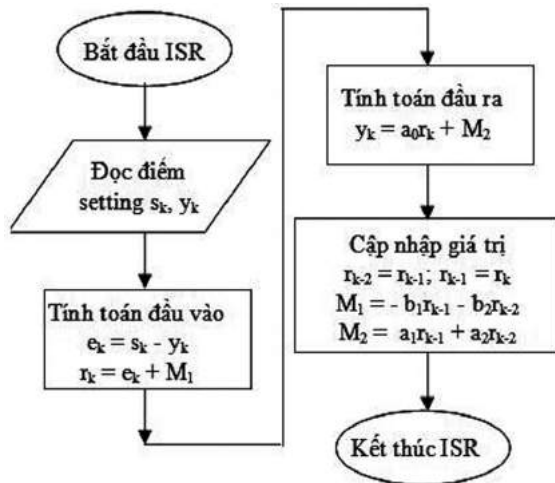
$$M_2 = a_1 r(k-1) + a_2 r(k-2).$$

Khi đó:

$$r(k) = e(k) + M_1 \quad (10)$$

$$u(k) = a_0 r(k) + M_2 \quad (11)$$

Và lưu đồ thuật toán tổng quát khi lập trình (chương trình ISR trên cả phần mềm và phần cứng) được mô tả như **Hình 4**. Như vậy, thuật toán này cho phép áp dụng cho mọi cấu trúc điều khiển số.



**Hình 4.** Sơ đồ thuật toán bộ điều khiển PID số

### 2.3. Biểu diễn hệ thống điều khiển số trên phần mềm

Để diễn tả một cách cụ thể, tác giả đề xuất bài toán tổng quát với hàm truyền số bậc hai của đối tượng, có các hệ số:

$$a_0 = 2.38 \cdot 10^{-5}; a_1 = 4.76 \cdot 10^{-5}; a_2 = 2.38 \cdot 10^{-5};$$

$$b_1 = 1; b_2 = -1.903; b_3 = 0.9048.$$

Khi đó, hàm truyền số được mô tả như sau:

$$D(z) = 10^{-5} \cdot \frac{2.38z^2 + 4.76z + 2.38}{z^2 - 1.93z + 0.9048} \quad (12)$$

Ta có hàm truyền vòng hở với bộ điều khiển PID số như sau:

$$H(z) = \frac{U(z)}{E(z)} = G_P + G_I \frac{z+1}{z-1} + G_D \frac{z-1}{z-C} \quad (13)$$

Hay

$$H(z) = \frac{U(z)}{E(z)} = G_P + G_I \frac{1+z^{-1}}{1-z^{-1}} + G_D \frac{1+z^{-1}}{1-Cz^{-1}} \quad (14)$$

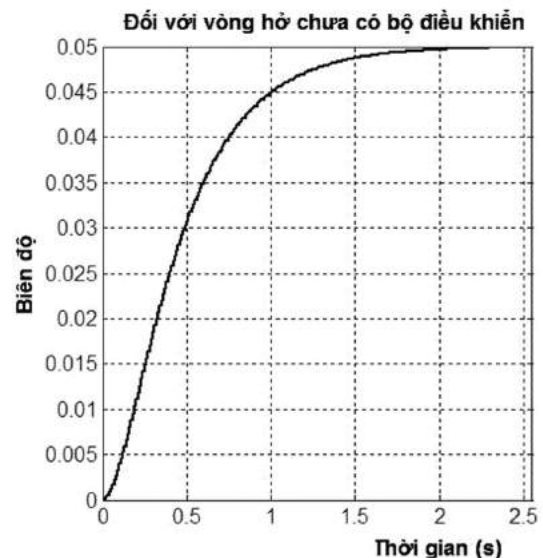
Trong đó:

$$G_P = K_P; \quad G_I = K_I \frac{T_s}{2};$$

$$G_D = \frac{2K_D}{T_s + 2T_F}; \quad C = \frac{T_s - 2T_F}{T_s + 2T_F}; \quad (15)$$

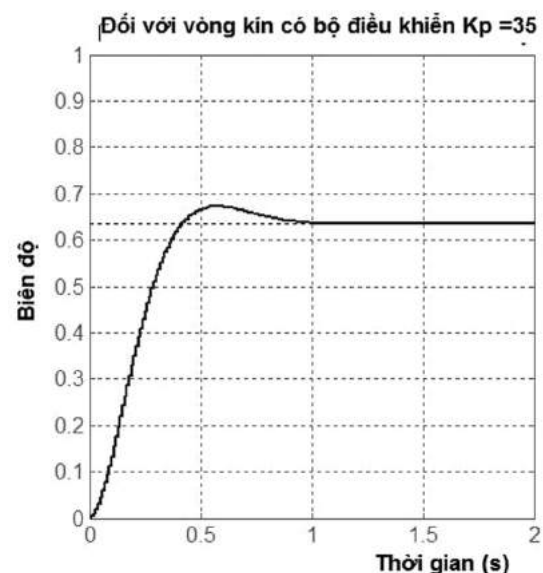
Trước tiên, chúng ta xây dựng bộ điều khiển dòng điện trên phần mềm Matlab cho đối tượng điều khiển trên. Bộ điều khiển số với chu kỳ trích mẫu  $T_s = 0.1\text{ms}$ ,  $T_F = 0.142$  kích thích đầu vào là hàm bước nhảy (Step), giá trị đặt là  $r = 1$ .

Kết quả mô tả trên **Hình 5** là hệ chưa có bộ điều khiển số nên đáp ứng đầu ra 0.05/1 (đầu vào là 1) hệ chưa xác lập ổn định.



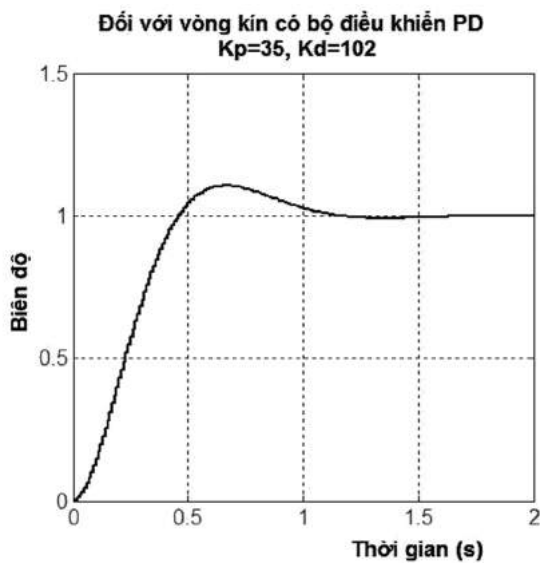
**Hình 5.** Kết quả mô phỏng khi chưa có bộ PID

Bộ điều khiển dòng điện cụ thể khâu P số được đưa thêm vào hệ thống, kết quả này được thể hiện trên **Hình 6**. Đáp ứng đầu ra 0.63 so với kích thích đầu vào 1, hệ chưa ổn định ở trạng thái xác lập.

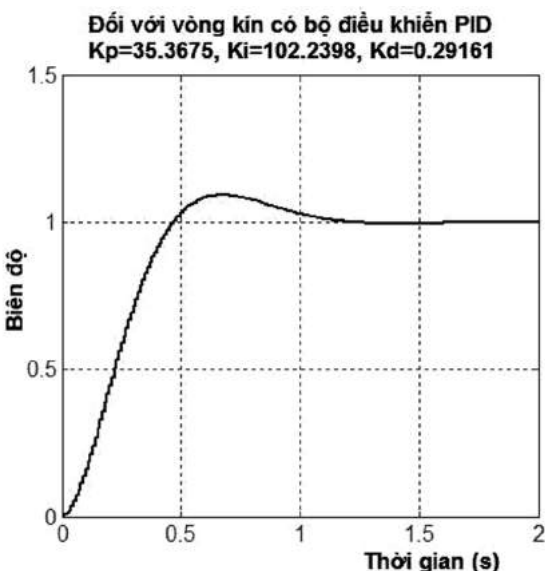


**Hình 6.** Kết quả mô phỏng khi sử dụng P

Tương tự, các bộ điều khiển PI, PID số cũng được thực hiện cho hệ thống này. Bằng kết quả tối ưu bộ điều khiển PID số trên Matlab, ta tìm được điểm ổn định cho hệ thống điều khiển **Hình 7** ứng với khâu PI số và **Hình 8** ứng với khâu PID số. Kết quả cả hai trường hợp đều ổn định xác lập tại thời điểm 1.6s và giá trị đạt được các hệ số  $K_p = 35$ ;  $K_i = 102$ ;  $K_d = 0.29$ ;  $T_s = 0.0001s$ .



**Hình 7.** Kết quả mô phỏng khi sử dụng PI



**Hình 8.** Kết quả mô phỏng khi sử dụng PID

Nhận xét: Khi thực hiện thuật toán điều khiển (**Hình 4**) trên phần mềm, hệ thống điều khiển PID số với đối tượng tổng quát cho kết quả tốt, hệ thống đáp ứng ổn định khi tối ưu hóa các hệ số  $K_p, K_i, K_d$ .

Việc mô phỏng ở các chế độ của bộ điều khiển từ P, PI, PID để chỉ ra rằng bộ điều khiển dòng điện nằm trong cùng có thể thực hiện khâu PI vẫn có thể bảo đảm độ ổn định, rút ngắn thời gian thực hiện và giảm bộ nhớ so với bộ PID khi xây dựng trên phần cứng.

**2.4. Xây dựng bộ điều khiển dòng điện trên phần cứng của FPGA**

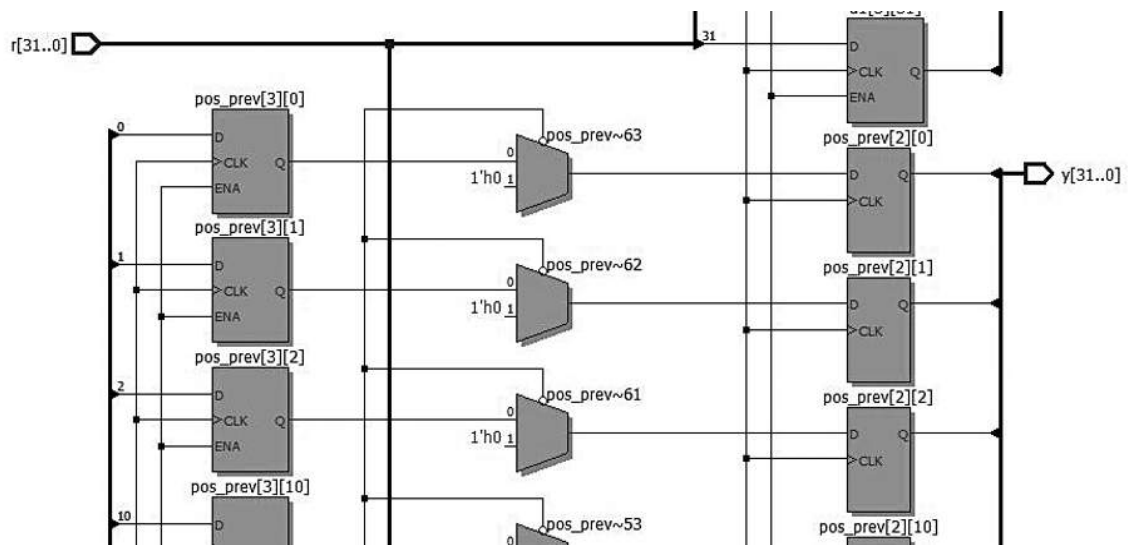
Như đã đề cập trong phần đầu, bộ điều khiển số được xây dựng trên nền tảng FPGA nhằm giảm tải vòng quét của CPU ở các thuật toán mềm, tăng khả năng đáp ứng cho các vòng điều khiển ngoài. Như đã diễn tả trên Matlab bộ điều khiển dòng điện chỉ cần khâu PI hoặc PID cũng mang lại hệ thống ổn định cho vòng trong. Vì vậy, khâu điều khiển dòng điện PI được thực hiện cứng hóa dựa trên nền tảng FPGA theo phương trình sai phân.

