

## Bài báo nghiên cứu

**TÍNH TOÁN HỆ SỐ HIỆU CHỈNH TỰ HẤP THỤ  
SỬ DỤNG MÔ PHỎNG MONTE CARLO  
VÀ MẠNG NƠ-RON NHÂN TẠO**

*Nguyễn Huỳnh Khánh Duyen<sup>1</sup>, Nguyễn Thanh Huy<sup>1</sup>, Lê Quang Vương<sup>1,2\*</sup>,  
Hoàng Đức Tâm<sup>1</sup>, Phan Long Hồ<sup>2,3</sup>, Trần Thiện Thanh<sup>2</sup>, Châu Văn Tạo<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

<sup>2</sup>Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

<sup>3</sup>Viện Y tế Công cộng Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

\*Tác giả liên hệ: Lê Quang Vương – Email: [vuonglq@hcmue.edu.vn](mailto:vuonglq@hcmue.edu.vn)

Ngày nhận bài: 14-5-2024; ngày nhận bài sửa: 01-7-2024; ngày duyệt đăng: 04-9-2024

**TÓM TẮT**

Nghiên cứu này đề xuất sử dụng mạng nơ-ron nhân tạo (ANN) để xác định hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ của vật liệu trong phép đo gamma mẫu môi trường. Phương pháp này tính đến đặc tính như số bậc nguyên tử, mật độ khối và năng lượng photon. Mô hình ANN đã được đào tạo và kiểm tra trên tập dữ liệu bao gồm 2575 điểm dữ liệu. Kết quả dự đoán hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ bằng mô hình ANN có độ chính xác cao với  $R^2$  trung bình là 0,88 ( $0,54 \leq R^2 \leq 0,97$ ), RMSE trung bình là 0,13 ( $0,07 \leq RMSE \leq 0,27$ ) và MAE trung bình là 0,10 ( $0,05 \leq MAE \leq 0,21$ ). Ngoài ra, độ sai biệt tương đối nhỏ hơn 12% chứng tỏ kết quả dự đoán bởi ANN cho 42 giá trị hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ tại năng lượng 40, 50, 60 keV có sự phù hợp tốt với kết quả tính toán bởi mô phỏng MCNP6. Phương pháp này là một công cụ hiệu quả và đáng tin cậy, giúp giảm thời gian tính toán và tiết kiệm chi phí trong các phép đo mẫu môi trường.

**Từ khóa:** ANN; hệ phổ kế gamma; MCNP; hệ số tự hấp thụ; XCOM

**1. Giới thiệu**

Phép đo phổ tia gamma là một trong những phương pháp được sử dụng rộng rãi để xác định hoạt độ các đồng vị phóng xạ tự nhiên và nhân tạo trong các mẫu môi trường. Đây là một kỹ thuật không phá hủy có thể xác định chính xác đồng thời hoạt độ của nhiều đồng vị phóng xạ. Tuy nhiên, sự suy giảm photon trong bản thân mẫu có thể rất khác nhau giữa mẫu tham chiếu và mẫu thực. Vì vậy, một số quy trình đã được phát triển để đánh giá các hiệu chỉnh tự hấp thụ cần thiết trong phép đo phổ gamma (Debertin & Helmer, 1988; Eisenbud & Gesell, 1997; Gilmore, 2008b; L'Annunziata, 2012). Mặt khác, việc áp dụng các hiệu

---

**Cite this article as:** Nguyen Huynh Khanh Duyen, Nguyen Thanh Huy, Le Quang Vuong, Hoang Duc Tam, Phan Long Ho, Tran Thien Thanh, & Chau Van Tao (2025). Calculation of self-absorption correction factors using Monte Carlo simulation and artificial neural networks. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 22(1), 1-14.

chỉnh đòi hỏi phải biết hệ số suy giảm tuyến tính của cả mẫu tham chiếu và mẫu thực. Nếu thành phần của mẫu thực rất khác so với mẫu tham chiếu và mật độ của chúng cũng khác nhau, hệ số tự hấp thụ có thể đóng góp đến 8% tại vùng năng lượng thấp dưới 80 keV (Barba-Lobo et al., 2021; Modarresi & Masoudi, 2018).

Hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ cho từng năng lượng gamma và từng dạng hình học của mẫu có thể xác định bằng các phép đo thực nghiệm (Huy et al., 2013; Mostajaboddavati et al., 2006; Thanh et al., 2010). Tuy nhiên, công việc này đòi hỏi phải chuẩn bị và đo lường một số lượng lớn mẫu có mật độ khối khác nhau. Điều này mất nhiều thời gian và chi phí. Chương trình mô phỏng Monte Carlo cũng thường được lựa chọn để tính toán hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ cho từng cấu trúc hình học đo khác nhau. Một số chương trình mô phỏng đã được áp dụng để xác định hệ số tự hấp thụ trong phép đo phổ tia gamma như Deteff (Vargas et al., 2002), MCNP5 (Huy et al., 2013; Modarresi & Masoudi, 2018), MCNP6 (Bilici et al., 2023), MCNP-CP (Vuong et al., 2023), GESPECOR (Iurian, 2017). Ngoài ra, một phương pháp hiệu quả khác đó là mạng nơ-ron nhân tạo (ANN, Artificial Neural Networks) cũng đang được áp dụng cho các phép đo gamma mẫu môi trường. ANN có khả năng khái quát và phân tích dữ liệu phức tạp để dự đoán chính xác hệ số suy giảm khối của vật liệu (Benhadjira et al., 2024; Salgado et al., 2020). Việc sử dụng mô hình ANN trong dự đoán hệ số tự hấp thụ của vật liệu mang lại nhiều lợi thế quan trọng mà các phương pháp khác khó đạt được. Bằng cách được đào tạo từ số lượng lớn dữ liệu được xác định trước đó, mô hình ANN có thể khái quát hóa mối quan hệ giữa các đại lượng đầu vào như năng lượng gamma, thành phần nguyên tố, mật độ khối... và xây dựng mô hình dự đoán chính xác hệ số tự hấp thụ ở đầu ra (Bilmez et al., 2022).

