

## Bài báo nghiên cứu

**KẾT QUẢ BAN ĐẦU TRONG VIỆC ỨNG DỤNG MÔ PHỎNG  
MONTE CARLO VÀ MÔ HÌNH MẠNG NƠON NHÂN TẠO  
ĐỂ XÁC ĐỊNH NỒNG ĐỘ DUNG DỊCH BAZƠ  
DỰA TRÊN KỸ THUẬT ĐO GAMMA TRUYỀN QUA****Nguyễn Thành Đạt<sup>1, 2, 3\*</sup>, Hoàng Thị Kiều Trang<sup>1, 2</sup>, Hoàng Đức Tâm<sup>3</sup>**<sup>1</sup>Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam<sup>2</sup>Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam<sup>3</sup>Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam\*Tác giả liên hệ: Nguyễn Thành Đạt – Email: [datnth@hcmue.edu.vn](mailto:datnth@hcmue.edu.vn)

Ngày nhận bài: 28-8-2023; ngày nhận bài sửa: 20-10-2023; ngày duyệt đăng: 21-10-2023

**TÓM TẮT**

Nghiên cứu đề xuất sử dụng dữ liệu mô phỏng Monte Carlo kết hợp với mạng nơon nhân tạo để xác định nồng độ phần trăm của dung dịch bazơ dựa trên kỹ thuật đo gamma truyền qua. Dữ liệu mô phỏng được dùng để đánh giá mối liên hệ giữa tỉ số truyền qua  $R$  (tỉ số diện tích đỉnh của truyền qua của dung dịch và nước cất) và nồng độ phần trăm của dung dịch bazơ ứng với các năng lượng trong khoảng từ 60 keV đến 662 keV. Độ suy giảm trung bình của tỉ số  $R$  khi nồng độ dung dịch tăng từ 1% tới 50% lớn nhất là 0,0063 tại 60 keV và nhỏ nhất là 0,0024 tại 662 keV. Kết quả thu được chỉ ra rằng độ nhạy của phép đo lớn hơn khi sử dụng chùm tia năng lượng thấp. Mô hình mạng nơon nhân tạo được huấn luyện dựa trên dữ liệu mô phỏng để dự đoán nồng độ của dung dịch. Kết quả dự đoán của mô hình cho thấy cách tiếp cận đề xuất trong nghiên cứu là khả thi với độ lệch tương đối giữa nồng độ dự đoán từ mô hình và nồng độ kiểm chứng là dưới 5% trong khoảng giá trị nồng độ từ 4% đến 50%. Các kết quả ban đầu này là cơ sở để xây dựng phương pháp phân tích không hủy mẫu hiệu quả để xác định nồng độ của dung dịch bazơ.

**Từ khóa:** dung dịch bazơ; nồng độ phần trăm; gamma truyền qua; mô phỏng Monte Carlo; Na(Tl)

**1. Giới thiệu**

Các loại bazơ là hóa chất có vai trò không thể thiếu trong quy trình sản xuất chất tẩy rửa, xử lý nước thải sinh hoạt, nguyên liệu giấy. Bazơ cũng được sử dụng để trung hòa độ pH, loại bỏ các hợp chất axit trong tinh chế dầu mỏ. Do đó, việc xác định nồng độ của bazơ trong các dung dịch là bước quan trọng để đảm bảo chất lượng cho các sản phẩm, quy trình

---

**Cite this article as:** Nguyen Thanh Dat, Hoang Thi Kieu Trang, & Hoang Duc Tam (2024). Determining the concentration of base solution based on gamma transition technique combined with Monte Carlo simulation and artificial neural network: Preliminary results. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 21(1), 162-175.

sản xuất công nghiệp. Một số phương pháp thường dùng trong hóa học để phân tích nồng độ chất tan trong dung dịch là trung hòa, oxi hóa – khử, tạo kết tủa hay phức chất (Pierre, 2019). Tuy nhiên, các phương pháp hóa phân tích đòi hỏi nhiều bước thực hiện và có thể gây hao hụt một phần mẫu. Chính vì vậy, kỹ thuật phân tích không hủy mẫu đối với dung dịch đã được phát triển và áp dụng thành công trong một số nghiên cứu về xác định mật độ dung dịch (Priyada et al., 2012; Tondon et al., 2017; Golgoun et al., 2020; Chuong et al., 2020, 2021a) hay nồng độ axit (Chuong et al., 2021b). Hai kỹ thuật được sử dụng trong các nghiên cứu trên là kỹ thuật gamma truyền qua và tán xạ. Ưu điểm của các kỹ thuật này là không gây ảnh hưởng trực tiếp đến mẫu phân tích, bố trí phép đo đơn giản và có thể áp dụng cho nhiều loại dung dịch khác nhau.

Một số nghiên cứu trước đây (Priyada et al., 2012; Tondon et al., 2017) đã so sánh hai kỹ thuật trên và chỉ ra rằng kỹ thuật gamma tán xạ có độ nhạy cao hơn trong phép đo nồng độ hay mật độ dung dịch. Tuy nhiên, cần chú ý rằng cường độ chùm tia tán xạ ghi nhận thường rất nhỏ, vì vậy, nguồn phóng xạ có hoạt độ lớn thường sử dụng để đảm bảo tính thống kê của phép đo. Điều này có thể gây ra các nguy cơ đối với sức khỏe người sử dụng và khó áp dụng khi đo thực nghiệm tại hiện trường. Trong cấu hình đo, nếu nguồn phát có hoạt độ thấp được ưu tiên sử dụng thì kỹ thuật đo gamma truyền qua sẽ phù hợp hơn với đối tượng đo là dung dịch.

Các nghiên cứu gần đây (Chuong et al., 2021b, Sang et al., 2021a) đã bước đầu áp dụng thành công phép đo gamma truyền qua với năng lượng 662 keV của nguồn  $^{137}\text{Cs}$  để xác định nồng độ một số loại axit. Độ lệch của các mẫu đo so với mẫu chuẩn axit trong các nghiên cứu là dưới 5%. Độ nhạy của phép đo với các dung dịch axit chưa được đánh giá cụ thể trong các nghiên cứu trên. Việc đánh giá này là cơ sở cần thiết để cải thiện độ chính xác của phép đo đối với mỗi dung dịch khác nhau. Một số yếu tố chính ảnh hưởng đến độ nhạy của phép đo gồm cấu hình đo, năng lượng chùm tia gamma, loại dung dịch, loại đầu dò sử dụng. Nghiên cứu này sẽ bước đầu đánh giá về độ nhạy của phép đo nồng độ trong các dung dịch bazơ dựa trên kỹ thuật đo truyền qua với các nguồn phát gamma có năng lượng khác nhau. Kết quả nghiên cứu là cơ sở để xây dựng một quy trình đo nồng độ phù hợp, có độ chính xác cao với mỗi loại dung dịch.

