

Bài báo nghiên cứu

XÂY DỰNG MÔ HÌNH MẠNG NƠ-RON NHÂN TẠO ĐỂ XÁC ĐỊNH NHANH NỒNG ĐỘ DUNG DỊCH NaOH DỰA TRÊN PHỔ TRUYỀN QUA CỦA CHÙM TIA GAMMA NĂNG LƯỢNG THẤP 59,54 keV*Nguyễn Thành Đạt^{1,2*}, Trần Vũ Thiên Ân¹, Võ Diệp Trung Tín²,**Trần Trung Nguyên¹, Huỳnh Đình Chương², Hoàng Thị Kiều Trang², Hoàng Đức Tâm¹**¹Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam**²Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam***Tác giả liên hệ: Nguyễn Thành Đạt – Email: datnth@hcmue.edu.vn**Ngày nhận bài: 02-7-2025; Ngày nhận bài sửa: 25-8-2025; Ngày duyệt đăng: 08-8-2025***TÓM TẮT**

Nghiên cứu này trình bày một cách tiếp cận mới để xác định nhanh nồng độ của dung dịch NaOH dựa trên phép đo sự suy giảm của chùm tia gamma năng lượng thấp 59,54 keV phát ra từ nguồn ²⁴¹Am và mạng nơ-ron nhân tạo (ANN) được huấn luyện trực tiếp từ phổ đo. Đầu tiên, mô phỏng Monte Carlo được sử dụng để tạo dữ liệu phổ. Sau đó, dữ liệu phổ này được trích xuất trực tiếp để huấn luyện và tối ưu mô hình ANN. Hiệu suất dự đoán của mô hình tối ưu được so sánh với phương pháp đường chuẩn được xây dựng từ mối liên hệ giữa tỉ số lnR giữa diện tích đỉnh truyền qua giữa nước và dung dịch NaOH với nồng độ tương ứng. Kết quả thu được cho thấy mô hình ANN đạt độ lệch trung bình dưới 2,8 % so với các nồng độ tham chiếu, trong khi đường chuẩn cho độ lệch trung bình trên 6,0 %. Ở vùng nồng độ thấp (C = 5,0%), mô hình ANN cho độ lệch chỉ 2,5%, tốt hơn nhiều so với độ lệch khoảng 12,6% từ đường chuẩn. Điều này cho thấy sự kết hợp phép đo truyền qua với tia gamma năng lượng thấp và mô hình ANN là cách tiếp cận đầy hứa hẹn để xác định nhanh nồng độ với độ chính xác cao cho các dung dịch kiềm.

Từ khóa: gamma truyền qua; mô phỏng Monte Carlo; MLP-ANN; NaOH; nồng độ

1. Giới thiệu

Natri hidroxit (NaOH) là một loại bazơ mạnh, tồn tại phổ biến dưới dạng tinh thể trắng hoặc dung dịch trong nước. Nhờ khả năng phân li hoàn toàn trong nước, NaOH tạo ra môi trường kiềm có tính ăn mòn cao, được ứng dụng rộng rãi trong công nghiệp hóa chất, sản xuất giấy, xà phòng và trong các phòng thí nghiệm. Tuy nhiên, do đặc tính hút ẩm mạnh và dễ hấp thụ khí CO₂ từ không khí, dung dịch NaOH dễ thay đổi nồng độ theo thời gian. Việc

Cite this article as: Nguyen, T. D., Tran, V. T. A., Vo, D. T. T., Tran, T. N., Huynh, D. C., Hoang, T. K. T., & Hoang, D. T. (2026). Development of an artificial neural network model for rapid determination of NaOH solution concentration using the transmission spectrum of low-energy gamma rays at 59.54 keV. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 23(1), 150-162. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.1.5093\(2026\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.1.5093(2026))

xác định chính xác nồng độ NaOH là rất quan trọng nhằm đảm bảo độ chính xác trong các phản ứng hóa học, quy trình sản xuất và các phép phân tích định lượng. Sai số về nồng độ NaOH có thể dẫn đến sai lệch kết quả thí nghiệm, ảnh hưởng đến chất lượng sản phẩm, hoặc gây nguy hiểm trong các yêu cầu kiểm soát độ pH cẩn thận.