Từ (12), phương trình sai phân được mô tả trong trường số nguyên của FPGA:

$$10^7 y(k) = 1903.10^4 y(k-1) - 9048.10^3 y(k-2) + 238u(k) + 476u(k-1) + 238u(k-2) \quad (16)$$

Trong đó:  $e(k) = r(k) - y(k)$  (17)

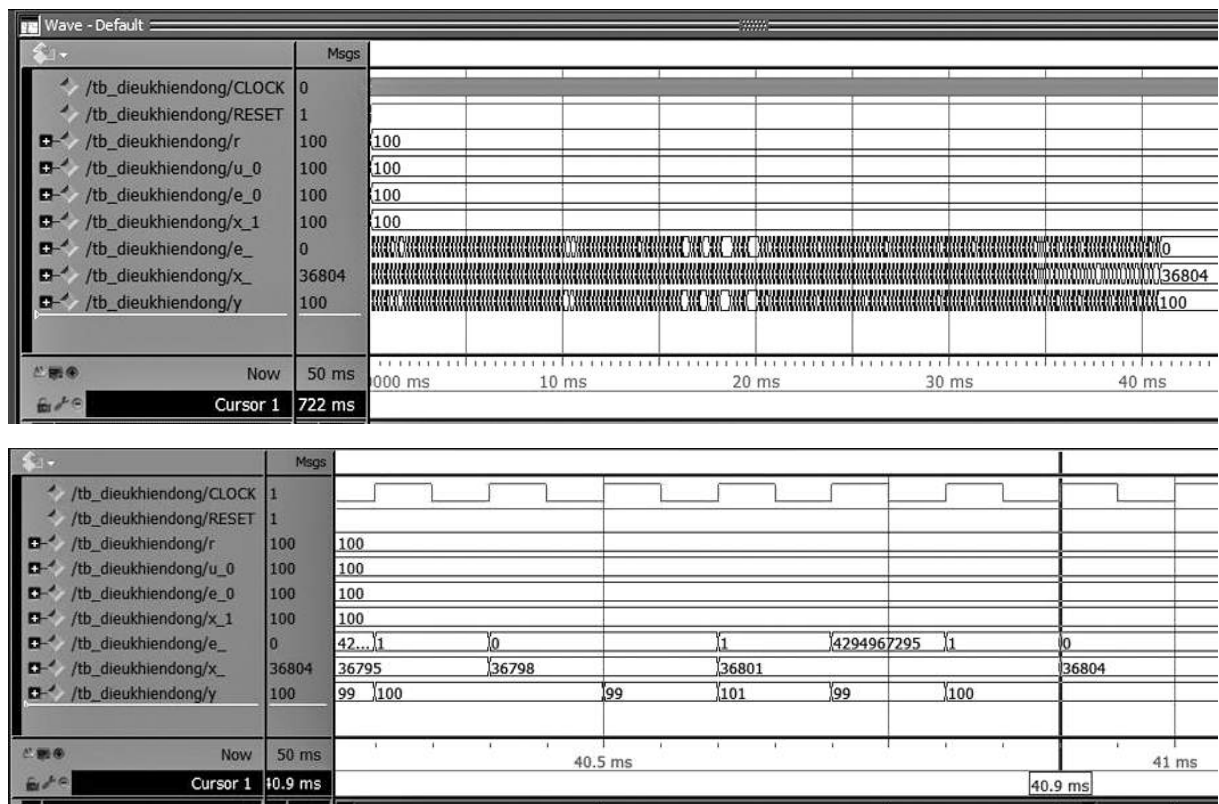
Trên **Hình 9** là một phần kết quả của hệ thống điều khiển xây dựng trên nền tảng FPGA dựa trên phương trình sai phân (16) gồm đối tượng điều khiển được cho trong (12) và bộ điều khiển số PI, ngôn ngữ lập trình phần cứng cho FPGA là Verilog.



Hình 9. Một phần cấu trúc hệ điều khiển sử dụng bộ PI số xây dựng trên nền tảng FPGA

Sau khi xây dựng hệ thống điều khiển với khâu điều khiển số PI cứng hóa trên FPGA, tác giả tiến hành mô phỏng kết quả trên phần mềm ModelSim của Altera với chu kỳ CLOCK là 0,1ms (trong thực tế hệ thống này cho phép mô phỏng lên đến 1ps), giá trị đặt  $r = 100$  (số nguyên khi thực hiện trên chip). Kết quả được chỉ ra trên Hình 10 (a-tổng thể, b là phóng lớn) cho thấy hệ

thống ổn định xác lập ở thời gian 41ms với giá trị đầu ra xác lập  $y = 100$  tương ứng giá trị đầu vào đặt  $r = 100$ . Nếu so sánh với việc mô phỏng trên Matlab thì số chu kỳ để đạt được giá trị xác lập ổn định thì ở đây đáp ứng nhanh hơn nhiều. Điều đó nhờ vào hoạt động độc lập của bộ điều khiển được thiết kế cứng, chúng không phụ thuộc vào các vòng quét của CPU.

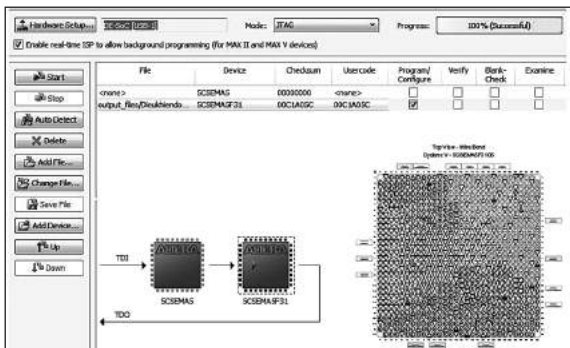


Hình 10. Kết quả mô phỏng hệ thống khi xây dựng bộ điều khiển số trên FPGA

Như vậy, ta thấy thực hiện bộ điều khiển trên phần cứng và phần mềm đều cho kết quả của hệ thống ổn định và xác lập trạng thái đáp ứng đầu ra. Đồng thời tốc độ làm việc của bộ điều khiển PI số được xây dựng trên phần cứng (Hardware) phụ thuộc vào tốc độ Clock của FPGA mà không phụ thuộc vào chu kỳ vòng quét của CPU như trước đây.

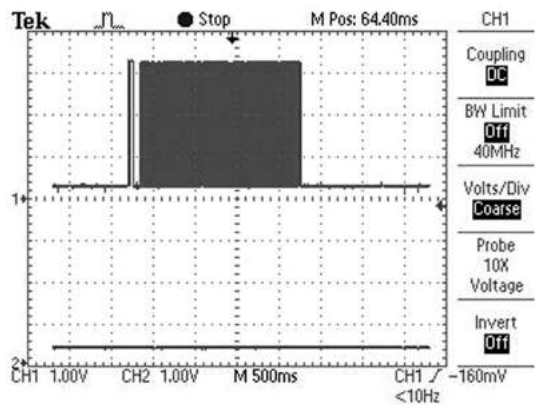
**2.4. Xây dựng hệ thống thực nghiệm**

Ưu điểm của FPGA trong việc thiết kế phần cứng một cách dễ dàng và khả năng tái cấu trúc phần cứng nhiều lần hay cho phép người dùng thay đổi cấu trúc bộ điều khiển ngay cả khi đang hoạt động. Trong nội dung mục này, tác giả thực hiện cấu hình thực nghiệm bộ điều khiển dòng điện (PI) trên nền tảng FPGA chip Cyclone V 5CSEMA5F31C6 của hãng Altera. Thực nghiệm này được thực hiện trên KIT De1SoC. Sau khi thiết kế bằng ngôn ngữ Verilog, ta tiến hành biên dịch để tạo file.sof chứa chuỗi Bitstream (nhị phân) cấu hình cho FPGA. Đối với KIT De1SoC cấu trúc 5CSEMA5F31C6 chia làm hai phần: một là lõi mềm ARM, hai là FPGA ở đây file.sof chỉ cấu hình cho phần FPGA (phần bên phải của Hình 11).

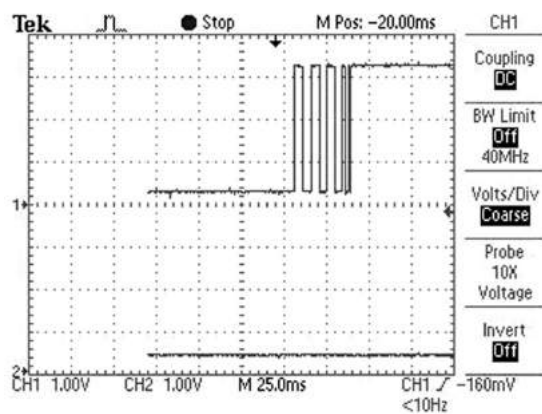


**Hình 11.** Cấu hình phần cứng trên chip Cyclone V 5CSEMA5F31C6 - KIT De1SoC Altera

Sau khi cấu hình thành công trên phần cứng FPGA, hệ thống được chạy thực trên KITDe1Soc và đo đạt đầu ra trên oscilloscope thông qua các chân đáp ứng đầu ra “y”. Kết quả Hình 12 là quá trình tổng thể và thời điểm quá trình quá độ Hình 13.

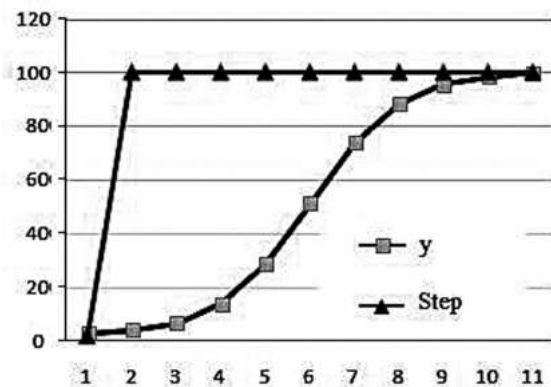


**Hình 12.** Kết quả thực nghiệm hệ thống điều khiển



**Hình 13.** Quá trình quá độ của thực nghiệm

Để dễ dàng biểu diễn trạng thái đáp ứng đầu ra, ta tiếp tục tiến hành thay đổi tần số hiển thị biểu diễn các kết quả thực nghiệm khi truy xuất các số liệu thực nghiệm từ file.xls trên oscilloscope điện tử và xây dựng biểu đồ như Hình 14.



**Hình 14.** Biểu diễn hệ thống đáp ứng đầu ra “y” và kích thích đầu vào từ các số liệu thực nghiệm

Một lần nữa, kết quả thực nghiệm cho thấy việc xây dựng bộ điều khiển dòng điện trên nền

tảng FPGA là hoàn toàn phù hợp hướng nghiên cứu trong tương lai và tiến đến ứng dụng trên các thiết bị điều khiển thương mại.

### 3. KẾT LUẬN

Với nội dung thực hiện ở trên, bài báo đã đưa ra được các vấn đề sau đây: Đề xuất xây dựng bộ điều khiển dòng điện (cụ thể PI, hoặc PID) trên nền FPGA là hoàn toàn hợp lý. Việc xây dựng bộ điều khiển dòng điện trên phần cứng giúp giảm tải cho CPU và tăng khả năng đáp ứng, rút ngắn thời gian thực hiện điều khiển.