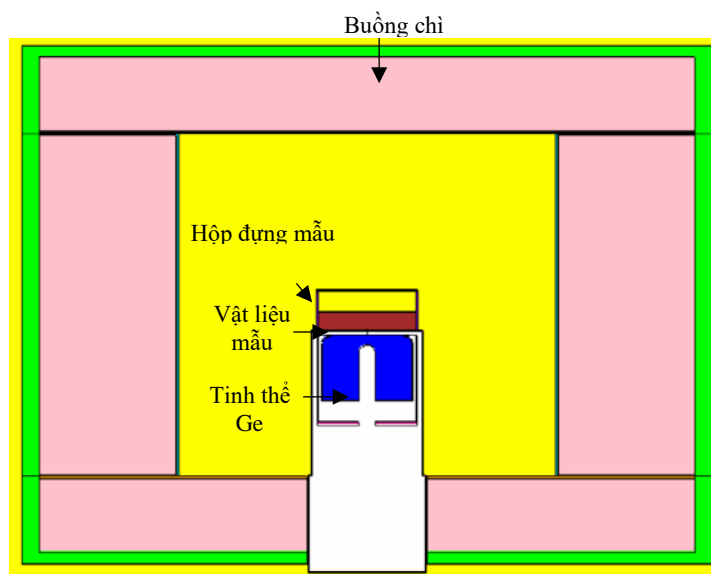
Trong nghiên cứu này, chúng tôi phát triển một mô hình ANN dự đoán đáng tin cậy hệ số tự hấp thụ của các vật liệu có số bậc nguyên tử  $Z$  từ 1 đến 55. Phương pháp này tính đến năng lượng gamma ( $E$ ), số bậc nguyên tử  $Z$  và mật độ khối ( $\rho$ ) của vật liệu. Tập dữ liệu được xây dựng bởi chương trình XCOM và loại bỏ các vật liệu có  $Z > 55$  do hệ số tự hấp thụ quá khác xa so với 1, không phù hợp cho mô hình này (Barba-Lobo et al., 2021). Mô hình ANN đề xuất có khả năng dự đoán chính xác hệ số tự hấp thụ của vật liệu với độ sai biệt dưới 12% so với kết quả tính toán từ chương trình MCNP6. Kết quả nghiên cứu này sẽ góp phần bổ sung một cách tiếp cận mới nhằm xác định nhanh chóng hệ số tự hấp thụ trong các phép đo gamma mẫu môi trường.

## **2. Vật liệu và phương pháp nghiên cứu**

### **2.1. Mô phỏng Monte Carlo**

Trong nghiên cứu này, chương trình mô phỏng Monte Carlo MCNP6 phiên bản 6.1 (Pelowitz, 2013) được sử dụng để mô tả chi tiết cấu trúc hình học của hệ phổ kế gamma phòng thấp và mẫu phân tích dạng hình học trụ. Hệ phổ kế bao gồm một đầu dò HPGe GEM50 với tinh thể có chiều cao 77 mm, đường kính 65,9 mm, được bọc ngoài bằng một lớp nhôm dày 1 mm (Thanh et al., 2018). Đầu dò được đặt trong một buồng chì phòng thấp

với nhiều lớp vật liệu như lớp thép carbon dày 13 mm, lớp chì dày 101 mm, lớp thiếc dày 0,5 mm, và đồng dày 1,6 mm theo thứ tự từ ngoài vào trong. Chương trình sử dụng Tally F8 để thu thập thông tin về phân bố độ cao xung của photon và năng lượng bị bỏ lại trong tinh thể đầu dò, tương ứng với 16.384 khe năng lượng trong khoảng từ 0 đến 3000 keV. Mode P được sử dụng để mô phỏng các tương tác của photon với vật liệu, bao gồm hiện tượng quang điện, tán xạ không kết hợp, tán xạ kết hợp, tạo cặp và hủy cặp... Số lịch sử hạt sử dụng trong mô phỏng là  $10^9$  hạt để đạt được sai số thống kê dưới 0,01% cho kết quả ghi nhận hiệu suất tại khe năng lượng quan tâm.



**Hình 1.** Mô phỏng MCNP6 hệ phổ kế gamma với đầu dò HPGe và hộp mẫu trụ

Để thu được các phép đo đáng tin cậy về hoạt độ của các hạt nhân phóng xạ môi trường, cần có giá trị chính xác của hiệu suất ghi đỉnh năng lượng toàn phần và hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ của mẫu đối với từng cấu trúc hình học đo nguồn – đầu dò xác định. Hiệu ứng tự hấp thụ xảy ra trong thể tích vật liệu mẫu khi một số bức xạ gamma phát ra từ nguồn có thể bị mất một phần hoặc toàn bộ năng lượng của chúng trong vật liệu trước khi rời khỏi mẫu. Trong trường hợp mẫu chuẩn và mẫu phân tích có cùng cấu trúc hình học đo, hệ số tự hấp thụ chịu ảnh hưởng bởi các yếu tố như thành phần nguyên tố, mật độ khối, và năng lượng gamma. Các hình học mẫu phổ biến thường được sử dụng cho các phép đo mẫu môi trường là mẫu Marinelli (Yücel et al., 2019) và mẫu trụ (Loan et al., 2022; Sima et al., 2020). Trong đó, mẫu trụ thường được sử dụng cho các phép đo mẫu rắn do các bước chuẩn bị mẫu đơn giản và dễ bảo quản, tiết kiệm thời gian và chi phí (Boshkova & Minev, 2001; Shweikani et al., 2014). Do đó, nghiên cứu này sử dụng hình học mẫu dạng trụ cho các mô phỏng tính toán hệ số tự hấp thụ. Hình 1 thể hiện cấu trúc hình học của hệ phổ kế trong phép đo gamma mẫu môi trường với vật liệu mẫu dạng trụ có bề dày 2 cm và đường kính 7,2 cm, được mô phỏng bằng phần mềm MCNP6. Hệ số tự hấp thụ tại năng lượng gamma E (MeV) được xác định bằng công thức (Gilmore, 2008b; Vuong et al., 2023):

$$C_{\text{abs}}^{\text{MCNP}} = \frac{\varepsilon_{\text{standard}}}{\varepsilon_{\text{sample}}}. \quad (1)$$

Trong đó,  $\varepsilon_{\text{standard}}$  và  $\varepsilon_{\text{sample}}$  là giá trị hiệu suất ghi mô phỏng của mẫu chuẩn và mẫu phân tích. Mẫu chuẩn được giả định là nước ( $\rho = 1 \text{ g/cm}^3$ ) với thành phần nguyên tố gồm 11,2% Hydrogen và 88,8% Oxygen (Richland, 2021). Mẫu phân tích bao gồm các nguyên tố có số bậc nguyên tử  $Z$  từ 1 đến 55, mật độ khối là  $1 \text{ (g/cm}^3\text{)}$ .

## 2.2. Tính toán hệ số tự hấp thụ bằng chương trình XCOM

Trong một cấu trúc hình học đo lí tưởng, khi mẫu hình trụ được đặt trên cửa sổ đầu dò và đồng trục với đầu dò, thành phần mẫu phân bố đồng đều, hệ số tự suy giảm bức xạ trong vật liệu mẫu được xác định bằng công thức (Debertin & Helmer, 1988):

$$F = \frac{1 - e^{-\mu \cdot x}}{\mu \cdot x}, \quad (2)$$

Trong đó,  $\mu$  là hệ số suy giảm tuyến tính,  $x$  là bề dày vật liệu mẫu.

