

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CENTRO DE GEOCIÊNCIAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GEOFÍSICA

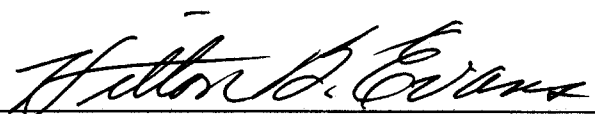
SIMULAÇÃO DE PERFIS NUCLEARES DE POÇO EM
FORMAÇÕES COMPLEXAS

TESE APRESENTADA POR
JADIR DA CONCEIÇÃO DA SILVA

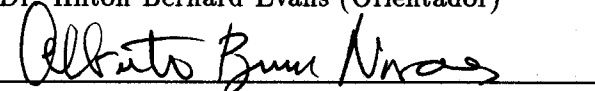
COMO REQUISITO PARCIAL À OBTENÇÃO DO GRAU DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS NA ÁREA DE GEOFÍSICA

Data de Aprovação : 26 / 04 / 1993

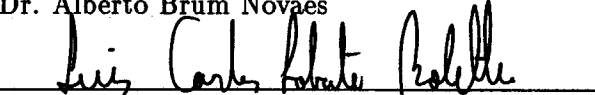
COMITÊ DE TESE:



Dr. Hilton Bernard Evans (Orientador)



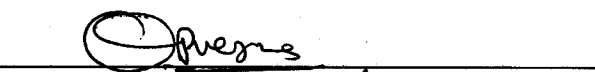
Dr. Alberto Brum Novaes



Dr. Luiz Carlos Lobato Botelho



Dr. Michael Anthony Lovell



Dr. Om Prakash Verma

BELÉM

1993

SILVA, Jadir da Conceição da. Simulação de perfis nucleares de poço em formações complexas. Belém, Universidade Federal do Pará. Centro de Geociências, 1993. 150 p. il. Tese (Doutorado em Geofísica) – Curso de Pós-Graduação em Geofísica, Centro de Geociências, UFPa., 1993.

1. PERFILAGEM NUCLEAR DE POÇO. 2. SIMULAÇÃO MONTE CARLO. 3. ELEMENTOS FINITOS. I. Título.

À minha família pelo incentivo
à realização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Ao NPGP/UFPa e a todo corpo docente, técnico e administrativo por terem propiciado os meios para a realização deste trabalho.

Ao prof. Hilton B. Evans, pelo desafio assumido na orientação desta tese.

À PETROBRÁS pelo suporte financeiro, na minha condição de bolsista do programa de formação de mestres e doutores firmado entre esta empresa e a UFPa.

Ao prof. Carlos Alberto Dias pelo incentivo e batalha constantes em favor do desenvolvimento da geofísica no Brasil.

Aos professores Michael Lovell, Antônio Expedito Gomes de Azevedo, Alberto Brum Novaes, Om Prakash Verma e Luiz Carlos Lobato Botelho pelas valiosas sugestões apresentadas.

Ao DEN - Departamento de Engenharia Nuclear da UFMG pelos conhecimentos a mim transmitidos, acerca da Física Nuclear Aplicada e sem os quais seria impossível o desenvolvimento deste trabalho.

Ao CDTN - Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear da UFMG por ter tornado possível um amplo trabalho de pesquisa bibliográfica.

Minha particular gratidão ao colega Licurgo Peixoto de Brito, pelas sugestões e revisão do texto inicial.

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA	i
AGRADECIMENTOS	ii
RESUMO	1
ABSTRACT	3
1 - INTRODUÇÃO	5
1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO	7
1.2 METODOLOGIA	7
2 - INTERAÇÃO DE FÓTONS COM A MATÉRIA	11
2.1 EFEITO FOTOELÉTRICO	13
2.2 ESPALHAMENTO COMPTON	15
2.3 PRODUÇÃO DE PARES	18
3 - INTERAÇÃO DE NÊUTRONS COM A MATÉRIA	22
3.1 ESPALHAMENTO DE NÊUTRONS	22
3.1.1 Espalhamento Elástico	23
3.1.2 Espalhamento Inelástico	26
3.2 ABSORÇÃO DE NÊUTRONS	27
3.2.1 Captura Radiativa	27
3.2.2 Reações	27
4 - DETECÇÃO DE FÓTONS POR CINTILAÇÕES	28
4.1 EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO E AÇÃO FOTOMULTIPLICADORA	29
4.2 PODER DE RESOLUÇÃO DE ENERGIA	31
4.3 ESPECTROMETRIA GAMA A CINTILAÇÃO	32
4.4 ESTRUTURA DO ESPECTRO DE UMA FONTE GAMA MONOENÉRGICA	33
5 - TRANSPORTE DE RADIAÇÃO	38
5.1 REDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN	38
5.1.1 A Aproximação P_1	40

5.1.2	Equação de Difusão para Multigrupos	41
5.2	SOLUÇÃO POR ELEMENTOS FINITOS	42
5.2.1	Obtenção da Matriz de Forma $K^{(e)}$	44
5.2.2	Obtenção do Vetor Fonte $f^{(e)}$	45
5.3	DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DA FORMAÇÃO	46
5.3.1	Coefficiente de Difusão $D_g(r, z)$	46
5.3.2	Seção de Choque Diferencial $b_{gg'}(r, z)$	48
5.3.3	Seção de Choque Total $\Sigma_{T,g}(r, z)$	50
5.4	TESTE DO ALGORITMO	51
6	SIMULAÇÃO DA FUNÇÃO RESPOSTA DO CRISTAL NaI(Tl) PE- LO MÉTODO MONTE CARLO	54
6.1	CONSTRUÇÃO DE AMOSTRAS	54
6.1.1	Método de Rejeição	55
6.1.2	Método de Distribuição - Cumulativa	56
6.1.3	Simulação do Livre Percurso Médio de Fótons	57
6.1.4	Simulação de Direções Equiprováveis	58
6.1.5	Técnica de Von Neumann de Seleção do Ângulo Azimutal	59
6.2	SELEÇÃO DO TIPO DE INTERAÇÃO	61
6.2.1	Simulação do Espalhamento Compton	62
6.2.2	Simulação do Espalhamento Rayleigh	65
6.2.3	Simulação do Efeito Fotoelétrico	66
6.2.4	Simulação da Produção de Pares	68
6.3	ANÁLISE DOS RESULTADOS DA SIMULAÇÃO MC	69
6.4	EFEITO DA RESOLUÇÃO SOBRE O ESPECTRO DE PERDA DE ENERGIA	71
6.5	MODELO PARA O ACOPLAMENTO FEM x MC	71
7	SIMULAÇÃO DE PERFIS NUCLEARES	75
7.1	SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA NGS	75
7.1.1	Fontes de Radioatividade Natural	75
7.1.2	Modelos para Calibração da Ferramenta	79
7.1.3	Análise Espectral do Sistema K-U-Th	81
7.2	SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA LDT	107
7.2.1	Calibração da Ferramenta	107
7.2.2	Correções Ambientais	110
7.3	SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA CNL	119
7.3.1	O Modelo de Regressão Polinomial de Tittle	119

7.3.2	Determinação dos Macroparâmetros da Formação	122
7.3.3	Interpolação entre Pontos Extremos	122
7.3.4	Extrapolação para a Presença de Minerais Perturbadores	124
7.3.5	Modelo Geral para Camadas Finas	126
8 -	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	133
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	137
ANEXO I	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN . . .	142
ANEXO II	SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO	145

RESUMO

A identificação e descrição dos caracteres litológicos de uma formação são indispensáveis à avaliação de formações complexas. Com este objetivo, tem sido sistematicamente usada a combinação de ferramentas nucleares em poços não - revestidos.

Os perfis resultantes podem ser considerados como a interação entre duas fases distintas:

- Fase de transporte da radiação desde a fonte até um ou mais detectores, através da formação.
- Fase de detecção, que consiste na coleção da radiação, sua transformação em pulsos de corrente e, finalmente, na distribuição espectral destes pulsos.

Visto que a presença do detector não afeta fortemente o resultado do transporte da radiação, cada fase pode ser simulada independentemente uma da outra, o que permite introduzir um novo tipo de modelamento que desacopla as duas fases.

Neste trabalho, a resposta final é simulada combinando soluções numéricas do transporte com uma biblioteca de funções resposta do detector, para diferentes energias incidentes e para cada arranjo específico de fontes e detectores.

O transporte da radiação é calculado através do algoritmo de elementos finitos (FEM), na forma de fluxo escalar $2\frac{1}{2}$ -D, proveniente da solução numérica da aproximação de difusão para multigrupos da equação de transporte de Boltzmann, no espaço de fase, dita aproximação P_1 , onde a variável direção é expandida em termos dos polinômios ortogonais de Legendre. Isto determina a redução da dimensionalidade do problema, tornando-o mais compatível com o algoritmo FEM, onde o fluxo dependa exclusivamente da variável espacial e das propriedades físicas da formação.

A função resposta do detector NaI(Tl) é obtida independentemente pelo método Monte Carlo (MC) em que a reconstrução da vida de uma partícula dentro do cristal cintilador é feita simulando, interação por interação, a posição, direção e energia das diferentes partículas, com a ajuda de números aleatórios aos quais estão associados leis de probabilidades adequadas. Os possíveis tipos de interação (Rayleigh, Efeito fotoelétrico, Compton e Produção de pares) são determinados similarmente. Completa-se a simulação quando as funções resposta do

detector são convolvidas com o fluxo escalar, produzindo como resposta final, o espectro de altura de pulso do sistema modelado. Neste espectro serão selecionados conjuntos de canais denominados janelas de detecção. As taxas de contagens em cada janela apresentam dependências diferenciadas sobre a densidade eletrônica e a litologia. Isto permite utilizar a combinação dessas janelas na determinação da densidade e do fator de absorção fotoelétrico das formações.

De acordo com a metodologia desenvolvida, os perfis, tanto em modelos de camadas espessas quanto finas, puderam ser simulados. O desempenho do método foi testado em formações complexas, principalmente naquelas em que a presença de minerais de argila, feldspato e mica, produziram efeitos consideráveis capazes de perturbar a resposta final das ferramentas. Os resultados mostraram que as formações com densidade entre 1.8 e 4.0 g/cm^3 e fatores de absorção fotoelétrico no intervalo de 1.5 a 5 $barns/e^-$, tiveram seus caracteres físicos e litológicos perfeitamente identificados. As concentrações de Potássio, Urânio e Tório, puderam ser obtidas com a introdução de um novo sistema de calibração, capaz de corrigir os efeitos devidos à influência de altas variâncias e de correlações negativas, observadas principalmente no cálculo das concentrações em massa de Urânio e Potássio.

Na simulação da resposta da sonda CNL, utilizando o algoritmo de regressão polinomial de Tittle, foi verificado que, devido à resolução vertical limitada por ela apresentada, as camadas com espessuras inferiores ao espaçamento fonte - detector mais distante tiveram os valores de porosidade aparente medidos erroneamente. Isto deve-se ao fato do algoritmo de Tittle aplicar-se exclusivamente a camadas espessas. Em virtude desse erro, foi desenvolvido um método que leva em conta um fator de contribuição determinado pela área relativa de cada camada dentro da zona de máxima informação. Assim, a porosidade de cada ponto em subsuperfície pôde ser determinada envolvendo estes fatores com os índices de porosidade locais, porém supondo cada camada suficientemente espessa a fim de adequar-se ao algoritmo de Tittle. Por fim, as limitações adicionais impostas pela presença de minerais perturbadores, foram resolvidas supondo a formação como que composta por um mineral base totalmente saturada com água, sendo os componentes restantes considerados perturbações sobre este caso base.

Estes resultados permitem calcular perfis sintéticos de poço, que poderão ser utilizados em esquemas de inversão com o objetivo de obter uma avaliação quantitativa mais detalhada de formações complexas.

ABSTRACT

The identification and description of lithological parameters of a formation are essential in the evaluation of complex formations. Based on this, the combination of the nuclear tool response in uncased wells has been used systematically.

The resultant logs can be considered as the interaction between two distinct phases:

- The radiation transport phase from a source to one or more detectors through the formation.
- The detection phase that consists of the collection of radiation, its transformation into current pulses, and the spectral distribution of these pulses.

As the presence of the detector does not strongly affect the radiation transport result, each phase can be simulated independent of the other, which allows us to introduce a new type of model in which the transport phase and the detection phase are uncoupled.

In this work, the final response is simulated combining transport numerical solutions with a library of the detector responses to different incident energies and for each specific source - detector array.

The radiation is calculated by the Finite Elements Method (FEM), as a $2\frac{1}{2}$ -D scalar flux derived from the numerical solution of the multigroup diffusion approximation of the Boltzmann transport equation in phase space. This is known as P_1 approximation, where the variable direction is expanded in terms of the Legendre orthogonal polynomials, leading to the dimensionality reduction of the problem in such a way as to let it be more consistent with the FEM, where the flux depends only on the spatial variable and the physical properties of the formation.

The NaI(Tl) response function is obtained separately by the Monte Carlo method (MC) where the life of a particle within the scintillator crystal is reconstructed simulating interaction by interaction the position, direction and energy of the different particles using a random number technique with associated appropriate probabilities laws. Each type of interaction (e.g., Rayleigh, Photo-electric, Compton and Pair production) is determined similarly and the simulation is concluded when the detector response functions are convolved with the

scalar flux. The final response is the pulse-height spectrum of the simulated system. From this spectrum, a set of channels called detection windows are then selected. The count rates in each window show different dependencies on density and lithology. This fact allows one to use a combination of these windows in determining the density and photoelectric absorption factor of the formation.

According to the method developed in this work, the logs in both thin and thick layers can be simulated. The performance of the method has been tested in complex formations, mainly where the presence of clay minerals, feldspars and micas have produced considerable effects sufficient to perturb the final response of the sonde. The results show that it is possible to identify physical and lithological parameters in formations having densities between 1.8 and 4.0 g/cm^3 and photoelectric absorption factors in the interval of 1.5 to 5.0 $barns/e^-$. The concentrations of Potassium, Uranium and Thorium can be obtained through the introduction of a new system of calibration which corrects the effects due to high variances and negative correlations observed on the mass concentration of Uranium and Potassium.

In the simulation of the CNL response using the Tittle polynomial regression algorithm, it is verified that due to the limited vertical resolution of this sonde, the porosity value is poorly measured for most layers of thickness less than the source - far detector spacing, thus it has application only in thick layers. A new method was developed to solve this problem; the contribution of the relative area of each layer within the maximum information zone is determined. Thus, this neutron porosity makes possible an in-depth evaluation of expected CNL porosity-lithology response, convolving that area factor with the local formation porosity index, considering only thick layers. The presence of perturbing minerals is solved by considering the formation as formed by a predominant base matrix mineral, totally saturated by fresh water; the rest of the components are then considered as a perturbation of this base case.

These results enable the calculation of synthetic well logs that can be used in inversion schemes in order to get a more detailed quantitative evaluation of complex formations.

1 - INTRODUÇÃO

A grande maioria das propriedades de interesse na perfilagem de poço, tais como a litologia, porosidade, densidade, etc., pode ser inferida a partir das interações de dois tipos de radiação: raios- γ e nêutrons. Por outro lado, alguns minerais contêm elementos tais como Potássio, Tório e Urânio, que são fontes naturais de radiação gama. A detecção dessa radiação indica a presença daqueles elementos. Esta é chamada *perfilagem de raios gama naturais*.

A atenuação de raios - γ num material de determinada espessura, é uma função da energia do raio gama, da densidade do material e do número atômico (Z) dos átomos que o constituem. Consequentemente, o número de raios - γ registrado a alguma distância de uma fonte artificial pode ser usado para inferir estas quantidades. Estamos agora tratando do *perfil de densidade* ou *perfilagem $\gamma - \gamma$ seletiva*.

A atenuação da intensidade de um feixe de nêutrons passando através de um material com uma dada espessura, depende primariamente do seu conteúdo de hidrogênio. Assim, o número de nêutrons detectados a alguma distância da fonte, pode ser usado para inferir o conteúdo de hidrogênio da formação e esta constituiu-se na *perfilagem neutrônica* ou *perfil de porosidade*.

A combinação destes perfis que utilizam de métodos nucleares, oferece uma variedade de aplicações específicas extremamente úteis na avaliação de formações complexas e no conhecimento da geologia. Uma formação segundo DAHLBERG (1989) é dita complexa quando ela contém uma combinação qualquer de minerais raros ou incomuns, argilas, absorvedores de nêutrons térmicos e hidrocarbonetos de composições variadas. A estas inclui-se também as formações de geometria singular, intercalando tanto camadas finas quanto espessas.

Vários tipos de modelos têm sido construídos na tentativa de explicar as discrepâncias existentes entre estes modelos e os dados experimentais. Infelizmente, poucos deles têm sido até então conclusivos. Por muitos anos, os tipos de modelamento vêm se limitando ao método Monte Carlo, onde um grande número de tentativas deve ser feito a fim de obter níveis de estatística aceitáveis (MICKAEL et al., 1988; DEUPREE & NOEL, 1988). Embora gere bons resultados, este método vem sendo gradativamente abandonado, visto que o preço computacional pago na sua elaboração inviabiliza sua aplicação extensiva. Mesmo assim,

estes modelamentos adquirem uma grande importância, especialmente quando se trata da identificação dos casos em que estas discrepâncias se devem exclusivamente à adoção de um determinado sistema de detecção, que embora indispensável para uma melhor qualidade da solução, traz complicações adicionais que degradam sensivelmente quaisquer respostas por ele proporcionadas.

Conclui-se assim que a melhor forma de aumentar a eficiência da solução e torná-la compatível com os modelos experimentais, é condicionar a presença de um detector finito e semi-absorvedor, em substituição aos detectores pontuais, tidos como absorvedores perfeitos, adotados nos modelos anteriores (SCHIMSCHAL, 1980). Isto significa a exigência de modelos híbridos, constituídos por no mínimo duas fases distintas: transporte e detecção. Estes modelos foram desenvolvidos inicialmente visando aliviar a construção e uso extensivos de modelos de laboratórios para testes de calibração.

Um primeiro trabalho neste sentido foi desenvolvido por WILSON et al. (1985), e consiste basicamente de um modelo computacional 1-D, denominado ANISN, que simula medidas de espectroscopia de raios gama naturais e sua subsequente convolução com uma série de funções resposta de um detector específico, elaborado pelo código Monte Carlo modificado de EVANS (1967).

Uma característica importante dos modelos atuais é que eles permitem estudar os processos de degradação das medidas, quando submetidos diretamente à influência de camadas adjacentes à camadas finas (MORLAND, 1984).

Como podemos observar, o maior desafio pertinente a estes modelos, que visam reproduzir fielmente condições encontradas na natureza, está no acoplamento necessário entre as duas fases. Os modelos até agora desenvolvidos adotam para tal, a convolução simples entre o fluxo diferencial calculado na fase de transporte e a função resposta do detector, observadas a energia e a direção da partícula incidente (WILSON et al., 1985).

No entanto, são inúmeros os campos de aplicação destes modelos. A combinação das diferentes respostas apresentadas pelos perfis é extremamente útil na avaliação de formações complexas, visto que as medidas espectrais dos raios gama naturais da formação, para Th, U e K, respondem primariamente às categorias sedimentares das argilas, feldspatos e micas (QUIREIN et al., 1982), enquanto as medidas de densidade e porosidade em formações limpas, permitem identificar distintamente carbonatos, silicatos e evaporitos (GARDNER & DUMANOIR, 1980). Admite-se ainda a necessidade de um extenso desenvolvimento teórico para a análise dos espectros gerados por estes modelos (BERTOZZI, et al. 1981). Pode-se, contudo, adiantar que a radioatividade das formações é, segundo WAHL (1983), afetada principalmente pela densidade da formação e pela densidade e composição do fluido do poço.

1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO

O presente trabalho tem como objetivo, o desenvolvimento de um novo algoritmo para a simulação das respostas das sondas de raios gama naturais (NGS), de densidade e índice fotoelétrico (LDT) e de porosidade (CNL). Ele consiste, em linhas gerais, da construção de um algoritmo de elementos finitos para o cálculo do fluxo escalar de raios gama nas vizinhanças do poço, aplicado sobre a aproximação de difusão da equação de transporte de Boltzmann. Separadamente, simulamos pelo método Monte Carlo a função resposta do detector para cada energia incidente, definida como sendo a energia representativa de cada grupo do modelo físico. Um código é criado para acoplar o fluxo escalar com a série de funções resposta do detector, sendo a saída deste código, o espectro de altura de pulsos.

1.2 METODOLOGIA

As respostas desenvolvidas neste trabalho podem ser dadas pelo seguinte modelo convolucional

$$n(E') = \int_{\Delta E'} G(E', E) \Phi(E) dE, \quad (1.1)$$

onde $\Phi(E)$ é o fluxo escalar da radiação para a energia E , $G(E', E)$ é a função resposta do detector no canal correspondente à energia E' , devido a uma fonte monoenergetica E , distante aproximadamente um livre percuso médio da face lateral do detector e, finalmente, $n(E')$ é o espectro de altura de pulso do arranjo considerado.

Os programas computacionais relativos aos algoritmos de elementos finitos (FEM) e Monte Carlo (MC), serão implementados visando aos cálculos do fluxo escalar de raios gama e da função resposta dos diversos formatos de cristais que constituem os detectores das sondas NGS e LDT. Estes programas serão baseados nos cálculos desenvolvidos nos capítulos 5 e 6 deste trabalho. Para a sonda NGS, o fluxo escalar será calculado ao longo de cada modelo utilizando uma única malha de elementos finitos. A convolução desse fluxo com a função resposta do detector envolverá em cada passo 30 nós consecutivos da malha, tomados no sentido vertical. A seguir, o detector é deslocado 5 cm ao longo do poço, utilizando agora no processo de convolução outro conjunto de 30 nós, e assim por diante. Isto permitirá simular fielmente a influência exercidas pelas camadas ao afastarem-se relativa e verticalmente do ponto de localização do detector. Já para a sonda LDT, o fluxo será calculado a cada 20 cm ao longo do poço, utilizando uma malha diferente a cada deslocamento do conjunto fonte-detectores. No entanto, para a representação final dos perfis, interpolaremos este conjunto de pontos de forma que três novos pontos sejam introduzidos entre cada dois dos pontos

consecutivos anteriores. Isto permitirá simular a densidade e o fator de absorção fotoelétrica das formações também a cada 5 cm ao longo do poço.

Como base para o desenvolvimento dos modelos propostos, introduziremos nos três capítulos a seguir, alguns conceitos fundamentais acerca da interação de fótons e nêutrons com o material da formação. Paralelamente, nos aprofundaremos um pouco mais na teoria que envolve a detecção de fótons por cintilações, descrevendo aspectos importantes de um sistema de detecção, composto por um cristal cintilador acoplado opticamente à uma câmara multiplicadora de elétrons e um analisador multicanal. Este seleciona, conta e armazena numa mesma janela, os pulsos cujas alturas situam-se entre limites pré-estabelecidos.

A história dos fótons é seguida, passo a passo, dentro do cristal cintilador NaI, onde ele pode contribuir ou não com um pulso. Em suma, o método Monte Carlo desenvolvido aqui, envolve a simulação da função resposta dos vários formatos de detectores utilizados na composição das sondas NGS e LDT, e corresponde a reproduzir a história da vida de um grande número de raios gama e elétrons dentro do cristal, de forma que os intervalos de confiança das medidas situem-se entre limites considerados aceitáveis (98 a 99 %). Para que este fato se verifique, uma mesma simulação será repetida cinco vezes, cada uma com uma diferente semente para a geração da série de números aleatórios. A resposta final será a média entre estas medidas. Para uma maior confiabilidade de cada medida estipularemos seu desvio padrão em cerca de 1 %.