Một điểm mới trong nghiên cứu là sự kết hợp mô phỏng Monte Carlo và mô hình mạng nơron nhân tạo (artificial neural network – ANN). Mô phỏng Monte Carlo đã được sử dụng rộng rãi trong các nghiên cứu trước đây đối với phép đo nồng độ, mật độ dung dịch để xây dựng cơ sở dữ liệu làm đường chuẩn của phép đo hay huấn luyện các mô hình ANN (Salgado et al., 2016; Sang et al., 2021a-b). Phương pháp này giúp các nghiên cứu tiết kiệm thời gian, chi phí so với việc thu thập dữ liệu đo từ các phép đo thực nghiệm với mẫu chuẩn. Những ưu điểm nổi bật khác là mô phỏng Monte Carlo cũng cho độ chính xác cao như các phép đo thực nghiệm và phù hợp với nhiều kiểu cấu hình đo hay các đối tượng đo khác nhau. Trên cơ sở dữ liệu được xây dựng từ mô phỏng Monte Carlo, mô hình ANN sẽ được xây dựng để huấn

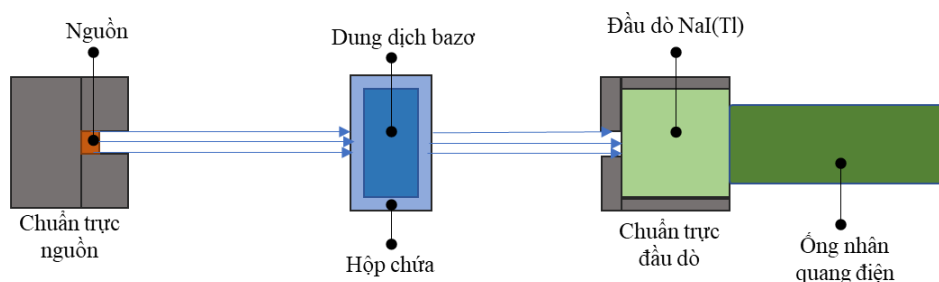
luyện và tối ưu để dự đoán các kết quả mới từ dữ liệu đo được cung cấp. Mô hình ANN cũng đã bước đầu ứng dụng thành công trong một số nghiên cứu về phép đo mật độ dung dịch, nồng độ axit dựa trên kỹ thuật đo gamma truyền qua hay tán xạ (Sang et al., 2021a, b). Với cấu hình đo có nhiều tham số thay đổi như năng lượng chùm tia gamma hay loại chất tan trong mẫu dung dịch đo, phương pháp sử dụng đường chuẩn để thể hiện mối liên hệ giữa sự suy giảm chùm tia gamma với đại lượng đo thường gặp rất nhiều khó khăn. Mô hình ANN cho thấy khả năng xử lý các kiểu dữ liệu phức tạp và phi tuyến tính như trên.

Nghiên cứu của chúng tôi sẽ tiến hành mô phỏng Monte Carlo cho phép đo nồng độ natri hiđroxit (NaOH) trong các dung dịch khác nhau dựa trên kỹ thuật đo gamma truyền qua với các nguồn phát gamma có năng lượng trong khoảng 60 keV đến 662 keV. Sau đó, nghiên cứu xác định tỉ số giữa diện tích đỉnh của chùm tia truyền qua dung dịch và chùm tia truyền qua nước cất (R) ở các dung dịch có nồng độ khác nhau được tính toán. Kết quả ở một số mức năng lượng được so sánh để đánh giá ảnh hưởng của năng lượng chùm tia gamma đến độ nhạy của phép đo. Sau đó mô hình ANN được xây dựng và tối ưu trên cơ sở huấn luyện dữ liệu mô phỏng Monte Carlo. Mô hình tối ưu sẽ được đánh giá ban đầu qua một tập dữ liệu mô phỏng khác. Các kết quả này là cơ sở để đánh giá khả năng ứng dụng của mô hình ANN cho phép đo nồng độ bazơ trong dung dịch dựa trên kỹ thuật gamma truyền qua.

## 2. Phương pháp

### 2.1. Mô phỏng Monte Carlo

Mô phỏng Monte Carlo là phương pháp thường sử dụng trong vật lý hạt nhân để mô phỏng quá trình tương tác giữa bức xạ và vật chất. Chương trình MCNP6 (Goorley et al., 2016) được sử dụng để mô phỏng lại phổ phân bố theo độ cao xung của chùm tia gamma truyền qua mẫu nước cất và các mẫu dung dịch bazơ có nồng độ khác nhau đến đầu dò NaI(Tl) theo bố trí thí nghiệm như Hình 1.



**Hình 1.** Bố trí phép đo nồng độ dung dịch bazơ trong mô phỏng Monte Carlo

Các thông số hình học tối ưu của đầu dò NaI(Tl) đã được chúng tôi xác định trong các nghiên cứu trước đây (Tam et al., 2016; Tam & Le, 2018; Hang et al., 2020). Cả nguồn và đầu dò đều được chuẩn trực với đường kính trong lần lượt là 0,5 mm và 1,0 mm. Năm mức năng lượng được sử dụng trong nghiên cứu này gồm 60 keV, 81 keV, 122 keV, 344 keV và 662 keV phát ra từ các nguồn phóng xạ tương ứng là  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{137}\text{Ba}$ ,  $^{152}\text{Eu}$  và  $^{137}\text{Cs}$ . Mẫu được mô phỏng gồm một hộp rỗng mica hình chữ nhật kích thước 11,88 cm × 10,0 cm × 3,84 cm

với bề dày khoảng trống bên trong hộp là 2,4 cm và dung dịch NaOH đựng trong hộp có nồng độ thay đổi từ 1%-50%. Giá trị mật độ ứng với mỗi nồng độ của dung dịch NaOH trong nghiên cứu được lấy theo giá trị tham chiếu ở điều kiện nhiệt độ phòng thí nghiệm là 20 °C (Green & Southard, 2019). Khoảng cách từ mẫu đo đến nguồn phóng xạ và bề mặt đầu dò đều là 12,3 cm. Mỗi mô phỏng được chạy với 6 tỉ hạt để đảm bảo sai số thống kê của diện tích đỉnh gamma truyền qua nhỏ hơn 2%.

Ở đây chúng tôi sử dụng tally F8 trong MCNP6 để tạo dữ liệu đầu ra là phổ phân bố theo độ cao xung. Mỗi khe năng lượng trong phổ mô phỏng được khai báo ứng với 8192 kênh của đầu dò dựa trên đường chuẩn năng lượng thu được từ các phép đo thực nghiệm. Bên cạnh đó, để dạng phổ mô phỏng khớp với phổ thực nghiệm, thể “FT8 GEB a b c” cũng được sử dụng để tạo dạng phân bố theo hàm Gauss cho các đỉnh năng lượng trong phổ mô phỏng. Các tham số a, b, c được xác định bằng việc làm khớp dữ liệu thực nghiệm của bề rộng một nửa (full width at half maximum, FWHM) tại các đỉnh với năng lượng của chùm tia gamma E theo phương trình:

$$FWHM(MeV) = a + b\sqrt{c + cE^2} \tag{1}$$

Các giá trị này trong nghiên cứu lần lượt là a = -0,00614035 MeV, b = 0,06222202 MeV<sup>1/2</sup>, c = -0,04117 MeV<sup>-1</sup>