Mẫu chuẩn và mẫu phân tích có thể được chuẩn bị từ cùng một loại vật liệu, nhưng rất tốn kém và mất nhiều thời gian, không phù hợp với các phòng thí nghiệm vừa và nhỏ. Thay vào đó, có thể chọn một mẫu chuẩn có thành phần vật liệu tương tự với mẫu phân tích để xây dựng đường chuẩn hiệu suất cho các phép đo hoạt độ phóng xạ môi trường. Khi đó mẫu phân tích và mẫu chuẩn sẽ có sự khác nhau về thành phần nguyên tố và mật độ khối. Một hệ số hiệu chỉnh hiệu suất đơn giản có thể tính toán bằng cách lấy tỉ lệ giữa các hiệu chỉnh tự suy giảm của từng vật liệu mẫu:

$$C_{\text{abs}} = \frac{F_{\text{sample}}}{F_{\text{standard}}} = \frac{\mu_{\text{standard}}}{\mu_{\text{sample}}} \times \frac{1 - e^{-\mu_{\text{sample}} \cdot x}}{1 - e^{-\mu_{\text{standard}} \cdot x}}. \quad (3)$$

Trong đó,  $C_{\text{abs}}$  là hệ số tự hấp thụ tại năng lượng gamma;  $F_{\text{sample}}$ ,  $F_{\text{standard}}$  và  $\mu_{\text{sample}}$ ,  $\mu_{\text{standard}}$  lần lượt là hệ số tự suy giảm bức xạ và hệ số suy giảm tuyến tính của mẫu phân tích, mẫu chuẩn.

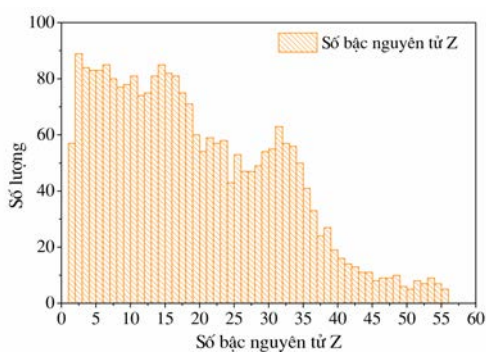
XCOM là công cụ cơ sở dữ liệu đánh giá sự suy giảm photon trong vật liệu (NIST). Nó cho phép người dùng lựa chọn thành phần vật liệu quan tâm (nguyên tố, hợp chất hoặc hỗn hợp) và cung cấp một loạt dữ liệu suy giảm photon trong khoảng năng lượng từ 1 keV đến 100 GeV. Hệ số suy giảm khối ( $\mu_{\rho} = \mu / \rho$ ) của vật liệu được đánh giá dựa trên các hiện tượng tương tác photon với vật chất như hấp thụ quang điện, tán xạ (đàn hồi và không đàn hồi) và tạo cặp. Hiện nay, có nhiều chương trình máy tính được phát triển để tính toán hệ số suy giảm khối như WinXCOM (Gerward et al., 2004), BXCOM (Eyecioğlu et al., 2019), NXCOM (El-Khayatt, 2011), Auto- $Z_{\text{eff}}$  (Taylor et al., 2012), Direct- $Z_{\text{eff}}$  (Adem & Tanfer, 2014), ParShield (Elmahroug et al., 2015), Phy-X/PSD (Şakar et al., 2020)... Các chương trình này đều là những công cụ mạnh mẽ có các tính năng mở rộng nhằm hỗ trợ tốt cho các phép đo thực nghiệm. Một số nghiên cứu đã được tiến hành nhằm so sánh mức độ tương

đồng giữa các chương trình máy tính trên. Tuy nhiên, kết quả tính toán hệ số suy giảm khối có độ sai biệt khoảng 37% giữa các chương trình (Hila et al., 2020), đặc biệt là tại cạnh hấp thụ của các nguyên tố nặng như wolfram ( $Z = 74$ ), bạch kim ( $Z = 78$ ), vàng ( $Z = 79$ ) (Arun Kumar et al., 2023).

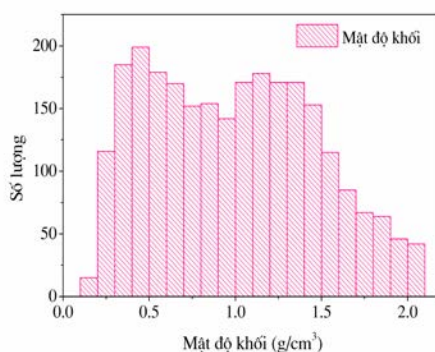
Trong nghiên cứu này, hệ số suy giảm khối ( $\mu_{\rho}^{XCOM}, g/cm^3$ ) của các nguyên tố có số bậc nguyên tử  $1 \leq Z \leq 55$  tại các năng lượng 40, 45, 50, 55, 60 keV được lấy từ cơ sở dữ liệu XCOM. Mẫu chuẩn nước có hệ số suy giảm tuyến tính  $\mu_{\text{standard}} = \mu_{\rho}^{H_2O} \times \rho_{H_2O}$ . Hệ số suy giảm tuyến tính của mẫu phân tích ( $\mu_{\text{sample}} = \mu_{\rho}^{\text{sample}} \times \rho_{\text{sample}}$ ) được xác định cho các nguyên tố với mật độ khối  $0,1 \leq \rho \leq 2,0 (g/cm^3)$ , bước tăng  $0,1 g/cm^3$ . Cuối cùng, hệ số tự hấp thụ tại các năng lượng gamma đối với hình học mẫu dạng trụ với bề dày  $x = 2\text{cm}$  được xác định bằng công thức (3). Kết quả xác định hệ số tự hấp thụ được thể hiện trong hình 2a.

**2.3. Mạng nơ-ron nhân tạo (ANN)**

Mạng nơ-ron nhân tạo (ANN, artificial neural network) là một công cụ mạnh mẽ để thực hiện các nghiên cứu về dự đoán và phân tích dữ liệu. Một mô hình ANN được cấu tạo từ nhiều lớp, mỗi lớp chứa các nơ-ron độc lập. Các nơ-ron trong lớp đầu tiên, hay còn gọi là lớp đầu vào, nhận thông tin từ dữ liệu ngoài cần xử lý và chuyển dữ liệu này qua mạng bằng các lớp ẩn. Trong quá trình này, mỗi nơ-ron sẽ xử lý thông tin bằng cách áp dụng các hàm toán học nhất định. Các trọng số của liên kết giữa các nơ-ron được điều chỉnh trong quá trình học, thông qua kỹ thuật lan truyền ngược và các phương pháp tối ưu hóa như Gradient Descent, nhằm giảm sai số giữa kết quả dự đoán của mạng và dữ liệu thực tế. Kết quả là, một mô hình ANN hoàn chỉnh có khả năng không chỉ hiểu và mô phỏng cấu trúc phức tạp của dữ liệu mà còn có thể đưa ra các dự đoán chính xác, vượt trội hơn hẳn so với những phương pháp truyền thống (Benhadjira et al., 2024).