Bằng kết quả mô phỏng trên phần mềm ModelSim và thực nghiệm trên KITDe1SoC cho kết quả đáp ứng tốt, thời gian xác lập nhanh, không phụ thuộc vào chu trình phần mềm.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. W. Wang and P. Zhao. Application of kalman filter in the CNC servo control system, *Symp. Secur. Detect. Inf. Process.*, **2010**, 7, 442-446.
2. Y. C. Xiaohong Wang, Zhiffeng Pan, Thi Thu Giang Hoang, Liafang Tian. New Repetitive current controller for PWM Rectifier, *IFAC International Fed. Autom. Control.*, **2018**, 154-159.
3. E. R. Alphonsus and M. O. Abdullah. A review on the applications of programmable logic controllers (PLCs), *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **2016**, 60, 1185-1205.
4. P. Ponce, A. Molina, G. Tello, L. Ibarra, B. MacCleery, and M. Ramirez. Experimental study for FPGA pid position controller in CNC Micro-machines, *IFAC Proc. Vol.*, **2015**, 48(3), 2203-2207.
5. M. Aboelaze and M. G. Shehata. Implementation of Multiple PID Controllers on, *978-1-5090-0246-7/15/2015 IEEE*, **2015**, 446-449.
6. L. Kong, L. Zhu, L. Zhang, H. Bao, and C. Rao. Real-Time Controller Based on FPGA and DSP for Solar Ground Layer Adaptive Optics Prototype System at 1-m NVST, *IEEE Photonics J.*, **2017**, 9(2), 1-11.
7. B. D. Reddy, N. K. Anish, M. P. Selvan, and S. Moorthi. Embedded control of n-level DC-DC-AC inverter, *IEEE Trans. Power Electron.*, **2015**, 30(7), 3703-3711.
8. J. Karttunen, S. Kallio, J. Honkanen, P. Peltoniemi, and P. Silventoinen. Stability and performance of current harmonic controllers for multiphase PMSMs, *Control Eng. Pract.*, **2017**, 65, 59-69.
9. M. R. Stanković, S. M. Manojlović, S. M. Simić, S. T. Mitrović, and M. B. Naumović. FPGA system-level based design of multi-axis ADRC controller, *Mechatronics*, **2016**, 40, 146-155.
10. Q. Tang, L. Jiang, X. X. Liu, and Q. Dai. A real-time updatable FPGA-based architecture for fast regular expression matching, *Procedia Comput. Sci.*, **2014**, 31(2014), 852-859.
11. J. V. Frances-Villora, A. Rosado-Muñoz, J. M. Martínez-Villena, M. Bataller-Mompean, J. F. Guerrero, and M. Wegrzyn. Hardware implementation of real-time Extreme Learning Machine in FPGA: Analysis of precision, resource occupation and performance, *Comput. Electr. Eng.*, **2016**, 51, 139-156.
12. Y. Chen, B. Xie, and E. Mao. Electric Tractor Motor Drive Control Based on FPGA, *IFAC-PapersOnLine*, **2016**, 49(16), 271-276.
13. M. Curkovic, K. Jezernik, and R. Horvat. FPGA-based predictive sliding mode controller of a three-phase inverter, *IEEE Trans. Ind. Electron.*, **2013**, 60(2), 637-644.
14. J. Cigánek, M. Kocúr, and Š. Kozák. Hardware Realization of Advanced Controller Design Methods using FPGA, *IFAC-PapersOnLine*, **2016**, 49(5), 163-168.
15. M. Hanifzadegan and R. Nagamune. Contouring Control of CNC Machine Tools Based on Linear Parameter-Varying Controllers, *IEEE/ASME Trans. Mechatronics*, **2016**, 21(5), 2522-2530.
16. Nguyen Phung Quang. *Điều khiển tự động truyền động điện xoay chiều 3 pha*, Nxb Giáo Dục, 1998.
17. V. B. Patel and R. H. Acharya. Design of FPGA-based All Digital PID Controller for Dynamic Systems, *Int. J. Adv. Res. Electr. Electron. Instrum. Eng. Vol. 1, Issue 2*, **2012**, 1(2), 64-72.
18. G. Zhao, Y. Zhao, A. Dong, and L. Zhang. Research on Nonlinear PID Position Controller of CNC System, *2007 IEEE Int. Conf. Autom. Logist.*, **2007**, 2446-2450.

## **An IoT application for power monitoring system: A case study of 220VAC low voltage load**

**Ho Van Trinh<sup>1,2</sup>, Le Van Tho<sup>3</sup>, Ngo Minh Khoa<sup>4,\*</sup>**

*<sup>1</sup>Graduate student course 21, Faculty of Engineering and Technology, Quy Nhon University, Vietnam*

*<sup>2</sup>Binh Dinh College (Campus 2 - Hoai Nhon), Vietnam*

*<sup>3</sup>Undergraduate student course 38, Faculty of Engineering and Technology, Quy Nhon University, Vietnam*

*<sup>4</sup>Faculty of Engineering and Technology, Quy Nhon University, Vietnam*

*Received: 18/12/2019; Accepted: 10/02/2020*

### **ABSTRACT**

An IoT technology based on Thingspeak cloud is studied in this paper to design a power monitoring system of 220VAC low voltage networks. The hardware unit of this system is designed by using modules including PZEM004T, Wemos D1 R1 Arduino with ESP8266 module. This system can easily measure, acquire and monitor electrical quantities including voltage, current, active power and consumption energy of 220VAC low voltage loads. The system in this paper shows the application of Thingspeak cloud for power monitoring at two different locations of low voltage loads via Internet.

**Keywords:** *IoT, control and monitoring, electric energy, PZEM004T, Wemos D1 R1.*

---

*\*Corresponding author.*

*Email: ngominhkhoa@qnu.edu.vn*

# Ứng dụng công nghệ IoT thiết kế hệ thống giám sát điện năng: Áp dụng cho phụ tải điện hạ áp 220VAC

Hồ Văn Trinh<sup>1,2</sup>, Lê Văn Thọ<sup>3</sup>, Ngô Minh Khoa<sup>4,\*</sup>

<sup>1</sup>Học viên cao học K21, Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

<sup>2</sup>Trường Cao đẳng Bình Định (Cơ sở 2 - Hoài Nhơn), Việt Nam

<sup>3</sup>Sinh viên K38, Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

<sup>4</sup>Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

Ngày nhận bài: 18/12/2019; Ngày nhận đăng: 10/02/2020

## TÓM TẮT

Công nghệ IoT trên nền tảng Thingspeak cloud được nghiên cứu ứng dụng trong bài báo này để thiết kế hệ thống giám sát điện năng đối với mạng điện hạ áp 220VAC. Phần cứng của hệ thống được thiết kế bằng cách sử dụng các mô-đun bao gồm: PZEM004T, Wemos D1 R1 Arduino có tích hợp mô-đun ESP8266. Hệ thống này có thể dễ dàng đo lường, thu thập và giám sát các thông số như: điện áp, dòng điện, công suất tác dụng, điện năng tiêu thụ của các phụ tải điện hạ áp 220VAC. Hệ thống trong bài báo này thể hiện ứng dụng Thingspeak để giám sát điện năng tại hai vị trí phụ tải điện hạ áp khác nhau thông qua Internet.

**Từ khóa:** Công nghệ IoT, điều khiển giám sát, điện năng, PZEM004T, Wemos D1 R1.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hiện nay, công nghệ IoT đang là xu thế phát triển đối với các tập đoàn công nghệ trên thế giới. IoT cơ bản là sự kết nối của các thiết bị với Internet, trong đó các thiết bị điện phải giao tiếp với nhau và giao tiếp với máy tính bằng cũng như với Internet để tạo thành một hệ thống thông minh trao đổi dữ liệu, điều khiển lẫn nhau. IoT đang trở thành xu hướng công nghệ ảnh hưởng ngày càng lớn tới đời sống của cả thế giới và có ứng dụng vô cùng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực trong tương lai, trong đó có ngành điện. Trong hệ thống điện, việc ứng dụng công nghệ IoT có thể cải thiện đáng kể hiệu quả và khả năng vận hành của lưới điện thông minh hiện nay.<sup>1,2</sup> Trong đó, hai công trình này đã trình bày tổng quan về vai trò, tác động và những thách thức của việc ứng

dụng công nghệ IoT trong các hệ thống điện<sup>1</sup> và các hệ thống cảm biến hiện đại trong hệ thống điện trong tương lai.<sup>2</sup>

Liên quan đến lĩnh vực nghiên cứu của bài báo, hệ thống thu thập dữ liệu điện năng tiêu thụ của mỗi ngôi nhà thông minh và truyền dữ liệu đó đến server trung tâm để phục vụ xử lý và phân tích sau đó.<sup>3</sup> Hệ thống giám sát điện áp và dòng điện thông minh được đề xuất;<sup>4</sup> nó giám sát hệ thống điện ba pha sử dụng Arduino như là một bộ vi điều khiển để đọc điện áp và dòng điện từ các cảm biến, sau đó truyền không dây các dữ liệu đo lường để giám sát kết quả đo sử dụng ứng dụng Android. Một hệ thống quản lý ngôi nhà được điều khiển bằng các thiết bị di động bằng cách tích hợp Arduino với AppInventor.<sup>5</sup> Trong khi đó, một phương pháp để giám sát

\*Tác giả liên hệ chính.

Email: ngominhkhoa@qnu.edu.vn



các tham số chất lượng điện năng bằng cách sử dụng Ethernet dựa trên đo đếm điện năng thông minh.<sup>6</sup> Dữ liệu điện năng tiêu thụ được truyền đến server bằng thiết bị đo năng lượng thông minh và lưu trữ ở đó; chương trình LabVIEW cũng được sử dụng để phân tích dữ liệu từ server và các thông số chất lượng điện năng cũng được tính toán. Bộ mạch Arduino cũng được nghiên cứu ứng dụng để thiết kế hệ thống đo đếm điện năng thông minh.<sup>7,8</sup>

Như vậy việc ứng dụng công nghệ IoT trong việc thiết kế hệ thống giám sát chất lượng điện năng là một hướng đang được quan tâm nghiên cứu hiện nay. Bài báo này nghiên cứu đề xuất ứng dụng công nghệ IoT dựa trên nền tảng Thingspeak để thiết kế hệ thống giám sát điện năng tại 2 vị trí phụ tải điện hạ áp 220VAC khác nhau. Cấu trúc phần cứng của hệ thống sử dụng các thiết bị như PZEM004T, bo mạch Wemos D1 R1 Arduino, môđun role,... để thực hiện tính năng thu thập, xử lý, tính toán và hiển thị các thông số tại các vị trí giám sát.

**2. THIẾT KẾ PHẦN CỨNG**

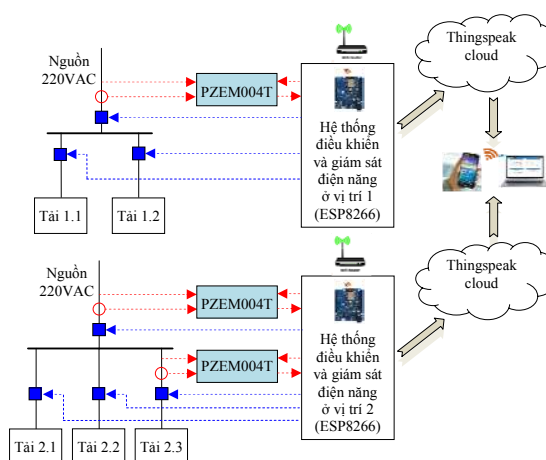
Trong bài báo này, các tác giả tập trung đi vào thiết kế hệ thống giám sát điện năng ở 2 vị trí khác nhau dựa trên nền Webpage Thingspeak cho đối tượng là các phụ tải điện một pha 220VAC. Phần mạch lực của hệ thống thiết kế được thể hiện như hình 1. Hai vị trí cần giám sát điện năng của hệ thống được mô tả như sau:

+ *Vị trí 1*: phần mạch lực gồm có một mạch nguồn cung cấp và hai mạch tải (tải 1.1 và tải 1.2). Các tín hiệu dòng điện và điện áp ở mạch nguồn được thu thập bằng môđun PZEM004T và đưa về bộ xử lý trung tâm (Wemos D1 R1) của hệ thống ở vị trí 1.