Tỉ số R được sử dụng trong nghiên cứu để thay cho cường độ của chùm tia gamma truyền qua dung dịch do tỉ số này đã được chứng minh là thay đổi không đáng kể ở cả mô phỏng lẫn thực nghiệm (Chuong et al., 2020, 2021a). Từ phổ mô phỏng thu được, tỉ số R<sup>Sim.</sup> của các dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau được xác định như sau:

$$R^{Sim.} = \frac{N_b^{Sim.}}{N_w^{Sim.}} = \exp[-(\mu_b - \mu_w)d] \tag{2}$$

trong đó,  $N_b^{Sim.} = \varepsilon I_0 \exp(-\mu_b d - 2\mu_T x_T)$  và  $N_w^{Sim.} = \varepsilon I_0 \exp(-\mu_w d - 2\mu_T x_T)$  lần lượt là diện tích dưới đỉnh của chùm tia gamma truyền qua mẫu đo chứa dung dịch và nước cất,  $\mu_b$ ,  $\mu_w$  và  $\mu_T$  lần lượt là hệ số suy giảm tuyến tính (LAC) của dung dịch NaOH, nước cất và hộp chứa; d và  $x_T$  lần lượt là bề dày khoảng trống bên trong hộp và bề dày thành hộp,  $I_0$  là cường độ chùm tia ban đầu phát ra từ nguồn,  $\varepsilon$  là hiệu suất đỉnh năng lượng toàn phần của đầu dò ứng với năng lượng của chùm tia.

Đặt:

$$\alpha = \mu_b - \mu_w = \mu_b^p \rho_b - \mu_w^p \rho_w \tag{3}$$

với  $\mu_b = \mu_b^p \rho_b$ ,  $\mu_w = \mu_w^p \rho_w$  trong đó  $\mu_b^p$  và  $\mu_w^p$  lần lượt là hệ số suy giảm khối của dung dịch NaOH và nước cất,  $\rho_b$  và  $\rho_w$  lần lượt là mật độ khối lượng của dung dịch NaOH và nước cất.

Khi đó công thức (2) được viết lại như sau:

$$R^{Sim.} = e^{-\alpha d} \tag{4}$$

Sai số của tỉ số R được tính theo công thức truyền sai số:

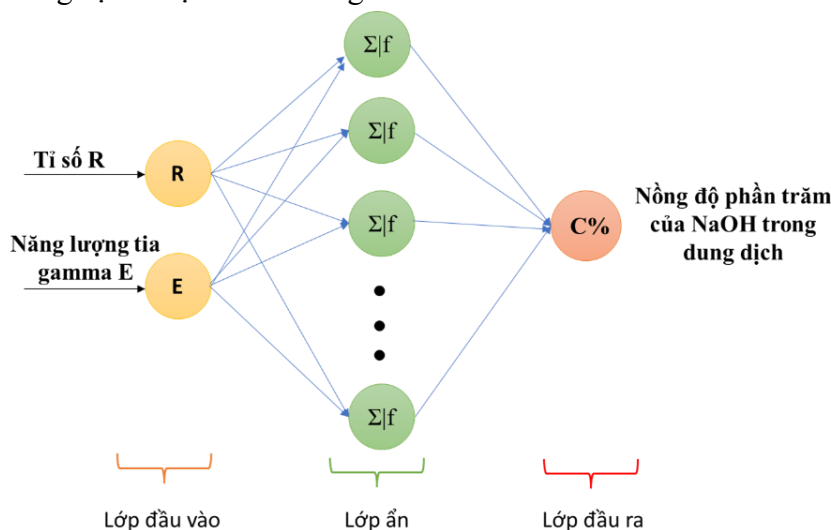
$$\sigma_{R^{Sim.}} = \sqrt{\frac{1}{(N_w^{Sim.})^2} \sigma_{N_b^{Sim.}}^2 + \frac{(N_b^{Sim.})^2}{(N_w^{Sim.})^4} \sigma_{N_w^{Sim.}}^2} \tag{5}$$

ở đây,  $\sigma_{N_w^{Sim.}} = 3,89\sqrt{N_w^{Sim.}}$  và  $\sigma_{N_b^{Sim.}} = 3,89\sqrt{N_b^{Sim.}}$  lần lượt là sai số của các giá trị  $N_w^{Sim.}$  và  $N_b^{Sim.}$ , giá trị 3,89 được sử dụng để đảm bảo độ tin cậy 99,99%.

Các giá trị của tỉ số  $R^{Sim.}$  và nồng độ bazơ trong dung dịch được sử dụng làm dữ liệu đầu vào để huấn luyện và đánh giá mô hình ANN được xây dựng dựa trên thư viện Keras (Vasilev et al., 2018) của ngôn ngữ lập trình Python.

**2.2. Mô hình mạng nơron nhân tạo**

Mô hình ANN là mô hình toán học mô phỏng cách thức hoạt động của các tế bào thần kinh trong não người, trong đó mô hình đã được huấn luyện có thể tự điều chỉnh một cách độc lập để tìm kết quả khi xử lí các dữ liệu đầu vào mới không có sẵn trong tập huấn luyện trước đó. Với dữ liệu dạng bảng, kiến trúc mô hình thường sử dụng là mô hình mạng nhiều lớp truyền thẳng (MLP: multi-layer perception). Cấu trúc tổng quát của mạng MLP gồm một lớp đầu vào, một hay nhiều lớp ẩn và một lớp đầu ra. Tại lớp đầu vào, các nơron nhận dữ liệu vào xử lí (tính các trọng số, gửi đến hàm kích hoạt) rồi cho ra kết quả theo hàm kích hoạt và sau đó truyền đến các nơron lớp ẩn đầu. Các nơron tại đây sẽ tiếp nhận như là dữ liệu đầu vào, xử lí và gửi kết quả đến lớp ẩn tiếp theo. Quá trình này tiếp tục cho đến khi các nơron ở lớp đầu ra cho kết quả. Kiến trúc mạng MLP ANN được đề xuất để xác định nồng độ bazơ trong dung dịch được mô tả trong Hình 2.



**Hình 2.** Kiến trúc mạng MLP ANN dùng để xác định nồng độ bazơ trong dung dịch

Cấu trúc cơ bản của mạng MLP được xây dựng trong nghiên cứu gồm một lớp đầu vào có hai nơron, lớp đầu ra có một nơron. Số nơron của lớp ẩn sẽ được tìm dựa vào một quy trình đánh giá thống kê với các tham số được trình bày trong các phương trình (8-11). Hàm kích hoạt Softmax được dùng để tìm mối liên hệ giữa các lớp ẩn và hàm mất mát là

MSE (sai số toàn phương trung bình) để đánh giá mô hình sau mỗi vòng huấn luyện. Hai hàm này được xác định dựa trên các công thức sau:

$$Softmax = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^K e^{x_j}} \quad (6)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i^{ref} - C_i^{pred})^2 \quad (7)$$

trong đó,  $x_i$  là giá trị đầu vào của nơron thứ  $i$  trong lớp ẩn,  $\sum_{j=1}^K e^{x_j}$  là tổng hàm mũ của  $e$  với giá trị  $x_j$ ,  $j$  chạy từ 1 đến  $K$  với  $K$  là số lượng nơron của lớp ẩn,  $C_i^{ref}$  là giá trị nồng độ tham chiếu thứ  $i$ ,  $C_i^{pred}$  là giá trị nồng độ dự đoán thứ  $i$  và  $N$  là tổng số dữ liệu.