(Hình 2a)

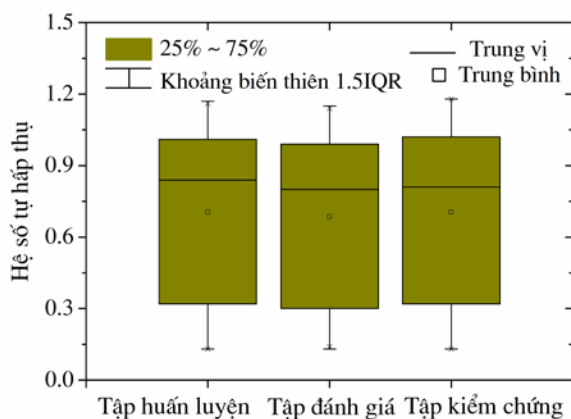


(Hình 2b)

**Hình 2. Thống kê sự phân bố dữ liệu của mô hình ANN**

Nghiên cứu này sử dụng mô hình ANN với thư viện Keras (Keras, 2023) để tính toán hệ số tự hấp thụ cho các vật liệu có số bậc nguyên tử  $1 \leq Z \leq 55$ , mật độ khối trong khoảng từ  $0,1$  đến  $2,0 g/cm^3$ , bước tăng  $0,1 g/cm^3$ . Đáng chú ý, trong các phân tích môi trường sử

dụng hệ phổ kế gamma, mẫu phân tích thường có sự tương đồng về thành phần mẫu với mẫu tham chiếu và hệ số hiệu chỉnh tự hấp thụ thường có giá trị lớn hơn 0,1 (Barba-Lobo et al., 2021; Gilmore, 2008a; IAEA, 2003). Do đó, trong nghiên cứu này chúng tôi loại bỏ các hệ số  $C_{abs} < 0,1$  khỏi tập dữ liệu huấn luyện mô hình. Hình 2a thể hiện sự phân bố số lượng điểm dữ liệu hệ số tự hấp thụ theo số bậc nguyên tử  $Z$ , trong đó tập trung lượng lớn dữ liệu ở  $5 \leq Z \leq 15$ . Hình 2b thể hiện sự phân bố dữ liệu đồng đều theo mật độ khối, trong đó vùng dữ liệu thấp tập trung ở  $\rho \leq 0,1 (g/cm^3)$  và  $\rho \geq 1,6 (g/cm^3)$ . Dữ liệu được chia ngẫu nhiên thành ba phần riêng biệt cho các nhiệm vụ cụ thể: điều chỉnh trọng số bằng tập huấn luyện (70%), xác minh tính tổng quát của mô hình bằng tập kiểm chứng (15%), đánh giá mô hình bằng tập kiểm tra (15%). Hình 3 thể hiện sự phân bố của 2575 điểm dữ liệu hệ số tự hấp thụ tương ứng với năng lượng gamma 40, 45, 50, 55, 60 keV. Giá trị trung bình hệ số tự hấp thụ của tập huấn luyện, tập đánh giá, tập kiểm chứng tương ứng là 0,47 ( $0,13 \leq C_{abs} \leq 1,17$ , trung vị là 0,34); 0,48 ( $0,14 \leq C_{abs} \leq 1,15$ , trung vị là 0,37); 0,49 ( $0,13 \leq C_{abs} \leq 1,18$ , trung vị là 0,38). Cấu trúc của mô hình ANN gồm một lớp đầu vào, một hoặc hai lớp ẩn, và một lớp đầu ra. Lớp đầu vào được thiết kế để nhận các tham số quan trọng như năng lượng gamma ( $E$ ), số bậc nguyên tử ( $Z$ ), và mật độ khối của vật liệu ( $\rho$ ). Qua đó, các thông tin này sẽ được xử lý bởi lớp ẩn, nơi các nơ-ron sử dụng hàm kích hoạt để phân tích và tinh chỉnh trọng số thông qua quá trình huấn luyện, giúp mô hình có thể học được mối quan hệ giữa các đầu vào ( $E, Z, \rho$ ) và đầu ra (hệ số tự hấp thụ  $C_{abs}$ ). Sự kết hợp giữa các lớp này cho phép mô hình hiệu và dự đoán chính xác hệ số tự hấp thụ, mang lại một cách tiếp cận hiện đại, hiệu quả, nhanh chóng, và tiết kiệm.



**Hình 3.** Phân bố dữ liệu hệ số tự hấp thụ cho mô hình ANN

Quá trình hội tụ của mạng nơ-ron nhân tạo (ANN) phụ thuộc vào việc lựa chọn kích thước và cấu trúc phù hợp. Để xây dựng một mô hình đáng tin cậy và hiệu quả, chúng tôi xác định hai yêu cầu chính: (1) mô hình phải có số lượng nơ-ron tối thiểu để giảm thiểu thời gian hội tụ và đơn giản hóa cấu trúc của mạng, giúp quản lý và điều chỉnh mô hình trở nên dễ dàng hơn; (2) duy trì mức độ chính xác cần thiết để đảm bảo chất lượng dự đoán không

bị suy giảm. Chúng tôi đề xuất sử dụng mô hình ANN với một hoặc hai lớp ẩn, với mô hình một lớp ẩn phù hợp cho các tác vụ đơn giản hơn, trong khi mô hình hai lớp ẩn phù hợp cho các tác vụ phức tạp hơn. Một mô hình ANN có nhiều hơn hai lớp ẩn không mang lại lợi ích đáng kể so với sự gia tăng thời gian xử lý và giảm độ chính xác (Barba-Lobo et al., 2021), và do đó không khuyến khích trong phạm vi nghiên cứu này.