+ *Vị trí 2*: phần mạch lực gồm có một mạch nguồn cung cấp và 2 mạch tải (tải 2.1, tải 2.2 và tải 2.3). Các tín hiệu điện áp, dòng điện ở mạch nguồn cung cấp và một mạch tải

2.3 (giả định là mạch tải quan trọng tại vị trí 2 cần giám sát điện năng) được thu thập bằng hai môđun PZEM004T và đưa về bộ xử lý trung tâm (Wemos D1 R1) của hệ thống ở vị trí 2.

Sau khi thu thập được các giá trị điện áp, dòng điện, công suất tác dụng, điện năng tiêu thụ tại các vị trí cần giám sát, hệ thống tại mỗi vị trí sẽ gửi các giá trị này lên Thingspeak cloud, sau đó từ Thingspeak cloud sẽ gửi lên Webpage Thingspeak và hiển thị kết quả thông số giám sát của phụ tải dưới các dạng đồ thị.

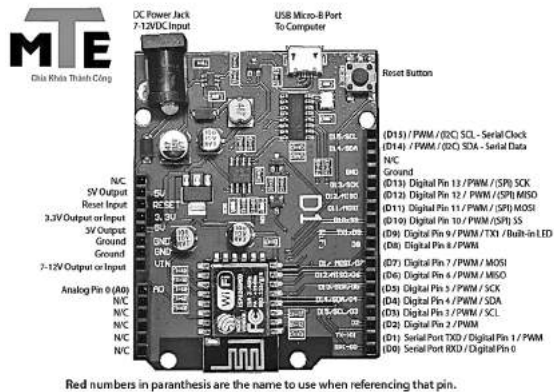


**Hình 1.** Sơ đồ hệ thống điều khiển, giám sát điện năng qua Thingspeak.

Phần cứng của hệ thống được thiết kế dựa trên phần mô tả đã trình bày ở trên. Các môđun chính của hệ thống được trình bày như sau:

**2.1. Môđun Wemos D1 R1 Arduino**

Wemos D1 R1 Arduino được thể hiện trong hình 2 là board mạch được phát triển dựa trên Môđun ESP8266-12E và được thiết kế theo tiêu chuẩn của board mạch Arduino UNO, tương thích với Arduino IDE và NodeMCU. Wemos D1 R1 Arduino được tích hợp Wifi, dễ dàng thực hiện các ứng dụng thu thập dữ liệu và điều khiển thiết bị thông qua Wifi. Nó có khả năng chuyển đổi điện áp trên board, cho phép cấp 1 điện áp DC 9-24V để chuyển đổi thành 5V với dòng tối đa 1A.



Hình 2. Mô đun Wemos D1 R1 Arduino.

### 2.2. Mô đun PZEM004T

Mạch đo điện AC đa năng 100A giao tiếp UART PZEM-004T được thể hiện trong hình 3 được sử dụng để đo và theo dõi gần như hoàn toàn các thông số về điện năng: điện áp, dòng điện, công suất và điện năng tiêu thụ. Mô đun này sử dụng giao tiếp UART để dàng kết nối truyền dữ liệu tới bộ vi điều khiển hoặc máy tính, thích hợp cho các ứng dụng giám sát điện năng, IoT,... Mạch đo điện AC đa năng 100A giao tiếp UART PZEM-004T nhỏ gọn, dễ lắp đặt, sử dụng cách đo dòng cách ly an toàn và khả năng đo dòng lên đến 100A, mạch có chất lượng gia công và linh kiện tốt, độ bền cao. Các chức năng chính của PZEM004T:

- Chức năng đo các thông số điện (điện áp, dòng điện, công suất, điện năng).
- Chức năng báo động quá tải (trên ngưỡng báo động điện, đèn flash nguồn và còi kêu kíp báo động).
- Chức năng cài đặt ngưỡng báo động nguồn.
- Chức năng cài đặt lại của phím năng lượng.
- Lưu trữ dữ liệu khi tắt nguồn
- Chức năng hiển thị số màu đỏ (hiển thị điện áp, dòng điện, công suất, điện năng).
- Chức năng giao tiếp nối tiếp (có thể giao tiếp với một loạt các thiết bị đầu cuối thông qua các chân, đọc và thiết lập thông số).



Hình 3. Hình ảnh PZEM004T trên thực tế.

### 2.3. Mô đun role 4 kênh

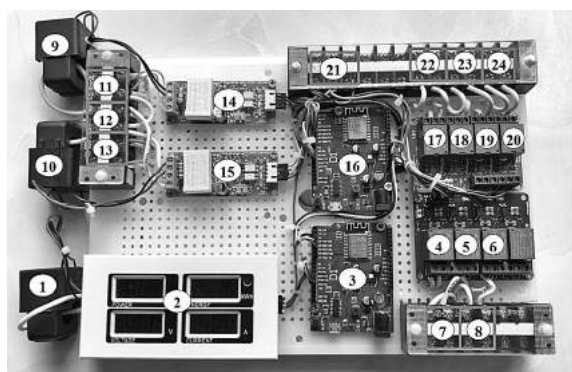
Mô đun role 4 kênh 5V gồm 4 role hoạt động tại điện áp 5VDC chịu được hiệu điện thế lên đến 250VAC 10A. Mô đun role 4 kênh 5V được thiết kế chắc chắn, khả năng cách điện tốt. Trên mô đun đã có sẵn mạch kích role sử dụng transistor và IC cách ly quang giúp cách ly hoàn toàn mạch điều khiển (vi điều khiển) với role bảo đảm vi điều khiển hoạt động ổn định và tiện dụng khi kết nối với vi điều khiển. Mô đun role 4 kênh sử dụng chân kích mức thấp (0V), khi có tín hiệu 0V vào chân IN thì role sẽ nhảy qua thường hở của role.



Hình 4. Mô đun role 4 kênh.

### 2.4. Tổng thể phần cứng

Sau khi thiết kế sơ đồ lắp ráp chi tiết, tác giả tiến hành lắp ráp hệ thống thực nghiệm như hình 5.



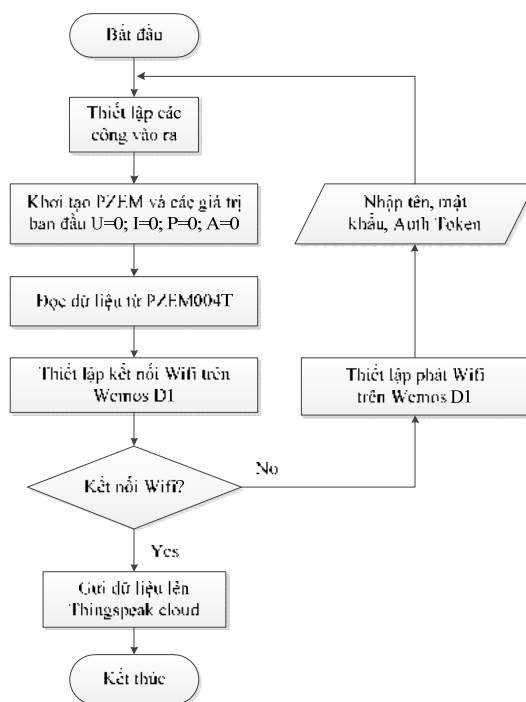
Hình 5. Mô hình thực tế sau khi lắp đặt.

Chú thích:

1. Máy biến dòng của mạch nguồn 1.
2. Môđun PZEM004T mạch nguồn ở vị trí 1.
3. Môđun Wemos D1 R1 ở vị trí 1.
4. Role đóng/cắt mạch nguồn ở vị trí 1.
5. Role đóng/cắt mạch tải 1.1.
6. Role đóng/cắt mạch tải 1.2.
7. Ngõ ra của mạch tải 1.1.
8. Ngõ ra của mạch tải 1.2.
9. Máy biến dòng của mạch nguồn 2.
10. Máy biến dòng của mạch tải 2.3.
11. Ngõ vào nguồn cấp 220V vị trí 2.
12. Ngõ vào đo điện áp ở tải 3 vị trí 2.
13. Ngõ vào nguồn cấp 220V vị trí 1.
14. Môđun PZEM004T mạch nguồn ở vị trí 2.
15. Môđun PZEM004T mạch tải 2.3 ở vị trí 2.
16. Môđun Wemos D1 R1 ở vị trí 2.
17. Role đóng /cắt mạch nguồn ở vị trí 2.
18. Role đóng /cắt mạch tải 2.1 ở vị trí 2.
19. Role đóng /cắt mạch tải 2.2 ở vị trí 2.
20. Role đóng /cắt mạch tải 2.3 ở vị trí 2.
21. Ngõ vào nguồn 5V và 9V.
22. Ngõ ra của tải 2.1 ở vị trí 2.
23. Ngõ ra của tải 2.2 ở vị trí 2.
24. Ngõ ra của tải 2.3 ở vị trí 2.

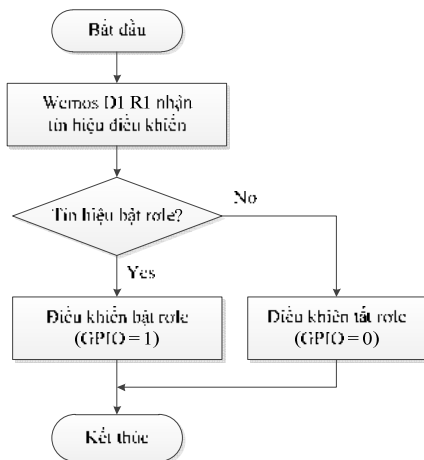
### 3. THIẾT KẾ PHẦN MỀM

Lưu đồ thuật toán gửi dữ liệu lên Internet của hệ thống được thể hiện trong hình 6. Bắt đầu thiết lập các cổng vào, khởi tạo các giá trị ban đầu, khởi tạo PZEM004T. Sau đó đọc dữ liệu từ PZEM004T, thiết lập kết nối Wifi trên Wemos D1 R1. Nếu có kết nối Wifi thì gửi các giá trị đọc được từ PZEM004T lên Thingspeak cloud. Nếu không kết nối được Wifi (nguyên nhân do đổi mật khẩu hay đứt cáp Wifi) thì hệ thống sẽ thiết lập phát Wifi trên Wemos D1 R1. Sau đó ta sẽ kết nối vào điểm truy cập Wifi của Wemos D1 R1 phát ra, tiếp theo ta mở trình duyệt web nhập Ip 192.168.4.1 để đổi tên và mật khẩu Wifi mới sau đó lưu vào EEPROM ESP8266. Nhấn nút reset để bắt đầu lại chương trình.



Hình 6. Lưu đồ thuật toán gửi dữ liệu lên Internet.

Sau khi nhận được tín hiệu điều khiển từ Wemos D1 R1 bắt đầu điều khiển các role. Nếu nhận được tín hiệu bật role thì Wemos D1 R1 thực hiện sẽ đưa chân role về mức cao để điều khiển bật role vì role điều khiển bật ở mức cao. Nếu nhận được tín hiệu tắt role thì Wemos D1 R1 thực hiện sẽ đưa chân role về mức thấp để điều khiển tắt role vì role điều khiển tắt ở mức thấp.