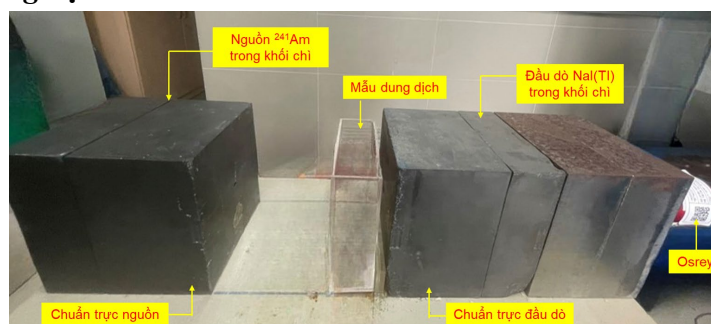
Hiện nay, nhiều phương pháp dùng để đo nồng độ NaOH trong dung dịch đã được phát triển. Một trong các phương pháp được sử dụng phổ biến trong hóa học là chuẩn độ axit – bazơ dựa trên phản ứng trung hòa giữa axit và bazơ (Sue & Arai, 2004), trong đó một dung dịch axit chuẩn có nồng độ biết trước (thường dùng HCl) được thêm từ từ vào dung dịch NaOH cho đến khi số mol axit bằng số mol bazơ (điểm tương đương). Điểm này được xác định bằng sự thay đổi màu sắc của các chất chỉ thị màu như phenolphthalein hoặc máy đo pH. Kỹ thuật này đơn giản, chi phí thấp và dễ thực hiện, nhưng đòi hỏi xử lý mẫu cẩn thận và mất thời gian, không phù hợp với các ứng dụng yêu cầu đo nhanh hay trên quy mô lớn. Một phương pháp khác cũng thường dùng để xác định nồng độ dung dịch là đo độ dẫn điện dựa trên sự thay đổi của các ion trong dung dịch (Dorn et al., 2024). Ưu điểm của phương pháp này là nhanh, không yêu cầu xử lý mẫu, nhưng độ nhạy của phép đo dễ bị ảnh hưởng bởi nhiệt độ, giảm độ chính xác khi nồng độ cao (Rhoades, 1993). Bên cạnh đó, các kỹ thuật đo quang phổ cũng được áp dụng để xác định nồng độ NaOH, cụ thể như kỹ thuật UV-Vis đo nồng độ NaOH qua cường độ phổ hấp thụ ở vùng tử ngoại với bước sóng 200-220 nm (Tong et al., 2023), hay kỹ thuật FTIR-ATR đo nồng độ NaOH mối liên hệ tuyến tính giữa phổ hấp thụ hồng ngoại có cường độ đỉnh tại số sóng 3640 cm^{-1} với nồng độ OH^- trong dung dịch (Dai et al., 2023). Hai kỹ thuật trên có thời gian đo nhanh nhưng còn một số hạn chế như phải dùng thêm chất chỉ thị màu (UV-Vis) hay phải chuẩn mẫu (FTIR-ATR). Các phân tích trên cho thấy mỗi phương pháp đo nồng độ NaOH đều có những ưu điểm và hạn chế riêng về độ chính xác, tốc độ đo và yêu cầu kỹ thuật. Do đó, yêu cầu về một kỹ thuật kiểm tra không hủy mẫu có thể giám sát nồng độ NaOH trong các dây chuyền công nghiệp liên tục, đồng thời ít bị ảnh hưởng bởi dung môi trong dung dịch là rất cần thiết. Để đạt được các yêu cầu trên, nghiên cứu của chúng tôi đề xuất sử dụng kỹ thuật đo bức xạ gamma truyền qua để xác định nồng độ dung dịch NaOH, kỹ thuật này dựa trên sự suy giảm của cường độ tia gamma khi truyền dung dịch theo nguyên lý Beer-Lambert.

Một số nghiên cứu gần đây đã áp dụng phương pháp đo gamma truyền qua để xác định nồng độ của các dung dịch axit (Nguyen et al., 2024; Truong et al., 2021). Kết quả ban đầu trong các nghiên cứu này cho thấy phương pháp có độ chính xác khá cao với độ lệch giữa nồng độ đo được và giá trị tham chiếu nhỏ hơn 5,0%. Tuy nhiên, điểm đáng chú ý là các nghiên cứu này đều sử dụng nguồn phóng xạ ^{137}Cs phát ra chùm tia gamma có năng lượng 661,7 keV. Nếu sử dụng mức năng lượng 661,7 keV để đo nồng độ NaOH trong dung dịch sẽ có một số hạn chế như hệ số suy giảm tuyến tính μ ở năng lượng này rất nhỏ, thay đổi không đáng kể giữa các nồng độ khác nhau (Nguyen et al., 2024). Điều này là làm giảm độ nhạy của phương pháp. Để khắc phục hạn chế này, nghiên cứu này sử dụng chùm tia gamma

có năng lượng thấp hơn, cụ thể là chùm tia 59,54 keV từ nguồn ^{241}Am , điều này giúp nâng cao độ nhạy của phép đo và phù hợp với bề dày mẫu đo trong thực tế. Mặt khác, chúng tôi cũng ứng dụng mô hình mạng nơ-ron nhân tạo (ANN) kết hợp mô phỏng Monte Carlo vào phép đo nhằm phát triển một cách tiếp cận mới để xác định nồng độ dung dịch NaOH. Mô hình ANN đã được áp dụng rộng rãi trong kỹ thuật phân tích bằng tia gamma, chẳng hạn nghiên cứu của Truong et al. (2021) đã bước đầu sử dụng mô hình ANN để dự đoán nồng độ của các mẫu axit, với độ sai lệch < 3,5% so với giá trị tham chiếu. Thay vì sử dụng tỉ số $\ln R$ (với R là tỉ số diện tích đỉnh truyền qua giữa dung dịch và nước cất) làm đầu vào cho mô hình ANN như các nghiên cứu trước đây, chúng tôi trực tiếp sử dụng dữ liệu vùng phổ xung quanh đỉnh gamma đặc trưng, qua đó giữ lại thông tin nền Compton hoặc các đỉnh phụ quan trọng cho việc phân tích. Điều này không chỉ khắc phục hạn chế của giả định suy giảm cường độ chùm tia theo định luật Beer-Lambert, trong khi thực tế còn có thành phần tán xạ thứ cấp, mà còn giúp ANN tự động trích xuất các đặc trưng phi tuyến, nâng cao độ chính xác và tính khái quát của mô hình. Độ chính xác của giá trị nồng độ NaOH được ước tính bởi mô hình ANN được so sánh với kết quả thu được từ phương pháp đường chuẩn, dựa trên các phép đo thực nghiệm, nhằm đánh giá mức độ hiệu quả và tính khả thi của phương pháp.

2. Mẫu đo và phương pháp

2.1. Bố trí thực nghiệm



Hình 1. Sơ đồ thí nghiệm đo nồng độ dung dịch NaOH bằng kỹ thuật gamma truyền qua

Trong nghiên cứu này, hệ phổ kế gamma sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) với kích thước tinh thể 51 mm × 51 mm (sản xuất bởi Mirion Technologies, Inc., Hoa Kỳ), kết nối với thiết bị phân tích phổ kỹ thuật số đa kênh Osprey, tích hợp nguồn điện cao áp, bộ tiền khuếch đại và bộ xử lý tín hiệu số với 2048 kênh. Nguồn phóng xạ được sử dụng là nguồn điểm ^{241}Am có hoạt độ khoảng 15,8 mCi, phát ra bức xạ gamma với năng lượng 59,54 keV (cung cấp bởi Eckert & Ziegler). Để giảm thiểu ảnh hưởng của bức xạ gamma tán xạ thứ cấp, đầu dò được đặt bên trong một ống chuẩn trực bằng chì với đường kính lỗ 7,7 mm và chiều dài 90 mm. Nguồn phóng xạ cũng được đặt trong một ống chuẩn trực bằng chì có đường kính lỗ 5 mm và chiều dài 90 mm. Khoảng cách giữa nguồn và bề mặt đầu dò được thiết lập cố định ở mức 350 mm. Bố trí thí nghiệm gồm khối nguồn, đầu dò và mẫu đo được bố trí như trên Hình 1.