Cada fóton começa com uma energia conhecida, selecionada de uma placa fictícia emissora, constituída por um arranjo de blocos de volume unitário, cujos centros de gravidade (CG) representam fontes pontuais determinadas pelo algoritmo FEM. Estas fontes serão selecionadas com o auxílio de números aleatórios, aos quais são atribuídos probabilidades individuais de emissão para cada nova história. A geometria acima descrita poderá ser vista no capítulo 6, onde as variáveis envolvidas na simulação serão convenientemente definidas.

Os cossenos diretores do percurso inicial serão dados por números aleatórios que selecionam o CG do bloco emissor, bem como o ponto na face lateral do cristal onde o fóton incide. A partir deste ponto, com o auxílio de novos números aleatórios, estimamos o percurso de vôo do fóton até o ponto de primeira interação. Para cada história, será contado o número total de fótons que interagiram pelo menos uma vez dentro do cristal.

O tipo de interação, se espalhamento Compton, absorção fotoelétrica, produção de pares ou espalhamento Rayleigh, é selecionado também com o auxílio de um número aleatório, dependendo das seções de choque relativas para cada tipo de interação. Caso a interação selecionada seja o espalhamento Compton, o ângulo de espalhamento e a energia do fóton após o espalhamento são determinados pelo método de Khan apud SPANIER & GELBARD (1969)

que faz a amostragem randômica da distribuição de Klein e Nishina. O ângulo azimutal é escolhido aleatoriamente através da técnica de Von Neumann apud KALOS & WHITLOCK (1986) que seleciona ângulos uniformemente distribuídos, dando o seno e cosseno do ângulo sem a necessidade do cálculo de quaisquer funções trigonométricas. Uma vez determinados os ângulos de espalhamento e azimutal, os cossenos diretores da nova direção do fóton podem ser facilmente obtidos e a história continua.

Na hipótese de ser o efeito fotoelétrico o tipo de interação selecionada, calculamos a energia depositada pelo fóton no cristal cintilador e a história é dada como terminada.

Como resultado do efeito de produção de pares, surgem dois raios gama de aniquilação no ponto final do trajeto do pósitron. A história destes raios gama será contada à semelhança da história dos fótons primários.

Se, finalmente, a seleção recair no espalhamento Rayleigh, consideramos uma perda média de energia de 1.0 KeV, sujeito a um ângulo de espalhamento muito pequeno e que se repetirá até a absorção total do fóton ou a redução de sua energia abaixo de níveis pré-estabelecidos. Estes níveis ou limiares de energia serão de 100 KeV para a sonda NGS e de 10 KeV para a sonda LDT.

Para cada percurso, um teste será feito para ver se o fóton tem ou não escapado do cristal. Aqui também são contados ao final de cada história, os números de cada tipo de interação. A resposta final desta fase será o espectro de perda de energia dos fótons incidentes. A função resposta do detector será, enfim, calculada envolvendo o espectro de perda de energia com uma função gaussiana que simula o efeito da resolução do detector sobre o espectro ideal.

Adicionalmente, um modelo teórico será desenvolvido para caracterizar a resposta da sonda CNL de porosidade neutrônica, em formações com uma dada composição de minerais e fluidos (DAHLBERG, 1989). Esta resposta é investigada usando um polinômio de regressão desenvolvido por TITTLE (1988), para resolver discrepâncias registradas na literatura e observadas nas comparações dos dados de perfis neutrônicos com os dados de testemunhos e/ou de outros tipos de perfis de porosidade (WILEY & PATCHETT, 1989). Na simulação do perfil neutrônico, o índice de porosidade será calculado de 5 em 5 cm ao longo do poço, permitindo uma varredura completa das camadas atravessadas pelo poço.

Estes métodos simplificados de cálculo de porosidade, utilizam macroparâmetros da formação: os comprimentos de freiamento (L_s) e difusão (L_d). Eles são introduzidos como entradas independentes de um funcional utilizado na determinação do índice de porosidade, tanto de formações complexas como de estruturas de composição arbitrária.

Enfim, o modelamento proposto neste trabalho permitirá o estudo detalhado de um grande

número de modelos complexos, caracterizados por uma multiplicidade de camadas finas, minerais raros arbitrariamente distribuídos ao longo das formações, etc., porém concorrendo com a mesma importância para o efeito global.

2 - INTERAÇÃO DE FÓTONS COM A MATÉRIA

O estudo dos mecanismos de interação da radiação eletromagnética com a matéria é de fundamental importância para o entendimento dos processos envolvidos na absorção, espalhamento e detecção de fótons (DAVISSON & EVANS, 1952). Dentre os vários tipos de interação; a saber, espalhamento Rayleigh, espalhamento Compton, absorção fotoelétrica, formação de pares, etc., a predominância de um tipo ou outro de interação decorre das considerações de probabilidade incorporadas na seção de choque, cujo valor indica o quão provável é a ocorrência de um dado tipo de interação, para um valor da energia do fóton incidente e para um dado tipo de átomo no material.

Se considerarmos que as medidas de absorção de raios- γ , devem-se ao fato de que a intensidade da radiação diminui quando ela atravessa um dado material, podemos dizer que, para pequenas espessuras Δx , o decréscimo na intensidade é proporcional à espessura e à intensidade I do feixe incidente, para raios gama monoenergéticos em um feixe paralelo (GREEN, 1955), isto é

$$\Delta I = -\mu I \Delta x \quad (2.1)$$

onde μ é uma constante de proporcionalidade denominada coeficiente de absorção ou seção de choque. Se a radiação é homogênea, μ é constante, e a integração da equação (2.1) resulta

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x}. \quad (2.2)$$

Visto que a intensidade da radiação pode ser representada como o produto da sua energia E pelo número N de fótons cruzando a unidade de área por unidade de tempo (GREEN, 1955), podemos reescrever a equação (2.2) da seguinte forma

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\mu x}. \quad (2.3)$$

No intervalo de energia comumente usado nas técnicas de perfilagem de poço (0.03 - 3.0 MeV), apenas três tipos de interação são considerados; (i) O espalhamento Compton, em que o fóton é espalhado por um elétron do átomo, após o que, o fóton incidente é desviado para uma nova direção, com menor energia, enquanto o elétron recua com a energia restante; (ii) O efeito fotoelétrico, no qual o fóton cede toda sua energia a um elétron ligado, que utiliza parte dessa energia para vencer a energia de ligação, enquanto a parte restante é incorporada ao

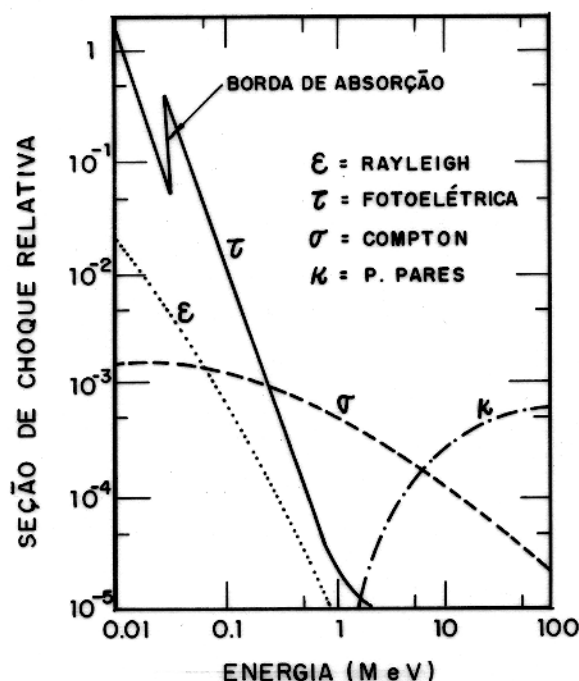


Figura 2.1 - Variação das seções de choque com a energia do fóton incidente. (τ) é a seção de choque para o efeito fotoelétrico e as discontinuidades mostradas são as bordas de absorção, (σ) é a seção de choque para o espalhamento Compton, (κ) a seção de choque para a produção de pares e, finalmente, (ϵ) aquela do espalhamento Rayleigh (Adaptado de MARTIN - MALMONGE, 1974).

elétron na forma de energia cinética; (iii) Produção de pares, no qual um fóton, ao interagir com o campo do núcleo, produz um par elétron-pósitron, cuja energia cinética total é igual a energia do fóton incidente menos a energia em massa das duas partículas criadas ($2mc^2$).

Os três processos de interação acima descritos agem independentemente uns dos outros. Podemos, portanto, definir o coeficiente de absorção total μ , como a soma das contribuições de cada processo individualmente, $\mu = \sigma + \tau + \kappa$, onde σ , τ e κ são as seções de choque correspondentes ao espalhamento Compton, efeito fotoelétrico e produção de pares, respectivamente.

A Figura 2.1 mostra como as seções de choque (σ , μ , κ) variam com a energia do fóton incidente para um material específico.

A curva ϵ , representativa do espalhamento Rayleigh, foi excluída da seção de choque total por tratar-se de um espalhamento elástico onde o fóton incidente é simplesmente desviado sem perder energia, ocorrendo principalmente com elétrons muito fortemente ligados ao átomo, não sendo possível provocar excitação no mesmo (MOAKE, 1988). Assim, ela

é significativa apenas para elementos pesados. Podemos pensar nessa interação como que ocorrendo efetivamente com toda a massa do átomo.

Tendo em vista que no ambiente geológico, a ocorrência de altos números atômicos é rara e que, por sua vez, as energias de reação dos fótons encontram-se acima dos níveis prescritos para o espalhamento Rayleigh, esse tipo de interação só será considerado no estudo do sistema de detecção a ser descrito posteriormente. Assim, torna-se interessante estudar detalhadamente as interações que ocorrem comumente nos ambientes geológicos: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares.

2.1 EFEITO FOTOELÉTRICO

Análises teóricas do processo fotoelétrico têm demonstrado que as soluções exatas das equações são extremamente difíceis e tediosas, em razão da necessidade de se considerar a equação relativística de Dirac para o elétron ligado (DAVISSON & EVANS, 1952). Um fóton não pode transferir toda sua energia a um elétron livre. Contudo, a absorção total da energia do fóton pode acontecer se o elétron está inicialmente ligado ao átomo, caso em que, o momentum é conservado pelo recuo do átomo inteiro residual (BARBOSA, 1986). Nesta interação, a energia $h\nu$ do fóton incidente é absorvida e um elétron, usualmente K ou L, é ejetado do átomo com uma energia $T = h\nu - \Phi_i$, onde Φ_i é a energia de ligação do elétron na camada i e h e ν são a constante de Planck e a frequência do fóton, respectivamente. O fóton primário desaparece neste processo, mas o átomo excitado emitirá subsequentemente um ou mais fótons de raios-X de energia total Φ_i .

VICTOREEN (1948), apresentou evidências de que a absorção dos quanta, quando definidos pelo coeficiente de absorção de massa fotoelétrico (μ/ρ), podia ser representado por uma expressão simples, relacionando números atômicos (Z) dos átomos e comprimentos de onda ($\lambda_K, \lambda_L, \dots$) dos fótons envolvidos no processo. Ele assumiu que μ/ρ podia ser dado para certo elemento na forma abaixo,

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_Z = K\lambda^3. \quad (2.4)$$

Contudo, futuras investigações indicaram que a equação (2.4), para um dado elemento Z , podia ser melhorado ainda que grosseiramente, produzindo uma nova expressão

$$\frac{\mu}{\rho} = KZ^4\lambda^3 \quad (2.5)$$

ou em termos de energia,

$$\frac{\mu}{\rho} = K \frac{Z^4}{(h\nu)^3}. \quad (2.6)$$

Outros estudiosos têm percebido que essas equações dão valores aproximados, somente sob condições adequadas. Para altos valores de Z e λ , entretanto, elas divergem bastante dos valores esperados.

A Figura 2.1 mostra que a curva para o efeito fotoelétrico apresenta descontinuidades, justamente nas energias que correspondem às energias de ligação do elétron na própria camada. Estas descontinuidades, conhecidas como *bordas de absorção*, ocorrem porque a energia ($h\nu$) do fóton incidente se torna menor que a energia de ligação de alguns elétrons, diminuindo subitamente o número de elétrons energeticamente disponíveis para este tipo de interação.

VICTOREEN (1948) mostrou em seus trabalhos que o coeficiente de absorção (τ_a) de qualquer elemento podia ser dado por

$$\tau_a = \frac{C}{\nu^3} - \frac{D}{\nu^4} = C'\lambda^3 - D'\lambda^4 \quad (2.7)$$

onde C e D são constantes que mudam de valor entre as descontinuidades representadas pelas bordas de absorção. Estas constantes foram determinadas como sendo

$$C = \nu_1 \nu_2 \left(\frac{3\pi e^2}{mc} \right) \quad (2.8)$$

$$D = \nu_1 \nu_2 \nu_3 \left(\frac{3\pi e^2}{mc} \right) \quad (2.9)$$

onde ν_1, ν_2, ν_3 são frequências críticas obtidas de fórmulas de emissão espectral da forma

$$\nu_c = Rc(Z-s)^2 \left[\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) + \alpha^2(Z-s)^2 \left(\frac{1}{n_1^4} - \frac{1}{n_2^4} \right) \left(\frac{n}{\kappa} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]. \quad (2.10)$$

R é o número de Rydberg, c a velocidade da luz, α a constante de Sommerfeld para a estrutura fina, s uma constante de blindagem e finalmente, n_1 e n_2 são números quânticos principais.

Uma melhor concordância pode ser obtida, assumindo os seguintes valores para as constantes da expressão (2.10) : $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$; $n = 1, 2, 3, \dots$; $\alpha = 2\pi e^2/ch$, $k = n$, tal que $n/k = 1$.

Percebe-se que o essencial é que, no termo entre cochêtes da equação (2.10), o qual representa a correção relativística de Sommerfeld, sejam incluídas potências suficientemente altas de α^2 para que o termo aditivo possa ser desprezado. Os valores de C e D para qualquer elemento, podem então ser obtidos incluindo o número atômico (Z) e valores adequados para s e n na equação (2.10).

Finalmente, uma expressão geral para o coeficiente de absorção de massa fotoelétrica, pode ser obtido substituindo as equações (2.8) e (2.9) para C e D em (2.7) e multiplicando o

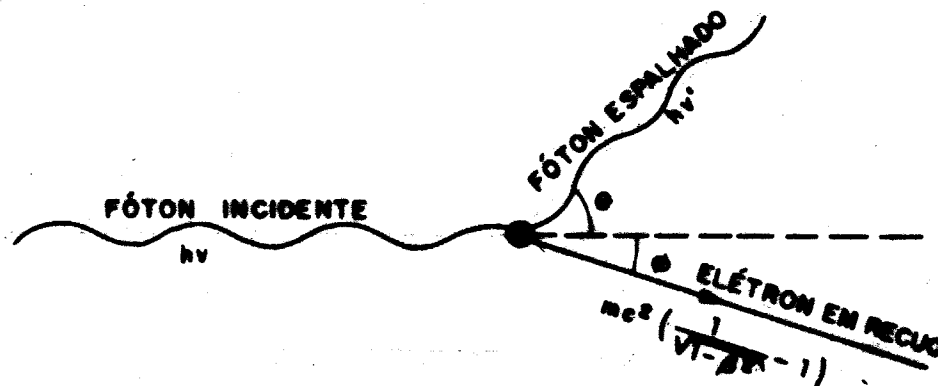


Figura 2.2 - Notações usuais de ângulos e energias utilizados na análise do espalhamento Compton (Adaptado de DAVISSON & EVANS, 1952).

resultado por N_0/A , onde N_0 é o número de Avogadro e A é o número de massa médio dos átomos da formação ,

$$\frac{\tau}{\rho} = \left(\frac{\nu_1 \nu_2}{\nu^3} - \frac{\nu_1 \nu_2 \nu_3}{\nu^4} \right) \frac{3\pi e^2 N_0}{mc A}. \quad (2.11)$$

2.2 ESPALHAMENTO COMPTON

O efeito Compton é o espalhamento inelástico de fótons com transferência de energia que pode, via de regra, ser interpretado como uma colisão elástica entre o fóton primário e um elétron orbital, cuja energia é pequena comparada com a do fóton incidente (GREEN, 1955). Esta condição permite considerar o elétron como livre. O fóton ao colidir com ele é defletido, enquanto que o elétron recua, em uma direção diferente da anterior, como mostra a Figura 2.2, onde β é a velocidade do elétron em unidades de velocidade da luz c , $\beta = v_e/c$.

A partir do princípio de conservação de energia e momentum, DAVISSON & EVANS (1952) obtiveram expressões relativísticas para energia cinética, momentum; etc., adotando para isso as notações mostradas na Figura 2.2:

$$h\nu = mc^2 \left[\frac{1}{(1 - \beta^2)^{1/2}} - 1 \right] + h\nu', \quad (2.12)$$

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{mc\beta}{(1 - \beta^2)^{1/2}} \cos \varphi + \frac{h\nu'}{c} \cos \theta, \quad (2.13)$$

$$0 = \frac{mc\beta}{(1 - \beta^2)^{1/2}} \sin \varphi - \frac{h\nu'}{c} \sin \theta \quad (2.14)$$

Eliminando duas quantidades quaisquer entre φ, β, θ ou ν' , eles obtiveram a partir da

combinação das equações (2.12) - (2.14), a energia ou comprimento de onda do fóton espalhado, como uma função do ângulo de espalhamento θ ,

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (2.15)$$

onde $\alpha = h\nu/mc^2$.

Além disto, puderam ainda determinar a energia do elétron em recuo, em termos de θ , ou mesmo uma expressão para o cosseno do ângulo de espalhamento do elétron no sistema de laboratório; então,

$$E_e = h\nu \left[1 - \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right] = h\nu \left[\frac{2\alpha}{1 + 2\alpha + (1 + \alpha)^2 \tan^2 \varphi} \right], \quad (2.16)$$

$$\cos \theta = 1 - \frac{2}{(1 + \alpha)^2 \tan^2 \varphi + 1}. \quad (2.17)$$

Para obter a fração da energia do fóton espalhado em uma determinada direção, utilizaremos a fórmula de Klein-Nishina, provenientes dos tratados da mecânica quântica e da equação de Dirac para o elétron (GREEN, 1955),

$$I = I_0 \frac{e^4}{2m^2 c^4 r^2} \frac{1 + \cos^2 \theta}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^3} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{(1 + \cos^2 \theta)[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right\}, \quad (2.18)$$

onde I_0 é a intensidade do feixe incidente, I é a intensidade do feixe espalhado a um ângulo θ , ver Figura 2.2, e r a distância do elétron espalhado, cujas massa e carga são respectivamente m e e .

A equação (2.18) pode ser reescrita de uma forma mais compacta como sendo

$$I = \frac{I_0}{r^2} \frac{h\nu'}{h\nu} \kappa(\theta), \quad (2.19)$$

onde $\kappa(\theta)$ é a seção de choque para o número de fótons espalhados por elétron e por unidade de ângulo sólido (Ω) na direção θ , dado analiticamente por

$$\frac{d_e \sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left\{ \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right] \right\}, \quad (2.20)$$

sendo $r_0 = e^2/mc^2$ e $e\sigma(\theta)$ a seção de choque por elétron. Para baixas energias, isto é, para valores pequenos de α , a equação (2.20) pode ser reduzida para a forma

$$\kappa(\theta) = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2 \theta), \quad (2.21)$$

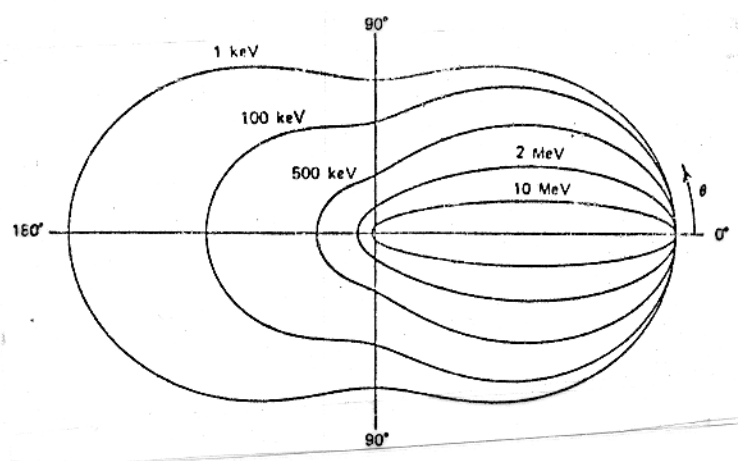


Figura 2.3 - Seção de choque diferencial para o número de fótons incidentes á direita e que são espalhados no efeito Compton por unidade de ângulo sólido . As curvas são mostradas para as energias iniciais indicadas.

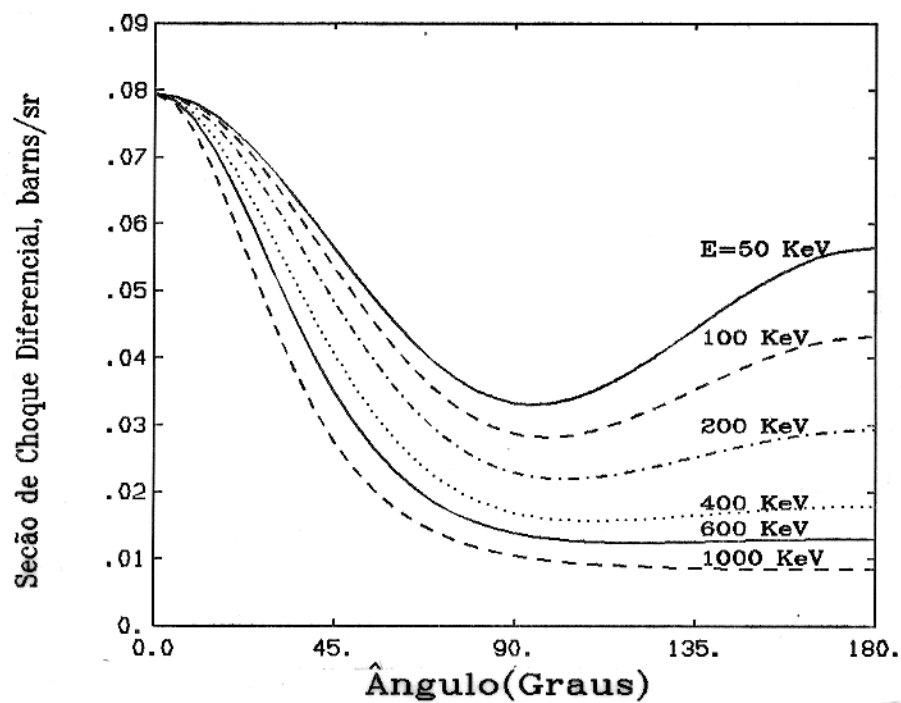


Figura 2.4 - Distribuição angular dos fótons espalhados no efeito Compton para diferentes energias iniciais (sr = esferorradiano).

que nada mais é do que a equação de *Thomson* para o elétron livre . As Figuras 2.3 e 2.4 resumem bem estas expressões.

A seção de choque total para o espalhamento Compton ${}_e\sigma$, pode ser determinada integrando a equação (2.20) entre diferentes limites para φ e θ .