Thuật toán ADAM (Adaptive Moment Estimation) cũng được sử dụng để tối ưu hóa mô hình. Đây là một thuật toán tối ưu có nhiều điểm mạnh, đặc biệt dễ sử dụng, tăng tốc độ hội tụ tại điểm cực đại của hàm mất mát và phù hợp với nhiều kiểu dữ liệu.

Dữ liệu đầu vào của mô hình gồm tỉ số  $R$  và năng lượng chùm tia gamma được sử dụng, trong khi đó dữ liệu đầu ra là nồng độ phần trăm của NaOH trong mỗi dung dịch. Số dữ liệu mô phỏng được sử dụng trong mô hình là 150 điểm và được chia ngẫu nhiên thành ba phần: (1) dữ liệu huấn luyện gồm 120 điểm (80%), (2) dữ liệu để đánh giá mô hình gồm 20 điểm (13,33%) và (3) dữ liệu độc lập để kiểm chứng độ tin cậy của mô hình gồm 10 điểm (6,67%). Dữ liệu (1) và (2) còn được gọi là dữ liệu học của mô hình. Các dữ liệu khi được đưa vào mô hình sẽ được chuẩn hóa về mật độ xác suất (giá trị từ 0 đến 1) để phù hợp với điều kiện của hàm kích hoạt. Quy trình huấn luyện và đánh giá mô hình ANN cho phép đo nồng độ bazo được mô tả ở sơ đồ Hình 3.

Cấu trúc của mô hình thường được đánh giá dựa trên sự suy giảm của hàm mất mát và các chỉ số thống kê gồm MSE (sai số toàn phương trung bình) và các chỉ số gồm RMSE (sai số căn quân phương), MABE (sai số tuyệt đối trung bình), MAPE (sai số phần trăm tuyệt đối trung bình),  $R^2$  (hệ số xác định). Các chỉ số này được xác định như sau:

$$RMSE = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i^{ref} - C_i^{pred})^2 \right]^{1/2} \quad (8)$$

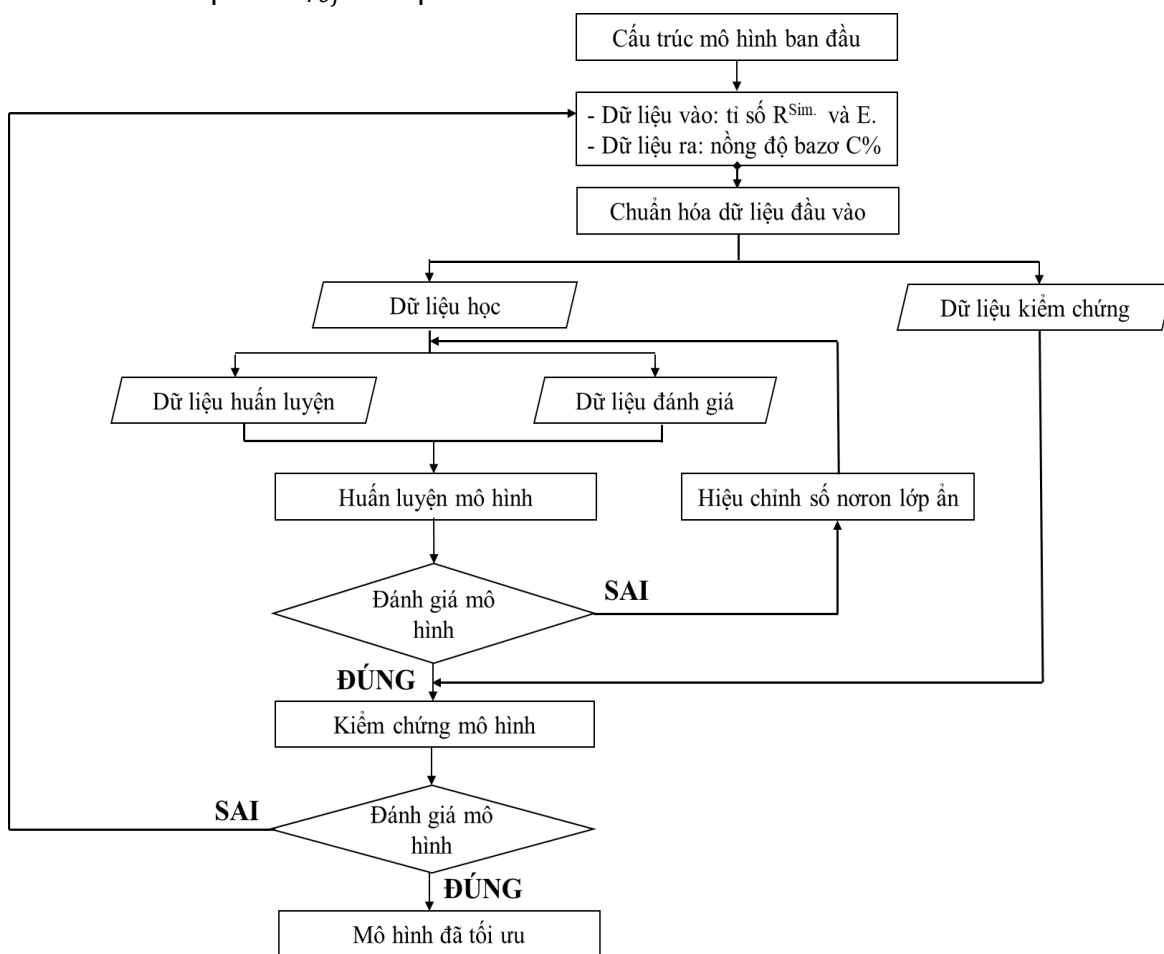
$$MABE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |C_i^{ref} - C_i^{pred}| \quad (9)$$

$$MAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{C_i^{ref} - C_i^{pred}}{C_i^{ref}} \right| \quad (10)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_i^{ref} - C_i^{pred})^2}{\sum_{i=1}^N (C_i^{ref} - \bar{C})^2} \quad (11)$$

Một số tham số quan trọng của mô hình như số nơron của lớp ẩn được xác định thông qua các chỉ số này. Số vòng huấn luyện của mô hình sẽ được xác định khi giá trị hàm mất mát tiến đến một giá trị cực tiểu quy ước, ở đây chúng tôi lấy giá trị cực tiểu mà hàm MSE cần tiến tới là  $10^{-5}$ . Tốc độ học của mô hình được tự động điều chỉnh theo sự suy giảm hàm mất mát trong quá trình huấn luyện qua một chương trình con. Bên cạnh đó, độ lệch tương đối giữa giá trị dự đoán từ mô hình và giá trị tham chiếu cũng là một tham số quan trọng để đánh giá độ tin cậy của mô hình. Trong phép đo nồng độ bazơ trong dung dịch, độ lệch này được xác định như sau:

$$RD(\%) = \left| \frac{(C_{pred} - C_{ref})}{C_{ref}} \right| \times 100 \tag{12}$$