Các mẫu dung dịch NaOH được pha với nồng độ khác nhau và đựng trong hộp đo chữ

nhật có kích thước 13 cm × 13 cm × 5 cm đặt cách bề mặt đầu dò 10 cm. Quy trình pha các mẫu dung dịch được thực hiện cẩn thận theo các bước sau: đầu tiên, một lượng NaOH dạng khan (Fisher (Hoa Kỳ) sản xuất) và nước cất 2 lần được cân chính xác để pha chế nồng độ yêu cầu. Tuy nhiên, cần lưu ý rằng độ chính xác của nồng độ dung dịch trong thực tế bị ảnh hưởng bởi nhiệt độ dung dịch sau pha chế và nồng độ bão hòa của chất tan. Trong trường hợp của NaOH, một hợp chất tỏa nhiệt mạnh khi tiếp xúc nước, nghiên cứu giới hạn nồng độ NaOH trong dung dịch dưới 20 % để đảm bảo độ chính xác của các mẫu dung dịch. Sau đó, hỗn hợp NaOH và nước cất được khuấy đều bằng một máy khuấy từ với tốc độ trung bình 500 vòng/phút để tạo dung dịch yêu cầu. Mỗi phép đo được thực hiện trong thời gian ngắn là 300 giây (khoảng 5 phút) dưới điều kiện nhiệt độ phòng được giữ ổn định trong khoảng 25-27°C.

2.2. *Mô phỏng Monte Carlo*

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng chương trình MCNP phiên bản 6.1 (MCNP6) để tạo ra phổ mô phỏng Monte Carlo cho các phép đo nồng độ NaOH khác nhau (Goorley et al., 2012). Chương trình này giúp mô tả lại chính xác bố trí hệ đo thực nghiệm khi cung cấp đầy đủ thông tin về cấu hình nguồn, hệ đo, thành phần hóa học và mật độ của mẫu. Các thông số của đầu dò NaI(Tl) đã được tối ưu trong nghiên cứu trước đây của chúng tôi (Huynh et al., 2019). Nồng độ dung dịch NaOH trong mô phỏng thay đổi từ 0% đến 50% với bước nhảy là 0,5%, thông tin tỉ lệ các nguyên tố trong dung dịch được tính toán từ dữ liệu của NIST và mật độ khối tương ứng được tính toán tại nhiệt độ 25°C (Perry et al., 1997).

Để thu được phổ xác suất phân bố theo độ cao xung trong mô phỏng có dạng phổ phù hợp với phổ thực nghiệm thu được từ đầu dò, thẻ “FT8 GEB a b c” trong tally F8 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 và c được xác định thông qua việc làm khớp độ rộng nửa đỉnh (FWHM) của các đỉnh năng lượng trong phổ thực nghiệm, có giá trị trong nghiên cứu này lần lượt là -0,008124; 0,070417 và -0,190044. Số photon phát ra từ nguồn được khai báo trong mỗi mô phỏng là $3,0 \cdot 10^{10}$ nhằm đảm bảo độ chính xác về mặt thống kê.

2.3. *Phương pháp xác định nồng độ dung dịch NaOH dựa trên đường chuẩn*

Quy trình xác định nồng độ của dung dịch NaOH bằng kỹ thuật gamma truyền qua dựa trên việc xây dựng đường chuẩn phù hợp giữa tỉ số $\ln R$ và nồng độ dung dịch được thực hiện theo các bước sau đây:

Bước 1. Tạo dữ liệu mô phỏng Monte Carlo với nồng độ khác nhau và sau đó xác định tỉ số $\ln R^{Sim}$ theo công thức:

$$\ln R = \ln \left(\frac{N_s}{N_w} \right) = -(\mu_s^p \rho_s - \mu_w^p \rho_w) d \quad (1)$$

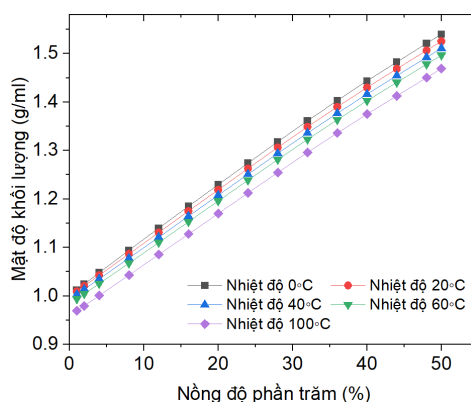
trong đó $N_s = N_0 \exp(-\mu_s^p \rho_s d)$, $N_w = N_0 \exp(-\mu_w^p \rho_w d)$ lần lượt là diện tích dưới đỉnh chùm tia gamma truyền qua với dung dịch NaOH và nước cất. Các giá trị μ_s^p và μ_w^p lần lượt là hệ

số suy giảm khối (MAC) đối với dung dịch NaOH và nước cất; ρ_s và ρ_w lần lượt là mật độ khối lượng của dung dịch NaOH và nước cất; d là bề rộng hộp đựng dung dịch.

Bên cạnh đó, mật độ khối lượng của dung dịch NaOH cũng cho thấy sự thay đổi tuyến tính theo nồng độ dung dịch ở các nhiệt độ khác nhau như trên Hình 2. Sự phụ thuộc này được biểu diễn theo công thức sau:

$$\rho_s = a_1 C + a_0 \tag{2}$$

Điểm cần chú ý là $\rho_w = a_0$ trong trường hợp của nước cất, khi đó nồng độ NaOH bằng không.