Mối liên hệ giữa các lớp ẩn trong mô hình ANN được xác định bằng hàm Softmax (công thức (4)) (Haykin, 2009). Hiệu quả của mô hình được đánh giá thông qua sự suy giảm của hàm mất mát và các chỉ số thống kê, bao gồm: hệ số tương quan  $R^2$  (R-square score); sai số toàn phương trung bình (RMSE, root mean square error); và sai số tuyệt đối trung bình (MAE, mean absolute error). Hệ số  $R^2$  được sử dụng để đánh giá sự biến thiên của dữ liệu; một giá trị  $R^2$  cao cho thấy mô hình có khả năng dự đoán chính xác, phản ánh sự phù hợp giữa dữ liệu dự đoán và thực tế (công thức (5)). RMSE tính toán sai số trung bình của các dự đoán so với giá trị thực tế (công thức (6)). RMSE với giá trị thấp hơn chỉ ra sự chênh lệch nhỏ hơn giữa dự đoán và thực tế, do đó nâng cao chất lượng mô hình. Cuối cùng, MAE cung cấp một thước đo về trung bình sai số tuyệt đối, giúp hiểu rõ mức độ sai lệch trung bình mà không bị ảnh hưởng bởi các giá trị ngoại lệ (công thức (7)). Sự kết hợp của ba chỉ số đánh giá này mang lại một cái nhìn toàn diện và chính xác về hiệu quả dự đoán của mô hình, đồng thời hỗ trợ trong việc xác định những điểm mạnh cũng như cơ hội cải tiến cho các mô hình ANN trong tương lai.

$$\text{Soft max} = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j}} \quad (4)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})(y_i^{\text{pred}} - \bar{y}^{\text{pred}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^N (y_i^{\text{pred}} - \bar{y}^{\text{pred}})^2}} \quad (5)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - y_i^{\text{pred}}|^2} \quad (6)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - y_i^{\text{pred}}| \quad (7)$$

Trong đó,  $N$  là tổng số điểm dữ liệu đầu vào,  $n$  là số lượng nơ-ron của lớp ẩn,  $x_i$  là giá trị đầu vào của nơ-ron thứ  $i$ ,  $y_i$  là giá trị hệ số tự hấp thụ thứ  $i$ ,  $y_i^{\text{pred}}$  là giá trị hệ số tự hấp thụ thứ  $i$  của mô hình dự đoán.

Hình 4 thể hiện các bước của mô hình ANN trong tính toán hệ số tự hấp thụ, bao gồm:

**Bước 1:** xác định số lượng nơ-ron thích hợp trong các lớp ẩn để đạt được dự đoán chính xác. Quá trình huấn luyện thô được áp dụng để thay đổi số lượng nơ-ron trong mỗi lớp ẩn một cách có hệ thống, từ ít đến nhiều, và đánh giá hiệu suất của mô hình sau mỗi chu

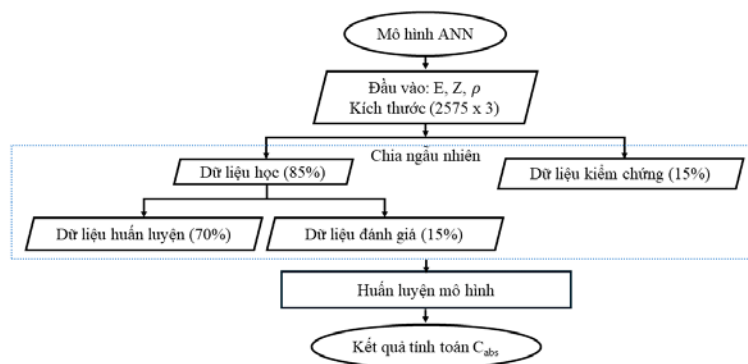
kỳ huấn luyện. Để tối ưu hóa mô hình, chúng tôi sử dụng thuật toán tối ưu hóa GD (Gradient Descent) kết hợp với thuật toán ADAM (Adaptive Moment Estimation). Bảng 1 trình bày các tham số và cấu hình chi tiết của quá trình huấn luyện nhằm cung cấp một cái nhìn toàn diện về cách tiếp cận và các biến thử nghiệm. Hàm mất mát là RMSE (công thức (6)). Ngoài ra, tỉ lệ bỏ học (Dropout rate = 0,1) cũng được đưa vào để giảm hiện tượng mô hình học tập quá mức (Srivastava et al., 2014).

**Bảng 1. Thông số của mô hình học thô và học tinh chỉnh**

Mô tả	Mô hình học thô	Mô hình học tinh chỉnh
Tốc độ học	$10^{-2}$	từ $10^{-1}$ tại $MSE = 10^{-1}$ đến $10^{-5}$ tại $MSE = 10^{-7}$
Kích thước nhóm	128	128
Hàm mất mát	RMSE	RMSE
Trọng số ban đầu	0	0
Số vòng lặp	150	40.000

**Bước 2:** dựa trên số lượng nơ-ron được xác định cho mỗi mô hình từ quá trình học thô, chúng tôi tiến hành kiểm tra các mô hình với một lớp ẩn và hai lớp ẩn sử dụng phương pháp học tinh chỉnh. Tốc độ học được điều chỉnh từ  $10^{-1}$  đến  $10^{-5}$  (tương ứng với MSE từ  $10^{-1}$  đến  $10^{-7}$ ) nhằm đảm bảo sự ổn định trong quá trình cập nhật trọng số. Trong quá trình này, việc điều chỉnh trọng số được thực hiện bằng phương pháp GD kết hợp với thuật toán tối ưu hóa ADAM, tương tự như trong quá trình học thô.

**Bước 3:** sử dụng mô hình trên để dự đoán hệ số tự hấp thụ ( $C_{abs}$ ) và so sánh với kết quả tính toán bởi MCNP6 và XCOM.



**Hình 4. Sơ đồ tính toán hệ số tự hấp thụ bằng mô hình ANN**

### 3. Kết quả và thảo luận

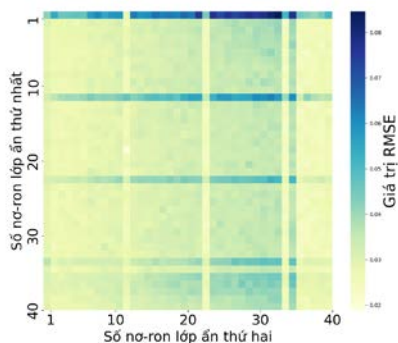
#### 3.1. Xác định số nơ-ron phù hợp cho mô hình ANN

**Bảng 2. Các thông số đánh giá mô hình ANN**

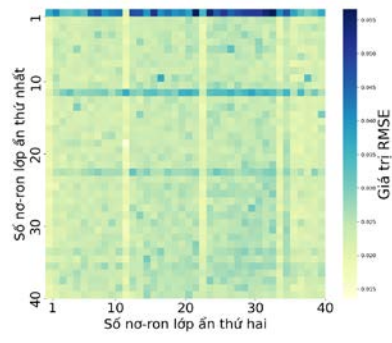
Mô hình	Số nơ-ron			Giá trị đánh giá		
	Lớp ẩn thứ nhất	Lớp ẩn thứ hai	RD(%)	RMSE	MAE	R <sup>2</sup>
1	13		6,9	0,14	0,11	0,88
2	26	2	4,6	0,09	0,07	0,95



Bảng 2 thể hiện các giá trị  $R^2$ , RMSE, MAE khi khảo sát số nơ-ron tối ưu của mô hình ANN một lớp ẩn và hai lớp ẩn. Mô hình một lớp ẩn được khảo sát với số nơ-ron tăng từ 1 đến 40, kết quả thể hiện mô hình tối ưu có số nơ-ron là 13. Đối với mô hình 2 lớp ẩn, từng cặp nơ-ron được khảo sát (Hình 5). Kết quả thể hiện số nơ-ron lớp ẩn thứ nhất là 26 tương ứng với số nơ-ron lớp ẩn thứ hai là 2.