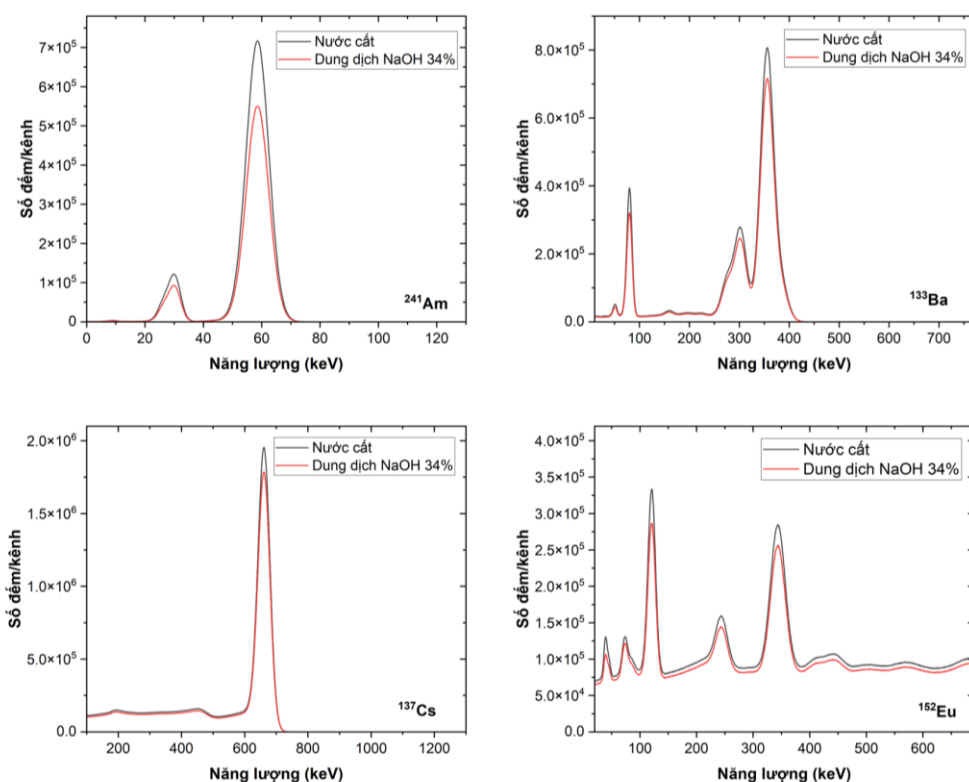
Hình 3. Sơ đồ khối cho quá trình huấn luyện và tối ưu hóa mô hình ANN

### 3. Kết quả và thảo luận

#### 3.1. Ảnh hưởng của năng lượng chùm tia gamma đến độ nhạy của phép đo nồng độ bazơ trong dung dịch

Hình 4 cho thấy dạng phổ truyền qua với nguồn phát  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{137}\text{Ba}$ ,  $^{152}\text{Eu}$  và  $^{137}\text{Cs}$  thu được từ mô phỏng Monte Carlo trong trường hợp đo nước cất và dung dịch NaOH. Điều cần

lưu ý là khi đo với loại đầu dò có độ phân giải không cao như NaI(Tl) thì phổ gamma trong thực nghiệm của một số nguồn có nhiều đỉnh năng lượng gần nhau như  $^{152}\text{Eu}$  hay  $^{137}\text{Ba}$  có thể không đạt được độ phân giải như phổ mô phỏng ở Hình 4. Do đó, nghiên cứu chỉ dùng các mức năng lượng gamma đặc trưng và có xác suất phát ra lớn ở các nguồn mà đầu dò NaI(Tl) phát hiện được để phân tích. Phổ mô phỏng được phân tích và làm khớp bằng hàm Gauss trên cơ sở phương pháp bình phương tối thiểu trong chương trình Colegram (Ménèsguen & Lépy, 2021) để tìm diện tích đỉnh phổ. Sau đó, tỉ số R ứng với mỗi nồng độ được tính toán theo công thức (2). Như đã đề cập ở trên, giá trị tỉ số R giữa thực nghiệm và mô phỏng trong các nghiên cứu trước đây đã chứng minh là sai khác không đáng kể nên có thể sử dụng tỉ số R mô phỏng để xây dựng đường chuẩn cho phép đo. Đồng thời, tỉ số R có thể được dùng là căn cứ để đánh giá độ nhạy của phép đo khi các tham số của cấu hình đo thay đổi.



**Hình 4.** Phổ mô phỏng của phép đo nước cất và dung dịch NaOH 34% với các nguồn  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{133}\text{Ba}$ ,  $^{152}\text{Eu}$  và  $^{137}\text{Cs}$

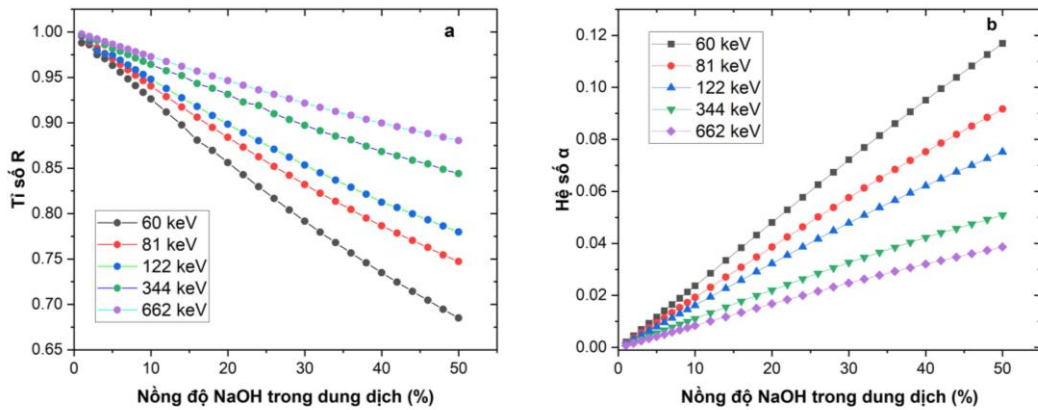
Để đánh giá ảnh hưởng của năng lượng lên tỉ số R khi đo với các năng lượng khác nhau, chúng tôi xác định hệ số  $\alpha$  trong công thức (3) từ các giá trị mật độ khối lượng và hệ số suy giảm khối tính từ chương trình XCOM (Berger, 2010) của mỗi dung dịch. Bảng giá trị mật độ, hệ số  $\alpha$  và tỉ số R theo nồng độ phần trăm của dung dịch NaOH được trình bày ở Bảng 1. Hình 5a cho thấy giá trị hệ số  $\alpha$  có xu hướng tăng nhiều hơn theo nồng độ của dung dịch ở các mức năng lượng thấp (60 keV và 81 keV) so với các mức năng lượng cao hơn (344 keV và 662 keV). Sự thay đổi của của hệ số  $\alpha$  chứng tỏ tỉ số R suy giảm nhiều hơn theo



nồng độ khi sử dụng nguồn có năng lượng càng thấp (xem hình 5b). Khi nồng độ của dung dịch NaOH tăng từ 1% tới 50% thì độ giảm trung bình của tỉ số R lần lượt là 0,0063 (60 keV), 0,0051 (81 keV), 0,0044 (122 keV), 0,0031 (344 keV) và 0,0024 (662 keV). Như vậy, với mức năng lượng thấp, phổ đo của các dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau sẽ dễ phân biệt hơn do sự suy giảm đáng kể của tỉ số R giữa các dung dịch. Nói cách khác là độ nhạy phép đo đối với trường hợp dung dịch NaOH tốt hơn khi sử dụng nguồn có năng lượng thấp. Tuy nhiên, độ nhạy của phép đo còn phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác, do đó các dữ liệu thực nghiệm là yêu cầu cần thiết để đánh giá một cách chi tiết hơn.