Hình 2. Mật độ khối lượng của dung dịch NaOH theo nồng độ tại các nhiệt độ khác nhau (Perry et al., 1997)

Mặt khác, giá trị μ_s^p đã được chứng minh là một hàm tuyến tính theo nồng độ C như công thức (3) trong một số nghiên cứu trước đây (Huynh et al., 2021).

$$\mu_s^p = (\mu_{NaOH}^p - \mu_w^p) C + \mu_w^p = b_1 C + b_0 \tag{3}$$

trong đó $b_1 = \mu_{NaOH}^p - \mu_w^p$ và $b_0 = \mu_w^p$, μ_{NaOH}^p là hệ số suy giảm tuyến tính của NaOH.

Thay công thức (2), (3) vào công thức (1), ta có:

$$\ln R = [(b_1 C + b_0)(a_1 C + a_0) - a_0 b_0] d \tag{4}$$

Phương trình (4) cho thấy $\ln R$ là một hàm đa thức bậc 2 theo nồng độ NaOH trong dung dịch, và có thể viết gọn lại như sau:

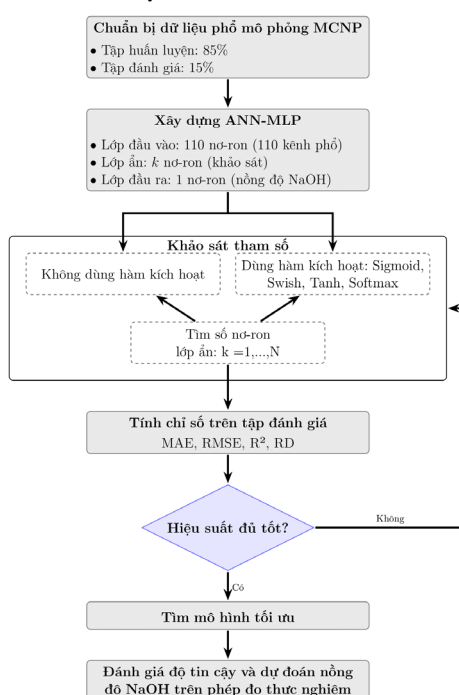
$$\ln R = \alpha_2 C^2 + \alpha_1 C + \alpha_0 \tag{5}$$

Bước 2. Xây dựng đường chuẩn từ các giá trị $\ln(R^{Sim.})$ với nồng độ C của dung dịch bằng phương pháp làm khớp bình phương tối thiểu theo phương trình (5). Các tham số α_2 , α_1 , α_0 và các sai số của chúng được xác định từ đường chuẩn.

Bước 3. Thực hiện các phép đo thực nghiệm với các mẫu dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau và nước cất. Tính tỉ số $\ln(R^{Exp.})$ từ phổ thực nghiệm bằng công thức (1), sau đó xác định nồng độ NaOH và sai số của phép đo theo đường chuẩn đã xây dựng ở bước 2.

2.4. Xác định nồng độ dung dịch sử dụng mô hình mạng nơ-ron nhân tạo

Nghiên cứu sử dụng mô hình mạng nơ-ron nhân tạo với kiến trúc đa lớp truyền thẳng MLP (Multi-Layer Perceptron) và thuật toán truyền ngược (Schmidhuber, 2015) nhằm dự đoán nồng độ dung dịch NaOH trực tiếp từ dữ liệu phổ gamma ghi nhận bởi đầu dò NaI(Tl). Khác với phương pháp đường chuẩn yêu cầu bước xử lý trung gian như tính toán tỉ số $\ln R$, mô hình ANN khai thác phổ đo làm dữ liệu đầu vào mà không cần bước trích xuất đặc trưng. Cách tiếp cận này nhằm đơn giản hóa quy trình xử lý dữ liệu, tăng cường khả năng tự động hóa và tăng tính khả thi khi dùng để đo nồng độ NaOH trong công nghiệp. Quá trình huấn luyện và tối ưu mô hình ANN gồm lớp đầu vào, một lớp ẩn duy nhất, và một lớp đầu ra để xác định nồng độ dung dịch NaOH được mô tả chi tiết trên sơ đồ Hình 3.



Hình 3. Sơ đồ xây dựng mô hình ANN-MLP để xác định nồng độ NaOH trong dung dịch

Đầu tiên, 100 phổ mô phỏng từ chương trình MCNP6 tương ứng với các mẫu dung dịch NaOH có nồng độ từ 0 % - 50 % đã được tạo ra cho việc huấn luyện mô hình. Từ mỗi phổ, chỉ vùng dữ liệu phổ giữa kênh số 118 và 277 (vùng quanh đỉnh tia gamma ở năng lượng 59,54 keV) được trích xuất làm đầu vào cho mô hình ANN, do đây là vùng mà số đếm giảm rõ rệt theo sự suy giảm của nồng độ NaOH. Dữ liệu sau đó được phân chia ngẫu nhiên: 85% làm tập huấn luyện để tối ưu hóa trọng số (weight) và hệ số bias của mạng ANN bằng cách làm giảm hàm mất mát sai số toàn phương trung bình (MSE) theo công thức (6) đến khi hội tụ, 15% còn lại để đánh giá hiệu suất dự đoán và ngăn chặn sự quá khớp (overfitting) của mô hình. Quá trình huấn luyện trên máy tính với CPU Intel Xeon W-2135 và GPU NVIDIA GeForce RTX 3060 Ti, trung bình thời gian huấn luyện mô hình khoảng 16,3 giây.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_i^n (C_i^{ref} - C_i^{pred})^2 \quad (6)$$

trong đó C_i^{ref} , C_i^{pred} lần lượt là nồng độ tham chiếu và dự đoán thứ i của dung dịch NaOH.