(Hình 5a)

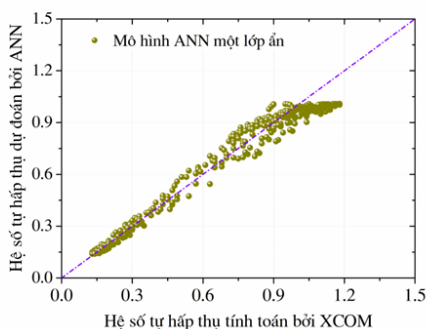


(Hình 5b)

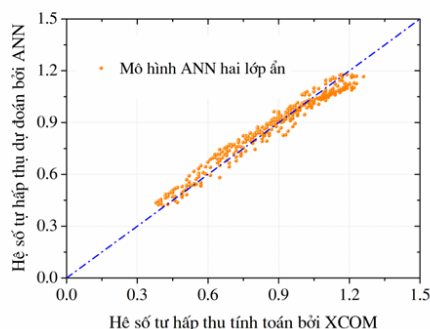
Hình 5. Kết quả khảo sát số nơ-ron của lớp ẩn thứ nhất và lớp ẩn thứ hai

### 3.2. Kết quả xác định hệ số tự hấp thụ bằng mô hình ANN

Khả năng khái quát hóa dữ liệu của mô hình ANN thường được đánh giá thông qua khả năng dự đoán dữ liệu mới không bao gồm trong tập dữ liệu huấn luyện. Trong nghiên cứu này, một tập dữ liệu độc lập gồm 367 giá trị ( $E, Z, \rho$ ) tại các năng lượng gamma 40, 45, 50, 55, 60 keV được sử dụng để kiểm chứng độ chính xác của mô hình ANN. Kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ có sự phù hợp tốt với kết quả tính toán bởi chương trình XCOM với độ sai biệt trung bình 7,6% và 4,9% tương ứng cho mô hình ANN một lớp ẩn và hai lớp ẩn. Hình 6a thể hiện kết quả dự đoán bởi mô hình ANN một lớp ẩn so sánh với chương trình XCOM, với độ sai biệt tương đối lớn nhất là 15%. Hình 6b thể hiện kết quả dự đoán bởi mô hình ANN hai lớp ẩn, với độ sai biệt tương đối lớn nhất là 14,7%.



(Hình 6a)

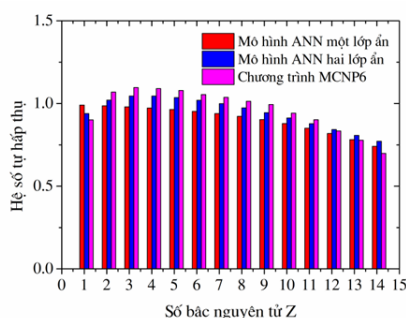


(Hình 6b)

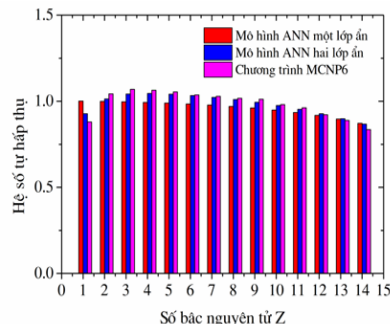
Hình 6. Kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ so sánh với XCOM

Ngoài ra, chương trình MCNP6 được sử dụng để mô phỏng và tính toán hệ số tự hấp thụ của các vật liệu có mật độ 1 ( $\text{g/cm}^3$ ), với các photon có năng lượng 40, 50, 60 keV. Độ sai biệt tương đối trung bình 3% giữa kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ từ mô hình ANN và

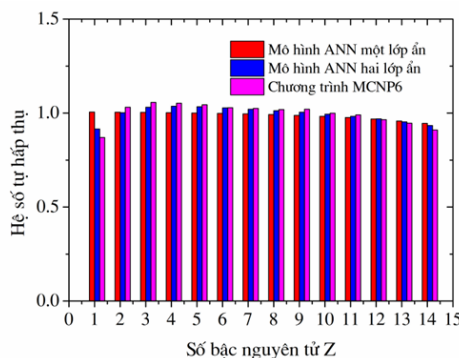
chương trình MCNP6. Đối với năng lượng 40 keV, kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ so sánh với chương trình MCNP6 có độ sai biệt tương đối dưới 10% (Hình 7a). Đối với năng lượng 50 keV, kết quả thể hiện độ sai biệt tương đối lớn nhất là 14% và 5% tương ứng với mô hình 1 lớp ẩn và 2 lớp ẩn so với MCNP6 (Hình 7b). Tại năng lượng 60 keV (Hình 7c), kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ của mô hình 1 lớp ẩn so sánh với MCNP6 có độ sai biệt tương đối lớn nhất là 16%, và 4% cho mô hình 2 lớp ẩn. Các kết quả trên thể hiện mô hình 2 lớp ẩn dự đoán chính xác kết quả hệ số tự hấp thụ so với mô Hình 1 lớp ẩn.



(Hình 7a)



(Hình 7b)



(Hình 7c)

Hình 7. Kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ so sánh với chương trình MCNP6

#### 4. Kết luận

Nghiên cứu này đánh giá việc sử dụng mô hình ANN để xác định hệ số tự hấp thụ của vật liệu trong phép đo phổ gamma mẫu môi trường. Mô hình mạng nơ-ron một lớp ẩn và hai lớp ẩn được xây dựng với 2208 điểm dữ liệu từ chương trình XCOM. Đầu vào là các giá trị năng lượng gamma (E), số bậc nguyên tử Z, và mật độ khối ( $\rho$ ). Quá trình khảo sát số lượng nơ-ron phù hợp cho các lớp ẩn được tiến hành nhằm tối ưu hóa mô hình ANN, rút ngắn thời gian tính toán và nâng cao độ chính xác của kết quả dự đoán. Kết quả thể hiện mô hình 1 lớp ẩn với 13 nơ-ron cho kết quả dự đoán hệ số tự hấp thụ có độ sai biệt trung bình 6,9% so với dữ liệu XCOM. Đối với mô hình 2 lớp ẩn, số nơ-ron tối ưu lần lượt là 26 và 2 cho lớp ẩn thứ nhất và lớp ẩn thứ hai, độ sai biệt trung bình đạt được là 4,6% giữa kết quả dự đoán bởi ANN và dữ liệu XCOM. Mô hình ANN cho thấy độ chính xác cao với hệ số tương quan  $R^2$  trung bình 0,88 cho mô hình 1 lớp ẩn và 0,95 cho mô hình 2 lớp ẩn.