Fazendo $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ onde θ varia de 0 a π e φ de 0 a 2π , obtemos para ${}_e\sigma$

$$\begin{aligned} {}_e\sigma &= \int_{\Omega} \kappa(\theta) d\Omega \\ &= 2\pi r_0^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[\frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\} \end{aligned} \quad (2.22)$$

A Figura 2.1 mostra o comportamento de ${}_e\sigma$ com as variações da energia do fóton incidente. Algumas vês no entanto, é necessário conhecer a quantidade de energia adquirida pelo fóton espalhado ou aquela absorvida pelo elétron em recuo. Estas quantidades podem ser expressas em termos de duas grandezas ${}_e\sigma_s$ e ${}_e\sigma_a$; a primeira sendo a seção de choque para o espalhamento Compton por elétron e para a energia do fóton espalhado, e a segunda, a seção de choque para a energia absorvida pelo elétron em recuo. O valor de ${}_e\sigma_s$ pode ser determinado, especificando antes a seção de choque diferencial a partir da expressão $(h\nu'/h\nu)\kappa(\theta)$, que aplicada à equação (2.20) resulta na seção de choque (GREEN, 1955),

$$\frac{d{}_e\sigma_s(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left\{ \frac{1}{[1+\alpha(1-\cos\theta)]^3} \times \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\alpha^2(1-\cos\theta)^2}{[1+\alpha(1-\cos\theta)]} \right] \right\} \quad (2.23)$$

Da mesma forma que anteriormente, a seção ${}_e\sigma_s$ é obtida pela integração da equação (2.23) entre os seguintes limites : $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi < 2\pi$, resultando na equação

$${}_e\sigma_s = \pi r_0^2 \left[\frac{1}{\alpha^3} \ln(1+2\alpha) + \frac{2(1+\alpha)(2\alpha^2-2\alpha-1)}{\alpha^2(1+2\alpha)^2} + \frac{8\alpha^2}{3(1+2\alpha)^3} \right] \quad (2.24)$$

Visto que ${}_e\sigma$ é a seção de choque para a quantidade total de energia removida do feixe incidente e ${}_e\sigma_s$ a quantidade retida pelo fóton espalhado, torna-se óbvio que a quantidade de energia absorvida pelo elétron em recuo, terá sua seção de choque definida pela diferença entre as duas seções anteriormente descritas, ou seja, ${}_e\sigma_a = {}_e\sigma - {}_e\sigma_s$.

2.3 PRODUÇÃO DE PARES

Às energias maiores que $2mc^2$ (1.022MeV), a absorção de raios- γ pelo processo de produção de pares deve ser considerada. Neste processo a energia do fóton ao reagir com o

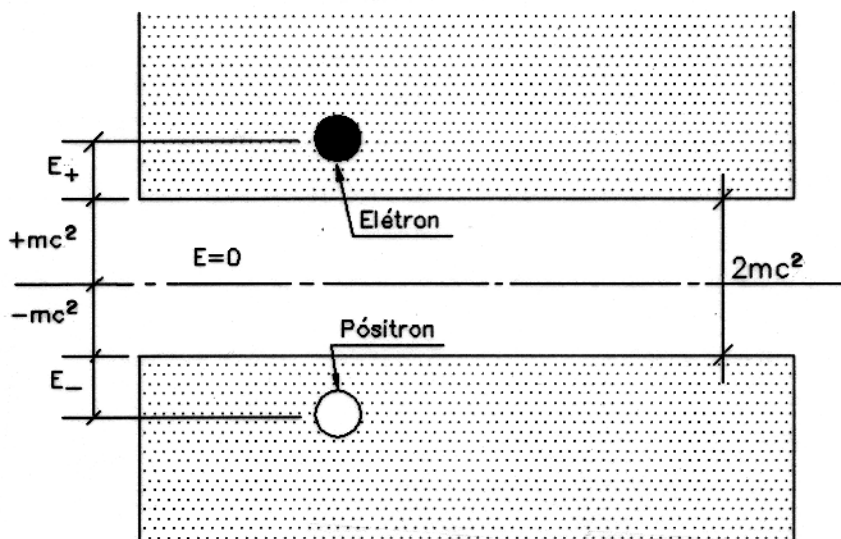


Figura 2.5 - Diagrama de energias proposto por Dirac para o estudo da origem dos pósitrons (Adaptado de BURLHAM, 1973).

campo de núcleo é convertida em um par elétron-pósitron, cada um com massa m , sendo a energia em excesso repartida entre eles na forma de energia cinética. Uma análise teórica preliminar deste processo foi feita por Bethe & Heitler apud DAVISSON & EVANS (1952), o qual envolvia considerações acerca do estado de energia negativa de um elétron. Contudo, foi Dirac apud DAVISSON & EVANS (1952) quem propôs um modelo revolucionário para explicar o efeito de produção de pares. Segundo este modelo, a equação que representava o movimento do elétron era invariante sob a transformação de Lorentz. Assim, a *Equação de Dirac para o elétron* traduzia de forma natural a estrutura fina das linhas espectrais e o spin do elétron. Para resolver a equação de Dirac era necessário considerar que o elétron podia existir em duas séries de estados quânticos, um de energia positiva, incluindo a energia de repouso e outro de energia negativa. Os valores possíveis da energia do elétron livre eram maiores que $+m_0c^2$ ou menores que $-m_0c^2$, e nenhuma outra energia existia entre esses dois limites como indicado pela Figura 2.5, consideradas como regiões proibidas.

Alertamos, porém, para o fato de que um elétron no estado de energia negativa terá propriedades sem quaisquer analogias clássicas, ou seja, ele não teria nenhum significado físico real exceto na teoria quântica onde ele pudesse fazer transições descontínuas de um estado de energia para outro.

Dirac evitou estas dificuldades, assumindo que os estados de energia negativa eram reais mas que eles estavam todos ocupados. Os elétrons ordinariamente observados estão todos no estado de energia positiva. Suponha agora que um elétron esteja faltando em uma distribuição de estados de energia negativa. O estado vazio, de acordo com Dirac, apareceria como uma partícula de energia e carga positiva visto que uma partícula de carga e energia negativa

estava ausente. Esse vazio ("Dirac hole") se comportaria como uma partícula positivamente carregada, assumida inicialmente por ele como sendo um próton; mas identificada posteriormente por Anderson apud VICTOREEN (1948), nos estudos sobre os raios cósmicos, como sendo o pósitron.

As fórmulas para a probabilidade da formação de pares são muito mais complicadas que aquelas para a absorção fotoelétrica e o espalhamento Compton. A mais importante delas utiliza como base a aproximação de Born (DAVISSON & EVANS, 1952), no qual a interação entre o elétron (ou pósitron) e o núcleo é considerada uma pequena perturbação, à qual conservando-se apenas os primeiros termos conduz à uma equação para a seção de choque de criação de um pósitron, com energia total entre E_+ e $E_+ + dE_+$, e um elétron, com energia total entre E_- e $E_- + dE_-$:

$$\begin{aligned} {}_a\kappa_{E_+} dE_+ = & \bar{\phi} \frac{p_+ p_-}{(h\nu)^3} dE_+ \left\{ -\frac{4}{3} - 2E_+ E_- \frac{p_+^2 + p_-^2}{p_+^2 p_-^2} + mc^2 \left(\frac{E_+ \epsilon_-}{p_-^3} + \frac{\epsilon_+ E_-}{p_+^3} - \frac{\epsilon_+ \epsilon_-}{p_+ p_-} \right) \right. \\ & + L \left[\frac{(h\nu)^2}{p_+^3 p_-^3} (E_+^2 E_-^2 + p_+^2 p_-^2) - \frac{8 E_+ E_-}{3 p_+ p_-} - \frac{m^2 c^4 h\nu}{2 p_+ p_-} \left(\frac{E_+ E_- - p_-^2}{p_-^3} \right) \epsilon_- \right. \\ & \left. \left. \left(+ \frac{E_+ E_- - p_+^2}{p_+^3} \epsilon_+ + \frac{2 h\nu E_+ E_-}{p_+^2 p_-^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

onde

$$\begin{aligned} E_- &= h\nu - E_+, \\ \epsilon_+ &= 2 \ln[(E_+ + p_+)/mc^2], \\ \epsilon_- &= 2 \ln[(E_- + p_-)/mc^2], \\ L &= 2 \ln[(E_+ E_- + p_+ p_- + m^2 c^4)/mc^2 h\nu], \\ \bar{\phi} &= Z^2 r_0^2 / 137 \end{aligned}$$

sendo p_+ e p_- o momentum do pósitron e do elétron em unidades de energia.

Enfim, a seção de choque para a produção de pares (${}_a\kappa$) pode ser obtida pela integração da equação (2.25), sobre todos os valores possíveis das energias do pósitron e do elétron. Verificamos que a integração analítica da equação (2.25) é impossível, mas mesmo assim, a seção de choque total para uma dada energia pode ser obtida da área sob as curvas da Figura 2.6, onde, as abcissas são as frações da energia cinética disponível que o elétron ou pósitron recebe (BURLHAM, 1973). A fim de que a área sob as curvas seja de fato a seção de choque total, as ordenadas são os valores de ${}_a\kappa_{E_+}$ em unidades de $\bar{\phi}$, multiplicada pela energia cinética total, $h\nu - 2mc^2$. As curvas para 2 MeV, 5 MeV e 10 MeV, que cobrem todo o intervalo utilizado na geofísica de poço, foram obtidas via equação (2.25).

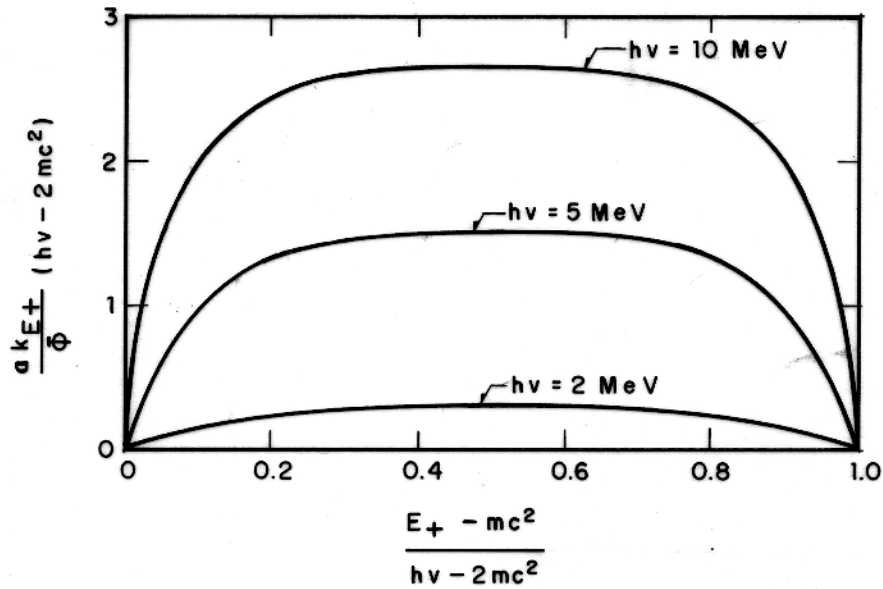


Figura 2.6 - Distribuição de energia para a produção de pares ($\alpha \kappa_{E_+} dE_+$) para energias até 10 MeV (Adaptado de BURLHAM, 1973).

Às baixas energias ($1.022 \leq E_-$ ou $E_+ \leq 3.00\text{MeV}$), a interação entre os elétrons ou pósitrons com o núcleo não são negligíveis, a aproximação de Born não mais se mantém. Como para a maioria dos elementos na formação, o efeito de produção de pares é muito menor que o efeito do espalhamento Compton, às energias usuais, podemos desprezar as correções que se fariam necessárias a um estudo mais completo.

3 - INTERAÇÃO DE NÊUTRONS COM A MATÉRIA

Os processos de interação de nêutrons com a matéria são muito diferentes daqueles referentes à radiação eletromagnética, e necessitam portanto tratamento especial. AMALDI & FERMI (1936) observaram que a radioatividade de certos alvos bombardeados com nêutrons aumentava ao passarem através de um material hidrogenoso. Esta constatação levou-os a conjecturar acerca da dependência entre a probabilidade de uma dada interação e a energia do nêutron incidente. A conversão de nêutrons rápidos em lentos, dada numa fase denominada de *moderação*, em que a energia do nêutron é sistematicamente reduzida, tem sido investigada em grande detalhe, tanto teórica quanto experimentalmente, o que envolve tratamento matemático extremamente complicado, estando por isso, além do alcance deste trabalho (TITTMAN, 1955; BARSCHALL, 1952). Numa fase posterior quando o nêutron tem sua energia reduzida a ponto de atingir o equilíbrio térmico com os átomos do meio, temos a fase de *difusão* (ADAIR, 1950). Assim como no caso dos raios gama, os nêutrons podem interagir com os materiais de várias formas, cada qual com sua probabilidade de ocorrência particular, caracterizada pela seção de choque. Infelizmente, para os nêutrons as interações são muito mais variadas e complexas, como demonstram os esquemas de algumas das diversas seções de choque apresentadas na Figura 3.1, onde os termos serão futuramente esclarecidos.

Para simplicidade nos deteremos apenas naquelas mais importantes para a geofísica de poço - o espalhamento e a absorção. O primeiro refere-se à fase de moderação e será subdividida em duas categorias, os espalhamentos elástico e inelástico. O segundo adquirirá tanto caráter moderador quanto difusor. À semelhança do espalhamento, será conveniente subdividir também o processo de absorção em dois grupos - a captura radiativa e as reações (ELLIS, 1987). Nas próximas seções estudaremos com mais detalhes os fundamentos físicos dos processos acima introduzidos.

3.1 ESPALHAMENTO DE NÊUTRONS

O espalhamento de nêutrons a que se refere este trabalho situa-se em um nível de energia tal que se torna dispensável o tratamento quântico adotado para o estudo dos processos de

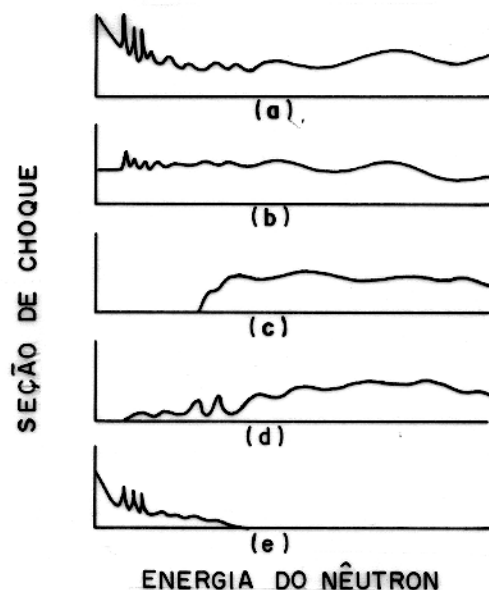


Figura 3.1 - Ilustração esquemática das variações da seção de choque total com a energia e quatro das suas componentes: (a) Seção de choque total, (b) Espalhamento elástico, (c) Espalhamento inelástico, (d) Reações, (e) Captura radiativa (Adaptada de ELLIS, 1987).

interação da radiação eletromagnética com a matéria (TITTMAN, 1955). Isto implica em grande simplificação para os cálculos se tomarmos como base o quadro clássico das colisões tipo *bolas de bilhar*, onde a matemática necessária não vai além da trigonometria e do cálculo elementar (ELLIS, 1987).

3.1.1 Espalhamento Elástico

A quantidade de energia que um nêutron perde em uma colisão simples pode ser calculada solucionando a equação da conservação da energia e momentum do nêutron após a colisão. Entretanto para facilitar os cálculos introduziremos um método que além de muito simples, ilustrará algumas idéias úteis ao tratamento das colisões nucleares (ELLIS, 1987). Este método envolve dois sistemas de referências: o sistema de centro de massa (C.M.) e o sistema de laboratório (S.L.). No C.M., o centro de massa do nêutron e do núcleo é considerado como estando em repouso e ambos, o nêutron e o núcleo, aproximam-se dele com as velocidades mostradas na Figura 3.2(a). No S.L., o núcleo alvo está em repouso antes da colisão e o nêutron aproxima-se dele com uma velocidade v_0 , conforme mostra a Figura 3.2(b), e o centro de massa entre o nêutron e o núcleo estacionário move a uma velocidade dada por

$$V_c = v_0 \frac{m}{M + m}, \quad (3.1)$$

onde m e M são respectivamente as massas do nêutron e do núcleo alvo.

Introduzidas as simplicidades do método, o que se propõe é descrever todo o processo do

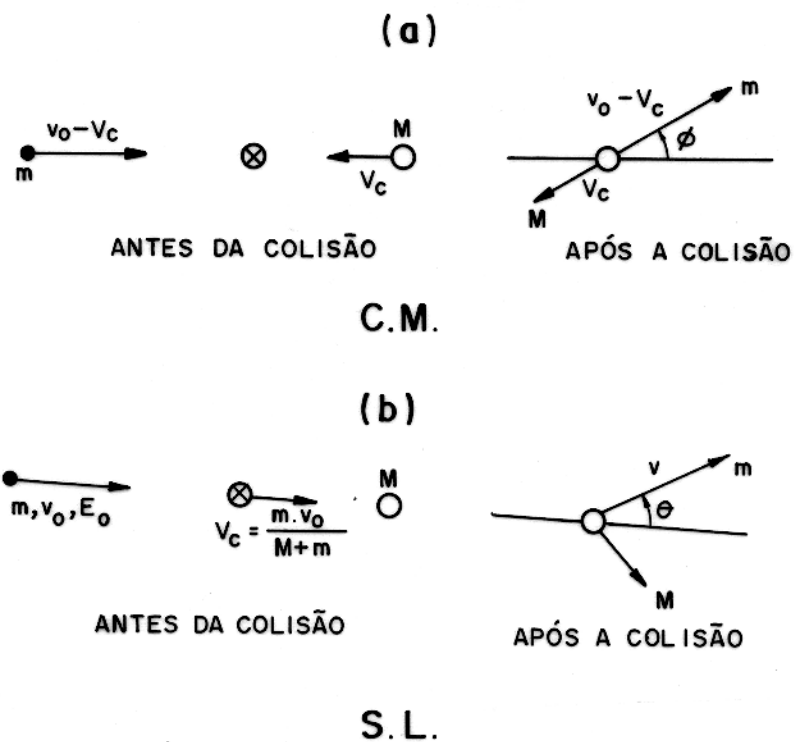


Figura 3.2 - (a) Reação de espalhamento sugerido pelo sistema de centro de massa C.M e (b) a mesma reação sob a perspectiva do sistema de laboratório S.L. (Adaptado de ELLIS, 1987).

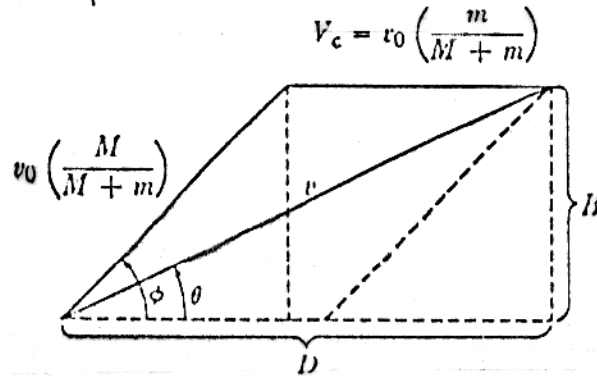


Figura 3.3 - Relação entre o ângulo de espalhamento no sistema de centro de massa (C.M.) e aquele no sistema de laboratório (S.L.) (Adaptado de TITTMAN, 1986).

ponto de vista do observador movendo-se com o centro de massa e depois transformado de volta para o sistema de laboratório. No C.M., antes da colisão, o nêutron move-se para a direita com velocidade

$$v_0 - V_c = v_0 \frac{M}{M + m} \quad (3.2)$$

e o núcleo para a esquerda com velocidade V_c . O momentum total será calculado sem dificuldades como sendo

$$m \left(\frac{M v_0}{M + m} \right) - M \left(\frac{m v_0}{M + m} \right) = 0 \quad (3.3)$$

visto que o momentum é uma grandeza vetorial e a velocidade do núcleo é oposta à direção da velocidade do nêutron. Após a colisão, o nêutron move a um ângulo ϕ com a direção inicial. Visto que o momentum total deve ser conservado, seu valor deve ser zero após a colisão, e o núcleo se afasta a um ângulo $(180^\circ + \phi)$ com a direção do nêutron incidente. O fato de que o momentum é zero no C.M. antes e após a colisão, torna sua aritmética muito mais simples do que no S.L., pois o observador verá apenas uma mudança nas direções do nêutron e do núcleo movendo-se em direções opostas. Na colisão elástica a energia cinética também é conservada. Para tal, as velocidades das partículas no C.M. devem ser as mesmas que elas possuíam antes da colisão, senão haveria uma mudança na energia cinética total das duas partículas. Conclui-se, dessa forma, que o efeito total no C.M. é alterar as direções das velocidades mas não suas magnitudes (TITTMAN, 1986).

De acordo com a Figura 3.2, no S.L. tanto as magnitudes quanto as velocidades são alteradas, e as direções não são mais opostas. O nêutron espalhado através de um ângulo θ tem a velocidade v , que é a soma vetorial da velocidade do nêutron no C.M. e a velocidade do centro de massa.

Para o caso geral, a velocidade do nêutron após a colisão pode ser encontrada como uma função de ϕ , aplicando a lei dos cossenos para o esquema da Figura 3.3 (ELLIS, 1987):

$$v^2 = v_0^2 \left(\frac{M}{M+m} \right)^2 + v_0^2 \left(\frac{m}{M+m} \right)^2 + 2v_0^2 \left(\frac{M}{M+m} \right) \left(\frac{m}{M+m} \right) \cos \phi. \quad (3.4)$$

A razão da energia do nêutron após a colisão E , e antes dela E_0 , será

$$\frac{E}{E_0} = \frac{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \phi}{(M+m)^2}. \quad (3.5)$$

Adotando valor unitário para a massa do nêutron teremos para a razão M/m , o valor A , identificado como o número de massa do núcleo alvo. Assim, a expressão (3.5) torna-se

$$\frac{E}{E_0} = \frac{A^2 + 1 + 2A \cos \phi}{(A+1)^2} \quad (3.6)$$

e por conveniência expressaremos a razão de energias em termos da quantidade r , definida por

$$r = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2 \quad (3.7)$$

que é uma medida da energia máxima que o nêutron pode perder em uma colisão simples. Reescrevendo a equação (3.6) em função de r temos

$$\frac{E}{E_0} = \frac{1+r}{2} + \frac{1-r}{2} \cos \phi. \quad (3.8)$$

Analisando a equação (3.8), percebemos que a maior perda de energia ocorre para $\phi = 180^\circ$, quando $\cos \phi = -1$, e $E = rE_0$ e a menor, quando o nêutron apenas resvala o núcleo sem perder nenhuma energia, pois teremos neste caso, $\phi = 0$, $\cos \phi = 1$ e $E = E_0$.

3.1.2 Espalhamento Inelástico

No caso do espalhamento inelástico, uma parte da energia do nêutron incidente é empregada como energia de excitação do núcleo alvo (BARSCHALL, 1952). Isto significa uma redução na energia do nêutron incidente. O núcleo geralmente produz um ou mais raios gama característicos após a desexcitação. Este tipo de interação tem uma energia limiar abaixo da qual nenhuma reação ocorrerá. Esta energia corresponde ao primeiro estado de excitação do núcleo alvo (ADAIR, 1950).

Em suma, podemos definir o espalhamento inelástico como aquele passível de ocorrência apenas quando o nêutron incidente possuir energia cinética suficiente para elevar o núcleo a

um dos seus estados excitados. As seções de choque inelásticas crescem abruptamente acima deste limiar de energia e a partir daí, resultam constantes até que outros processos de reação se tornem energeticamente possíveis e passam a competir para a seção de choque total.