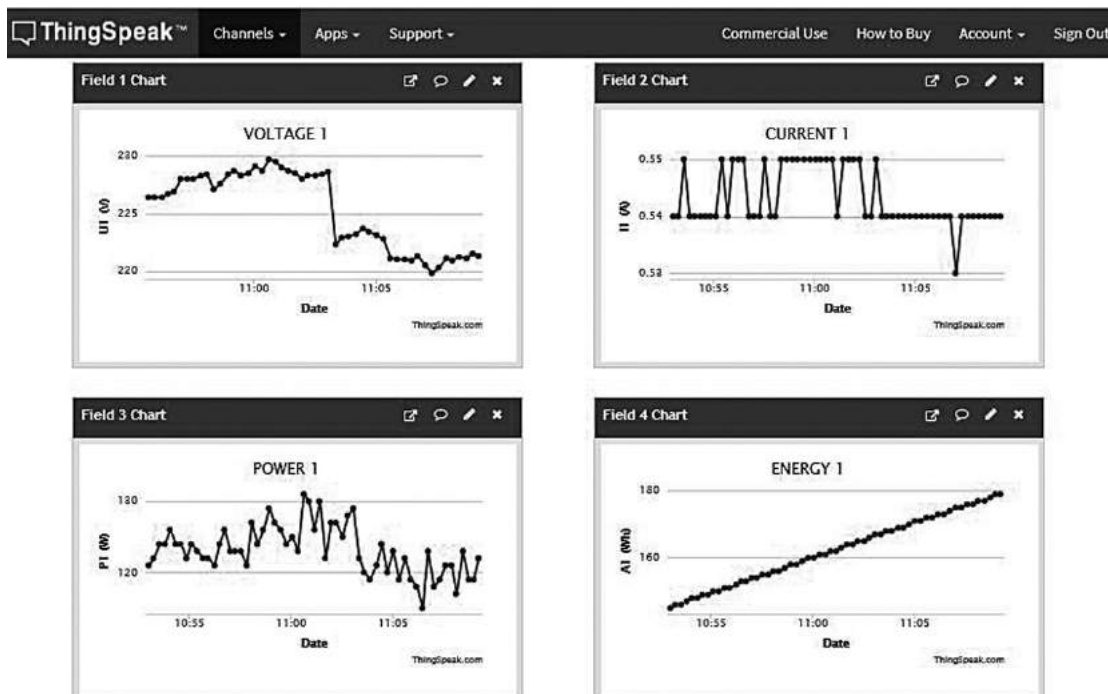
**Hình 7.** Lưu đồ thuật toán điều khiển role.

**4. CÁC KẾT QUẢ THỰC NGHIỆM**

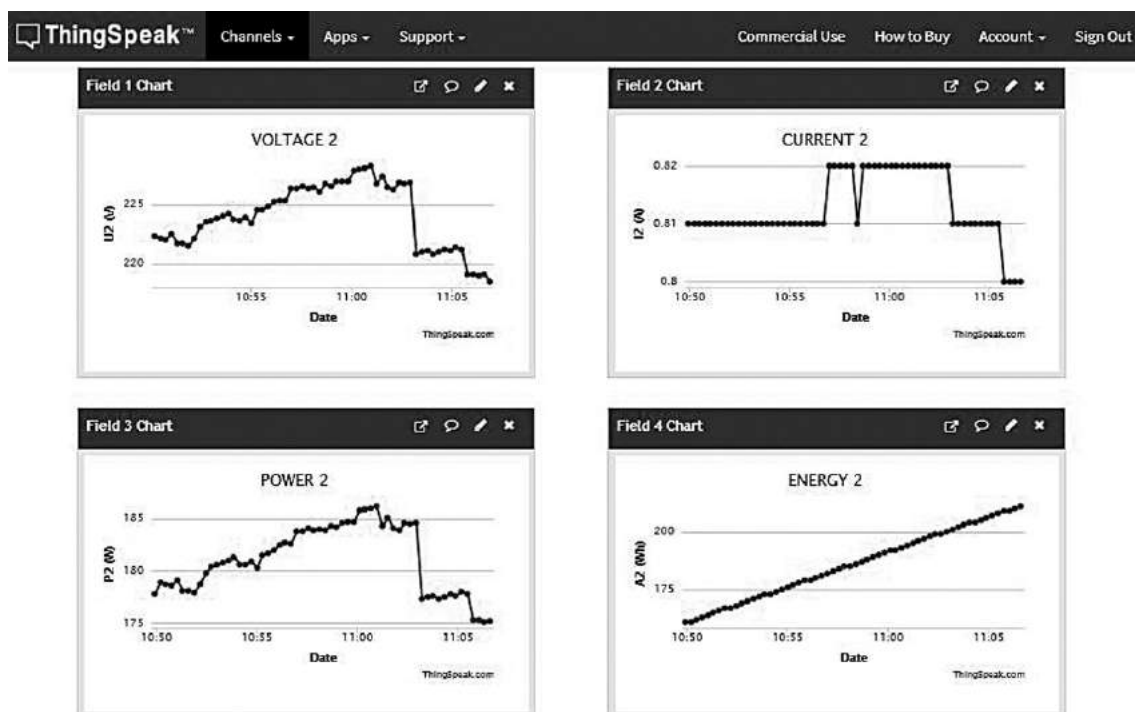
Sau khi thiết kế phần cứng và phần mềm của hệ thống, bài báo tiếp tục đi vào thực nghiệm để thu thập kết quả so sánh, đánh giá và phân tích hiệu quả của hệ thống đã thiết kế. Với đối tượng là hệ thống một pha 220VAC và tính thông dụng, nên phụ tải thông dụng được tác giả sử dụng để làm thực nghiệm trong bài báo này là 5 bóng đèn sợi tóc 60W 220VAC. Sau khi kết nối phần mạch lực và cấp nguồn cho mạch điều khiển và đo lường thì hệ thống sẽ bắt đầu làm việc bình thường. Khai báo tài khoản và mật khẩu của

mạng Internet Wifi tại nơi đặt hệ thống để kết nối hệ thống với Internet Wifi. Khi đó, các thông số đo được sẽ hiển thị trực tiếp lên màn hình PZEM004T của hệ thống giúp ta có thể giám sát được trạng thái vận hành của hệ thống tại chỗ. Ngoài ra, để có thể giám sát điều khiển từ xa thông qua máy tính hoặc smartphone cũng phải được kết nối với mạng Internet Wifi (có thể cùng mạng hoặc khác mạng với Internet Wifi kết nối với hệ thống) thì lúc này ta có thể mở Webpage Thingspeak trên máy tính hoặc smartphone để thực hiện các chức năng giám sát của hệ thống.

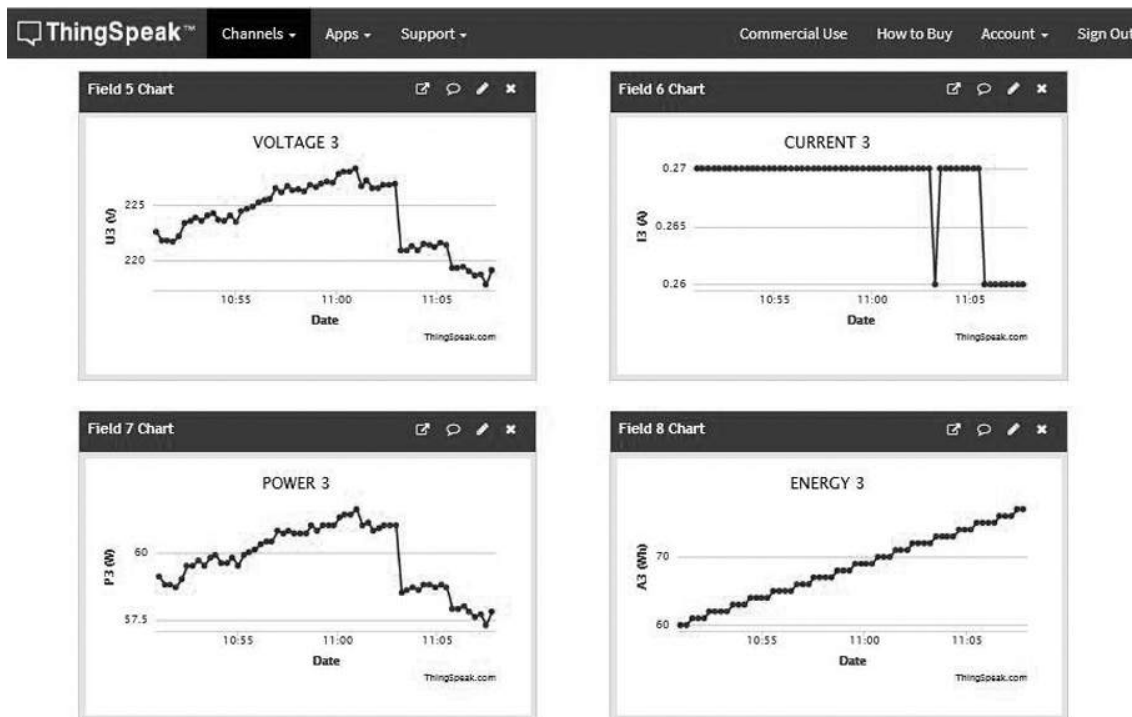
Kết quả giao diện ở hình 8, hình 9 và hình 10 hiển thị dưới dạng đồ thị giúp khách hàng có thể giám sát trực quan hình dạng thay đổi của các đại lượng đo được theo thời gian thực. Nghĩa là khách hàng có thể sử dụng kết quả này để theo dõi khi nào điện áp, công suất tiêu thụ tăng/giảm. Bên cạnh đó, toàn bộ dữ liệu ở các đồ thị này có thể được xuất ra toàn bộ file \*.csv để phục vụ công việc khác khi cần thiết. Các đồ thị trên Thingspeak chỉ có thể hiển thị được số mẫu trong một khoảng thời gian nhất định còn đối với việc lưu dữ liệu dưới dạng file \*.csv thì hệ thống có thể lưu trữ dữ liệu với khoảng thời gian dài hơn.



**Hình 8.** Kết quả giám sát thông số mạch nguồn ở vị trí 1 hiển thị trên Thingspeak.



Hình 9. Kết quả giám sát thông số mạch nguồn ở vị trí 2 hiển thị trên Thingspeak.



Hình 10. Kết quả thông số mạch tải 2.3 ở vị trí 2 hiển thị trên Thingspeak.

### 5. KẾT LUẬN

Hệ thống giám sát điện năng: Áp dụng cho phụ tải điện hạ áp 220VAC thiết kế trong bài báo này có thể thực hiện các chức năng giám sát trong thời gian thực các thông số: điện áp, dòng điện,

công suất tác dụng, điện năng tiêu thụ,... bằng cách hiển thị thông số lên màn hình PZEM004T, có thể giám sát ở nhiều vị trí và có thể giám sát thông số thông qua máy tính hoặc smartphone có kết nối với hệ thống thông qua phương thức

truyền thông mạng Internet Wifi. Do đó, khách hàng có thể truy cập ở bất kỳ nơi nào, bất kỳ thời điểm nào miễn là có thể truy cập được Internet, 3G, 4G thì người vận hành có thể quản lý và giám sát hệ thống của mình. Với tính theo dõi lượng điện năng tiêu thụ của phụ tải, xuất báo cáo các thông số đo được đến khách hàng sử dụng điện. Các kết quả trên màn hình giám sát được hiển thị dưới đồ thị để giúp khách hàng dễ dàng theo dõi tình trạng làm việc của hệ thống được cập nhật liên tục theo thời gian thực.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bùi Đăng Thành, Giang Hồng Quân, Nguyễn Hoàng Nam. Lưới điện thông minh và khả năng ứng dụng ở Việt Nam, *Tạp chí tự động hóa ngày nay*, **2016**, 178-179.
2. Nguyễn Đức Khoát, Khổng Cao Phong. Hệ thống quản lý & giám sát tiêu thụ điện năng, *Tạp chí tự động hóa ngày nay*, Số 153 (10/2013).
3. Nguyễn Trung Kiên. *Xây dựng hệ thống điều khiển giám sát*, luận văn thạc sĩ, Trường ĐHBK Hà Nội, 2013.
4. Thiều Minh Đức, Nguyễn Hoàng Nam, Bùi Đăng Thành, Nguyễn Huy Phương, Trịnh Công Đồng. Ứng dụng kiến trúc mở Arduino trong thiết kế thiết bị giám sát điện năng không dây, *Hội nghị toàn quốc lần thứ 3 về Điều khiển và Tự động hóa - VCCA*, 2015.
5. Mohannad Jabbar Mnati, Alex Van den Bossche and Raad Farhood Chisab. Smart Voltage and Current Monitoring System for Three Phase Inverters Using an Android Smartphone Application, *Sensors* **2017**, 17(4).
6. P. Srividya Devi, D.V. Pusphalatha and P.M. Sharma. Measurement of Power and Energy Using Arduino, *Research Journal of Engineering Sciences*, **2013**, 2(10), 10-15.
7. K. N. Ramli, A. Joret and N. H. Saad. Development of Home Energy Management System Using Arduino, **2014**.
8. P.P. Machado Jr, T.P. Abud, M.Z. Fortes, B.S.M.C. Borba. Power factor metering system using Arduino, *2017 IEEE Workshop on Power Electronics and Power Quality Applications*, Bogota, Colombia, 31 May-2 June 2017.