Ngoài ra, chúng tôi đánh giá khả năng khái quát hóa của mô hình ANN bằng cách tiến hành dự đoán hệ số tự hấp thụ của các nguyên tố tại 367 điểm dữ liệu bổ sung không bao gồm trong quy trình huấn luyện và đánh giá. Kết quả dự đoán bởi mô hình ANN có sự phù hợp tốt với kết quả tính toán hệ số tự hấp thụ bởi chương trình XCOM với độ sai biệt trung bình lần lượt là 7,6% và 4,9% cho mô hình ANN một lớp ẩn và hai lớp ẩn. Đáng chú ý, kết quả dự đoán của mô hình ANN có độ sai biệt tương đối trung bình 3% cho 42 giá trị hệ số tự hấp thụ so với mô phỏng MCNP6. Điều này chứng minh rằng mô hình ANN có thể dự đoán chính xác và khái quát hóa dữ liệu tốt cho các tính toán hệ số tự hấp thụ. Một trong những ưu điểm nổi trội của mô hình ANN là dữ liệu được xây dựng và giám sát, một yếu tố rất khó thực hiện bằng phương pháp đo thực nghiệm hoặc bằng phương pháp tính toán cổ điển (Barba-Lobo et al., 2021). Tuy nhiên, đối với trường hợp có hệ số tự hấp thụ quá lớn so với 1, hoặc vật liệu có thành phần nguyên tố phức tạp, mô hình ANN cần phải được xây dựng với tập dữ liệu lớn hơn hoặc phải được chuẩn hóa trước khi áp dụng.

- ❖ **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.2023.19.58. Cảm ơn TS Nguyễn Huỳnh Duy Khang đã cố vấn và hỗ trợ giải pháp cho mô hình ANN.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Adem, U., & Tanfer, C. (2014). The Direct- $Z_{\text{eff}}$  software for direct calculation of mass attenuation coefficient, effective atomic number and effective electron number. *Annals of Nuclear Energy*, 65, 158-165. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.anucene.2013.10.041>
- Arun Kumar, S., Shashikumar, S. K., Ambika, M. R., Karthik Kumar, M. B., Nagaiah, N., & Khandaker, M. U. (2023). Photon attenuation computational software tools - A comparative study. *Physics Open*, 17, 100175. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.physo.2023.100175>
- Barba-Lobo, A., Mosqueda, F., & Bolívar, J. P. (2021). A general function for determining mass attenuation coefficients to correct self-absorption effects in samples measured by gamma spectrometry. *Radiation Physics and Chemistry*, 179, Article 109247. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X20313293>
- Benhadjira, A., Sayyed, M. I., Bentouila, O., & Aiadi, K. E. (2024). Artificial neural network approach for calculating mass attenuation coefficient of different glass systems. *Nuclear Engineering and Technology*, 56(1), 100-105. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.net.2023.09.013>
- Bilici, S., Kamislioglu, M., & Altunsoy Guclu, E. E. (2023). A Monte Carlo simulation study on the evaluation of radiation protection properties of spectacle lens materials. *Eur Phys J Plus*, 138(1), Article 80. <https://doi.org/https://link.springer.com/article/10.1140/epjp/s13360-022-03579-6>

- Bilmez, B., Toker, O., Alp, S., Öz, E., & İçelli, O. (2022). A comparative study on applicability and efficiency of machine learning algorithms for modeling gamma-ray shielding behaviors. *Nuclear Engineering and Technology*, 54(1), 310-317. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.net.2021.07.031>
- Debertin, K., & Helmer, R. G. (1988). *Gamma- and X-ray spectrometry with semiconductor detectors*. North-Holland. [http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:20046286](http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:20046286)
- Eisenbud, M., & Gesell, T. (1997). *Environmental radioactivity from natural, industrial, and military sources* (4th ed.). [http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:21013965](http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:21013965)
- El-Khayatt, A. M. (2011). NXcom – A program for calculating attenuation coefficients of fast neutrons and gamma-rays. *Annals of Nuclear Energy*, 38(1), 128-132. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.anucene.2010.08.003>
- Elmahroug, Y., Tellili, B., Souga, C., & Manai, K. (2015). ParShield: A computer program for calculating attenuation parameters of the gamma rays and the fast neutrons. *Annals of Nuclear Energy*, 76, 94-99. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.09.044>
- Eyecioglu, Ö., El-Khayatt, A. M., Karabul, Y., Çağlar, M., Toker, O., & İçelli, O. (2019). BXCCom: a software for computation of radiation sensing. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 174(5-6), 506-518. <https://doi.org/10.1080/10420150.2019.1606811>
- Gerward, L., Guilbert, N., Jensen, K. B., & Leving, H. (2004). WinXCom—a program for calculating X-ray attenuation coefficients. *Radiation Physics and Chemistry*, 71(3), 653-654. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2004.04.040>
- Gilmore, R. G. (2008a). Gamma spectrometry of Naturally Occurring Radioactive Materials (NORM). In *Practical Gamma-Ray Spectrometry* (pp. 315-328). <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/9780470861981.ch16>
- Gilmore, R. G. (2008b). *Practical gamma-ray spectrometry* (2nd ed.). John Wiley & Sons, Ltd.
- Haykin, S. S. (2009). *Neural Networks and Learning Machines*. Pearson. <https://books.google.com.vn/books?id=KCwW0AAACAAJ>
- Hila, F. C., Amorsolo, A. V., Javier-Hila, A. M. V., & Guillermo, N. R. D. (2020). A simple spreadsheet program for calculating mass attenuation coefficients and shielding parameters based on EPICS2017 and EPDL97 photoatomic libraries. *Radiation Physics and Chemistry*, 177, Article 109122. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2020.109122>
- Huy, N. Q., Binh, D. Q., An, V. X., Loan, T. T. H., & Can, N. T. (2013). Self-absorption correction in determining the  $^{238}\text{U}$  activity of soil samples via 63.3 keV gamma ray using MCNP5 code. *Applied Radiation and Isotopes*, 71(1), 11-20. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2012.09.004>
- IAEA. (2003). *Extent of Environmental Contamination by Naturally Occurring Radioactive Material (NORM) and Technological Options for Mitigation*. <https://www.iaea.org/publications/6789/extent-of-environmental-contamination-by-naturally-occurring-radioactive-material-norm-and-technological-options-for-mitigation>
- Iurian, A. R. (2017). Self-attenuation corrections for Pb-210 in gamma-ray spectrometry using well and coaxial HPGe detectors.
- Keras. (2023). *Keras 3*. Retrieved 2020, April 01 from [https://keras.io/getting\\_started/](https://keras.io/getting_started/)
- L'Annunziata, M. F. (2012). *Handbook of Radioactivity Analysis*.