3.2 ABSORÇÃO DE NÊUTRONS

No processo de absorção, detectamos o desaparecimento do nêutron. As transmutações subsequentes obedecem certas leis de probabilidade condicionadas pela energia do nêutron incidente e pelo estado energético do núcleo alvo no momento da interação.

3.2.1 Captura Radiativa

Diferentemente das interações moderadoras representadas pelo espalhamento, na captura radiativa o nêutron é absorvido pelo núcleo alvo, formando um núcleo composto que apresentará uma energia de excitação igual a energia de ligação do nêutron acrescida de sua energia cinética (AMALDI & FERMI, 1936).

Quando a soma da energia de ligação do nêutron extra e sua energia cinética cai dentro da largura de um nível de energia de excitação do núcleo composto, a probabilidade de formação desse núcleo cresce vertiginosamente (ADAIR, 1950), resultando em um aumento da seção de choque ou ressonância do processo associado com o decaimento.

Quando o núcleo composto passa ao estado fundamental ele emite raios gama característicos. Embora a reação por captura radiativa possa ocorrer a todas as energias, a probabilidade da reação é normalmente proporcional ao intervalo de tempo que o nêutron gasta nas proximidades do núcleo. Portanto, a seção de choque para a captura de nêutrons varia geralmente com $(1/v)$, e é mais significativa para nêutrons de baixas energias ou térmicos.

3.2.2 Reações

Esta categoria é bastante ampla e complicações têm surgido através de processos competitivos de reações seguidas de emissão de partículas Alfa, Beta e mesmo de outros nêutrons (ELLIS, 1987). Diferente do processo de absorção por captura radiativa onde o núcleo composto passa ao estado fundamental pela simples emissão de radiação eletromagnética, neste caso ele emite partículas sob várias condições de energia e momento angular (ADAIR, 1950). Estes processos serão competitivos e ocorrerão na proporção de suas respectivas probabilidades de transição.

4 - DETECÇÃO DE FÓTONS POR CINTILAÇÕES

Existem numerosas técnicas de detecção de radiação gama que utilizam um efeito específico da interação entre os quanta gama e a matéria, dentre os quais destacam-se a formação de transportadores de carga livre em sólidos e gases (camaras de ionização, contadores Geiger, semicondutores, etc.) e a excitação de átomos com subsequente emissão de luz (contadores a cintilação, reações químicas em certos tipos de gases, etc.) (KOGAN et al., 1971). Neste trabalho nos deteremos apenas no detector a cintilação NaI ativado por Tálcio, caso específico do sistema de contagem constituído de um cintilador e uma fotomultiplicadora, vastamente utilizado nos trabalhos de perfilagem de poço.

O cintilador consiste de materiais que emitem luz após a excitação dos seus átomos. O mecanismo de emissão de fótons em materiais cintiladores é um processo complexo, subsequente à formação de transportadores de carga livre (elétrons e pósitrons).

Sabemos que quando um fóton interage com a matéria o mesmo cede aos elétrons toda ou parte de sua energia. Os elétrons vão sendo freiados e por consequência vão ionizando os átomos. O conjunto de estados criados pela degradação da energia inicial dos fótons é instável e o retorno ao estado de equilíbrio poderá ser feito segundo diversos processos, em particular pela emissão de um fóton de baixa energia (Raio-X). Assim, em um cintilador ocorre uma conversão da energia das ondas eletromagnéticas - um quantum de energia $h\nu_0$ é transferido para N fótons de energia média $h\bar{\nu}$. A razão $Nh\bar{\nu}/h\nu_0$, denominada *eficiência da curva quântica*, geralmente não excede 10% (KOGAN et al., 1971).

Se uma parte importante e suficientemente constante dessa energia encontra-se no intervalo da luz visível e a substância em questão é transparente a este tipo de radiação, podemos considerá-la um *cintilador*.

Para constituir um detector a cintilação acopla-se opticamente um certo volume de cintilador e um elemento fotoelétrico, Figura 4.1, de maneira a recolher um impulso cada vez que um sinal luminoso é produzido pela passagem do fóton. O elemento fotoelétrico universalmente empregado é a fotomultiplicadora, que é constituída por uma célula fotoelétrica incorporada a um multiplicador de elétrons. Tanto a célula quanto o multiplicador são cuidadosamente armazenados dentro de um tubo a vácuo herméticamente fechado.

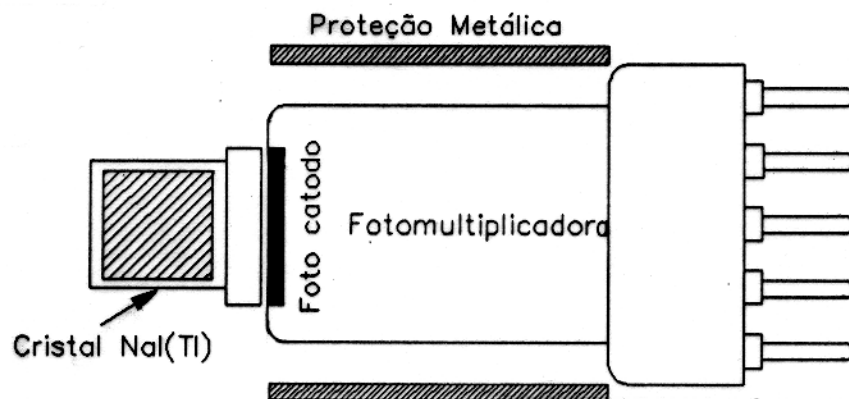


Figura 4.1 - Sistema de detecção de fótons mostrando o cristal NaI, a câmara fotomultiplicadora e o contacto óptico feito através da célula fotoelétrica ou fotocátodo (Adaptado de BURLHAM, 1973).

4.1 EFICIÊNCIA DE DETECÇÃO E AÇÃO FOTOMULTIPLICADORA

A eficiência de detecção do cristal NaI(Tl) é evidentemente proporcional ao volume do cintilador e ao rendimento luminoso que condiciona a relação sinal-ruído da cadeia de contagem. Existe contudo uma limitação na taxa de contagem, visto que a emissão luminosa não é instantânea, pois provém da desexcitação dos estados. Podemos constatar que depois de uma interação o fluxo luminoso emitido segue, em função do tempo, uma lei exponencial decrescente,

$$\phi = \phi_0 e^{-\lambda t} \quad (4.1)$$

onde a constante λ é característica do material cintilador que define a duração mínima dos impulsos recolhidos, limitando a taxa máxima de contagem admissível.

A radiação dos cintiladores é contínua, a banda de frequência espectral cai nas regiões violeta e ultravioleta com uma largura média de $10^3 \text{ \AA}$ (KOGAN et al., 1971). O tempo de luminescência é de 10^{-3} a 10^{-9} segundos e o número médio de fótons gerados no cintilador é aproximadamente proporcional à quantidade de energia absorvida, constituindo de $10^4 - 10^5$ fótons / MeV.

Em suma, a eficiência total de um detector $\varepsilon(E)$ é definida como sendo a probabilidade de registrar um quantum gama de energia E em função do ponto em que ele passa. Esta probabilidade pode ser vista como o produto de três medidas de eficiências parciais:

$$\varepsilon = \varepsilon_a(E) \cdot \varepsilon_c(E) \cdot \varepsilon_t(E). \quad (4.2)$$

A *eficiência de absorção da energia do fóton* $\varepsilon_a(E)$ é a razão entre a energia absorvida do fóton e a energia do fóton incidente. Uma alta $\varepsilon_a(E)$ é preferida por duas razões: primeiro, o detector deve absorver a maior parte da energia do fóton incidente a fim de produzir uma eficiência a mais alta possível; segundo, uma alta $\varepsilon_a(E)$ resulta em uma taxa de interação maior, reduzindo o ruído estatístico. A taxa de interação é proporcional a $\varepsilon_a(E)$. Como a estatística de *poisson* governa a detecção de radiação, a razão sinal-ruído é proporcional a raiz quadrada da taxa de interação, isto é

$$\begin{aligned} N &\propto \varepsilon_a(E) \\ \text{sinal/ruído} &\propto N/\sqrt{N} = \sqrt{N} \end{aligned} \quad (4.3)$$

portanto, detecção com alta $\varepsilon_a(E)$ resulta numa razão sinal / ruído mais alta para um dado tempo de exposição (SHAO et al., 1991).

A *eficiência de conversão luminosa* $\varepsilon_c(E)$, ou *eficiência quântica* como é algumas vezes denominada, é a razão entre a energia da luz gerada por cintilação e a energia do fóton absorvido. Finalmente, a *eficiência de transmissão* $\varepsilon_t(E)$ é tida como a razão entre a energia luminosa de saída e a energia da luz gerada por cintilação.

A conversão dos *flashes* de luz produzidos pelo cintilador em pulsos de corrente elétrica é feita por meio da fotomultiplicadora. Ela consiste de um fotocátodo, um sistema de emissores (dinodos) e um ânodo coletor encerrados num tubo a vácuo. O contacto óptico entre o cintilador e a fotomultiplicadora se dá através do fotocátodo e sua utilização visa assegurar que uma porção considerável dos fótons incida sobre a superfície do fotocátodo.

O mecanismo de conversão das cintilações em pulsos de corrente, depende da transferência total ou parcial de sua energia para os elétrons do fotocátodo. Se esta energia exceder a função trabalho, existirá certa probabilidade de que o elétron seja ejetado do fotocátodo. Devido ao efeito do campo elétrico, este elétron cai no primeiro dinodo e libera elétrons secundários de sua superfície. Estes elétrons secundários caem no segundo dinodo liberando mais elétrons e assim por diante. Os elétrons do último dinodo são coletados pelo ânodo na extremidade oposta da câmara fotomultiplicadora. A taxa de emissão secundária está situada entre 2 e 3. Se o número de dinodos é 12, o fator de multiplicação é de $10^5 - 10^6$. Isto significa que para cada elétron ejetado da superfície do fotocátodo corresponde de $10^5 - 10^6$ elétrons na saída da fotomultiplicadora (KOGAN et al., 1971).

A produção de elétrons secundários depende da energia dos elétrons primários e é determinada pela voltagem entre os dinodos. Inicialmente o campo cresce com o aumento da energia, podendo atingir no caso de um dinodo de Antimoniato de Césio, um valor máximo de 350-400 eV.

É importante ressaltar que mesmo na ausência de cintilações, pulsos de pequena amplitude são observados na saída da fotomultiplicadora devido à emissão térmica de elétrons pelo fotocátodo.

4.2 PODER DE RESOLUÇÃO DE ENERGIA

Os fótons são em grande parte absorvidos no próprio material do cintilador. O espectro dos fótons deixando o cintilador diferem do espectro de fótons gerados, visto que o caráter estatístico de sua geração e absorção está sujeito às flutuações estatísticas que operam a nível da emissão luminosa, da retirada de elétrons do fotocátodo e da multiplicação de elétrons na câmara fotomultiplicadora. Elas dizem respeito tanto ao número de fótons emitidos pelo cintilador no intervalo de tempo Δt , correspondente ao tempo de transição do átomo de um estado excitado para o estado fundamental, quanto ao número total de fótons gerados quando um quantum gama de energia E_0 passa através do cintilador (KOGAN et al., 1971).

Para um grande número de experimentos, podemos obter dados acerca da probabilidade $P(N, E_0)$ com a qual o número de fótons N deixando o cintilador, atingido por um quantum gama de energia E_0 , caia no intervalo $N, N + \Delta N$;

$$P(N, E_0) = f(N, E_0) \Delta N. \quad (4.4)$$

A função de densidade $f(N, E_0)$ depende obviamente da localização da área superficial ds onde o fóton incide e da direção do mesmo. Isto exige redefinir a função de densidade pela expressão $f(N, E_0, \varphi)$, sendo φ a direção de incidência do referido fóton.

A resolução do cintilador R_c é definida de acordo com a forma da função $f(N, E_0, \varphi)$ em um intervalo de valores de N , correspondente ao fotoefeito do fóton no cintilador quando $\varphi = 0$; e mede, basicamente, a facilidade de se discriminar pulsos próximos.

Suponha que $f(N, E_0, 0)$ atinga o máximo valor em $N = N_0$, enquanto que para N_1 e N_2 a função de densidade se iguala, Figura 4.2.

Podemos observar que

$$f(N_1, E_0, 0) = f(N_2, E_0, 0) = \frac{1}{2} f(N_0, E_0, 0) \quad (4.5)$$

e por definição

$$R_c(\%) = \frac{|N_1 - N_2|}{N_0} 100 \quad (4.6)$$

que é o parâmetro básico de um cintilador.

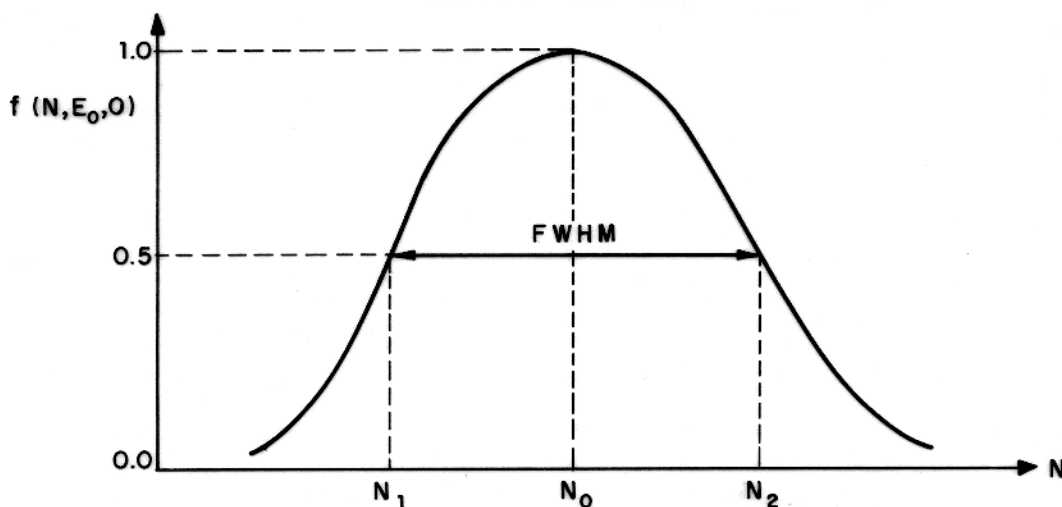


Figura 4.2 - Função de densidade e resolução em energia mostrada como a largura do pico à meia altura. Na abcissa temos o número de fótons deixando o cintilador e na ordenada a função de densidade dos fótons com incidência normal.

Adicionalmente devemos alertar para as características espectrais da fotomultiplicadora. A resolução em energia da fotomultiplicadora R_m determina a largura da curva de distribuição da amplitude dos pulsos elétricos de saída, devido a *flashes* de luz de mesma intensidade. R_m pode ser determinado de forma análoga a R_C e sua magnitude está, em geral, compreendida entre 3 e 10 %, para amplitudes de energias dos fótons da ordem de 0.66 MeV (Cs^{137}).

A resolução do detector R será por sua vez definida pela expressão

$$R = \frac{\Delta_{1/2}}{E_0} = (R_c^2 + R_m^2)^{1/2} \quad (4.7)$$

onde $\Delta_{1/2}$ ou FWHM é a largura do pico à meia altura.

4.3 ESPECTROMETRIA GAMA A CINTILAÇÃO

Os cintiladores utilizados para espectrometria, como é o caso do cristal de *Iôdeto de Sódio ativado com Tálho*, devem ter seções eficazes fotoelétrica e de absorção total elevadas e com o maior rendimento luminoso possível. A sua propriedade principal é a de fornecer uma quantidade de luz rigorosamente proporcional à energia dissipada pelos raios gama incidentes.

Se a função de transferência *luz - corrente* da fotomultiplicadora for linear, podemos obter impulsos elétricos de saída cuja amplitude é proporcional à energia perdida pelos fótons no

cintilador. Se colocarmos uma fonte gama monoenergética diante de um espectrômetro a cintilação, podemos observar que os impulsos obtidos não possuem todos a mesma amplitude, pois eles são produzidos por tipos diferentes de interação. Quando classificamos os impulsos segundo um histograma *amplitude x frequência*, o perfil obtido é denominado *espectro*.

4.4 ESTRUTURA DO ESPECTRO DE UMA FONTE GAMA MONOENÉRGICA

A distribuição dos pulsos elétricos de saída devido a quanta gama monoenergéticos é denominada linha instrumental $g(E', E)$ do detector a cintilação, onde E' é a energia ou amplitude do pulso na escala do espectrômetro. Ela é determinada por uma associação complexa envolvendo parâmetros geométricos de ambos, o fóton incidente e o detector.

Se a linha instrumental do detector NaI(Tl) é conhecida, juntamente com o efeito devido ao campo de radiação gama $\Phi(E)$, a distribuição de amplitude dos pulsos pode ser calculada pela expressão

$$n(E') = \int_0^{E_{max}} g(E', E) \Phi(E) dE \quad (4.8)$$

de tal forma que o número de pulsos registrados no intervalo de energia $\Delta E'$ na escala do espectrômetro será

$$N = \int_{\Delta E'} n(E') dE'. \quad (4.9)$$

Notemos que a densidade de distribuição do número de pulsos $n(E', E_\beta)$ na saída da fotomultiplicadora devido a elétrons monoenergéticos, tem as características estatísticas dos processos que ocorrem no cintilador e na fotomultiplicadora. Já a densidade de distribuição de elétrons secundários $L(E_\beta)$ ou de energia depositada, assume perfeita resolução (espectro ideal), pois o mesmo não contém as características do detector. Nas expressões acima, E_β e E são a energia absorvida pelos elétrons do cintilador e a energia do fóton incidente, respectivamente (KOGAN et al., 1971).

O número de pulsos, considerando o efeito da resolução em energia do detector sobre o espectro ideal, pode ser modelado envolvendo os dados perfeitos com a distribuição gaussiana

$$n(E', E_\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(E_\beta)} e^{-\frac{(E' - E_\beta)^2}{2\sigma^2(E_\beta)}} \quad (4.10)$$

onde $\sigma^2(E_\beta)$ é a variância da distribuição de elétrons.

A convolução acima citada resulta na linha instrumental

$$g(E', E) = \int_0^{E_\beta} n(E', E_\beta) L(E_\beta, E) dE_\beta \quad (4.11)$$

A magnitude da variância σ^2 ou do desvio padrão σ , depende da energia incidente E e pode ser determinada empiricamente por

$$\sigma(E) = A\sqrt{E} + BE \quad (4.12)$$

onde A e B são constantes determinadas experimentalmente, diferindo de um detector para outro. Contudo, para energias incidentes $E \leq 3.0\text{MeV}$, pode-se demonstrar que $\sigma^2(E_\beta)$ é determinado com boa precisão pela expressão abaixo (KOGAN et al., 1971)

$$\sigma^2(E_\beta) = \alpha E_\beta \quad (4.13)$$

O parâmetro α é relacionado unicamente à resolução em energia do detector, ou seja

$$R = \frac{\Delta_{1/2}}{E} = \frac{2\sqrt{2\alpha \ln 2}}{\sqrt{E}} = \frac{2.36\sqrt{\alpha}}{\sqrt{E}} \quad (4.14)$$

Sendo o desvio padrão dado por

$$\sigma(E_\beta) = \sqrt{\alpha} \sqrt{E_\beta} \quad (4.15)$$

obtemos finalmente uma expressão para o desvio padrão da distribuição de elétrons

$$\sigma(E_\beta) = R\sqrt{E \cdot E_\beta}/2.36 \quad (4.16)$$

A Figura 4.3 mostra o resultado da convolução dada pela equação (4.11) para $E = 3.00\text{MeV}$ e um cristal NaI(Tl). O pico A de absorção total é constituído pelo grupo de impulsos de maior amplitude e forma o fotopico. Ele corresponde aos fótons que transmitiram toda sua energia ao cintilador, através de uma (efeito fotoelétrico) ou mais etapas (efeito Compton seguido de absorção fotoelétrica). Para baixas e médias energias ele é quase que exclusivamente devido ao efeito fotoelétrico.

A parte do espectro compreendida entre O e B corresponde às difusões Compton em todos os ângulos possíveis.

O pico C de retrodifusão, nem sempre visível na linha instrumental, aparece sempre que um fóton gama faz uma interação Compton no material próximo ao detector e o mesmo não produz nenhum sinal. Entretanto, quando o gama espalhado é detectado, observamos um impulso cuja amplitude depende do ângulo de difusão. Todo o processo se deve principalmente à estrutura geométrica do detector e também porque o detector é mais eficaz quando $h\nu'$ é pequena. O pico de retrodifusão é devido quase sempre aos fótons reemitidos a um ângulo $\phi = \pi$. A relação a seguir pode ser estabelecida para as energias do espectro

$$E(A) = E(B) + E(C). \quad (4.17)$$

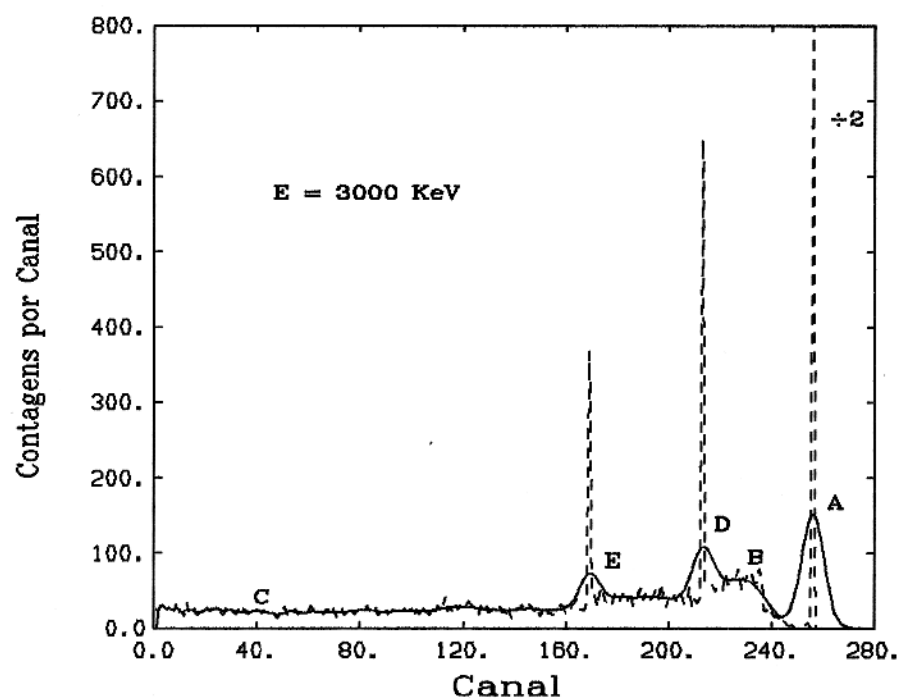


Figura 4.3 - Estrutura do espectro de uma fonte gama monoenergética. A linha cheia mostra o efeito da resolução em energia sobre o espectro ideal, dada pela linha tracejada e é denominada de linha instrumental. O pico A de absorção total tem sua amplitude reduzida à metade.

Uma parte importante do espectro origina-se do efeito formação de pares. Sua ocorrência é muito provável quando $E_\gamma \geq 1.022\text{MeV}$, aparecendo em vários casos. Quando o efeito se produz dentro do cintilador e os dois raios gama produzidos são absorvidos no material do cintilador, o impulso obtido se encontra no pico de absorção total (pico A). Se o efeito é ainda produzido dentro do cintilador mas um dos raios gama de aniquilação escapa, podemos observar um pico a 511 KeV abaixo do fotopico (pico D). Quando os dois raios gama de aniquilação escapam do cristal, observamos o pico E, situado 1022 KeV abaixo do pico de absorção total. Finalmente, quando o efeito de criação de pares se faz fora do cintilador, podemos detectar pelo menos um raio gama de aniquilação, caso haja a incidência de um deles no cristal.