Tiếp theo là bước khảo sát các tham số của lớp ẩn như hàm kích hoạt, số nơ-ron để tìm cấu trúc mô hình ANN tối ưu có hiệu suất tốt nhất. Năm cấu hình hàm kích hoạt cho lớp ẩn gồm: không dùng hàm kích hoạt, Sigmoid, Tanh, Softmax và Swish với số nơ-ron thay đổi từ 1 đến 100 được chạy khảo sát. Mỗi mô hình đều được chạy với tốc độ học cố định ở 0,01 và trong 100 vòng lặp. Hiệu suất dự đoán của mỗi mô hình được đánh giá sau dựa trên các chỉ số thống kê gồm RMSE, MAE, RD, R^2 được trình bày trong các phương trình (7-10), trong đó chỉ số RD là quan trọng nhất do phản ánh sự chính xác giữa kết quả dự đoán và giá trị thực.

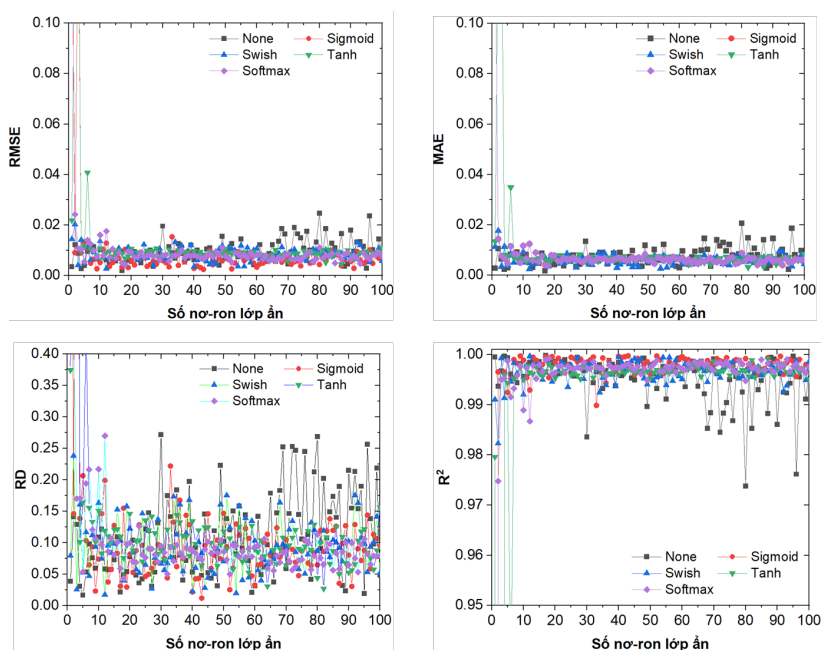
$$RMSE = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i^{ref} - C_i^{pred})^2 \right]^{1/2} \quad (7)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |(C_i^{ref} - C_i^{pred})| \quad (8)$$

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

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_i^{pred} - C_i^{ref})^2}{\sum_{i=1}^N (\overline{C^{pred}} - C_i^{ref})^2} \quad (10)$$

Kết quả ở Hình 4 cho thấy khi sử dụng hàm kích hoạt Sigmoid, các giá trị RMSE, MAE, RD và R^2 duy trì sự ổn định và có giá trị thấp hơn so với các hàm còn lại và trường hợp không sử dụng hàm kích hoạt. Chỉ số RD tại hàm này giảm nhanh khi số nơ-ron lớp ẩn vượt 10, trung bình dưới 5,0 % và đạt giá chỉ nhỏ nhất dưới 1,2 % tại 43 nơ-ron, sau đó có xu hướng tăng nhẹ. Dựa trên kết quả phân tích trên và tốc độ hội tụ của hàm mất mát, cấu hình ANN tối ưu sử dụng hàm kích hoạt Sigmoid với 43 nơ-ron ở lớp ẩn.



Hình 4. Sự thay đổi của các tham số thống kê RMSE, MAE, RD, R^2 theo số nơ-ron của lớp ẩn và các hàm kích hoạt ở tập đánh giá sau 100 lần chạy huấn luyện

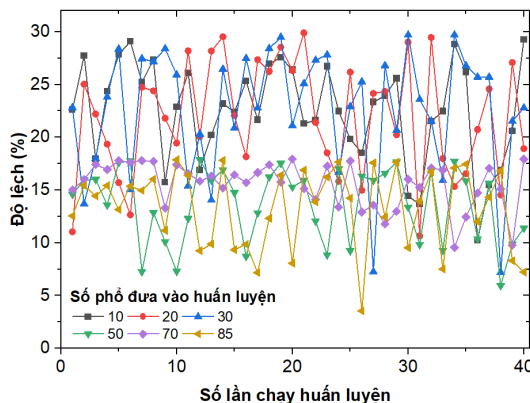
Thuật toán Adam được áp dụng khi huấn luyện mô hình ANN đã xác định ở trên để tối ưu hóa trọng số, tận dụng khả năng tự động điều chỉnh hệ số học dựa trên momen bậc nhất và bậc hai của gradient. Để hàm mất mát MSE hội tụ về 10^{-5} trong thời gian ngắn nhất, số vòng huấn luyện được tăng lên 500. Đồng thời, nhằm tránh hiện tượng quá khớp do trọng số quá lớn hoặc nơ-ron phụ thuộc lẫn nhau, một chương trình tự động điều chỉnh hệ số học trong khoảng 0,1 – 0,0001 theo hàm mất mát của tập đánh giá cũng được chúng tôi tích hợp vào bên cạnh thuật toán Adam. Các thông số khảo sát và tối ưu của mô hình ANN được dùng để dự đoán nồng độ NaOH được trình bày trong Bảng 1.