- Loan, T. T. H., Ba, V. N., & Thien, B. N. (2022). Natural radioactivity level in fly ash samples and radiological hazard at the landfill area of the coal-fired power plant complex, Vietnam. *Nuclear Engineering and Technology*, 54(4), 1431-1438. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.net.2021.10.019>
- Modarresi, S. M., & Masoudi, S. F. (2018). On the gamma spectrometry efficiency of reference materials and soil samples. *Journal of Environmental Radioactivity*, 183, 54-58. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2017.12.012>
- Mostajaboddavati, M., Hassanzadeh, S., Faghihian, H., Abdi, M. R., & Kamali, M. (2006). Efficiency calibration and measurement of self-absorption correction for environmental gamma-spectroscopy of soil samples using Marinelli beaker. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 268(3), 539-544. <https://doi.org/https://link.springer.com/article/10.1007/s10967-006-0202-x>
- NIST. *XCOM: Photon cross sections database*. Retrieved 2020, April 01 from <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>
- Pelowitz, P. (2013). *MCNP6<sup>TM</sup> User's manual, Version 1.0*. Los Alamos National Laboratory report LA-CP-13-00634.
- Richland. (2021). Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling. In *Rev2*. WA: Pacific Northwest National Laboratory: Detwiler R.S., R.J. McConn, T.F. Grimes, S.A. Upton, and E.J. Engel.
- Şakar, E., Özpolat, Ö. F., Alm, B., Sayyed, M. I., & Kurudirek, M. (2020). Phy-X / PSD: Development of a user friendly online software for calculation of parameters relevant to radiation shielding and dosimetry. *Radiation Physics and Chemistry*, 166, Article 108496. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.108496>
- Salgado, W. L., Dam, R. S. d. F., Teixeira, T. P., Conti, C. C., & Salgado, C. M. (2020). Application of artificial intelligence in scale thickness prediction on offshore petroleum using a gamma-ray densitometer. *Radiation Physics and Chemistry*, 168, Article 108549. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.108549>
- Sima, O., Ott, A. D. V. O., Dias, M. S., Dryak, P., Ferreux, L., Gurau, D., Hurtado, S., Jodlowski, P., Karfopoulos, K., Koskinas, M. F., Laubenstein, M., Lee, Y. K., Lépy M. C., Luca, A., Menezes, M.O., Moreira, D.S., Nikolič, J., Peyres, V., Saganowski, P., Savva, M. I.,... Yucel, H. (2020). Consistency test of coincidence-summing calculation methods for extended sources. *Applied Radiation and Isotopes*, 155(108921), Article 108921. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.108921>
- Srivastava, N., Hinton, G. E., Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Salakhutdinov, R. J. J. M. L. R. (2014). Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. *15*, 1929-1958.
- Taylor, M. L., Smith, R. L., Dossing, F., & Franich, R. D. (2012). Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Z<sub>eff</sub> software. *Medical Physics*, 39(4), 1769-1778. <https://doi.org/https://doi.org/10.1118/1.3689810>
- Thanh, T. T., Ferreux, L., Lépy, M. C., & Tao, C. V. (2010). Determination activity of radionuclides in marine sediment by gamma spectrometer with anti cosmic shielding. *Journal of Environmental Radioactivity*, 101(9), 780-783. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.05.003>

- Thanh, T. T., Vuong, L. Q., Ho, P. L., Chuong, H. D., Nguyen, V. H., & Tao, C. V. (2018). Validation of an advanced analytical procedure applied to the measurement of environmental radioactivity. *Journal of Environmental Radioactivity*, 184-185, 109-113. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2017.12.020>
- Vargas, M. J., Timón, A. F., Díaz, N. C., & Sánchez, D. P. (2002). Monte Carlo simulation of the self-absorption corrections for natural samples in gamma-ray spectrometry. *Applied Radiation and Isotopes*, 57(6), 893-898. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0969-8043\(02\)00220-8](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0969-8043(02)00220-8)
- Vuong, L. Q., Thanh, T. T., Ho, P. L., Hao, L. C., & Tao, C. V. (2023). Simultaneous correction of the coincidence summing and self-absorption for radioactivity measurement in solid samples by MCNP-CP code. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 332(2), 423-434. <https://doi.org/https://link.springer.com/article/10.1007/s10967-023-08773-z>
- Yücel, H., Zümrüt, S., Narttürk, R. B., & Gedik, G. (2019). Efficiency calibration of a coaxial HPGe detector-Marinelli beaker geometry using an  $^{152}\text{Eu}$  source prepared in epoxy matrix and its validation by efficiency transfer method. *Nuclear Engineering and Technology*, 51(2), 526-532. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.net.2018.09.024>

## CALCULATION OF SELF-ABSORPTION CORRECTION FACTORS USING MONTE CARLO SIMULATION AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

Nguyễn Huỳnh Khánh Duyên<sup>1</sup>, Nguyễn Thanh Huy<sup>1</sup>, Lê Quang Vuong<sup>1,2\*</sup>,  
Hoàng Đức Tâm<sup>1</sup>, Phan Long Hồ<sup>2,3</sup>, Trần Thiên Thanh<sup>2</sup>, Châu Văn Tao<sup>2</sup>

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

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

<sup>3</sup>Institute of Public Health in Ho Chi Minh City, Ho Chi Minh City, Vietnam

\*Corresponding author: Lê Quang Vuong – Email: [vuonglq@hcmue.edu.vn](mailto:vuonglq@hcmue.edu.vn)

Received: May 14, 2024; Revised: July 01, 2024; Accepted: September 04, 2024

### ABSTRACT

This study proposes an artificial neural network (ANN)-based method for determining the self-absorption correction factor in gamma spectrometry environmental samples. The method takes into account characteristics such as atomic number, bulk density, and photon energy. The ANN model was trained and tested on a dataset comprising 2,575 data points, achieving high predictive accuracy, with an average  $R^2$  of 0.88 (ranging from 0.54 to 0.97), an average RMSE of 0.13 (ranging from 0.07 to 0.27), and an average MAE of 0.10 (ranging from 0.05 to 0.21). Moreover, the relative deviation was less than 12%, which indicates that the ANN-predicted results for 42 self-absorption correction factor values at energies of 40, 50, and 60 keV were in agreement with the calculations by MCNP6 simulation. This method offers an efficient and cost-effective approach to reducing computational time in environmental sample measurements.

**Keywords:** ANN; gamma spectrometry; MCNP; self-absorption correction; XCOM