**Bảng 1.** Mật độ và hệ số  $\alpha$  theo nồng độ phần trăm của dung dịch NaOH

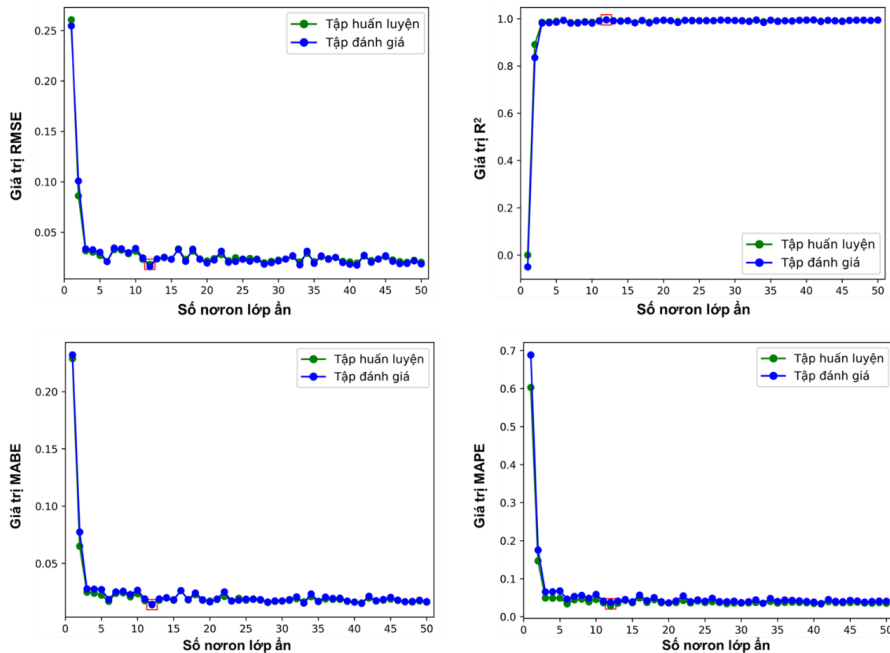
Nồng độ (%)	Mật độ (g/ml)	60 keV		81 keV		122 keV		344 keV		662 keV	
		$\alpha$	R	$\alpha$	R	$\alpha$	R	$\alpha$	R	$\alpha$	R
1,00	1,001	0,0021	0,9879	0,0016	0,9951	0,0014	0,9958	0,0010	0,9972	0,0007	0,9979
2,00	1,021	0,0045	0,9860	0,0037	0,9888	0,0031	0,9904	0,0021	0,9934	0,0016	0,9950
3,00	1,032	0,0069	0,9749	0,0056	0,9825	0,0048	0,9794	0,0033	0,9908	0,0025	0,9922
4,00	1,043	0,0093	0,9707	0,0075	0,9763	0,0065	0,9758	0,0044	0,9859	0,0033	0,9893
5,00	1,054	0,0117	0,9631	0,0095	0,9703	0,0080	0,9741	0,0055	0,9816	0,0042	0,9866
6,00	1,065	0,0141	0,9557	0,0114	0,9643	0,0097	0,9688	0,0067	0,9787	0,0050	0,9838
7,00	1,076	0,0165	0,9482	0,0134	0,9583	0,0113	0,9636	0,0078	0,9750	0,0059	0,9810
8,00	1,087	0,0189	0,9408	0,0154	0,9523	0,0130	0,9583	0,0089	0,9713	0,0067	0,9783
9,00	1,098	0,0213	0,9335	0,0172	0,9464	0,0146	0,9531	0,0099	0,9677	0,0076	0,9755
10,00	1,109	0,0237	0,9263	0,0193	0,9404	0,0161	0,9480	0,0110	0,9642	0,0084	0,9728
12,00	1,131	0,0285	0,9119	0,0231	0,9289	0,0194	0,9377	0,0133	0,9572	0,0101	0,9675
14,00	1,153	0,0335	0,8976	0,0271	0,9174	0,0227	0,9276	0,0155	0,9519	0,0118	0,9621
16,00	1,175	0,0383	0,8808	0,0309	0,9061	0,0259	0,9179	0,0177	0,9432	0,0134	0,9568
18,00	1,197	0,0432	0,8696	0,0348	0,8949	0,0291	0,9081	0,0199	0,9379	0,0151	0,9516
20,00	1,219	0,0480	0,8561	0,0386	0,8839	0,0322	0,8984	0,0220	0,9313	0,0167	0,9465
22,00	1,241	0,0529	0,8427	0,0425	0,8731	0,0355	0,8891	0,0242	0,9228	0,0184	0,9413
24,00	1,263	0,0577	0,8296	0,0463	0,8626	0,0387	0,8801	0,0263	0,9191	0,0200	0,9363
26,00	1,285	0,0626	0,8166	0,0502	0,8518	0,0417	0,8709	0,0285	0,9098	0,0216	0,9313
28,00	1,306	0,0674	0,8040	0,0538	0,8421	0,0449	0,8621	0,0306	0,9034	0,0232	0,9264
30,00	1,328	0,0722	0,7916	0,0576	0,8320	0,0478	0,8534	0,0327	0,8972	0,0248	0,9216
32,00	1,349	0,0769	0,7796	0,0613	0,8223	0,0509	0,8449	0,0346	0,8912	0,0263	0,9170
34,00	1,370	0,0815	0,7680	0,0649	0,8136	0,0538	0,8368	0,0365	0,8854	0,0278	0,9125
36,00	1,390	0,0861	0,7567	0,0684	0,8046	0,0566	0,8289	0,0385	0,8812	0,0292	0,9081
38,00	1,410	0,0906	0,7457	0,0719	0,7950	0,0595	0,8213	0,0404	0,8742	0,0306	0,9038
40,00	1,430	0,0951	0,7349	0,0752	0,7865	0,0622	0,8125	0,0423	0,8684	0,0320	0,8997
42,00	1,449	0,0995	0,7245	0,0786	0,7785	0,0649	0,8067	0,0441	0,8636	0,0334	0,8956
44,00	1,469	0,1038	0,7144	0,0819	0,7705	0,0676	0,7998	0,0457	0,8586	0,0347	0,8917
46,00	1,487	0,1083	0,7045	0,0851	0,7627	0,0700	0,7931	0,0474	0,8546	0,0360	0,8880
48,00	1,507	0,1126	0,6946	0,0884	0,7546	0,0727	0,7863	0,0492	0,8488	0,0373	0,8842
50,00	1,525	0,1169	0,6850	0,0917	0,7473	0,0752	0,7798	0,0509	0,8440	0,0386	0,8805