Bảng 1. Thông số của mô hình học máy được tối ưu để dự đoán bề dày vật liệu

Các thông số mô hình	Giá trị khảo sát	Giá trị tối ưu
Số nơron trong lớp đầu vào	110	110
Số nơron trong lớp ẩn	1 - 100	43
Số nơron trong lớp đầu ra	1	
Hàm kích hoạt	Không hàm kích hoạt Sigmoid – Tanh – Swish - Softmax	Sigmoid
Tốc độ học	0,01	0,1 – 0,0001
Số vòng huấn luyện	100	500

Mặt khác, ảnh hưởng của kích thước tập huấn luyện lên độ chính xác của mô hình với tập kiểm tra thu từ các phép đo thực nghiệm cũng được khảo sát bằng cách thay đổi số lượng phổ mô phỏng đầu vào từ 10 đến 85 với cùng cấu hình ANN đã tối ưu. Mỗi mô hình được chạy lặp lại 40 lần huấn luyện nhằm khử nhiễu do sự khởi tạo trọng số ngẫu nhiên, đảm bảo tính nhất quán của kết quả. Kết quả trên Hình 5 thể hiện độ lệch tương đối (RD) giữa nồng

độ dự đoán và thực tế theo số lượng phổ huấn luyện. Khi số mẫu huấn luyện trên 50 phổ, độ lệch duy trì sự ổn định dưới 18 %, trong khi độ lệch tăng trên 20% khi số phổ nhỏ hơn 30. Điều này cho thấy việc sử dụng 85 phổ mô phỏng là đủ để huấn luyện mô hình ANN, đồng thời đảm bảo sự sai biệt của kết quả dự đoán với dữ liệu thực nghiệm trong ngưỡng chấp nhận được.

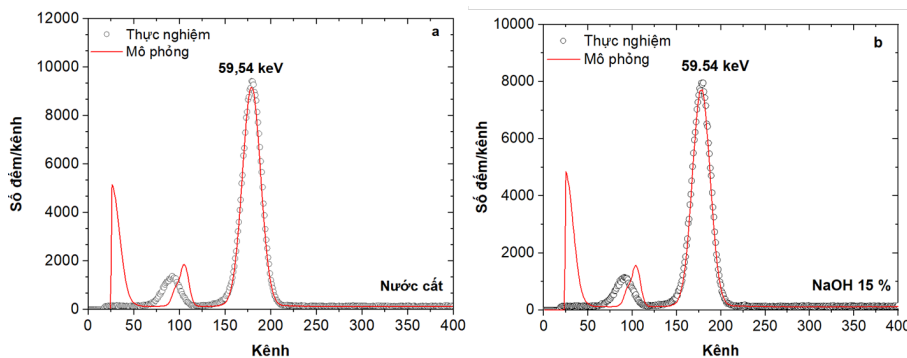


Hình 5. Sự biến thiên độ lệch giữa nồng độ dự đoán và tham chiếu với tập dữ liệu thực nghiệm của mô hình ANN tối ưu theo số lượng phổ mô phỏng dùng làm dữ liệu đầu vào

Sau khi đã xây dựng mô hình ANN tối ưu, các phép đo thực nghiệm được tiến hành để tạo tập dữ liệu kiểm tra độ tin cậy của mô hình. Tập dữ liệu gồm 5 phổ đặc trưng được trích xuất từ phép đo cho 5 mẫu dung dịch NaOH với các nồng độ 5,0%; 7,5%; 10,0%; 15,0% và 20,0%.

3. Kết quả và thảo luận

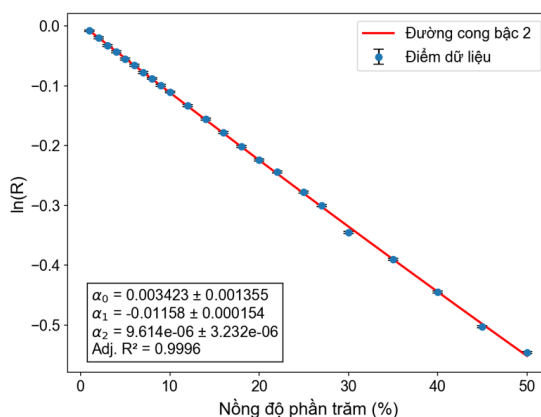
3.1. Kết quả dự đoán nồng độ dung dịch NaOH bằng phương pháp đường chuẩn (CF)



Hình 6. So sánh sự đáp ứng phổ giữa thực nghiệm và mô phỏng

Hình 6 trình bày so sánh dạng phổ truyền qua giữa dữ liệu thực nghiệm và mô phỏng Monte Carlo sau khi chuẩn hóa về cùng một thang đo. Kết quả cho thấy sự tương đồng về vị trí đỉnh, độ rộng đỉnh và nền tán xạ Compton xung quanh đỉnh phổ gamma 59,54 keV. Tuy nhiên, độ cao và vị trí đỉnh phổ giữa mô phỏng và thực nghiệm vẫn có sự khác biệt nhỏ trên hình, nguyên nhân chính là do mô phỏng Monte Carlo không thể mô tả hết tất cả các quá trình tương tác giữa bức xạ với vật chất trong thực tế. Điều này cho thấy việc sử dụng tỉ số $\ln R$ từ dữ liệu mô phỏng có thể thay thế dữ liệu thực nghiệm trong việc xây dựng đường chuẩn. Các giá trị mô

phông $\ln(R^{Sim.})$ cùng sai số tương ứng của các mẫu dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau đã được xác định theo quy trình trình bày ở phần 2.3. Các giá trị này dùng để xây dựng đường chuẩn dạng đa thức bậc 2 theo công thức (5) giữa tỉ số $\ln R$ và nồng độ NaOH như mô tả trên Hình 7. Hệ số xác định R^2 gần bằng 1,0 cho thấy đường chuẩn có độ chính xác cao và phù hợp để xác định nồng độ dung dịch NaOH. Các hệ số $\alpha_2, \alpha_1, \alpha_0$ cùng sai số thu được từ đường chuẩn được trình bày trong Hình 7.