De igual importância são os quanta de raios-X produzidos pela interação fotoelétrica com os átomos de iôdo do cristal. Estes raios-X têm uma energia de cerca de 28.0 KeV e uma fração deles pode escapar do cristal. Isto leva a uma assimetria na forma do fotopico. Quando os valores da energia do fóton é baixo, dois fotopicos aparecem com energias E e E - 28 KeV.

É importante ressaltar que a forma final do espectro pode ser influenciada por vários fatores: tamanho do cristal cintilador, energia do fóton incidente, etc. A Figura 4.4 mostra os efeitos que as dimensões do cristal têm sobre o espectro final, para uma fonte de Cs^{137} com $E = 0.662 \text{ MeV}$.

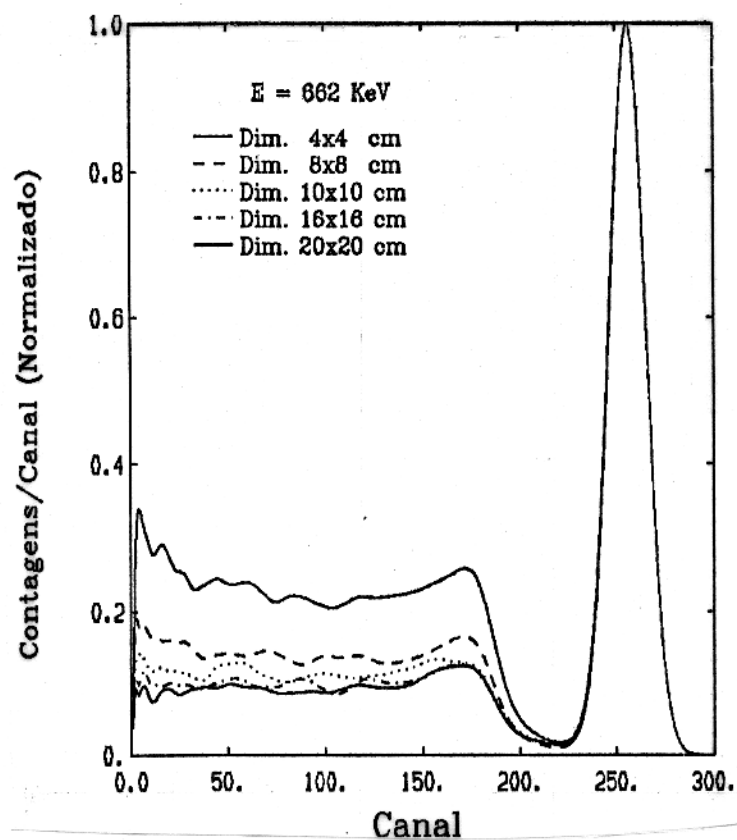


Figura 4.4 - Efeito da dimensão do cristal NaI(Tl) sobre o espectro gerado por uma fonte gama monoenergética. Todas as curvas foram normalizadas pelas taxas de contagens do canal 256, correspondente ao fotopico.

5 - TRANSPORTE DE RADIAÇÃO

A equação de transporte, no estado estacionário, à qual se refere o anexo I, trata-se da equação de transporte de Boltzmann monoenergética, no espaço de fase, para um sistema heterogêneo sem multiplicação,

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega) + \Sigma_T(\mathbf{r}, \Omega) \Psi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{s^2} N_s(\mathbf{r}) \sigma_s(\Omega \cdot \Omega') \Psi(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega' + S(\mathbf{r}, \Omega), \quad (5.1)$$

onde Ω é o vetor unitário direção, $\mathbf{r}$ o vetor espacial e $\Psi(\mathbf{r}, \Omega)$ o fluxo angular (BARRY & POLLARD, 1982). A seção de choque total é dada por $\Sigma_T(\mathbf{r}, \Omega) = N_a(\mathbf{r}) \sigma_a(\Omega) + N_s(\mathbf{r}) \sigma_c(\Omega)$, onde $N_a(\mathbf{r})$ e $N_s(\mathbf{r})$ são as densidades de absorvedores e espalhadores presentes na formação. A seção de choque diferencial microscópica $\sigma_s(\Omega \cdot \Omega')$, dá a probabilidade de espalhamento de nêutrons ou fótons da direção Ω' diretamente para a direção atual Ω .

5.1 REDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

A redução da equação de transporte de Boltzmann desenvolvida neste trabalho consiste, basicamente, em expandir as distribuições da fonte e do fluxo diferencial em harmônicos esféricos do cosseno do ângulo θ , entre a direção Ω e uma direção coordenada principal qualquer x (ETHERINGTON, 1958). Antes, porém, definiremos o fluxo escalar como sendo:

$$\Phi(x) = \int_{\Omega} \Psi(x, \Omega) d\Omega. \quad (5.2)$$

Em acordo com o cálculo avançado, as expansões do fluxo angular e da fonte serão dadas, respectivamente, por

$$\Psi(x, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \Phi_l(x) P_l(\mu) \quad (5.3)$$

$$S(x, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} S_l(x) P_l(\mu), \quad (5.4)$$

onde os $P_l(\mu)$, são os polinômios ortogonais de Legendre.

Consideremos a equação (5.1) no caso em que $S(\mathbf{r}, \Omega)$ e $\Sigma_T(\mathbf{r}, \Omega)$ dependem apenas da coordenada x de $\mathbf{r} = (x, y, z)$ e do ângulo θ . Da mesma forma, o fluxo será função apenas da coordenada x e de θ ; $\Psi(\mathbf{r}, \Omega) = \Psi(x, \mu)$, onde $\mu = \cos \theta$.

As distribuições da fonte e do fluxo são, então, consideradas rotacionalmente invariantes com respeito a direção x , e tanto o fluxo quanto $S(x, \Omega)$ e $\Sigma_T(x)$ não mudarão com o ângulo azimutal φ , desde que para tal, admitamos que a solução é única ou que o problema está bem formulado. Para este caso, $\nabla \Psi = (\frac{d\Psi}{dx}, 0, 0)$ e temos

$$\Omega \cdot \nabla \Psi = \cos \theta \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \mu \frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (5.5)$$

O raio onde medimos o azimute φ é $\sin \theta$ ($0 < \theta < \pi$). Portanto, $d\Omega = \sin \theta d\varphi d\theta$ e como $d\mu = d(\cos \theta) = -\sin \theta d\theta$, segue

$$d\Omega = -d\varphi d\mu. \quad (5.6)$$

Substituindo as equações (5.5) e (5.6) em (5.1) temos, para o caso monoenergético

$$\mu \frac{d\Psi(x, \mu)}{dx} + \Sigma_T(x) \Psi(x, \mu) = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 N_s(x) \sigma_s(\mu, \mu') \Psi(x, \mu') d\varphi d\mu + S(x, \mu). \quad (5.7)$$

A seção de choque $\sigma_s(\mu, \mu')$ é também expandida em harmônicos do cosseno do ângulo α entre as direções das partículas incidente e espalhada, $\mu_0 = \cos \alpha$:

$$\sigma_s(\mu_0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \sigma_l P_l(\mu_0) \quad -1 \leq \mu_0 \leq 1, \quad (5.8)$$

onde

$$\sigma_l = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0) P_l(\mu_0) d\mu_0. \quad (5.9)$$

Estas séries podem ser concentradas em uma expansão de μ, μ' e $\varphi - \varphi'$, utilizando o teorema de adição dos polinômios de Legendre (NOWOSAD, 1978),

$$P_l(\mu_0) = P_l(\mu) P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi'), \quad (5.10)$$

onde $P_l^m(\mu)$ são os polinômios de Legendre associados.

Substituindo a equação (5.10) em (5.8), temos

$$\sigma_s(\mu_0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \sigma_l \left[P_l(\mu) P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi') \right]. \quad (5.11)$$

Se levarmos agora a equação (5.11) em (5.7) e integrar em relação a φ' , de 0 a 2π , é óbvio que todos os termos com P_l^m se anulam, devido ao fator $\cos m(\varphi - \varphi')$, restando então

$$\mu \frac{d\Psi(x, \mu)}{dx} + \Sigma_T(x) \Psi(x, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{2l+1}{2} N_s \sigma_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu) \right]. \quad (5.12)$$

Esta aproximação da solução é conhecida como aproximação P_l . Após multiplicar P_l por cada harmônico esférico P_n e integrar o resultado entre -1 e +1, tendo-se observado as propriedades de ortogonalidade apresentadas pelos polinômios de Legendre, obteremos uma série de $n + 1$ equações diferenciais de 1ª ordem.

5.1.1 A Aproximação P_1

Na aproximação P_1 , é assumido que, nas expansões, a contribuição dos termos após os dois primeiros são negligíveis (ETHERINGTON, 1958). Estas considerações significam que o meio é fracamente absorvedor e que os harmônicos de ordem superior, expressam efeitos transientes próximos das fronteiras. Assim, a aproximação P_1 exige que a região em estudo esteja vários livres percursos médios distantes de quaisquer fronteiras.

No entanto, verificamos que a ortogonalidade dos P_l não dá uma relação imediata ao substituímos as equações (5.3) e (5.4) em (5.12), por causa do fator μ no primeiro termo. Contudo, podemos como alternativa, usar as propriedades adicionais de ortogonalidade apresentadas pelos polinômios de Legendre

$$\int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) P_l(\mu) d\mu = \begin{cases} 0 & \text{se } l \neq n + 1, \\ \frac{n+1}{2n+1} \frac{2}{2(n+1)+1} & \text{se } l = n + 1. \end{cases} \quad (5.13)$$

Multiplicando a equação (5.12) por P_n , $n = 0, 1$ sucessivamente, integrando de -1 a +1, obtemos, observada a relação anterior e lembrando que do cálculo avançado $P_0(\mu) = 1$ e $P_1(\mu) = \mu$,

$$\frac{d\Phi_1(x)}{dx} + \Sigma_T(x)\Phi_0(x) = N_s\sigma(x)\Phi_0(x) + S_0(x) \quad \text{para } n = 0, \quad (5.14)$$

$$\frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \mu P_1(\mu) \Psi(x, \mu) d\mu = N_s\sigma_1(x)\Phi_1(x) + S_1(x) \quad \text{para } n = 1. \quad (5.15)$$

Considerando ainda a hipótese de que a fonte não se altera com uma simples mudança de sentidos, ou seja, $S(x, \Omega) = S(x, -\Omega)$, podemos escrever que $\sigma_0 = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0) d\mu_0 = \sigma_s$, e ainda

$$S_1(x) = \int_{-1}^1 \mu S(x, \mu) d\mu = 0. \quad (5.16)$$

Fazendo uso da equação (5.13) na integral da equação (5.15) para $n = 1$, e considerando apenas os dois primeiros termos da expansão de $\Psi(x, \mu)$, obtemos

$$\frac{d\Phi_1(x)}{dx} + \Sigma_a(x)\Phi_0(x) = S_0(x) \quad \text{para } n = 0, \quad (5.17)$$

$$\frac{1}{3} \frac{d\Phi_0(x)}{dx} - [\Sigma_T(x) - N_s\sigma_1(x)]\Phi_1(x) = 0 \quad \text{para } n = 1. \quad (5.18)$$

As duas equações resultantes podem ser combinadas em uma equação simples para a componente isotrópica do fluxo. Para isto, basta eliminar $\Phi_1(x)$, obtendo como resultado, a aproximação de difusão da equação de transporte original:

$$\frac{d}{dx} \left[D(x) \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \right] - \Sigma_a(x) \Phi_0(x) + S_0(x) = 0, \quad (5.19)$$

onde $D(x)$ é o coeficiente de difusão, dado por

$$D(x) = \frac{1}{3[\Sigma_T(x) - N_s \sigma_1(x)]}. \quad (5.20)$$

No caso geral de três dimensões, a aproximação de difusão é obtida de forma análoga,

$$\nabla \cdot [D(\mathbf{r}) \nabla \Phi_0(\mathbf{r})] - \Sigma_a(\mathbf{r}) \Phi_0(\mathbf{r}) + S_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (5.21)$$

onde S_0 é a densidade total de nêutrons e/ou raios- γ da mesma energia que os de Φ_0 , produzidos por fontes externas.

5.1.2 Equação de Difusão para Multigrupos

Para o caso geral de difusão para multigrupos, supomos que as energias dos nêutrons e/ou raios- γ estão distribuídas em um número finito de grupos, dentro dos quais são constantes as propriedades físicas do meio. Para descrever esta aproximação, partimos o intervalo de energia $[E_0, E_G]$ em G subintervalos $I_g = [E_{g-1}, E_g]$, $g = 1, 2, \dots, G$ tal que, $E_0 > E_1 > E_2 > \dots > E_G$ com $\max_{1 \leq g \leq G} |E_{g-1} - E_g| \rightarrow 0$ quando $G \rightarrow \infty$. A equação para multigrupos determina aproximações $\Phi_g(\mathbf{r})$, para o fluxo escalar exato integrado sobre cada intervalo de energia I_g , e assim

$$-\nabla \cdot [D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r})] + \Sigma_{T,g}(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}) = S_g(\mathbf{r}) + \sum_{g'=1}^{g-1} b_{gg'}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}), \quad (5.22)$$

onde o último termo da equação (5.22), corresponde a explicar os termos da integral envolvendo $\Phi_g(\mathbf{r})$ que tinham sido incorporadas à fonte S_g . Como $\Sigma_{T,g}(\mathbf{r}) = \Sigma_{a,g}(\mathbf{r}) + \sum_k b_{kg}$ temos

$$b_{gg'} = N_s(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \sigma_s(\Omega \cdot \Omega', E_g, E_{g'}) d\Omega', \quad (5.23)$$

onde $b_{gg'} \geq 0$ é uma medida do número mais provável de nêutrons ou raios- γ de energia $E_{g'}$ passando para a energia E_g , por unidade de massa, tempo e volume no ponto $\mathbf{r}$. Para que o sistema de equações (5.22) não se decomponha em dois grupos, um dos quais não atua no outro, devemos supor $b_{gg'}$ irredutível e responsável direto pelo acoplamento entre os "G"

grupos. Supondo agora o operador linear $L_g = -\nabla \cdot [D_g(\mathbf{r})\nabla] + \Sigma_{T,g}(\mathbf{r})$, como os elementos da matriz diagonal L , e Φ , S e B como os vetores fluxo escalar, fonte espectral externa e a matriz de transição, respectivamente, a equação de difusão para multigrupos reduz-se no sistema de equações lineares $L\Phi = B\Phi + (S + S_b)$. S_b é um vetor cujos elementos S_{bg} são as taxas de contagens da radiação de fundo (*background*) em cada grupo g , a serem adicionados à fonte externa. O sistema de equações diferenciais será então:

$$\begin{pmatrix} L_1 & & & & \\ & L_2 & & & \\ & & L_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & 0 & & & L_G \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_G \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{G1} & b_{G2} & b_{G3} & \cdots & b_{GG} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_G \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ \vdots \\ S_G \end{bmatrix}. \quad (5.24)$$

5.2 SOLUÇÃO POR ELEMENTOS FINITOS

O fluxo escalar de nêutrons ou radiação gama no estado estacionário, para meios heterogêneos sem multiplicação, é governado pela aproximação de difusão da equação de transporte de Boltzmann, dada pela equação (5.22), que em coordenadas cilíndricas, assumindo simetria axial, toma a seguinte forma

$$-\frac{\partial}{\partial r} \left(r D_g \frac{\partial \Phi_g}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(r D_g \frac{\partial \Phi_g}{\partial z} \right) + r \Sigma_{T,g} \Phi_g = r \sum_{g'=1}^{g-1} b_{gg'} \Phi_{g'} + \frac{s_g \delta(r) \delta(z - z_0)}{2\pi}, \quad (5.25)$$

onde $D_g = D_g(r, z)$, $\Sigma_{T,g} = \Sigma_{T,g}(r, z)$, $\Phi_g = \Phi_g(r, z)$, e δ é a função *delta de Dirac*.

O fluxo escalar, obtido pela solução da equação (5.25), deve satisfazer as seguintes condições de contorno: a simetria axial implica na condição de fronteira

$$\left. \frac{\partial \Phi_g(r, z)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (5.26)$$

e à grandes distâncias da fonte $S_g(r, z)$, o fluxo deve aproximar-se de zero

$$\lim_{r, z \rightarrow \infty} \Phi_g(r, z) = 0 \quad (5.27)$$

e, finalmente, nas interfaces internas devem ser respeitadas as condições de continuidade do fluxo e da corrente, isto é

$$\Phi_g(r, z)|_L = \Phi_g(r, z)|_H, \quad (5.28)$$

$$\hat{n}_r \frac{\partial \Phi_g(r, z)}{\partial r} \Big|_L = \hat{n}_r \frac{\partial \Phi_g(r, z)}{\partial r} \Big|_H \quad (5.29)$$

$$\hat{n}_z \frac{\partial \Phi_g(r, z)}{\partial z} \Big|_L = \hat{n}_z \frac{\partial \Phi_g(r, z)}{\partial z} \Big|_H \quad (5.30)$$

onde L e H são dois meios adjacentes distintos e $\hat{n}_s$ é o vetor unitário normal às interfaces na direção genérica "s".

As considerações gerais acerca do desenvolvimento do algoritmo de elementos finitos do sistema de equações diferenciais acima consiste basicamente em dividir a região a ser estudada em sub-regiões discretas às quais constituem a malha de elementos finitos (RAMIREZ et al., 1991).

A função fluxo escalar $\Phi_g(r, z)$, é aproximada no interior de cada elemento por uma função de interpolação (tomando como base elementos triangulares), utilizada na derivação da equação matricial local.

O desenvolvimento do algoritmo de elementos finitos pode ser facilmente encontrado na literatura (DAVIES, 1980; ODEN & REDDY, 1976; BECKER et al., 1981). Sua aplicação se dá, em linhas gerais, exprimindo a aproximação do fluxo escalar $\tilde{\Phi}^{(e)}$, na sub-região (e), em termos de uma série de funções base $L_n^{(e)}$, $n = 1, 2, \dots$ do sistema local

$$\tilde{\Phi}^{(e)} = L_1^{(e)} \Phi_1 + L_2^{(e)} \Phi_2 + L_3^{(e)} \Phi_3 + \dots, \quad (5.31)$$

sendo que a variação linear desconhecida do fluxo é expandida sobre estes sub-domínios.

Tendo em vista que a expansão é finita, teremos inevitavelmente um erro de aproximação $\varepsilon = \mathbf{K}^{(e)} \tilde{\Phi}^{(e)} - \mathbf{f}^{(e)}$. Desejamos minimizar de alguma forma este erro. Para isto, forçamos o produto interno do erro com certas funções testes $N_n^{(e)}$, $n = 1, 2, 3$, ser zero sobre a região onde a base local é definida.

$$\langle N_n^{(e)}, \varepsilon \rangle = \int_e \int N_n^{(e)} \varepsilon dr dz = 0 \quad n = 1, 2, 3. \quad (5.32)$$

Matematicamente, isto significa fazer com que o erro da aproximação seja ortogonal à função teste, no sub-domínio (e).

Dentre as várias estratégias para a construção das aproximações das soluções de problemas de valores de contorno, apoiados na equação (5.32), adotaremos neste trabalho o método de *Galerkin*, onde as funções base e as funções testes são as mesmas, $N_n^{(e)} = L_n^{(e)}$. Assim, a norma $\|\varepsilon\|$ do erro da aproximação, deve ser minimizada por esta técnica.

5.2.1 Obtenção da Matriz de Forma $K^{(e)}$

Aplicando o método de *Galerkin* ao primeiro e segundo membros da equação (5.25), temos

$$K_{ij,(1)}^{(e)} = \int_A \int r D_g(r, z) \frac{(b_i b_j + c_i c_j)}{4A^2} 2\pi r dr dz \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (5.33)$$

onde A é a área do elemento triangular (e), e b_i, b_j, c_i e c_j são constantes utilizadas na interpolação das funções base $L_n = a_n + b_n r + c_n z$, definidas na literatura.

Neste caso, a integral aparecendo em $K_{ij,(1)}^{(e)}$, é uma integral de volume na qual $dV = 2\pi r dr dz$. Podemos, enfim, escrever o elemento (i, j) da matriz local $K_{(1)}^{(e)}$, na forma

$$K_{ij,(1)}^{(e)} = \frac{2\pi D_g(r, z)}{4A^2} \int_A \int r^2 dr dz \begin{pmatrix} b_1^2 + c_1^2 & b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_1 b_3 + c_1 c_3 \\ b_2 b_1 + c_2 c_1 & b_2^2 + c_2^2 & b_2 b_3 + c_2 c_3 \\ b_3 b_1 + c_3 c_1 & b_3 b_2 + c_3 c_2 & b_3^2 + c_3^2 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Para a solução desta integral, interpolamos também r em termos das funções bases L_n : $r = r_1 L_1 + r_2 L_2 + r_3 L_3$, onde cada r_n é o raio do nó n do elemento triangular (e), e assim

$$r^2 = [r_1 r_2 r_3] \begin{pmatrix} L_1^2 & L_1 L_2 & L_1 L_3 \\ L_2 L_1 & L_2^2 & L_2 L_3 \\ L_3 L_1 & L_3 L_2 & L_3^2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix} \quad (5.35)$$

e temos finalmente

$$K_{ij,(1)}^{(e)} = \frac{\pi D_g(r, z)}{12A} (r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 + r_1 r_2 + r_1 r_3 + r_2 r_3) \cdot (b_i b_j + c_i c_j) \quad (5.36)$$

onde $D_g(r, z)$ é o coeficiente de difusão para o grupo g . Quando da aplicação do método de *Galerkin* ao terceiro membro da equação (5.25), obtemos a seguinte expressão

$$K_{ij,(2)}^{(e)} = 2\pi \Sigma_{T,g}(r, z) \int_A \int r^2 L_i^{(e)} L_j^{(e)} dr dz \quad (5.37)$$

Substituindo o valor de r^2 na equação anterior e lembrando que

$$\int_A \int L_i^a L_j^b L_k^c dA = \frac{2A a! b! c!}{(a + b + c + 2)!} \quad (5.38)$$

obtemos a matriz

$$K_{(2)}^{(e)} = \pi \Sigma_{T,g} A \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

onde

$$\begin{aligned}
g_{11} &= r_1 r_1 / 7.5 + r_2 r_2 / 45 + r_3 r_3 / 45 + r_1 r_2 / 15 + r_1 r_3 / 15 + r_2 r_3 / 45, \\
g_{12} &= r_1 r_1 / 30 + r_2 r_2 / 30 + r_3 r_3 / 90 + r_1 r_2 / 22.5 + r_1 r_3 / 45 + r_2 r_3 / 45, \\
g_{13} &= r_1 r_1 / 30 + r_2 r_2 / 90 + r_3 r_3 / 30 + r_1 r_2 / 45 + r_1 r_3 / 22.5 + r_2 r_3 / 45, \\
g_{21} &= g_{12}, \\
g_{22} &= r_1 r_1 / 45 + r_2 r_2 / 7.5 + r_3 r_3 / 45 + r_1 r_2 / 15 + r_1 r_3 / 45 + r_2 r_3 / 15, \\
g_{23} &= r_1 r_1 / 90 + r_2 r_2 / 30 + r_3 r_3 / 30 + r_1 r_2 / 45 + r_1 r_3 / 45 + r_2 r_3 / 22.5, \\
g_{31} &= g_{13}, \\
g_{32} &= g_{23}, \\
g_{33} &= r_1 r_1 / 45 + r_2 r_2 / 45 + r_3 r_3 / 7.5 + r_1 r_2 / 45 + r_1 r_3 / 15 + r_2 r_3 / 15
\end{aligned}$$

e assim, temos estabelecido a matriz de forma do sistema local $\mathbf{K}^{(e)} = \mathbf{K}_{(1)}^{(e)} + \mathbf{K}_{(2)}^{(e)}$.