## The fish species composition diversity in Thi Nai lagoon, Binh Dinh province

Vo Van Chi\*, Nguyen Thi Phuong Hien

*Faculty of Natural Sciences, Quy Nhon University, Vietnam*

*Received: 08/12/2019; Accepted: 08/01/2020*

### ABSTRACT

This study was conducted to investigate the species composition diversity of fish in Thi Nai lagoon. The fish samples were collected every month and classified to species level. The fish species composition in Thi Nai lagoon was diverse, including 95 species, 81 genera in 55 families and 16 orders. On average, each order had 3,44 families, 5,06 genera và 5,94 species; each family had 1,47 genera and 1,73 species; each genus had 1,17 species. Of which, there were 7 species considered as vulnerable species in the Vietnam's Red Data Book. The fish fauna of Thi Nai is more diverse in order and family level but less abundant in genus and species level than other adjacent faunas. In general, the results of this study offered important data of fish diversity in Thi Nai lagoon to take a part in conserving fish resource in future.

**Keywords:** *Thi Nai lagoon, diversity of fish, fish species composition.*

---

\*Corresponding author.

Email: vovanchi@qnu.edu.vn

# Đa dạng thành phần loài cá ở đầm Thị Nại, tỉnh Bình Định

Võ Văn Chí\*, Nguyễn Thị Phương Hiền

Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Quy Nhơn, Việt Nam

Ngày nhận bài: 08/12/2019; Ngày nhận đăng: 08/01/2020

## TÓM TẮT

Nghiên cứu này được thực hiện để khảo sát sự đa dạng thành phần loài cá của khu hệ đầm Thị Nại. Các mẫu cá được thu thập định kỳ hàng tháng và được phân loại đến cấp loài. Thành phần loài cá ở đầm Thị Nại khá đa dạng, gồm có 95 loài, 81 giống nằm trong 55 họ thuộc 16 bộ. Trung bình mỗi bộ có 3,44 họ, 5,06 giống và 5,94 loài; mỗi họ có 1,47 giống và 1,73 loài; mỗi giống có 1,17 loài. Trong đó, có 7 loài cá thuộc diện sẽ nguy cấp theo danh mục của sách đỏ Việt Nam. Khu hệ cá đầm Thị Nại có sự đa dạng về bộ và họ nhưng ít đa dạng về giống và loài so với các khu hệ lân cận khác. Nhìn chung, kết quả của nghiên cứu này đã cung cấp những dẫn liệu quan trọng về đa dạng cá ở khu hệ đầm Thị Nại để góp phần vào việc quản lý nguồn lợi cá sau này.

**Từ khóa:** Đầm Thị Nại, đa dạng cá, thành phần loài cá.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Đầm Thị Nại là đầm lớn thứ hai trong số các đầm phá ở Việt Nam, nằm ở cực nam tỉnh Bình Định, được bao bọc bởi thành phố Quy Nhơn và huyện Tuy Phước. Đầm Thị Nại có diện tích tự nhiên khoảng 5.060 ha. Đây là một trong những đầm phá thể hiện nét đặc trưng về một hệ sinh thái của vùng đất ngập nước ở khu vực miền Trung Việt Nam, với sự đa dạng về nơi sống của sinh vật như rừng ngập mặn, thảm cỏ biển,... Vì vậy, đầm Thị Nại là nơi cư trú, kiếm ăn, sinh sản và ương giống của nhiều loài thủy sản.

Trong thời gian gần đây, nhiều hoạt động kinh tế - xã hội như khai thác, nuôi trồng thủy sản và sản xuất nông nghiệp diễn ra trong đầm và các vùng lân cận đã có những tác động nhất định đến hệ sinh thái tự nhiên của đầm, điều này

có thể ảnh hưởng đến tính bền vững của nguồn lợi thủy sản nói chung và nguồn lợi cá nói riêng. Vì vậy, nghiên cứu đa dạng thành phần loài cá đầm Thị Nại là cần thiết để cung cấp những dẫn liệu cho việc quản lý nguồn lợi cá ở khu hệ này trong tương lai.

## 2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Mẫu cá được thu trực tiếp từ ngư dân đang đánh bắt trên đầm và ở các chợ cá xung quanh đầm Thị Nại (khi biết rõ cá được bắt trong đầm). Bên cạnh đó, chúng tôi còn đặt thả có chứa dung dịch định hình (formol 10%) tại một số hộ ngư dân và nhờ họ thu mẫu thường xuyên trong thời gian nghiên cứu, sau đó chúng tôi thu gom mẫu cá tại ngư dân mỗi tháng một lần. Mẫu cá sau khi thu được định hình trong dung dịch formol 4% để phục vụ cho công việc phân loại ở phòng thí nghiệm.

\*Tác giả liên hệ chính.

Email: vovanchi@qnu.edu.vn



Các mẫu cá được định loại dựa vào đặc điểm hình thái theo hướng dẫn của Pravdin<sup>6</sup> và các tài liệu phân loại của Vương Dĩ Khang<sup>7</sup> và FAO Tập 3 đến Tập 6.<sup>8-11</sup>

Sử dụng tài liệu “Catalog of Fishes” của Eschmeyer, Fricke và van der Laan, phiên bản điện tử để kiểm tra, khẳng định tên khoa học và sắp xếp hệ thống phân loại của cá.<sup>12</sup>

Tra cứu danh mục các loài trong sách đỏ

Việt Nam - 2007 để xác định những loài cá thuộc những diện cần chú ý.<sup>1</sup>

**3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN**

**3.1. Đa dạng thành phần loài cá**

Trong thời gian khảo sát, chúng tôi thành lập được danh lục thành phần loài cá ở đầm Thị Nại, bao gồm 95 loài cá thuộc 81 giống, 55 họ và 16 bộ khác nhau. Danh lục cá được thể hiện cụ thể ở Bảng 1.

**Bảng 1.** Danh lục thành phần loài cá đầm Thị Nại

TT	Tên khoa học	Tên tiếng Việt	Ghi chú
<b>I</b>	<b>ANGUILLIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ CHÌNH</b>	
<b>(1)</b>	<b>Moringuidae</b>	<b>Họ cá chình giun</b>	
1	<i>Moringua macrocephalus</i> (Bleeker, 1863)	Cá chình giun	
<b>(2)</b>	<b>Muraenesocidae</b>	<b>Họ cá dưa</b>	
2	<i>Muraenesox cinereus</i> (Forsskål, 1775)	Cá dưa	
<b>(3)</b>	<b>Muraenidae</b>	Họ cá lịch biển	
3	<i>Strophidon sathete</i> (Hamilton, 1822)	Cá lịch không lồ	
<b>(4)</b>	<b>Ophichthidae</b>	<b>Họ cá chình rắn</b>	
4	<i>Pisodonophis boro</i> (Hamilton, 1822)	Cá lịch cu	
5	<i>Ophichthus apicalis</i> (Anonymous [Bennett], 1830)	Cá chình rắn tổ ong	
<b>II</b>	<b>ATHERINIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ SUỐT</b>	
<b>(5)</b>	<b>Atherinidae</b>	<b>Họ cá suốt</b>	
6	<i>Hypoatherina valenciennesi</i> (Bleeker, 1854)	Cá suốt nhiệt đới	
7	<i>Atherinomorus lacunosus</i> (Forster, 1801)	Cá suốt mắt to	
<b>III</b>	<b>AULOPIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ MỎI</b>	
<b>(6)</b>	<b>Synodontidae</b>	<b>Họ cá mối</b>	
8	<i>Saurida argentea</i> Macleay, 1881	Cá mối thường	
<b>IV</b>	<b>BATRACHOIDIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ CỐC</b>	
<b>(7)</b>	<b>Batrachoididae</b>	<b>Họ cá cóc</b>	
9	<i>Allenbatrachus grunniens</i> (Linnaeus, 1758)	Cá mao ếch	
<b>V</b>	<b>BELONIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ NHÓI</b>	
<b>(8)</b>	<b>Adrianichthyidae</b>	<b>Họ cá sóc</b>	
10	<i>Oryzias carnaticus</i> (Jerdon, 1849)	Cá sóc	
<b>(9)</b>	<b>Belonidae</b>	<b>Họ cá nhái</b>	
11	<i>Strongylura strongylura</i> (van Hasselt, 1823)	Cá nhói đuôi chằm	
<b>(10)</b>	<b>Hemiramphidae</b>	<b>Họ cá kìm</b>	
12	<i>Hyporhamphus limbatus</i> (Valenciennes, 1847)	Cá đầu	
13	<i>Hyporhamphus quoyi</i> (Valenciennes, 1847)	Cá kìm	
<b>(11)</b>	<b>Zenarchopteridae</b>	<b>Họ cá lim kìm</b>	
14	<i>Zenarchopterus ectuntio</i> (Hamilton, 1822)	Cá kìm biển vây	
<b>VI</b>	<b>CLUPEIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ TRÍCH</b>	
<b>(12)</b>	<b>Clupeidae</b>	<b>Họ cá trích</b>	
15	<i>Escualosa thoracata</i> (Valenciennes, 1847)	Cá mai	
16	<i>Herklotsichthys quadrimaculatus</i> (Rüppell 1837)	Cá trích vây xanh	
17	<i>Sardinella sindensis</i> (Day, 1878)	Cá trích	