Hình 5. Sự thay đổi của hệ số  $\alpha$  và tỉ số  $R$  theo nồng độ của dung dịch NaOH

**3.2. Đánh giá bước đầu về khả năng ứng dụng mô hình mạng neuron nhân tạo được huấn luyện từ dữ liệu mô phỏng Monte Carlo trong phép đo nồng độ bazơ trong dung dịch**

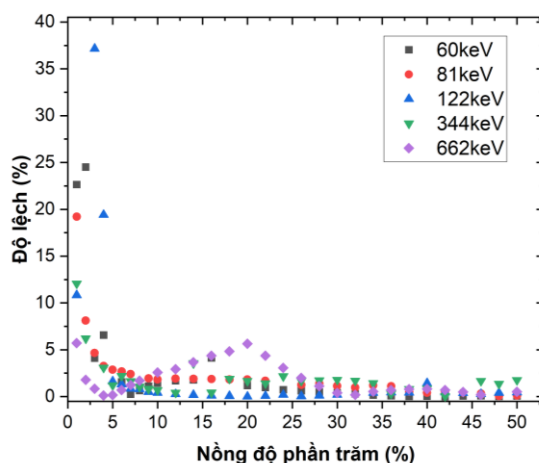
Dựa trên sự thay đổi các chỉ số thống kê RMSE, MABE, MAPE và  $R^2$  theo số nơron của lớp ẩn từ 1-40 như Hình 6, chúng tôi xác định số nơron phù hợp với lớp ẩn. Các giá trị RMSE, MAPE và MABE đạt giá trị ổn định và nhỏ nhất tại 12 nơron của lớp ẩn. Giá trị  $R^2$  tại số nơron này tiến tới gần bằng 1 hơn so với các giá trị khác. Mặt khác, giá trị hàm mất mát MSE của mô hình với 12 nơron của lớp ẩn cũng suy giảm về giá trị cực đại nhanh hơn so với các mô hình sử dụng số nơron khác. Những đánh giá trên cho thấy số nơron của lớp ẩn phù hợp nhất cho cấu trúc mô hình ANN là 12. Nhưng cần lưu ý là độ lệch giữa giá trị dự đoán từ mô hình với giá trị tham chiếu là chỉ số quan trọng để đánh giá khả năng ứng dụng thực tế của mô hình.



Hình 6. Sự thay đổi của các chỉ số RMSE, MABE, MAPE,  $R^2$  theo số nơron của lớp ẩn

Mô hình ANN được huấn luyện với các dữ liệu mô phỏng theo các bước trình bày ở phần trên. Phần lớn giá trị độ lệch tương đối (RD) giữa nồng độ dự đoán từ mô hình và nồng độ tham chiếu của tập dữ liệu học nhỏ hơn 5% (có 128 trên 140 điểm dữ liệu học, tương đương với 85,7% số điểm). Các điểm có độ lệch lớn hơn 5% tập trung ở những điểm có nồng độ dưới 4% (xem Hình 7). Khả năng dự đoán của mô hình chưa tốt ở vùng dữ liệu có nồng độ thấp có thể do thiếu các dữ liệu học ở vùng này trong quá trình huấn luyện hoặc mô hình chưa tối ưu tốt với trường hợp nồng độ dung dịch thấp. Các kết quả trên cho thấy mô hình ANN đã xây dựng có khả năng dự đoán khá chính xác nồng độ phần trăm của dung dịch NaOH.

Chúng tôi sử dụng một tập dữ liệu mô phỏng độc lập khác để đánh giá độ chính xác của mô hình khi dự đoán nồng độ của dung dịch NaOH. Kết quả đánh giá với tập kiểm chứng ở Bảng 2 cho thấy có 9/10 điểm dữ liệu (90,0%) có độ lệch tương đối giữa nồng độ dự đoán và nồng độ tham chiếu dưới 5%, chỉ có một điểm ở nồng độ 3% ở 344 keV có độ lệch lớn hơn 10%. Kết quả dự đoán chưa tốt của mô hình đối với nồng độ dung dịch thấp dưới 4% có thể xuất phát từ hai nguyên nhân đã được trình bày trong phần huấn luyện mô hình. Các kết quả ban đầu này cho thấy mô hình ANN có thể được áp dụng cho phép đo nồng độ dung dịch bazơ dựa trên kỹ thuật đo gamma truyền qua với mức năng lượng khác nhau. Khác với cách xây dựng đường chuẩn như trong một số nghiên cứu trước đây (Chuong et al., 2021b), các phép đo với các nguồn năng lượng khác nhau đều có thể đưa vào quá trình huấn luyện mô hình ANN. Điều đó giúp đơn giản hóa quá trình phân tích và xử lý dữ liệu của phép đo. Tuy nhiên, các dữ liệu ở vùng nồng độ thấp dưới 4% cần được bổ sung thêm để nâng cao độ chính xác của mô hình ở vùng này, đồng thời ta cũng cần các dữ liệu thực nghiệm để kiểm chứng độ tin cậy của mô hình trong thực tế.



Hình 7. Kết quả huấn luyện của mô hình ANN

**Bảng 2.** Kết quả dự đoán của mô hình ANN với tập kiểm chứng

Năng lượng (keV)	Nồng độ tham khảo $C^{ref}$ (%)	Nồng độ dự đoán $C^{pred}$ (%)	Độ lệch tương đối (%)
60	5,0	4,83	3,42
60	18,0	18,27	1,50
81	8,0	7,83	2,12
81	24,0	23,61	1,64
122	2,0	2,09	4,56
122	32,0	32,14	0,43
344	3,0	2,57	14,18
344	44,0	43,79	0,47
662	9,0	9,19	2,14
662	48,0	47,91	0,18

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu của chúng tôi đã bước đầu trình bày cách tiếp cận mới để xác định nồng độ phần trăm của dung dịch bazơ dựa trên dữ liệu mô phỏng Monte Carlo xây dựng trên phép đo gamma truyền qua và mô hình mạng nơron nhân tạo. Kết quả phân tích từ dữ liệu mô phỏng cho thấy giá trị tỉ số R suy giảm khi nồng độ tăng với độ suy giảm trung bình lớn nhất tại 60 keV (0,0063) và nhỏ nhất tại 662 keV (0,0024). Điều đó cho thấy độ nhạy của phép đo sẽ cao hơn khi sử dụng nguồn có năng lượng thấp trong trường hợp của dung dịch NaOH. Kết quả nồng độ thu được từ mô hình ANN cho thấy độ lệch tương đối giữa nồng độ dự đoán với các nồng độ tham chiếu là dưới 5% trong khoảng giá trị nồng độ từ 4%-50%. Điều này chứng tỏ khả năng ứng dụng của mô hình trong phép đo nồng độ dung dịch. Cách tiếp cận này có ưu điểm là tiết kiệm được thời gian, đơn giản hóa quá trình xử lý dữ liệu so với việc xây dựng đường chuẩn. Ngoài ra, cách tiếp cận có thể đánh giá, dự đoán kết quả đo nhanh hơn nhưng vẫn đảm bảo độ chính xác khi các thông số thực nghiệm như năng lượng chùm tia, mẫu đo thay đổi. Tuy nhiên, mô hình cần được phát triển để nâng cao độ chính xác trong trường hợp nồng độ dung dịch thấp dưới 4% và cần được kiểm chứng dựa trên các phép đo thực nghiệm.

- ❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.
- ❖ **Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Nguồn ngân sách khoa học và công nghệ Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh trong đề tài mã số CS.2022.19.54

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Huynh, D. C., Nguyen, T. H. Y., Nguyen, T. M. L., & Hoang, D. T. (2020). Determining the density of liquid using gamma scattering method. *Applied Radiation and Isotopes*, 163, Article 109197. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109197>
- Huynh, D. C., Truong, T. S., & Hoang, D. T. (2021a). Monte Carlo simulation combined with experimental measurements based on gamma transmission technique for determining the density of liquid. *Radiation Physics and Chemistry*, 179, Article 109216. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.109216>
- Huynh, D. C., Truong, T. S., Le, T. N. T., Nguyen, T. T. L., & Hoang, D. T. (2021b). The first result in the determination of the percentage concentration of sulfuric acid solution based on the gamma transmission technique with an energy of 662 keV. *VNUHCM Journal of Natural Sciences*, 5(2), 1179-1188. <https://doi.org/https://doi.org/10.32508/stdjns.v5i2.1010>
- Goorley, T., James, M., Booth, T., Brown, F., Bull, J., Cox, L. J., Durkee, J., Elson, J., Fensin, M., Forster, R. A., Hendricks, J., Hughes, H. G., Johns, R., Kiedrowski, B., Martz, R., Mashnik, S., McKinney, G., Pelowitz, D., Prael, R., Sweezy, J., Waters, L., Wilcox, T., & Zukaitis, T. (2014). Features of MCNP6. In *SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo* (pp. 06011). EDP Sciences. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2015.02.020>
- Green, D. W., & Southard, M. Z. (2019). *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill Education.
- Pierre, D. (2019). Acid-Base Titration. *Undergraduate Journal of Mathematical Modeling: One+ Two*, 10(1), Article 8. <https://doi.org/10.5038/2326-3652.10.1.4913>
- Priyada, P., Margret, M., & Ramar, R. (2012). Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for fluid–fluid and fluid–air interface levels detection and density measurements. *Applied Radiation and Isotopes*, 70(3), 462-469. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2011.10.019>
- Hoang, D. T., Huynh, D. C., Tran, T. T., & Chau, V. T. (2016). A study of the effect of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> reflector on response function of NaI (Tl) detector. *Radiation Physics and Chemistry*, 125, 88-93. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2016.03.020>
- Hoang, D. T., & Nguyen, T. M. L. (2018). An improved method for liquid density measurement using NaI (Tl) detector and low-strength source. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 317, 161-168. <https://doi.org/10.1007/s10967-018-5878-1>
- Nguyen, T. H., Dang, H. A., Truong, T. S., Tran, T. M. D, Nguyen, T. D, Lam, D. N. & Hoang, D. T. (2020). Determining the density of acid using the calibration curve constructed by Monte Carlo simulation data. *Ho Chi Minh City University Journal of Science*, 17(12), Article 2219. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.17.12.2874\(2020\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.17.12.2874(2020))
- Vasilev, I., Slater, D., Spacagna, G., Roelants, P., & Zocca, V. (2019). *Python Deep Learning: Exploring deep learning techniques and neural network architectures with Pytorch, Keras, and TensorFlow*. Packt Publishing Ltd.
- Ménesguen, Y., & Lépy, M. C. (2021). COLEGRAM, a flexible user-friendly software for processing of ionizing radiation spectra. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1003, Article 165341. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.165341>

- Berger, M. J., Hubbell, J. H., Seltzer, S. M., Chang, J., Coursey, J. S., Sukumar, R., Zucker, D. S., & Olsen, K. (2010). *XCOM: Photon Cross Sections Database*. Physical Measurement Laboratory, NIST. <https://dx.doi.org/10.18434/T48G6X>
- Tondon, A., Singh, M., Sandhu, B. S., & Singh, B. (2017). A Compton scattering technique for concentration and fluid-fluid interface measurements using NaI (TI) detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 403, 21-27. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.04.080>
- Salgado, C. M., Brandão, L. E. B., Conti, C. C., & Salgado, W. L. (2016). Density prediction for petroleum and derivatives by gamma-ray attenuation and artificial neural networks. *Applied Radiation and Isotopes*, 116, 143-149. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2016.08.001>
- Truong, T. S., Dang, H. A., Huynh, D. C., Nguyen, T. H., Lam D. N., Nguyen T. K. A., Tran, T. M. D., & Hoang, D. T. (2021a). ANN coupled with Monte Carlo simulation for predicting the concentration of acids. *Applied Radiation and Isotopes*, 169, Article 109563. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109563>
- Truong, T. S., Huynh, D. C. & Hoang, D. T. (2021b). An artificial neural network based approach for estimating the density of liquid applied in gamma transmission and gamma scattering techniques. *Applied Radiation and Isotopes*, 169, Article 109570. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109570>

---

**DETERMINING THE CONCENTRATION OF BASE SOLUTION BASED ON GAMMA TRANSITION TECHNIQUE COMBINED WITH MONTE CARLO SIMULATION AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORK: PRELIMINARY RESULTS**

**Nguyen Thanh Dat<sup>1, 2, 3\*</sup>, Hoang Thi Kieu Trang<sup>1, 2</sup>, Hoang Duc Tam<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>University of Science, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

<sup>2</sup>Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

<sup>3</sup>Department of Physics, Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

\*Corresponding author: Nguyen Thanh Dat – Email: [datnth@hcmue.edu.vn](mailto:datnth@hcmue.edu.vn)

Received: August 28, 2023; Revised: October 20, 2023; Accepted: November 21, 2023

**ABSTRACT**

*This study proposes an approach based on Monte Carlo simulation data of gamma transmission measurements combined with an artificial neural network (ANN) model to determine the percentage concentration of base solutions. The simulated data was used to evaluate the relationship between R (the ratio of the area under the transmission peak for the solution relative to that of water) and the concentration of base solution with different energies in the range of 60 – 667 keV. The average reduction of R has a minimum value of 0.0024 at 662 keV and a maximum value of 0.0063 at 60 keV. This result indicates that the measurement sensitivity is more favored in the low-energy case. The ANN model was trained by using the simulated data and then used to predict the concentration of the base solution. The study results show that the proposed approach is feasible for determining the concentration of base solutions. The relative deviations between ANN predictions and reference concentrations are less than 5% for the solution concentrations in the range of 4% to 50%. The preliminary results play an important role in developing a useful non-destructive method to determine the concentration of base solutions.*

**Keywords:** base solution; concentration; gamma transmission; Monte Carlo; NaI(Tl)