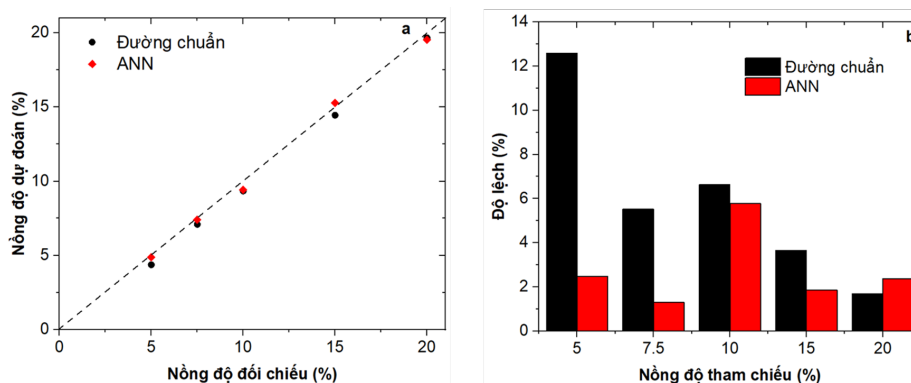
Hình 7. Đường chuẩn đa thức bậc 2 của giá trị $\ln(R^{Sim.})$ với nồng độ dung dịch NaOH

Đường chuẩn đã xây dựng ở trên được sử dụng để xác định nồng độ của các mẫu dung dịch NaOH trong các phép đo thực nghiệm. Kết quả ước tính nồng độ NaOH, độ lệch và sai số của phép đo được trình bày chi tiết ở Bảng 2 cho thấy phần lớn các mẫu thực nghiệm có độ lệch giữa giá trị dự đoán từ đường chuẩn và nồng độ tham chiếu nhỏ hơn 6,7%, ngoại trừ mẫu có nồng độ thấp ($C = 5,0\%$) thì có độ lệch lên đến 12,6%. Nguyên nhân dẫn đến độ lệch lớn ở mẫu này được dự đoán là do sự tỏa nhiệt mạnh của NaOH khi hòa tan với nước, dẫn tới sự bốc hơi của nước gây ảnh hưởng đến nồng độ dung dịch được pha chế.

Bảng 2. Nồng độ dự đoán các dung dịch NaOH sử dụng phương pháp đường chuẩn (CF) và mô hình ANN tối ưu trong phép đo gamma truyền qua ở năng lượng 59,54 keV

Nồng độ tham chiếu (%)	Nồng độ dự đoán từ đường chuẩn (%)	Độ lệch (%)	Sai số (%)	Sai số tương đối (%)	Nồng độ dự đoán từ mô hình ANN (%)	Độ lệch (%)
5,0	4,37	12,59	0,28	6,41	4,88	2,48
7,5	7,09	5,52	0,29	4,10	7,40	1,30
10,0	9,34	6,63	0,31	3,29	9,42	5,78
15,0	14,45	3,66	0,35	2,42	15,28	1,86
20,0	19,66	1,69	0,41	2,09	19,53	2,37

3.2. So sánh kết quả dự đoán nồng độ dung dịch NaOH từ mô hình ANN tối ưu với phương pháp đường chuẩn



Hình 8. (a) Nồng độ dung dịch NaOH ước tính từ đường chuẩn (CF) và mô hình ANN
 (b) Độ lệch giữa nồng độ dự đoán và tham chiếu cho 5 mẫu dung dịch NaOH khi sử dụng đường chuẩn (CF) và mô hình ANN

Phổ thực nghiệm của năm mẫu dung dịch NaOH có nồng độ khác nhau được dùng làm tập kiểm tra để đánh giá hiệu suất dự đoán của mô hình ANN tối ưu. Kết quả dự đoán nồng độ NaOH từ mô hình và độ lệch so với giá trị tham chiếu được trình bày trong Bảng 2. Đồng thời, các giá trị này được so sánh với kết quả từ phương pháp đường chuẩn, như minh họa trong Hình 8 (a) và 8 (b). Theo đó, các phân tích cho thấy nồng độ dự đoán từ mô hình ANN có độ chính xác cao với độ lệch trung bình dưới 2,8% so với phương pháp đường chuẩn trên 6,0% cho tất cả mẫu đo. Điểm đặc biệt là ở vùng nồng độ dung dịch thấp (<10%), mô hình ANN cho kết quả dự đoán rất tốt với độ lệch chỉ khoảng 2,5% và 1,30% tương ứng với các nồng độ 5,0% và 7,5%, trong khi đó kết quả tính toán từ đường chuẩn có độ lệch lên đến gần 12,6% ở nồng độ 5,0% và 5,52% ở nồng độ 7,5%. Tại nồng độ 10%, sai số dự đoán của ANN là 5,78%, cao hơn các nồng độ khác, nguyên nhân chủ yếu do mô hình chỉ huấn luyện trên phổ mô phỏng, trong khi phổ thực nghiệm ở các nồng độ vẫn có sự khác biệt nhỏ so với phổ mô phỏng. Tóm lại, so với phương pháp đường chuẩn, mô hình ANN sử dụng phổ làm đầu vào có khả năng khai thác dải toàn phổ giúp giảm giới hạn phát hiện và nâng cao độ nhạy, đặc biệt là ở vùng nồng độ thấp. Bên cạnh đó, phương pháp này không phụ thuộc vào các quy trình xử lý dữ liệu nên cho dự đoán theo thời gian thực với tốc độ cao, dễ dàng tích hợp vào quy trình đo đạc hoặc giám sát tự động. Những ưu điểm đó cho thấy mô hình ANN hay rộng hơn nữa là học máy dựa trên phổ làm đầu vào có tiềm năng ứng dụng rất lớn ở các quy trình phân tích, giám sát đòi hỏi tính tự động hóa cao trong các lĩnh vực công nghiệp.