5.2.2 Obtenção do Vetor Fonte $\mathbf{f}^{(e)}$

Analisando a equação (5.25), podemos ver que o vetor fonte constitui-se da adição de dois termos, um referente às fontes artificiais pontuais $\mathbf{f}_{(2)}^{(e)}$ e o outro, $\mathbf{f}_{(1)}^{(e)}$, devido ao espalhamento das partículas dos grupos de maior para os de menor energia.

Denotando o elemento fonte devido ao espalhamento por $\mathbf{S}^{(e)}$, o vetor fonte parcial $\mathbf{f}_{(1)}^{(e)}$ devido exclusivamente a $\mathbf{S}^{(e)}$, tem seus elementos definidos pela seguinte integral

$$f_{i,(1)}^{(e)} = \int_A \int r S^{(e)}(r, z) L_i^{(e)} 2\pi r dr dz \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.40)$$

e neste caso, $S^{(e)}(r, z)$ deve ser conhecida em cada nó i , do elemento (e)

$$S^{(e)}(r_i, z_i) = \sum_{g'=1}^g b_{gg'}(r_i, z_i) \Phi_{g'}^{(e)}(r_i, z_i), \quad (5.41)$$

onde g = número do grupo atual e $b_{gg'}(r_i, z_i)$, a seção de choque diferencial para espalhamento do grupo g' diretamente para o grupo g , no nó i . Assim, interpolando $S^{(e)}(r, z)$, temos

$$S^{(e)}(r, z) = [L_1^{(e)} L_2^{(e)} L_3^{(e)}] \begin{bmatrix} S^{(e)}(r_1, z_1) \\ S^{(e)}(r_2, z_2) \\ S^{(e)}(r_3, z_3) \end{bmatrix} \quad (5.42)$$

e por último,

$$f_{i,(1)}^{(e)} = 2\pi \int_A \int r^2 [L_1^{(e)} L_2^{(e)} L_3^{(e)}] \begin{bmatrix} S^{(e)}(r_1, z_1) \\ S^{(e)}(r_2, z_2) \\ S^{(e)}(r_3, z_3) \end{bmatrix} L_i^{(e)} dr dz \quad (5.43)$$

que produz como solução a seguinte cadeia de somatórios

$$f_{i,(1)}^{(e)} = \pi A \sum_{p=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 \left(\sum_{k=1}^3 r_j r_k S_p / h_i^{(l)} \right) \right), \quad (5.44)$$

onde $h_i^{(l)}$ são constantes determinadas cíclicamente a cada mudança dos índices l, p, j, k . Individualmente l varia de 1 a $3^3 = 27$, enquanto i permanece fixo, como mostra a 5.1.

Com relação à fonte pontual temos a integral

$$f_{i,(2)}^{(e)} = \int_A \int s_g L_i^{(e)} \delta(r) \delta(z - z_0) \delta(E - E_0) r dr dz \quad (5.45)$$

e devido às propriedades das funções *delta de Dirac*, a fonte assumirá um valor qualquer diferente de zero apenas no ponto $(r, z, E) = (0, z_0, E_0)$. Como exemplo, suponhamos que a fonte está localizada no nó 2 do elemento triangular (e). Assim,

$$\mathbf{f}_{(2)}^{(e)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot s_g \quad (5.46)$$

e o vetor fonte será, conseqüentemente, $\mathbf{f}^{(e)} = \mathbf{f}_{(1)}^{(e)} + \mathbf{f}_{(2)}^{(e)}$.

5.3 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DA FORMAÇÃO

Dentre os vários fatores que influem na eficiência da construção do algoritmo de elementos finitos, podemos destacar aqueles referentes à determinação dos parâmetros físicos que identificam a formação, quando especificada segundo um determinado grupo g : (1) o coeficiente de difusão $D_g(r, z)$, (2) a seção de choque total $\Sigma_{T,g}(r, z)$, (3) a seção de choque diferencial $b_{gg'}(r, z)$, para espalhamento entre os grupos g e g' .

5.3.1 Coeficiente de Difusão $D_g(r, z)$

Na obtenção da aproximação de difusão da equação de transporte original, determinamos o coeficiente de difusão como sendo

$$D_g(r, z) = \frac{1}{3[\Sigma_{T,g}(r, z) - N_s \sigma_1(r, z)]}, \quad (5.47)$$

onde $\sigma_1(r, z)$ pode ser obtido a partir do segundo termo ($l = 1$) da expansão de σ_s em polinômios ortogonais de Legendre

$$\sigma_l = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0) P_l(\mu_0) d\mu_0. \quad (5.48)$$

Tabela 5.1 - Valores das constantes cíclicas $h_i^{(l)}$.

(1)	índice $i=1$	índice $i=2$	índice $i=3$
1	7.5	30.0	30.0
2	30.0	45.0	90.0
3	30.0	90.0	45.0
4	30.0	45.0	90.0
5	45.0	30.0	90.0
6	90.0	90.0	90.0
7	30.0	90.0	45.0
8	90.0	90.0	90.0
9	45.0	90.0	30.0
10	30.0	45.0	90.0
11	45.0	30.0	90.0
12	90.0	90.0	90.0
13	45.0	30.0	90.0
14	30.0	7.5	30.0
15	90.0	30.0	45.0
16	90.0	90.0	90.0
17	90.0	30.0	45.0
18	90.0	45.0	30.0
19	30.0	90.0	45.0
20	90.0	90.0	90.0
21	45.0	90.0	30.0
22	90.0	90.0	90.0
23	90.0	30.0	45.0
24	90.0	45.0	30.0
25	45.0	90.0	30.0
26	90.0	45.0	30.0
27	30.0	30.0	7.5

Neste caso, considerando que $P_1(\mu_0) = \mu_0$ temos estabelecido a relação

$$\sigma_1 = \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu_0) \mu_0 d\mu_0 \quad (5.49)$$

Fazendo $\mu_0 = \cos \theta$, podemos reescrever a equação (5.49) da seguinte forma

$$\sigma_1 = \int_0^\pi \sigma_s(\cos \theta) \cos \theta \sin \theta d\theta \quad (5.50)$$

cujas soluções requer o conhecimento prévio do valor de σ_s para cada valor discreto de θ .

A densidade de centros espalhadores N_s será, por sua vez, determinada em função da densidade do meio (ρ_B).

5.3.2 Seção de Choque Diferencial $b_{gg'}(r, z)$

O cálculo de $b_{gg'}(r, z)$ é feito integrando sob a curva de $\sigma_s^{(g')}(\theta)$, entre os limites angulares $[\theta_{g'}^{(1)}, \theta_{g'}^{(2)}]$, conforme mostrado na Figura 5.1. O esquema da Figura 5.2 será tomado como base para o entendimento das diversas possibilidades de espalhamento. Inicialmente, analisamos o caso em que o espalhamento se dá a um pequeno ângulo após o qual a partícula ainda permanece no seu grupo de origem, isto é, $g' = g$. Neste caso, $\theta_{g'}^{(1)} = 0$.

Já no caso mais geral onde $g' \neq g$, a fronteira superior do grupo g pode ser identificada calculando

$$\cos \theta_{g'}^{(1)} = 1 + \frac{mc^2}{E_{g'}} - \frac{mc^2}{E_g^{(1)}}. \quad (5.51)$$

Se $|\cos \theta_{g'}^{(1)}| > 1$, a probabilidade de espalhamento entre a energia do grupo anterior $E_{g'}$ e a energia $E_g^{(1)}$ relativa à fronteira superior do grupo g é zero e assim $b_{gg'}(r, z) = 0$.

Quando $|\cos \theta_{g'}^{(1)}| < 1$, devemos pesquisar se o espalhamento se estende até o limite inferior do grupo g ou então identificar o ponto $E_g^{(2)}$ onde $|\cos \theta_{g'}^{(2)}| \leq 1$. Podemos determinar, analogamente,

$$\cos \theta_{g'}^{(2)} = 1 + \frac{mc^2}{E_{g'}} - \frac{mc^2}{E_g^{(2)}}. \quad (5.52)$$

Uma incoerência ocorre quando $|\cos \theta_{g'}^{(2)}| > 1$. Neste caso $\theta_{g'}^{(2)} = \pi$, valor este que se repetirá sempre que g' for o último grupo, ou seja, aquele de menor energia, independentemente de ser $|\cos \theta_{g'}^{(2)}| > 1$ ou não.

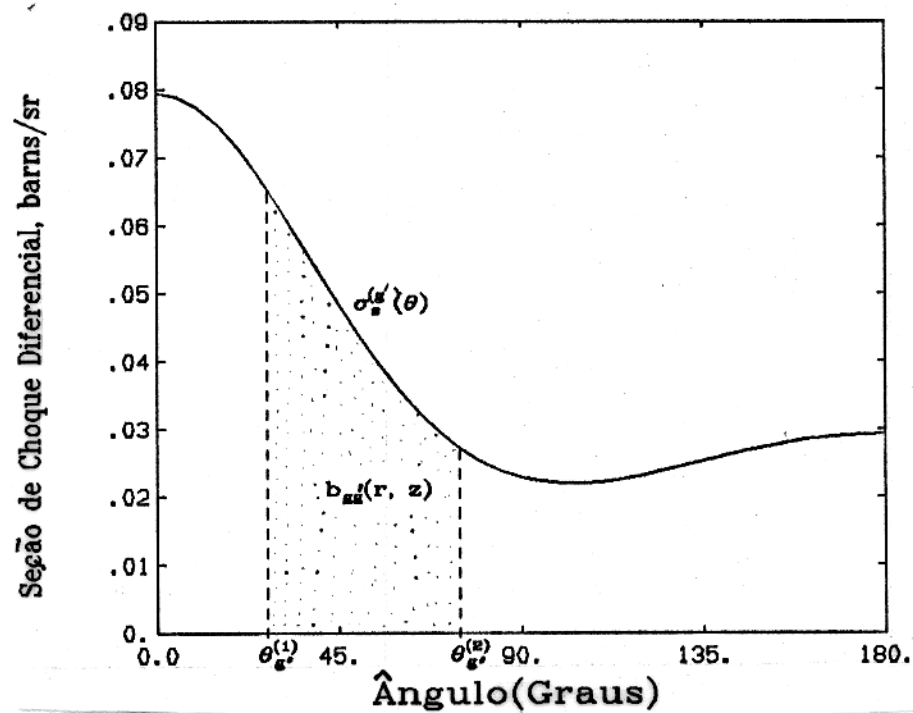


Figura 5.1 - Seção de choque diferencial mostrando os limites de integração adotados na determinação de cada elemento $b_{gg'}(r, z)$ da matriz de transição entre os grupos g' e g .

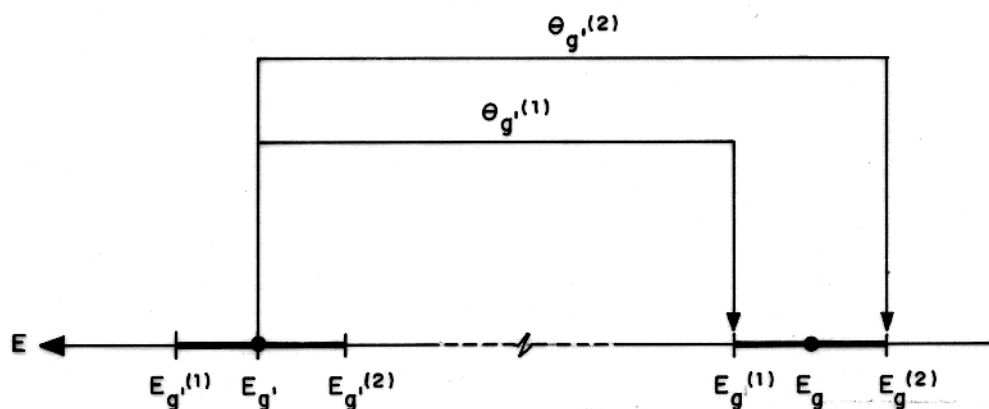


Figura 5.2 - Esquema geral para a determinação dos limites angulares $\theta_{g'}^{(1)}$ e $\theta_{g'}^{(2)}$, adotados no cálculo da seção de choque de espalhamento $b_{gg'}$, entre os grupos g e g' .

Enfim, de posse destes limites angulares, a seção de choque diferencial será dada por

$$b_{gg'}(r, z) = N_s \int_{\theta_{g'}^{(1)}}^{\theta_{g'}^{(2)}} 2\pi \sin \theta \sigma_s^{(g')}(\theta) d\theta, \quad (5.53)$$

onde $\sigma_s^{(g')}(\theta)$ é calculada para a energia correspondente ao grupo g' .

5.3.3 Seção de Choque Total $\Sigma_{T,g}(r, z)$

É importante ressaltar que a seção de choque total $\Sigma_{T,g}(r, z)$ a ser utilizada na aproximação de difusão, refere-se à parcela que é efetivamente removida do fluxo de partículas por espalhamento ou absorção. Podemos defini-la como sendo: $\Sigma_{T,g}^*(r, z) = \Sigma_{a,g}(r, z) + \Sigma_{s,g}(r, z)$, para a energia E_g . Se G é o número total de grupos, teremos naturalmente,

$$\Sigma_{s,g}(r, z) = \sum_{k=g'}^G b_{kg}(r, z). \quad (5.54)$$

A fração da seção de choque total devida à absorção $\Sigma_{a,g}(r, z)$, pode ser determinada a partir do conhecimento das seções de choque microscópicas para o efeito fotoelétrico (τ), produção de pares (κ) e absorção parcial relativa ao elétron Compton, cujo valor será: ${}_a\sigma_s = \sigma_s - {}_c\sigma_s$. Assim, $\Sigma_{a,g} = N(\tau + \kappa + {}_a\sigma_s)$, onde N é a densidade de elétrons da formação. A seção ${}_a\sigma_s$ é calculada a partir da distribuição de *Klein-Nishina*, enquanto τ e κ são determinados por meio de regressão linear múltipla dos dados de DAVISSON & EVANS (1952), às quais satisfarão as expressões abaixo,

$$\tau = [12.1 + (20 - Z_{ef})] \frac{Z_{ef}^{3.6}}{E_g^{3.14}} \quad \text{e} \quad \kappa = 1.06 \times 10^{-17} Z_{ef} \cdot E_g^4, \quad (5.55)$$

onde E_g é a energia do fóton em KeV para o grupo g e Z_{ef} é o número atômico efetivo da formação.

A fração devida ao espalhamento $\Sigma_{s,g}(r, z)$ é também determinada a partir da fórmula de *Klein-Nishina*. Conforme mostrado na Figura 5.2, notamos que nem sempre a energia E_g do grupo g , é a ideal para o cálculo das seções acima. Estudos feitos na teoria de reatores têm demonstrado que os valores do fluxo para cada intervalo de energia são melhor determinados quando a seção de choque total é descrita pela seguinte equação

$$\Sigma_{T,g}(r, z) = \left[\int_{E_g^{(2)}}^{E_g^{(1)}} \frac{\Sigma_{T,g}^*(r, z)}{E} dE \right] / \left[\ln \left(\frac{E_g^{(1)}}{E_g^{(2)}} \right) \right], \quad (5.56)$$

sendo $E_g^{(1)}$ e $E_g^{(2)}$ as energias das fronteiras superior e inferior do grupo g , respectivamente.

5.4 TESTE DO ALGORITMO

Antes da utilização do algoritmo de elementos finitos no cálculo do fluxo escalar de fótons nas vizinhanças do poço, alguns testes foram feitos para confirmar sua validade. Para tal, os valores dos fluxos obtidos com o algoritmo FEM foram comparados com resultados obtidos da solução analítica da aproximação de difusão proposta por TITTLE & ALLEN (1966), para um único grupo de energia, onde a formação é representada por três cilindros concêntricos com propriedades físicas distintas, representando o poço, a zona invadida e a zona virgem. Este modelo consta do anexo II, onde a simetria radial é conservada e a fonte pontual centralizada é expandida axialmente em termos das funções ortogonais de Fourier. Esta geometria adapta-se perfeitamente à simulação da resposta da sonda LDT.

Neste teste, a solução por elementos finitos é comparada com a solução analítica, tendo por objetivo apenas a calibração da malha. Um teste adicional é feito comparando a resposta do modelamento FEM com uma nova solução, modificada por ALLEN et al. (1967) para dois grupos de energia, visando ao estudo dos efeitos da interação entre os grupos dadas por cada elemento $b_{gg'}(r, z)$ da matriz de transição. As Figuras 5.3(a) e 5.3(b) mostram que os resultados obtidos via solução numérica estão em boa concordância com as soluções analíticas.

Nas Figuras 5.3(c) e 5.3(d), os espectros obtidos por elementos finitos, para modelos com fontes uniformemente distribuídas, foram comparados com os espectros calculados por BERTOZZI et al. (1981), simulando a resposta da sonda NGS. Percebemos nestes modelos, o aparecimento de um pequeno pico em torno de 200 KeV, correspondendo ao ponto em que a influência do efeito fotoelétrico começa a predominar sobre os outros efeitos atuando nestes modelos. A solução obtida com esta técnica, considera o espectro como resultado de um fenômeno local, originado pela degradação dos fótons de alta energia devida ao espalhamento Compton e à absorção fotoelétrica no ponto de interesse.

Depois de verificadas a calibração da malha e os efeitos da transição entre os grupos, um último teste é feito a fim de avaliar a convergência da solução.

A Figura 5.4(a) mostra que para o perfil de densidade $(\gamma - \gamma)$, a convergência é alcançada para um total de aproximadamente 32 grupos de energia enquanto que para o perfil de raios gama naturais, a convergência será alcançada para cerca de 46 grupos, Figura 5.4(b). Na Figura 5.4 (a) verificamos uma pequena distorção na curva para $D = 10$ cm. Este efeito deve-se a maior variabilidade do fluxo próximo da fonte, exigindo redefinir números intermediários de grupos (23 e 33) em lugar dos números de grupos múltiplos de cinco previamente definidos e estudados. O desenvolvimento completo dos modelos será mostrado no capítulo 7.

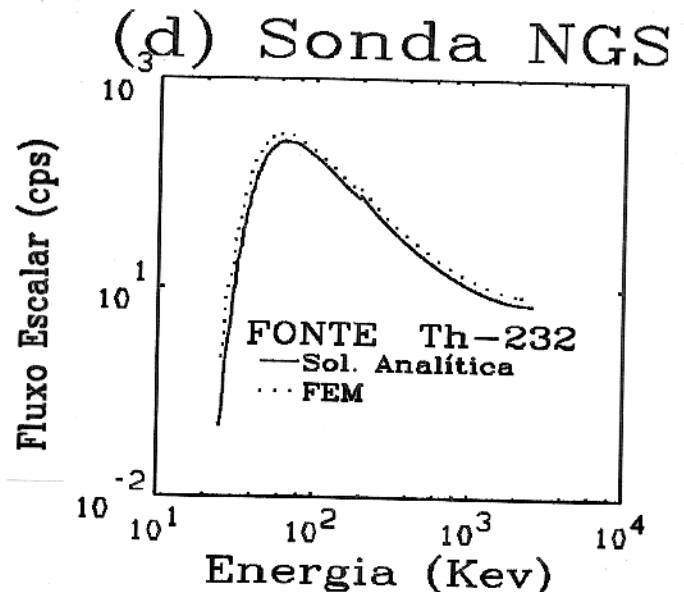
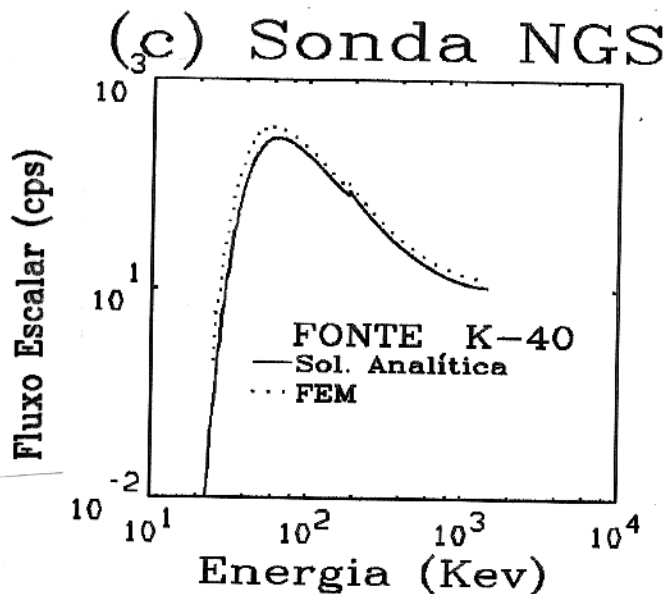
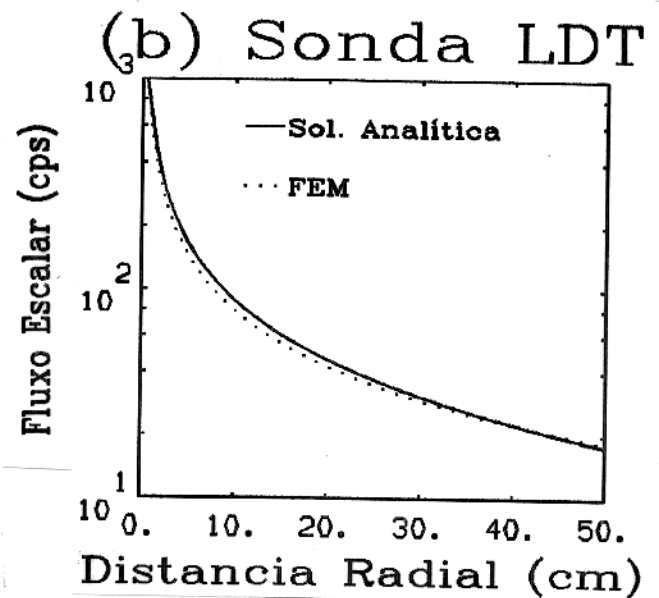
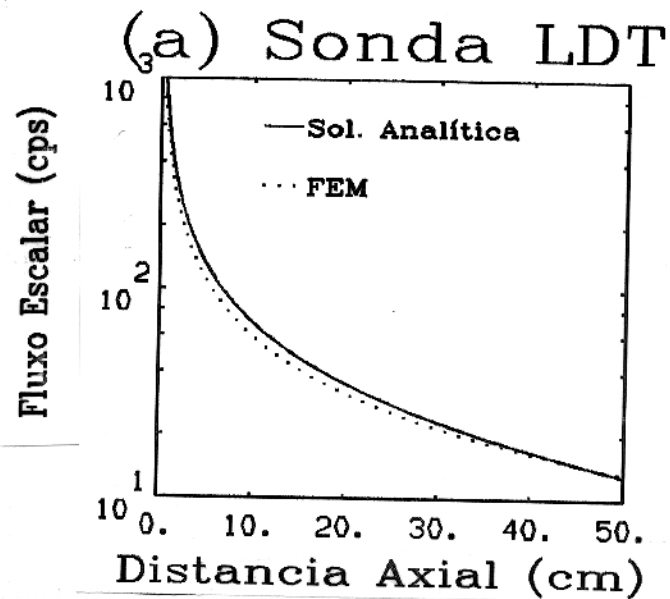


Figura 5.3 - Teste do algoritmo de elementos finitos visando a calibração da malha. (a) Mostra o fluxo escalar tomado na direção axial para a sonda LDT, (b) Mostra a solução para esta mesma sonda porém tomada na direção radial, tendo ambos os casos como suporte, a fonte pontual. (c) Apresenta o espectro local dos raios gama naturais do potássio-40, uniformemente distribuídos na vizinhança do poço e (d) Apresenta o mesmo tipo de espectro para o Tório-232.