18	<i>Konosirus punctatus</i> (Temminck & Schlegel, 1846)	Cá mòi chẳm	VU
<b>(13)</b>	<b>Engraulidae</b>	<b>Họ cá trỏng</b>	
19	<i>Thryssa hamiltonii</i> (Gray, 1835)	Cá rỏp	
20	<i>Stolephorus indicus</i> (van Hasselt, 1823)	Cá com Ắn Độ	
21	<i>Engraulis capensis</i> Gilchrist, 1913	Cá com Nhật	
22	<i>Setipinna taty</i> (Valenciennes, 1848)	Cá lẹp vàng	
<b>VII</b>	<b>ELOPIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ CHÁO BIỂN</b>	
<b>(14)</b>	<b>Megalopidae</b>	<b>Họ cá cháo lớn</b>	
23	<i>Megalops cyprinoides</i> (Broussonet, 1782)	Cá cháo lớn	VU
<b>(15)</b>	<b>Elopidae</b>	<b>Họ cá mẳng biển</b>	
24	<i>Elops saurus</i> Linnaeus, 1766	Cá cháo biển	VU
<b>VIII</b>	<b>GONORYNCHIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ MẮNG SỮA</b>	
<b>(16)</b>	<b>Chanidae</b>	<b>Họ cá mẳng sữa</b>	
25	<i>Chanos chanos</i> (Forsskål, 1775)	Cá mẳng sữa	VU
<b>IX</b>	<b>LAMNIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ NHẮM THU</b>	
<b>(17)</b>	<b>Odontaspidae</b>	<b>Họ cá nhắm</b>	
26	<i>Carcharias tricuspidatus</i> Day, 1878	Cá nhắm cát	
<b>X</b>	<b>MYLIOBATIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ ĐUỐI Ó</b>	
<b>(18)</b>	<b>Dasyatidae</b>	<b>Họ cá đuối bồng</b>	
27	<i>Dasyatis varidens</i> (Garman, 1885)	Cá đuối bồng	
<b>XI</b>	<b>PERCIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ VỰC</b>	
<b>(19)</b>	<b>Latidae</b>	<b>Họ cá chẳm</b>	
28	<i>Lates calcarifer</i> (Bloch, 1790)	Cá chẳm	
<b>(20)</b>	<b>Siganidae</b>	<b>Họ cá đĩa</b>	
29	<i>Siganus guttatus</i> (Bloch, 1787)	Cá đĩa công	
30	<i>Siganus javus</i> (Linnaeus, 1766)	Cá đĩa xanh	
31	<i>Siganus canaliculatus</i> (Park, 1797)	Cá kinh	
<b>(21)</b>	<b>Scaridae</b>	<b>Họ cá mó</b>	
32	<i>Leptoscarus vaigiensis</i> (Quoy & Gaimard, 1824)	Cá mó tiềm	
<b>(22)</b>	<b>Ambassidae</b>	<b>Họ cá sơn biển</b>	
33	<i>Ambassis ambassis</i> (Lacepède, 1802)	Cá sơn đầu trần	
34	<i>Ambassis kopsii</i> Bleeker, 1858	Cá sơn Kọp sọ	
<b>(23)</b>	<b>Apogonidae</b>	<b>Họ cá sơn</b>	
35	<i>Foa brachygramma</i> (Jenkins, 1903)	Cá sơn	
36	<i>Fibramia amboinensis</i> (Bleeker, 1853)	Cá sơn bắp đuối chẳm	
<b>(24)</b>	<b>Carangidae</b>	<b>Họ cá khẻ</b>	
37	<i>Caranx hippos</i> (Linnaeus, 1766)	Cá khẻ	
38	<i>Carangoides praeustus</i> (Anonymous [Bennett], 1830)	Cá khẻ vắ đen	
39	<i>Scomberoides lysan</i> (Forsskål, 1775)	Cá bẻ phương đổng	
40	<i>Seriola dumerili</i> (Risso, 1810)	Cá cam sọc	
<b>(25)</b>	<b>Chaetodontidae</b>	<b>Họ cá bướm</b>	
41	<i>Chaetodon wiebeli</i> Kaup, 1863	Cá bướm mọt vắ đuối	
42	<i>Parachaetodon ocellatus</i> (Cuvier, 1831)	Cá bướm vắn	VU
<b>(26)</b>	<b>Cichlidae</b>	<b>Họ cá rô phi</b>	
43	<i>Oreochromis mossambicus</i> (Peters, 1852)	Cá rô phi đen	
44	<i>Oreochromis niloticus</i> (Linnaeus, 1758)	Cá rô phi vắn	

(27)	<b>Eleotridae</b>	<b>Họ cá bóng đen</b>	
45	<i>Butis butis</i> (Hamilton, 1822)	Cá bóng cầu	
46	<i>Eleotris melanosoma</i> Bleeker, 1853	Cá bóng trứng	
(28)	<b>Ephippidae</b>	<b>Họ cá tai tượng</b>	
47	<i>Platax orbicularis</i> (Forsskål, 1775)	Cá chim tràng	
(29)	<b>Gerreidae</b>	<b>Họ cá móm</b>	
48	<i>Gerres filamentosus</i> Cuvier, 1829	Cá móm gai dài	
(30)	<b>Gobiidae</b>	<b>Họ cá bóng trắng</b>	
49	<i>Oxyurichthys tentacularis</i> (Valenciennes, 1837)	Cá bóng thệ	
50	<i>Acentrogobius caninus</i> (Valenciennes, 1837)	Cá bóng tro	
51	<i>Glossogobius giuris</i> (Hamilton, 1822)	Cá bóng cát	
52	<i>Oxyurichthys microlepis</i> (Bleeker, 1849)	Cá bóng chấm mắt	
53	<i>Yongeichthys nebulosus</i> (Forsskål, 1775)	Cá bóng vân mây	
54	<i>Periophthalmus barbarus</i> (Linnaeus, 1766)	Cá thòi lòi	
(31)	<b>Haemulidae</b>	<b>Họ cá sạo</b>	
55	<i>Pomadasys argenteus</i> (Forsskål, 1775)	Cá sạo	
(32)	<b>Leiognathidae</b>	<b>Họ cá liệt</b>	
56	<i>Leiognathus equulus</i> (Forsskål, 1775)	Cá liệt lớn	
57	<i>Secutor ruconius</i> (Hamilton, 1822)	Cá liệt vằn lưng	
58	<i>Eubleekeria splendens</i> (Cuvier, 1829)	Cá liệt xanh	
(33)	<b>Lethrinidae</b>	<b>Họ cá hè</b>	
59	<i>Lethrinus miniatus</i> (Forster, 1801)	Cá hè mõm dài	
60	<i>Lethrinus haematopterus</i> Temminck & Schlegel, 1844	Cá hè vẩy đỏ	
(34)	<b>Lutjanidae</b>	<b>Họ cá hồng</b>	
61	<i>Lutjanus argentimaculatus</i> (Forsskål, 1775)	Cá hồng bạc	
62	<i>Lutjanus russellii</i> (Bleeker, 1849)	Cá hồng chấm đen	
63	<i>Lutjanus lutjanus</i> Bloch, 1790	Cá hồng vàng sọc mờ	
(35)	<b>Monodactylidae</b>	<b>Họ cá chim mắt to</b>	
64	<i>Monodactylus argenteus</i> (Linnaeus, 1758)	Cá chim bạc	
(36)	<b>Mugilidae</b>	<b>Họ cá đối</b>	
65	<i>Mugil cephalus</i> Linnaeus, 1758	Cá đối mực	
66	<i>Osteomugil perusii</i> (Valenciennes, 1836)	Cá đối lá	
67	<i>Crenimugil burchanani</i> (Bleeker, 1853)	Cá đối nhọn	
(37)	<b>Mullidae</b>	<b>Họ cá phèn</b>	
68	<i>Upeneus vittatus</i> (Forsskål, 1775)	Cá phèn sọc vàng	
(38)	<b>Pomacentridae</b>	<b>Họ cá thia</b>	
69	<i>Abudefduf sordidus</i> (Forsskål, 1775)	Cá thia 3 sọc	
(39)	<b>Scatophagidae</b>	<b>Họ cá nâu</b>	
70	<i>Scatophagus argus</i> (Linnaeus, 1766)	Cá nâu	
(40)	<b>Sciaenidae</b>	<b>Họ cá đù</b>	
71	<i>Pennahia argentata</i> (Houttuyn, 1782)	Cá đù bạc	
72	<i>Johnius coitor</i> (Hamilton, 1822)	Cá đù bạc gai to	
(41)	<b>Serranidae</b>	<b>Họ cá Mú</b>	
73	<i>Epinephelus tauvina</i> (Forsskål, 1775)	Cá mú ruồi	VU
74	<i>Epinephelus malabaricus</i> (Bloch & Schneider, 1801)	Cá mú điếm gai	
(42)	<b>Sillaginidae</b>	<b>Họ cá đục</b>	
75	<i>Sillago sihama</i> (Forsskål, 1775)	Cá đục bạc	
76	<i>Sillago aeolus</i> Jordan & Evermann, 1902	Cá đục chấm	

(43)	<b>Sphyraenidae</b>	<b>Họ cá nhồng</b>	
77	<i>Sphyraena barracuda</i> (Edwards, 1771)	Cá nhồng	
(44)	<b>Terapontidae</b>	<b>Họ cá cãng</b>	
78	<i>Terapon jarbua</i> (Forsskål, 1775)	Cá cãng cát	
79	<i>Terapon theraps</i> Cuvier, 1829	Cá cãng vảy to	
80	<i>Terapon puta</i> Cuvier, 1829	Cá cãng vảy nhỏ	
(45)	<b>Trichiuridae</b>	<b>Họ cá hổ</b>	
81	<i>Trichiurus lepturus</i> Linnaeus, 1758	Cá hổ hột	
<b>XII</b>	<b>PLEURONCTIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ BƠN</b>	
(46)	<b>Cynoglossidae</b>	<b>Họ cá bơn lưỡi bò</b>	
82	<i>Cynoglossus puncticeps</i> (Richardson, 1846)	Cá bơn vằn	
83	<i>Cynoglossus monopus</i> (Bleeker, 1849)	Cá bơn lưỡi trâu	
(47)	<b>Paralichthyidae</b>	<b>Họ cá bơn cát</b>	
84	<i>Pseudorhombus neglectus</i> Bleeker, 1865	Cá bơn vẩy chấm to	
<b>XIII</b>	<b>SCORPAENIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ MŨ LÀN</b>	
(48)	<b>Platycephalidae</b>	<b>Họ cá chai</b>	
85	<i>Platycephalus indicus</i> (Linnaeus, 1758)	Cá chai Ấn Độ	
86	<i>Inegocia japonica</i> (Cuvier, 1829)	Cá chai Nhật	
<b>XIV</b>	<b>SILURIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ NHEO</b>	
(49)	<b>Ariidae</b>	<b>Họ cá úc</b>	
87	<i>Arius maculatus</i> (Thunberg, 1792)	Cá úc Trung Hoa	
(50)	<b>Bagridae</b>	<b>Họ cá ngạnh</b>	
88	<i>Tachysurus truncatus</i> (Regan, 1913)	Cá ngạnh	
(51)	<b>Plotosidae</b>	<b>Họ cá ngát</b>	
89	<i>Plotosus lineatus</i> (Thunberg, 1787)	Cá ngát	
<b>XV</b>	<b>SYNGNATHIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ CHÌA VÔI</b>	
(52)	<b>Syngnathidae</b>	<b>Họ cá chìa vôi</b>	
90	<i>Syngnathus pelagicus</i> Linnaeus, 1758	Cá chìa vôi	
91	<i>Hippocampus histrix</i> Kaup, 1856	Cá ngựa gai	VU
<b>XVI</b>	<b>TETRAODONTIFORMES</b>	<b>BỘ CÁ NÓC</b>	
(53)	<b>Ostraciidae</b>	<b>Họ cá nóc hòm</b>	
92	<i>Lactoria diaphana</i> (Bloch & Schneider, 1801)	Cá nóc sừng tròn bụng	
(54)	<b>Tetraodontidae</b>	<b>Họ cá nóc</b>	
93	<i>Chelonodontops patoca</i> (Hamilton, 1822)	Cá nóc răng rùa	
94	<i>Arothron reticularis</i> (Bloch & Schneider, 1801)	Cá nóc chuột vân lưới	
(55)	<b>Triacanthidae</b>	<b>Họ cá bò ba gai</b>	
95	<i>Triacanthus biaculeatus</i> (Bloch, 1786)	Cá bò ba gai	

Ghi chú: I, II,... là số thứ tự các bộ; (1), (2),... là số thứ tự các họ; 1, 2,... là số thứ tự các loài cá. VU: loài sẽ nguy cấp theo sách Đỏ Việt Nam - 2007.

Trong 95 loài cá trong đầm Thị Nại, chúng tôi xác định có 7 loài nằm trong sách Đỏ Việt Nam, đó là cá mòi chấm, cá cháo lớn, cá cháo

biển, cá măng sữa, cá bướm vằn, cá mú ruồi và cá ngựa gai. Tất cả 7 loài cá này đều thuộc diện sẽ nguy cấp (VU). Đây là điều chúng ta cần chú ý để xây dựng kế hoạch bảo tồn nguồn lợi cá sau này.

### 3.2. Cấu trúc thành phần loài

Cấu trúc thành phần loài cá ở đầm Thị Nại được trình bày cụ thể ở Bảng 2.