4. Kết luận

Nghiên cứu của chúng tôi đã trình bày cách tiếp cận mới kết hợp phép đo gamma truyền qua ở năng lượng thấp 59,54 keV với mô hình ANN dùng trực tiếp phổ làm đầu vào để xác định nồng độ dung dịch NaOH. Dữ liệu huấn luyện được tạo ra thông qua mô phỏng Monte Carlo cho phép giảm sự phụ thuộc vào số lượng mẫu chuẩn phải đo nhưng vẫn đảm bảo độ chính xác của dữ liệu. Mô hình ANN tối ưu cho nồng độ dự đoán có độ lệch trung bình so với nồng độ tham chiếu dưới 2,8% trên tập dữ liệu thực nghiệm, vượt trội so với phương pháp đường chuẩn với độ lệch trung bình trên 6,0%. Ở nồng độ thấp ($C = 5,0\%$),

mô hình ANN chỉ có độ lệch 2,5% trong khi phương pháp đường chuẩn lên tới gần 12,6 %, thể hiện khả năng nhạy và ổn định cao hơn ở ngưỡng phát hiện của phương pháp. Cách tiếp cận này cho phép phân tích trực tiếp trên dải phổ mà không cần qua bước xử lý trung gian, mang lại quy trình phân tích nhanh và chính xác, phù hợp với yêu cầu giám sát tự động theo thời gian thực trong công nghiệp.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Dai, F., Zhuang, Q., Huang, G., Deng, H., & Zhang, X. (2023). Infrared spectrum characteristics and quantification of OH groups in coal. *ACS omega*, 8(19), 17064-17076. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c01336>
- Dorn, M., Kareth, S., Weidner, E., & Petermann, M. (2024). Electrical conductivity of lithium, sodium, potassium, and quaternary ammonium salts in water, acetonitrile, methanol, and ethanol over a wide concentration range. *J. Chem. Eng. Data.*, 69(4), 1493-1502. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.3c00691>
- 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., ... Werbein, S. (2012). Initial MCNP6 release overview. *Nuclear Technology*, 180(3), 298–315. <https://doi.org/10.13182/NT11-135>
- Huynh, D. C., Nguyen, Q. H., Nguyen, T. M. L., Vo, H. N., & Tran, T. T. (2019). Validation of gamma scanning method for optimizing NaI(Tl) detector model in Monte Carlo simulation. *Applied Radiation and Isotopes*, 149, 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.04.009>
- Huynh, C. D., Truong, S. T., Le, T. N. T., Nguyen, L. T. T., & Hoang, T. D. (2021). 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 ke. *STDJ-NS*, 5(2), 1179-1188. <https://doi.org/10.32508/stdjns.v5i2.1010>
- Nguyen, T. D., Hoang, T. K. T., & Hoang, D. T. (2024). Determining the concentration of base solution based on gamma transition technique combined with Monte Carlo simulation and artificial neural network: preliminary results. *HCMUE Journal of Science*, 21(1), 162. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.21.1.3925\(2024\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.21.1.3925(2024))
- Perry, R.H., Green, D.W., Maloney, J. O., 1997. CHEMICAL ENGINEERS ' HANDBOOK SEVENTH Late Editor, Society.
- Rhoades, J. D. (1993). Electrical conductivity methods for measuring and mapping soil salinity. *Adv. Agron.*, 49, 201-251. [https://doi.org/10.1016/S0065-2113\(08\)60795-6](https://doi.org/10.1016/S0065-2113(08)60795-6)
- Schmidhuber, J. (2015). Deep learning in neural networks: An overview. *Neural networks*, 61, 85-117. <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003>

- Sue, K., & Arai, K. (2004). Specific behavior of acid–base and neutralization reactions in supercritical water. *J. Supercrit. Fluids*, 28(1), 57-68. [https://doi.org/10.1016/S0896-8446\(03\)00010-X](https://doi.org/10.1016/S0896-8446(03)00010-X)
- Tong, A., Tang, X., Liu, H., Gao, H., Kou, X., & Zhang, Q. (2023). Differentiation of NaCl, NaOH, and β -Phenylethylamine using ultraviolet spectroscopy and improved adaptive artificial bee colony combined with BP-ANN algorithm. *ACS Omega*, 8(13), 12418–12429. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c00271>
- 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. (2021). ANN coupled with Monte Carlo simulation for predicting the concentration of acids. *Applied Radiation and Isotopes*, 169, 109563. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109563>

**DEVELOPMENT OF AN ARTIFICIAL NEURAL NETWORK MODEL
FOR RAPID DETERMINATION OF NaOH SOLUTION CONCENTRATION USING
THE TRANSMISSION SPECTRUM OF LOW-ENERGY GAMMA RAYS AT 59.54 KEV**

Nguyen Thanh Dat^{1,2}, Tran Vu Thien An¹, Vo Diep Trung Tin²,
Tran Trung Nguyen¹, Huynh Dinh Chuong², Hoang Thi Kieu Trang², Hoang Duc Tam¹*

¹Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam

²University of Science, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

^{*}Corresponding author: Nguyen Thanh Dat – Email: datnth@hcmue.edu.vn

Received: July 02, 2025; Revised: August 25, 2025; Accepted: September 08, 2025

ABSTRACT

This study proposes a new approach for rapidly determining the concentration of NaOH solutions by measuring the attenuation of a low-energy 59.54 keV γ -ray beam emitted from a ²⁴¹Am source and using an artificial neural network (ANN) trained directly on raw spectra. First, Monte Carlo simulations configured are used to generate spectral data. Then these spectral data are directly extracted to train and optimize an ANN model. The predictive performance of the optimized network is benchmarked against a conventional calibration curve that relates the transmission ratio ($\ln R$) between water and NaOH solutions to their concentrations. The obtained results show that the ANN model achieves an average deviation of less than 2.8% from reference concentrations across the tested range, whereas the calibration curve yields deviations above 6.0%. In the low-concentration region ($C = 5.0\%$), the ANN achieves a 2.5% deviation, markedly better than the approximately 12.6% deviation of the calibration curve. The findings suggest that integrating low-energy γ -ray transmission measurements with an ANN model offers a promising methodology for high-precision monitoring of alkaline solutions.

Keywords: gamma transmission; Monte Carlo simulation; MLP-ANN; NaOH; concentration