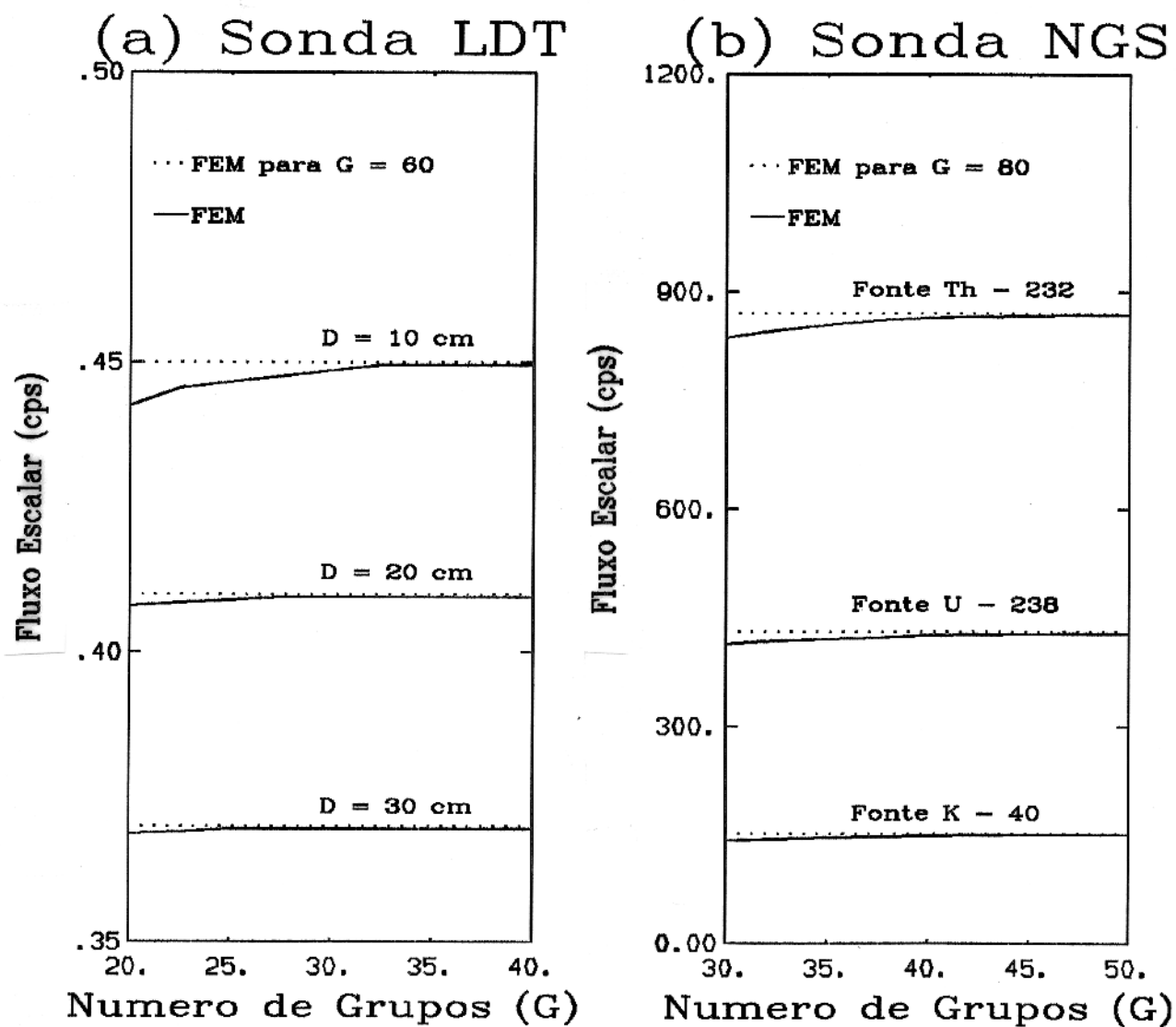


Figura 5.4 - Teste de convergência para a seleção dos grupos de energia : (a) Mostra a relação existente entre a solução considerada exata para a sonda LDT (linha pontilhada), e aquela obtida levando-se em conta um determinado número de grupos (linha cheia) para diferentes distâncias radiais D, da fonte pontual; (b) Mostra a convergência obtida com as três fontes naturais de raios gama (K-40, U-238 e Th-232).

6 - SIMULAÇÃO DA FUNÇÃO RESPOSTA DO CRISTAL NaI(Tl) PELO MÉTODO MONTE CARLO

O transporte de radiação é um processo estocástico natural, amplamente estudado nos modelamentos Monte Carlo (KALOS & WHITLOCK, 1986). A proposta deste capítulo é desenvolver o algoritmo MC para modelar a função resposta de um cristal de iôdeto de sódio ativado com tálio, sujeito ao fluxo de fótons gama monoenergéticos, constantes dos detectores utilizados nas sondas de perfilagem de poço.

Neste processo, as direções dos fótons são aleatórias bem como as demais variáveis independentes do sistema, tais como a energia e a posição. Cada uma delas pode, então, ser descrita por uma função distribuição de probabilidade (*fdp*) adequada. Uma vez no cristal, o fóton pode interagir com um átomo individual. A forma como a interação ocorre e com que átomo, é um processo aleatório. A interação geralmente envolve a transferência de parte da energia do fóton para um elétron. O fóton é espalhado com energia reduzida e direção diferente, ou pode ainda, ceder toda sua energia para o elétron e a história termina.

Para a descrição do fluxo de raios gama diretamente no espaço de fase vamos adotar um sistema de coordenadas fixo $(0, X_0, Y_0, Z_0)$ referido à geometria do cristal cintilador mostrado na Figura 6.1, e um sistema de coordenadas flutuante $(0, x, y, z)$, que permite seguir as trajetórias tanto dos fótons quanto dos elétrons dentro do cristal sem a necessidade de cálculos muito complicados. Transformações lineares serão a seguir utilizadas para redefinir as variáveis do fluxo no sistema de coordenadas fixo.

6.1 CONSTRUÇÃO DE AMOSTRAS

A idéia básica do método Monte Carlo é a construção de amostras distribuídas de acordo com certas leis de probabilidades (DICKENS, 1989). Nesta seção, discutiremos brevemente as duas técnicas principais de construção de amostras : o método de rejeição e o método de distribuição-cumulativa.

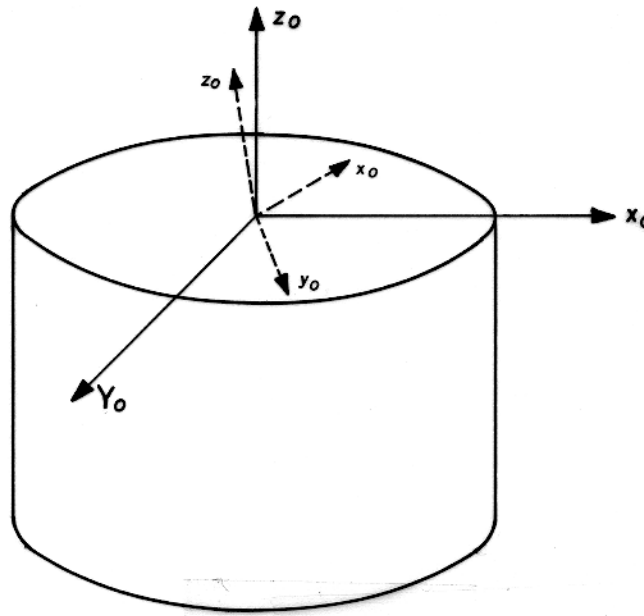


Figura 6.1 - Geometria e sistema de coordenadas adotados para o posicionamento do cristal cintilador, mostrando a relação entre os sistemas fixo $(0, X_0, Y_0, Z_0)$ e flutuante $(0, x_0, y_0, z_0)$.

6.1.1 Método de Rejeição

Neste método, estabelecemos uma função de distribuição apropriada $f(x)$, conforme indicado na Figura 6.2(a). Esta função é positiva definida no intervalo $a < x < b$ das variáveis independentes a partir das quais desejamos selecionar valores para x .

O primeiro passo para o desenvolvimento do método de rejeição é determinar o valor máximo de $f(x)$, $F(x) \geq f(x)$, para todo x no intervalo de interesse (RUBINSTEIN, 1981). Um exemplo é dado pela linha cheia superior da Figura 6.2(a). A seguir escolhemos um valor tentativa $\bar{x}$ para x entre a e b

$$\bar{x} = a + \rho_1(b - a) \quad (6.1)$$

onde ρ_1 é um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo $(0, 1)$.

Para assegurar que os pontos são escolhidos em proporção à área sob a curva $f(x)$, um segundo número aleatório ρ_2 é gerado e $f(\bar{x})$ é comparado com o produto $\rho_2 \cdot F(x)$. Se $f(\bar{x}) \geq \rho_2 \cdot f(x)$, a variável $\bar{x}$ é aceita. Caso contrário, ela é rejeitada e o processo é refeito a partir da escolha de um novo par de números aleatórios (ρ_1, ρ_2) .

A eficiência do método de rejeição tem duas componentes importantes (DICKENS, 1989). A primeira delas refere-se ao tempo necessário para determinar o valor de $F(x)$. Se este trabalho puder ser feito analiticamente, a técnica pode ser eficientemente empregada; caso contrário, devemos determinar $F(x)$ por métodos numéricos, o que resulta em um tempo

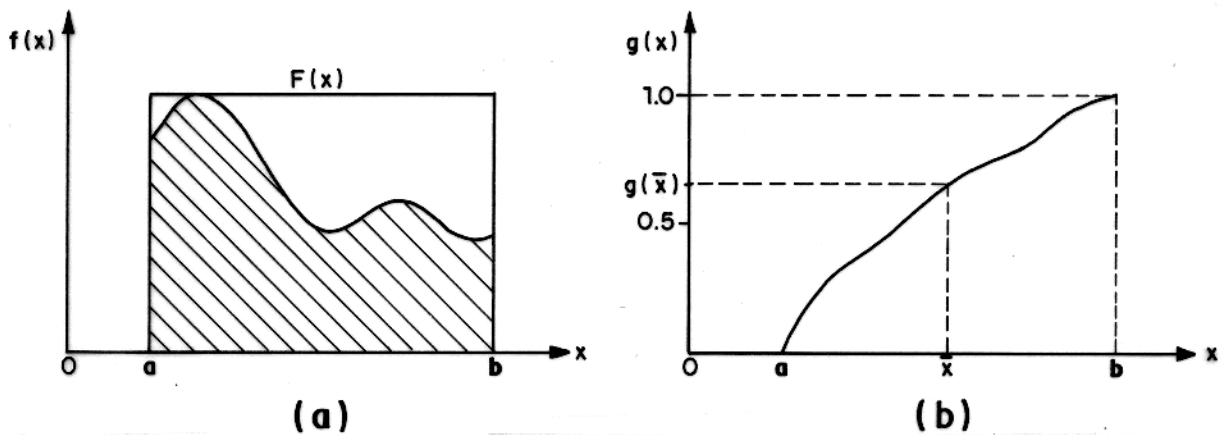


Figura 6.2 - (a) Função de distribuição $f(x)$ utilizando a técnica de rejeição; (b) Função de distribuição $g(x)$ utilizando a técnica de distribuição - cumulativa

maior de CPU. A segunda componente da eficiência do método de rejeição é dada pela expressão

$$\varepsilon_f = \frac{\int_a^b f(x)dx}{F(x)(b-a)} \quad (6.2)$$

em outras palavras, a área hachuriada da Figura 6.2(a). Ela representa a integral total da função de distribuição $f(x)$ na região de interesse, dividida pela área do retângulo $\{a \leq x \leq b, 0 \leq f(x) \leq F(x)\}$. O número médio de pares de números aleatórios (ρ_1, ρ_2) a ser utilizados para cada evento é dado por $n = 2 \cdot \varepsilon_f^{-1}$

6.1.2 Método de Distribuição - Cumulativa

Se por um lado este método de amostragem Monte Carlo requer o cálculo adicional de integrais; por outro lado, apenas uma escolha do número aleatório ρ_1 é necessária (KALOS & WHITLOCK, 1986). A Figura 6.2(b) ilustra este método. Aqui, estipulamos uma função $g(x)$ definida por

$$g(x) = \frac{\int_a^x f(x)dx}{\int_a^b f(x)dx} \quad (6.3)$$

tal que $g(a) = 0$ e $g(b) = 1$. A seguir, tomamos um número aleatório ρ_1 , através do qual calculamos $\bar{x}$, resolvendo a seguinte equação: $g(\bar{x}) = \rho_1$. Feito isto, impomos uma relação funcional entre ρ_1 e $\bar{x}$ e mostramos indiretamente que esta relação entre variáveis aleatórias

implica numa relação entre suas funções de densidade. Podemos, então, deduzir da relação entre variáveis aleatórias, uma relação simples de suas distribuições, fato este largamente empregado nas simulações de eventos diversos associados com o método Monte Carlo.

6.1.3 Simulação do Livre Percurso Médio de Fótons

A determinação do livre percurso médio de um fóton consiste em seguir sua trajetória entre dois pontos consecutivos de interação, $\mathbf{R}_1$ e $\mathbf{R}_2$. O fato do fóton viajar em linha reta entre os dois pontos facilita seu estudo (KALOS & WHITLOCK, 1986). Partindo de um ponto (x_1, y_1, z_1) , podemos calcular o ponto da interação seguinte pelas expressões,

$$\begin{aligned}x_2 &= x_1 + \Omega_x \cdot l, \\y_2 &= y_1 + \Omega_y \cdot l, \\z_2 &= z_1 + \Omega_z \cdot l\end{aligned}\tag{6.4}$$

onde l é a distância $|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|$ e $\Omega = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$ a direção do fóton incidente.

A probabilidade por unidade de percurso $\Sigma_T(\mathbf{R}, E)$ de ocorrer uma interação é uma propriedade do material e não muda com a distância viajada pelo fóton. Como consequência, a distribuição das distâncias é exponencial em materiais homogêneos.

A probabilidade $f(l|\Omega, \mathbf{R}, E)$ é o complemento de uma distribuição cumulativa. Dada a natureza do cristal NaI, podemos ignorar a dependência condicional de f e considerar somente seu comportamento com relação a l . O valor de $f(l)$, distante l_1 de $\mathbf{R}_1$, pode ser dado por $f(l_1) = f(l_2) + P\{l_2 \geq l > l_1\}$ para $l_2 > l_1$, sendo $P\{l_2 \geq l > l_1\}$ a probabilidade de que a interação ocorra entre l_1 e l_2 podendo ser reescrita da seguinte forma

$$f(l_1) - f(l_2) = f(l_1)P\{l_2 \geq l > l_1 | l > l_1\},\tag{6.5}$$

onde $P\{l_2 \geq l > l_1 | l > l_1\}$ é agora a probabilidade de que aquela interação ocorra somente se $l > l_1$.

Para pequenos valores de $|l_2 - l_1|$, a probabilidade condicional de que um evento ocorra é exatamente a probabilidade por unidade de percurso $\Sigma_T(\mathbf{R}, E)$, multiplicado por $(l_2 - l_1)$, mais os termos de ordem superior

$$f(l_1) - f(l_2) = f(l_1)\Sigma_T(l_1)(l_2 - l_1) + 0(l_2 - l_1)^2.\tag{6.6}$$

Derivando a equação (6.6) com respeito a l_2 temos, $-\frac{d}{dl}f(l) = f(l)\Sigma_T(l)$, onde l_2 foi substituído por l . Assim, devemos integrar a expressão $-\frac{d}{dl}\ln f(l) = \Sigma_T(l)$ de 0 até l , para

calcular a função de distribuição de $f(l)$

$$-\ln f(l) + \ln f(0) = \int_0^l \Sigma_T(l') dl'. \quad (6.7)$$

Sabemos que exatamente uma interação deve ocorrer para $l > 0$. Neste caso, $f(0) = 1$ e

$$f(l) = \exp\left[-\int_0^l \Sigma_T(l') dl'\right]. \quad (6.8)$$

Em um meio homogêneo, Σ_T é independente de l , tal que $f(l) = e^{-\Sigma_T \cdot l}$, de onde concluímos que l é de fato distribuído exponencialmente.

Recordamos que $f(l)$ é a probabilidade de que uma interação ocorra após o fóton percorrer uma distância maior que l . Podemos então, obter a função distribuição de probabilidade de l diferenciando $f(l)$,

$$-\frac{d}{dl}f(l) = \exp\left[-\int_0^l \Sigma_T(l') dl'\right] \cdot \Sigma_T(l), \quad (6.9)$$

onde o primeiro fator do lado direito é a probabilidade marginal de que o trajeto alcance a distância l e o segundo termo, é a probabilidade condicional para que a colisão ocorra no intervalo $l + dl$.

A simulação consiste, efetivamente, na amostragem do próximo evento. Isto pode ser feito igualando um número aleatório ρ , uniformemente distribuído no intervalo $(0, 1)$, a uma função de distribuição - cumulativa $1 - f(l) = 1 - \rho$. Como ρ é uniformemente distribuído, $1 - \rho$ também o é; e assim,

$$f(l) = \rho = \exp\left[-\int_0^l \Sigma_T(l') dl'\right] \quad (6.10)$$

ou melhor,

$$-\ln \rho = \int_0^l \Sigma_T(l') dl' = \Sigma_T \cdot l \quad (6.11)$$

e podemos, enfim, amostrar l da distribuição exponencial

$$l = -\frac{1}{\Sigma_T(E)} \ln \rho. \quad (6.12)$$

6.1.4 Simulação de Direções Equiprováveis

A direção dada por um vetor unitário origem no centro de uma esfera unidade, pode ser determinada selecionando por meio da extremidade do referido vetor, um ponto na superfície desta esfera, no espaço tridimensional.

As direções sendo equiprováveis, o ponto será uma variável Ω , uniformemente distribuída sobre a esfera; logo, a probabilidade de Ω assumir um determinado valor num elemento de superfície dS , deve ser igual a $\frac{dS}{4\pi}$ (SPANIER & GELBARD, 1969).

Usando coordenadas polares (θ, ϕ) , $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$, a função de densidade a ser amostrada será

$$f(\theta, \phi) = \frac{\sin \theta d\theta d\phi}{4\pi}. \quad (6.13)$$

A densidade $f(\theta, \phi)$ pode ser representada pelo produto de duas variáveis independentes $f(\theta)$ e $f(\phi)$. O procedimento pode ser simplificado especificando um par de números aleatórios (ρ_1, ρ_2) e resolvendo as equações resultantes, conforme sugerido pelo método das distribuições cumulativas

$$\begin{aligned} F_1(\theta) &= \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin t dt = \rho_1 \\ F_2(\phi/\theta) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\phi dt = \rho_2 \end{aligned}$$

para θ e ϕ , e cuja solução produz

$$\begin{aligned} \theta &= \arccos(1 - 2\rho_1), \\ \phi &= 2\pi\rho_2 \end{aligned} \quad (6.14)$$

que permite, a partir de valores independentes de ρ_1 e ρ_2 , simular direções equiprováveis no espaço tridimensional.

6.1.5 Técnica de Von Neumann de Seleção do Ângulo Azimutal

A técnica de Von Neumann de seleção de um ângulo azimutal, uniformemente distribuído, constitui-se numa generalização multidimensional do método de rejeição e pode ser descrito em termos gerais como segue: seja $(t_1, \dots, t_n)$ uma amostra escolhida da distribuição $f(x_1, \dots, x_n)$ e a variável aleatória $z = h(t_1, \dots, t_n)$, cuja aceitação pressupõe o atendimento ao vínculo $t_n < g(t_1, \dots, t_{n-1})$ ou em outro caso, a sua rejeição (SPANIER & GELBARD, 1969).

A função de distribuição $G(z)$ da variável aleatória z , definida acima, pode ser dada pela expressão

$$G(z) = \frac{\int_S \cdots \int f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n}{\int_{x_n < g(x_1, \dots, x_{n-1})} \cdots f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n}, \quad (6.15)$$

onde S é dado por

$$S: \begin{cases} z > h(x_1, \dots, x_n) \\ x_n < g(x_1, \dots, x_{n-1}) \end{cases} \quad (6.16)$$

cujas desigualdades definem certas regiões do espaço n -dimensional sobre as quais as integrações são efetuadas.

No caso em questão de obter o seno e o cosseno de um ângulo uniformemente distribuído entre 0 e 2π , é fácil verificar por argumentos puramente geométricos que se ϕ é o ângulo azimutal e ρ_1 e ρ_2 , dois números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo $(0, 1)$, podemos selecionar uma variável aleatória da seguinte forma

$$z = \frac{\rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1^2 + \rho_2^2} \quad \text{se} \quad \rho_2 < \sqrt{1 - \rho_1^2}. \quad (6.17)$$

Enfim, para calcular a distribuição de z no intervalo $-1 \leq z \leq 1$, usando a equação (6.15), podemos estabelecer diretamente as relações

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq x_1, x_2 \leq 1 \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \\ h(x_1, x_2) &= \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_1^2 + x_2^2}, \\ g(x_1) &= \sqrt{1 - x_1^2} \end{aligned}$$

Então,

$$G(z) = \frac{\int_{R_1} \int dx_1 dx_2}{\int_{R_2} \int dx_1 dx_2} = \frac{\int_{R_1} \int dx_1 dx_2}{\pi/4}, \quad (6.18)$$

onde

$$\begin{aligned} R_1 &= \{(x_1, x_2) | h(x_1, x_2) < z, \quad 0 \leq x_1, x_2 \leq 1\} \\ R_2 &= \{(x_1, x_2) | x_2 \leq g(x_1)\}. \end{aligned}$$

Fazendo as seguintes mudanças de variáveis: $s = x_1/x_2$ e $t = x_2$, temos

$$\begin{aligned} \int_{R_1} \int dx_1 dx_2 &= \int_0^{\sqrt{(1+z)/(1-z)}} ds \int_0^{\sqrt{1/(1+s^2)}} t dt \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\sqrt{(z+1)/(1-z)}} \frac{ds}{1+s^2} = \frac{1}{2} \arctan \sqrt{\frac{z+1}{1-z}}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$G(z) = \frac{2}{\pi} \arctan \sqrt{\frac{z+1}{1-z}} \quad -1 \leq z \leq 1 \quad (6.19)$$

e assim

$$G'(z) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-z^2}} \quad (6.20)$$

que, como pode ser visto, é a densidade da variável aleatória $z = \cos \pi\rho$, sendo ρ um número aleatório (SPANIER & GELBARD, 1969).

Assim sendo, obtemos o par de funções

$$\cos \phi = \frac{x_1^2 - x_2^2}{x_1^2 + x_2^2} \quad (6.21)$$

$$\sin \phi = \frac{2x_1x_2}{x_1^2 + x_2^2} \quad (6.22)$$

onde $x_1 = 2\rho_1 - 1$ e $x_2 = \rho_2$.

6.2 SELEÇÃO DO TIPO DE INTERAÇÃO

Para os quanta gama de energia E incidindo no detector, temos definidas as seções de choque $\sigma_i(E)$ para o i -ésimo tipo de interação e também a seção de choque total $\sigma_T(E)$, para o cristal NaI(Tl). O que propomos é a seleção do tipo de interação usando estas seções de choque.