**Bảng 2.** Cấu trúc thành phần loài cá ở đầm Thị Nại

TT	Bộ		Họ		Giống		Loài	
	Tên khoa học	Tên tiếng Việt	Số lượng	Tỷ lệ %	Số lượng	Tỷ lệ %	Số lượng	Tỷ lệ %
1	Anguilliformes	Bộ cá Chình	4	7,27	5	6,17	5	5,26
2	Atheriniformes	Bộ cá Suốt	1	1,82	2	2,47	2	2,11
3	Aulopiformes	Bộ cá Mối	1	1,82	1	1,23	1	1,05
4	Batrachoidiformes	Bộ cá Cóc	1	1,82	1	1,23	1	1,05
5	Beloniformes	Bộ cá Nhói	4	7,27	4	4,94	5	5,26
6	Clupeiformes	Bộ cá Trích	2	3,64	8	9,88	8	8,42
7	Elopiformes	Bộ cá Cháo biển	2	3,64	2	2,47	2	2,11
8	Gonorynchiformes	Bộ cá Măng sứa	1	1,82	1	1,23	1	1,05
9	Lamniformes	Bộ cá Nhám thu	1	1,82	1	1,23	1	1,05
10	Myliobatiformes	Bộ cá Đuối ó	1	1,82	1	1,23	1	1,05
11	Perciformes	Bộ cá Vược	27	49,09	42	51,85	54	56,84
12	Pleuronectiformes	Bộ cá Bơn	2	3,64	2	2,47	3	3,16
13	Scorpaeniformes	Bộ cá Mù lân	1	1,82	2	2,47	2	2,11
14	Siluriformes	Bộ cá Nheo	3	5,45	3	3,70	3	3,16
15	Syngnathiformes	Bộ cá Chia vôi	1	1,82	2	2,47	2	2,11
16	Tetraodontiformes	Bộ cá Nóc	3	5,45	4	4,94	4	4,21

Về bậc họ: Đa dạng nhất là bộ cá Vược (Perciformes) với 27 họ (chiếm 49,09%), tiếp theo là bộ cá Chình (Anguilliformes) và bộ cá Nhói đều có 4 họ (chiếm 7,27%), bộ cá Nheo (Siluriformes) và bộ cá Nóc có 3 họ (chiếm 5,45%), bộ Trích (Clupeiformes), bộ cá Cháo biển (Elopiformes) và bộ cá Bơn (Pleuronectiformes) đều có 2 họ (chiếm 3,64%), các bộ cá còn lại có 1 họ (đều chiếm 2,11%) (Bảng 2).

Về bậc giống: Đa dạng nhất vẫn là bộ cá Vược (Perciformes) với 42 giống (chiếm 51,85%), tiếp theo là bộ cá Trích (Clupeiformes) với 8 giống (chiếm 9,88%), bộ cá Chình (Anguilliformes) có 5 giống (chiếm 6,17%), bộ Cá Nóc (Tetraodontiformes) và bộ cá Nhói (Beloniformes) đều có 4 giống (cùng chiếm 4,94%). Các bộ cá còn lại có từ 1 - 3 giống (Bảng 2).

Về bậc loài: Bộ cá Vược (Perciformes) vẫn chiếm ưu thế với 54 loài (chiếm 56,84%), tiếp theo là bộ cá Trích (Clupeiformes) với 8 loài (chiếm 8,42%), bộ cá Chình (Anguilliformes) và bộ cá Nhói (Beloniformes) đều có 5 loài (cùng chiếm 5,26%), bộ Cá Nóc (Tetraodontiformes) có 4 loài (chiếm 4,21%), bộ cá Bơn (Pleuronectiformes) và bộ cá Nheo (Siluriformes) đều có 3 loài

(chiếm 3,16%). Các bộ còn lại có từ 1 - 2 loài (Bảng 2).

Như vậy, trung bình mỗi bộ có 3,44 họ, 5,06 giống và 5,94 loài; trung bình mỗi họ có 1,47 giống và 1,73 loài; mỗi giống chỉ có trung bình là 1,17 loài.

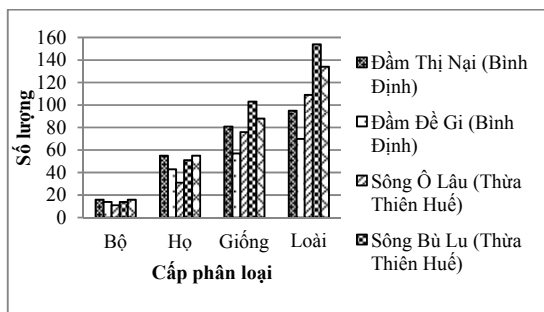
**4. SỰ ĐA DẠNG CỦA KHU HỆ CÁ Ở ĐÀM THỊ NẠI SO VỚI CÁC KHU HỆ KHÁC**

Để đánh giá sự đa dạng cá của khu hệ đầm Thị Nại so với các khu hệ khác ở miền Trung chúng tôi thống kê số liệu ở một số khu hệ, kết quả được thể hiện ở Bảng 3.

**Bảng 3.** Sự đa dạng cá ở các khu hệ khác nhau

Khu hệ cá	Số bộ	Số họ	Số giống	Số loài
Đầm Thị Nại (Bình Định)	16	55	81	95
Đầm Đè Gi (Bình Định) <sup>2</sup>	14	43	57	70
Sông Ô Lâu (Thừa Thiên Huế) <sup>4</sup>	11	31	76	109
Sông Bù Lu (Thừa Thiên Huế) <sup>3</sup>	14	51	103	154
Đầm Ô Loan (Phú Yên) <sup>5</sup>	16	55	88	134

Có thể thấy rằng, khu hệ cá đầm Thị Nại có số bộ và số họ tương đương với khu hệ đầm Ô Loan (Phú Yên) nhưng nhiều hơn so với các khu hệ khác như đầm Đề Gi, sông Ô Lâu, sông Bù Lu. Số giống cá ở đầm Thị Nại nhiều hơn hai khu hệ đầm Đề Gi và sông Ô Lâu nhưng ít hơn so với khu hệ sông Bù Lu và sông Ô Loan. Số loài cá ở khu hệ đầm Thị Nại chỉ nhiều hơn khu hệ đầm Đề Gi trong khi ít đa dạng hơn ba khu hệ còn lại (Ô Lâu, Bù Lu và Ô Loan) (Bảng 3, Hình 1). Nhìn chung, mặc dù khu hệ cá đầm Thị Nại đa dạng về cấp phân loại bộ và họ nhưng ít đa dạng về giống và loài so với các khu hệ khác.



**Hình 1.** Biểu đồ minh họa sự đa dạng cá ở các khu hệ khác nhau

### 5. KẾT LUẬN

- Khu hệ cá đầm Thị Nại khá đa dạng, với 95 loài, 81 giống, 55 họ và 16 bộ. Trong đó, đa dạng nhất là bộ cá Vược (Perciformes), với 27 họ, 42 giống và 52 loài.

- Có 7 loài cá trong đầm Thị Nại thuộc diện sẽ nguy cấp (VU) trong sách Đỏ Việt Nam.

- Khu hệ cá đầm Thị Nại đa dạng về bộ và họ nhưng ít đa dạng về giống và loài so với các khu hệ lân cận khác.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bộ Khoa học và Công nghệ. *Sách Đỏ Việt Nam (Phần I. Động vật)*, Nxb Khoa học Tự nhiên và Công nghệ, Hà Nội, 2007.
2. Võ Văn Chí, Võ Điều, Nguyễn Thị Phương Hiền. *Dẫn liệu bổ sung khu hệ cá đầm Đề Gi - tỉnh Bình Định*, Báo cáo khoa học về nghiên cứu và giảng dạy sinh học ở Việt Nam lần thứ 3, 2018, 182-189.

3. Võ Văn Phú, Trần Thụy Cẩm Hà. Cấu trúc thành phần loài cá ở hệ thống sông Bù Lu thuộc huyện Phú Lộc, tỉnh Thừa Thiên Huế. *Tạp chí Khoa học Đại học Huế*, **2008**, 49, 111-121.
4. Võ Văn Phú, Nguyễn Duy Thuận. Cấu trúc thành phần loài cá ở hệ thống sông Ô Lâu, tỉnh Thừa Thiên Huế, *Tạp chí Khoa học Đại học Huế*, **2009**, 55, 61-71.
5. Nguyễn Thị Phi Loan. Thành phần loài cá ở đầm Ô Loan, tỉnh Phú Yên, *Tạp chí Khoa học Đại học Huế*, **2008**, 49, 65-74.
6. Pravdin I. F. *Hướng dẫn nghiên cứu cá* (bản dịch tiếng Việt của Phạm Thị Minh Giang), Nxb Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội, 1973.
7. Vương Dĩ Khang. *Ngư loại phân loại học* (bản dịch tiếng Việt của Nguyễn Bá Mão), Nxb Nông thôn, 1963.
8. Carpenter, K.E., Niem, V.H. (eds). *FAO species identification guide for fishery purposes. The living marine resources of the Western Central Pacific. Volume 3. Batoid fishes, chimaeras and bony fishes part 1 (Elopidae to Linophrynidae)*, Rome, FAO, 1999.
9. Carpenter, K.E., Niem, V.H. (eds). *FAO species identification guide for fishery purposes. The living marine resources of the Western Central Pacific. Volume 4. Bony fishes part 2 (Mugilidae to Carangidae)*, Rome, FAO, 1999.
10. Carpenter, K.E., Niem, V.H. (eds). *FAO species identification guide for fishery purposes. The living marine resources of the Western Central Pacific. Volume 5. Bony fishes part 3 (Menidae to Pomacentridae)*, Rome, FAO, 2001.
11. Carpenter, K.E., Niem, V.H. (eds). *FAO species identification guide for fishery purposes. The living marine resources of the Western Central Pacific. Volume 6. Bony fishes part 4 (Labridae to Latimeriidae), estuarine crocodiles, sea turtles, sea snakes and marine mammals*, Rome, FAO, 2001.
12. Eschmeyer, W. N. and R. Fricke, and R. van der Laan (eds). *Catalog of fishes: genera, species, references*, Electronic version accessed <http://researcharchive.calacademy.org/research/ichthyology/catalog/fishcatmain.asp>, 14/11/2019.

## CONTENTS

1.	A theoretical study on adsorption of organic molecules containing benzene ring onto kaolinite surface <b>Nguyen Thi Thuy, Nguyen Ngoc Tri, Nguyen Tien Trung</b> .....	5
2.	An insight into improper hydrogen bond of C-H...N type in complexes of chloroform with hydrogen cyanide and its fluoro derivative <b>Phan Dang Hong Nhung, Huynh Thanh Nam, Nguyen Tien Trung</b> .....	16
3.	Linear functional state bounding for linear discrete-time systems with delays and bounded disturbances <b>Luu Thi Hiep, Phan Thanh Nam</b> .....	25
4.	A new method for designing observers of nonlinear time-delay Glucose-Insulin system <b>Dao Thi Hai Yen, Dinh Cong Huong</b> .....	38
5.	Rational liouvillian solution of algebraic ordinary differential equations of order one in genus zero <b>Nguyen Tri Dat, Ngo Lam Xuan Chau</b> .....	48
6.	Teach and learn matrix problems with the help of maple software <b>Le Van Thien</b> .....	53
7.	Optimizing locations and capacities of distributed generation for improving voltage quality of distribution networks <b>Ngô Minh Khoa, Huynh Duc Hoan</b> .....	63
8.	Current controller design based on FPGA <b>Do Van Can</b> .....	71
9.	An IoT application for power monitoring system: A case study of 220VAC low voltage load <b>Ho Van Trinh, Le Van Tho, Ngo Minh Khoa</b> .....	79
10.	The fish species composition diversity in Thi Nai lagoon, Binh Dinh province <b>Vo Van Chi, Nguyen Thi Phuong Hien</b> .....	87