Tendo-se estabelecidos os quatro tipos de interações possíveis, podemos identificá-los pelos seus respectivos índices (i) na forma geral $\sigma_i(E)$, a saber : $i = 1$ para o espalhamento Compton, $i = 2$ para o efeito fotoelétrico, $i = 3$ para o espalhamento Rayleigh e, finalmente, $i = 4$ para a produção de pares. A seguir, formamos um arranjo $S(E)$ de dimensão 5, onde cada membro $\{s_j(E), j = 0, 1, 2, 3, 4\}$ de $S(E)$, será dada por

$$s_j(E) = \sum_{i=1}^j \sigma_i(E), \quad (6.23)$$

sendo $s_4(E) = \sigma_T(E)$ e $s_0(E) = 0$.

Escolhemos um número aleatório ρ , uniformemente distribuído no intervalo $(0, 1)$, e que será utilizado para selecionar um número S' da forma a seguir:

$$S' = \rho \cdot s_4(E) = \rho \cdot \sigma_T(E). \quad (6.24)$$

Este número é então comparado com os valores de $s_j(E)$, até que a relação

$$s_{m-1}(E) \leq S' \leq s_m(E) \quad m = 1, 2, 3, 4 \quad (6.25)$$

seja localizada e por conseguinte, o tipo de interação, selecionado como sendo aquele de índice m .

DICKENS (1989) tem identificado as duas causas principais que este tipo de seleção têm sobre o tempo de CPU: (1) a magnitude relativa e o ordenamento das seções de choque $\sigma_i(E)$ e (2) o algoritmo específico utilizado para fazer a comparação representada pela equação (6.25).

6.2.1 Simulação do Espalhamento Compton

No caso do efeito Compton, a energia e a direção do fóton secundário são calculados de acordo com a distribuição de Klein-Nishina. Para isto, a energia do fóton inicial é dada em unidades de energia do elétron em repouso, $\alpha = E_\gamma/mc^2$.

A simulação do cosseno do ângulo polar de espalhamento $\mu = \cos \theta$, e da fração da energia incidente adquirida pelo fóton secundário, são determinados utilizando o método de Khan. O diagrama de blocos da Figura 6.3 mostra que o método é dividido em dois ramos e que um total de três números aleatórios (ρ_1, ρ_2, ρ_3), uniformemente distribuídos no intervalo (0, 1), são necessários em cada ciclo de amostragem.

Se o valor do primeiro número aleatório ρ_1 é menor que a relação $(1+2\alpha)/(9+2\alpha)$, o ramo esquerdo é seguido. A variável b , que determina a redução da energia do fóton no processo de espalhamento, é estimado com o auxílio do segundo número aleatório ρ_2 . Observamos que este valor de b não é sempre aceito. Sua aceitação ou rejeição é determinada comparando-o com ρ_3 . Um procedimento similar é conduzido se o ramo direito do diagrama for selecionado. Na sua fase final, o método de Khan permite calcular a energia E'_γ adquirida pelo fóton espalhado, especificando esta energia em unidades de energia do elétron em repouso, $\alpha' = E'_\gamma/mc^2$.

As funções trigonométricas ($\cos \phi, \sin \phi$) associadas com o ângulo azimutal são calculadas usando a técnica de Von Neumann.

Conhecidos os ângulos e a energia do fóton primário, podemos calcular os cossenos diretores da nova direção do fóton como sendo

$$\begin{aligned}\cos \alpha' &= \mu \cos \alpha + A(\cos \alpha \cos \gamma \cos \phi - \cos \beta \sin \phi), \\ \cos \beta' &= \mu \cos \beta + A(\cos \beta \cos \gamma \cos \phi - \cos \alpha \sin \phi), \\ \cos \gamma' &= \mu \cos \gamma - A(1 - \cos^2 \gamma)^2 \cos \phi\end{aligned}\tag{6.26}$$

onde

$$A = \left(\frac{1 - \mu^2}{1 - \cos^2 \gamma} \right)^{1/2}.\tag{6.27}$$

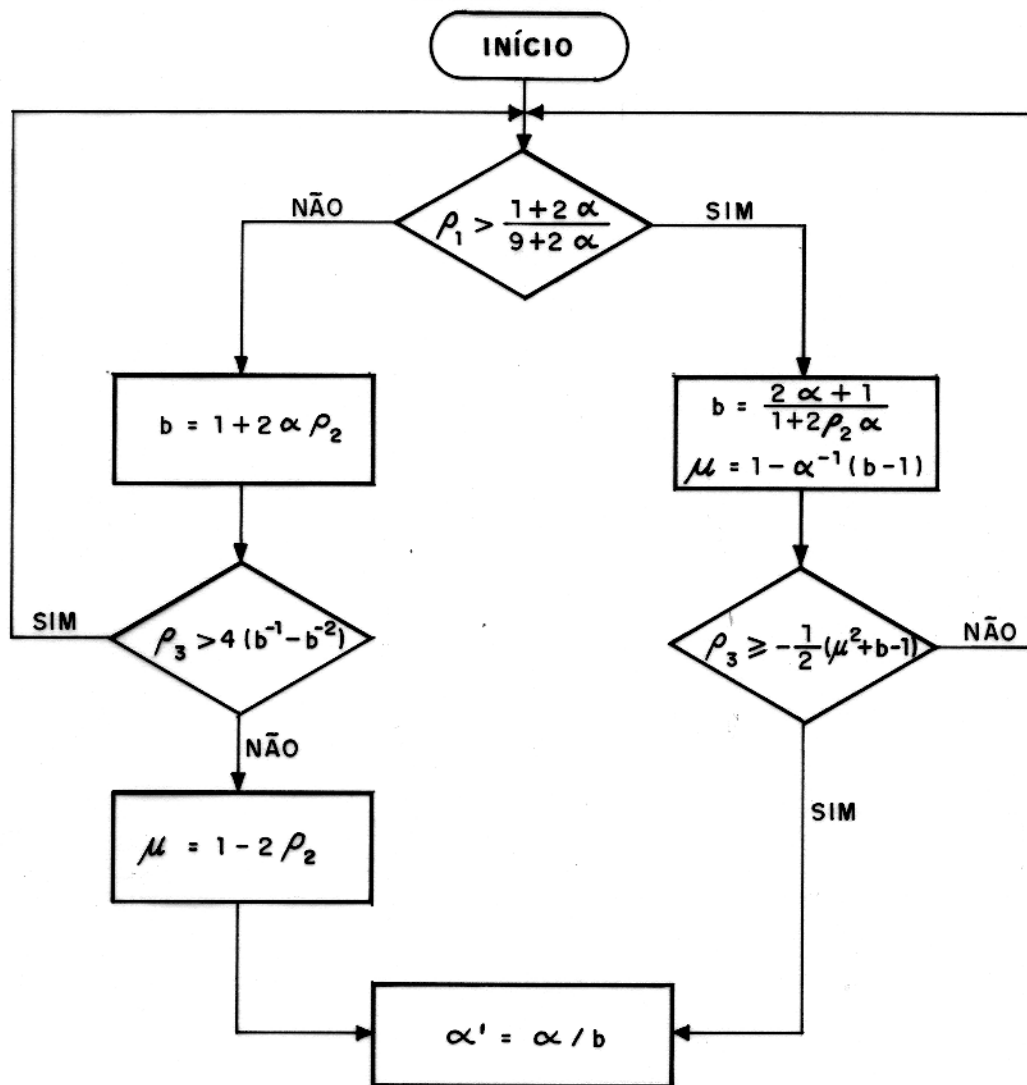


Figura 6.3 - Diagrama de blocos para o método de Khan (Adaptado de H. R. Franzen - ANL. Microfilme).

Um caso especial ocorre quando o fóton está viajando paralelo ou anti-paralelo ao eixo z , pois o fato de $|\cos \gamma| = 1$, determina uma instabilidade numérica na equação (6.26). Neste caso, o valor de A torna-se inválido e uma nova expressão para a direção do fóton deve ser considerada

$$\begin{aligned}\cos \alpha' &= (1 - \mu^2)^{1/2} \cos \phi, \\ \cos \beta' &= (1 - \mu^2)^{1/2} \sin \phi, \\ \cos \gamma' &= \frac{\cos \gamma}{|\cos \gamma|}.\end{aligned}\tag{6.28}$$

O comprimento do percurso efetuado pelo elétron Compton é calculado usando a teoria de Wilson¹, que estabelece

$$d_{(e-)} = \ln 2 \left(\frac{E_{(e-)}}{E_c \ln 2} + 1 \right),\tag{6.29}$$

onde a energia do elétron $E_{(e-)}$, é a diferença entre as energias dos fótons primário e secundário, isto é, $E_{(e-)} = E_\gamma - E'_\gamma$, sendo E_c , a energia crítica do elétron e que pode ser aproximada em unidade MeV pela equação

$$E_c = \frac{1600mc^2}{Z_{ef}},\tag{6.30}$$

sendo Z_{ef} , o número atômico efetivo do material cintilador.

O próximo ponto de interação do elétron será dado pelas coordenadas

$$\begin{aligned}x' &= x + d_{(e-)} \cdot \cos \alpha', \\ y' &= y + d_{(e-)} \cdot \cos \beta', \\ z' &= z + d_{(e-)} \cdot \cos \gamma'\end{aligned}\tag{6.31}$$

Para determinar a energia absorvida pelo cristal, podemos seguir dois caminhos. Primeiro, fazemos um teste para ver se o ponto (x', y', z') , da extremidade final do trajeto do elétron, se encontra dentro ou fora do cristal. Caso este ponto se localize dentro do cristal, consideramos o cristal como que absorvendo completamente a energia do elétron e assim $E_{abs} = E_{(e-)}$. O segundo ocorre quando o ponto (x', y', z') se acha localizado fora do cristal. Neste caso, em vez de calcular diretamente a energia dissipada pelo elétron no cristal, usaremos de um procedimento um pouco diferente, que é o de estimar a energia do elétron imediatamente após deixar o cristal e subtrair esta energia da energia original transportada por ele. Se assumirmos que l' é a projeção dos pontos coordenados x' e y' sobre o raio do cristal cintilador, temos

$$l' = x' \cos \alpha' + y' \cos \beta'\tag{6.32}$$

¹MILHER, W. F. & SNOW, W. J. ANL 6318. Microfilme.

e o raio r_1 , dado pela projeção do raio vetor do ponto (x', y', z') sobre um plano qualquer, normal ao eixo do cristal é

$$r_1 = (x'^2 + y'^2)^{1/2}. \quad (6.33)$$

Podemos, enfim, determinar a distância a ser percorrida pelo elétron, desde a face do cristal até o ponto de repouso

$$d_1 = \frac{l' - \sqrt{l'^2 + (R_c^2 - r_1^2)(1 - \cos^2 \gamma')}}{1 - \cos^2 \gamma'}, \quad (6.34)$$

onde R_c é o raio do cristal.

Caso $d_1 < 0$, ele será rejeitado e uma nova distância será a seguir definida

$$d_1 = \begin{cases} z' / \cos \gamma' & \text{se } z' \geq 0 \\ (H_c + z') / \cos \gamma' & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6.35)$$

sendo H_c , a altura do cristal. Se $d_1 \geq 0$, determinamos a diferença Δd entre a distância efetivamente percorrida pelo elétron e a distância d_1 , $\Delta d = d_{(e-)} - d_1$. A partir dela, estabelecemos, de acordo com o método de rejeição, o compromisso entre a magnitude máxima perdida em $d_{(e-)}$ e a altura do cristal cintilador. Isto pode ser resumido da seguinte forma : se $|z + \Delta d \cos \alpha'| \geq H_c$, adotamos para d_1 o valor indicado pela equação (6.35); caso contrário, d_1 assumirá ou o valor de $d_{(e-)}$, se $d_1 > d_{(e-)}$, ou aquele dado pela equação (6.34). Assim, a energia do elétron, imediatamente após deixar o cristal, terá um valor aproximado de

$$E_1 = \exp \left(\frac{d_1}{2.86 \ln 2} - 1 \right) \cdot 10.7415 \quad (6.36)$$

e finalmente, a energia absorvida pelo cristal será $E_{abs} = E_{(e-)} - E_1$.

O passo final relaciona-se com a absorção da energia do fóton secundário E'_γ . Este fóton será tratado da mesma forma que o fóton primário e percorrerá a distância dada pela equação (6.12).

Contudo, a história será dada com terminada sempre que $E'_\gamma < 10 \text{ KeV}$, caso em que a energia absorvida pelo cristal será $E_{abs} = E'_\gamma$.

6.2.2 Simulação do Espalhamento Rayleigh

Na simulação do efeito Rayleigh, suporemos que os átomos no cristal absorvem uma quantidade de energia muito pequena ($\approx 1 \text{ KeV}$). A nova direção do fóton é determinada

comparando um número aleatório ρ_1 com o ângulo crítico θ_c , cujo seno será dado por

$$\sin \theta_c = K \frac{mc^2}{E_\gamma}, \quad (6.37)$$

(onde a constante K para o cristal NaI(Tl) assume o valor $K = 0.026\sqrt[3]{53}$) com um outro número aleatório ρ_2 , com a seguinte distribuição

$$d_n \cong \exp(-b \cos \theta_c), \quad (6.38)$$

onde $b = 1/10$.

A seleção do cosseno do ângulo polar de espalhamento, $\mu = \cos \theta$, se faz, comparando o cosseno do ângulo crítico obtido da relação

$$\cos^{(1)} \theta_c = 1 - 2 \sin^2 \theta_c \quad (6.39)$$

com o cosseno do ângulo crítico, distribuído uniformemente no intervalo $(-1, 1)$, dado por

$$\cos^{(2)} \theta_c = 2\rho_1 - 1 \quad (6.40)$$

A condição para a aceitação do cosseno do ângulo crítico é $\cos^{(2)} \theta_c \geq \cos^{(1)} \theta_c$. Caso contrário, devemos refazer a simulação até que esta condição seja satisfeita. Entretanto, este trabalho deve ser evitado sempre que $|\cos^{(1)} \theta_c| > 1$, caso em que $\cos^{(2)} \theta_c$ será incondicionalmente selecionado.

O passo seguinte é substituir $\cos^{(2)} \theta_c$ na distribuição (6.38) e restringir sua aceitação definitiva à comparação com um segundo número aleatório ρ_2 , sob a condição anapelável de que $\mu = \cos^{(2)} \theta_c$ se e somente se $d_n \geq \rho_2$.

Da mesma forma que para o espalhamento Compton, o ângulo azimutal é determinado de acordo com o método de Von Neumann e a energia do fóton secundário será dada por $E'_\gamma = E_\gamma - 1.0 \text{ KeV}$.

O novo ponto de interação (x', y', z') é calculado à semelhança do espalhamento compton, e a história prosseguirá até que o fóton escape do cristal, é absorvido ou tenha sua energia reduzida a um nível tal que não exista mais interesse nele.

6.2.3 Simulação do Efeito Fotoelétrico

O esforço inicial desta simulação está na escolha do átomo e da camada onde ocorre o efeito fotoelétrico. A maior probabilidade relativa de ocorrência do efeito deve-se aos átomos

de iôdo e podemos, sem introduzir erros apreciáveis no resultado final da simulação, supor que o cristal constitui-se exclusivamente de átomos de iôdo. Assim, se levarmos em conta que $\approx 80\%$ do efeito ocorre na camada K e quase todo o restante na camada L , onde as energias de ligação ou função trabalho são $E_B^{(K)} = 33.164 \text{ KeV}$ e $E_B^{(L)} = 5.184 \text{ KeV}$, podemos selecionar a camada de reação a partir do conhecimento da energia E_γ do fóton primário e das energias de ligação das camadas K e L , conforme demonstrado a seguir:

$$E_\gamma \geq 33.164 \text{ KeV} \quad \text{Reação na camada K,} \quad (6.41)$$

$$E_\gamma < 33.164 \text{ KeV} \quad \text{Reação na camada L.} \quad (6.42)$$

Isto permite determinar sem dificuldades, a energia do fotoelétron imediatamente após a sua ejeção

$$E_{(e^-)} = E_\gamma - E_B^{(j)}, \quad (6.43)$$

onde j é a camada selecionada.

O ângulo azimutal ϕ é distribuído uniformemente de acordo com o método de Von Neumann, enquanto o ângulo polar θ , obedece à distribuição

$$dn = \sin \theta \left[1 + 2\beta \left(1 + \frac{E_B^{(j)}}{E_{e^-}} \right) \cos \theta \right] \sin \theta d\theta \quad (6.44)$$

sob a condição $dn > 0$ para $\beta = v_{(e^-)}/c$.

A distribuição acima sustenta a idéia de que existe uma probabilidade muito grande do fotoelétron sair numa direção perpendicular à do fóton incidente. Como o ângulo θ deve estar compreendido no intervalo $[0, \pi]$, ele pode ser simulado pela equação $\theta = \pi(1 - \rho_1)$, onde ρ_1 é novamente um número aleatório no intervalo $(0, 1)$.

Usando a técnica de rejeição, uma comparação é feita adotando-se uma outra distribuição tomando por base o valor máximo permitido para θ

$$D = \frac{dn/d\theta}{(1 - \cos^2 \theta_{max})(1 + A_k \cos \theta_{max})} \quad (6.45)$$

e um número aleatório ρ_2 . O ângulo polar $\mu = \cos \theta$ só será aceito após verificada a relação $\rho_2 \leq D$.

A variável A_k , utilizada na distribuição D , é uma função das energias do fóton incidente, da ligação do elétron na j -ésima camada e da energia de ejeção do fotoelétron, podendo ser expressa pela equação

$$A_k = 2\beta \left(1 + \frac{E_B^{(j)}}{E_{(e^-)}} \right) \quad (6.46)$$

e, finalmente

$$\cos \theta_{max} = \frac{[(1 + A_k)^2 + A_k^2]^{1/2}}{A_k} - \frac{1 + A_k}{A_k}. \quad (6.47)$$

De posse dos valores dos ângulos polar e azimutal, calculamos os cossenos diretores ($\cos \alpha'$, $\cos \beta'$, $\cos \gamma'$) de acordo com a equação (6.26), e a partir deles, o novo ponto de interação (x', y', z') do fotoelétron. A distância percorrida pelo fotoelétron é calculada pela teoria de Wilson.

A análise da deposição de energia no cristal pelo fotoelétron é feita verificando se o ponto (x', y', z') cai dentro ou fora do cristal. O trabalho subsequente é repetido como nas simulações anteriores.

Não devemos, no entanto, esquecer que ao lado do fotoelétron há ainda a produção de raios-X característicos, cuja energia, para o átomo de iôdo, pode ser calculado pela expressão simples

$$E_{R-X} = E_B^{(K)} - E_B^{(L)} \approx 28 \text{ KeV} \quad (6.48)$$

e tem distribuição isotrópica. Este raio-X é tratado da mesma forma que os raios gama primários.

6.2.4 Simulação da Produção de Pares

Conforme visto no capítulo anterior, o efeito de produção de pares só é energeticamente possível naqueles casos em que a energia do fóton primário é maior que $2mc^2$, casos estes em que as energias de ambos, o elétron e o pósitron, são dadas por

$$E_{(e^-)} = E_{(e^+)} = \frac{1}{2}(E_\gamma - 1.022) \quad (6.49)$$

e tem o ângulo azimutal distribuído uniformemente de acordo com a técnica de Von Neumann, enquanto o cosseno do ângulo polar assume o valor

$$\mu = \cos \left(\frac{mc^2}{E_{(e^-)}} \right) \quad (6.50)$$

O passo seguinte será determinar o comprimento do percurso do elétron ou pósitron pela teoria de Wilson, juntamente com o novo ponto de interação (x', y', z') e checar se o trajeto completo das partículas se encontra dentro ou fora do cristal. Se o elétron tem todo o seu percurso restrito ao interior do cristal, a energia absorvida será simplesmente $E_{abs} = E_{(e^-)}$.

Caso o elétron escape do cristal, calculamos a sua energia E_1 imediatamente após ele deixar o cristal. Isto pode ser feito da mesma forma que aquela conduzida para o espalhamento Compton, estimando a energia absorvida com sendo $E_{abs} = E_{(e^-)} - E_1$.

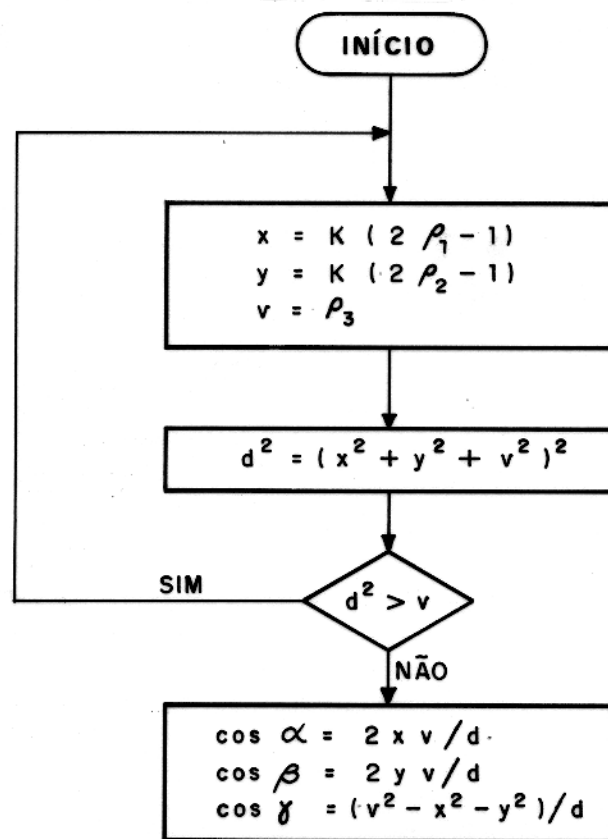


Figura 6.4 - Diagrama de blocos para o método de Coveyou (Adaptado de H. R. Franzen - ANL. Microfilme).

Para o pósitron ocorre um processo um pouco diferente. Caso ele deposite sua energia dentro do cristal, dois raios gama de aniquilação são produzidos no final do seu trajeto, cada um com uma energia dada por $E_{\gamma_1} = E_{\gamma_2} = 510.8 \text{ KeV}$. A direção de um dos raios gama de aniquilação é escolhida aleatoriamente, segundo o método de rejeição de *Coveyou* para seleção de direções isotrópicas aleatórias. Consequentemente, a direção do outro raio gama é determinada a 180° do primeiro.

O método de *Coveyou* pode ser melhor entendido com o auxílio do diagrama de blocos da Figura 6.4. Se ρ_1, ρ_2, ρ_3 são três números aleatórios, uniformemente distribuídos no intervalo $(0, 1)$ e k é uma constante cujo valor é dado por *Coveyou* como sendo $k = \sqrt{3}/\sqrt[3]{16}$, os cossenos diretores do espalhamento são aqueles constantes do diagrama. A partir daí, os raios gama de aniquilação são tratados da mesma forma que os fótons primários.

6.3 ANÁLISE DOS RESULTADOS DA SIMULAÇÃO MC

A qualidade esperada da simulação da função resposta do cristal é medida através de dois fatores intrínsecos de cada cristal: (1) a fotofração e (2) a eficiência total absoluta. A

Tabela 6.1 - Fotofração para um cristal NaI de 2 x 2 in.

E(MeV)	GINASB	ANL-6318	ANL-5902	MC
0.279	0.831 $\pm$ 0.001	0.829	0.855	0.842 $\pm$ 0.001
0.662	0.476 $\pm$ 0.001	0.470	0.481	0.467 $\pm$ 0.001
1.330	0.295 $\pm$ 0.005	0.297	0.286	0.291 $\pm$ 0.004
2.620	0.166 $\pm$ 0.001	0.189	0.199	0.184 $\pm$ 0.001
4.450	0.121 $\pm$ 0.001	0.110	0.141	0.133 $\pm$ 0.001

fotofração nada mais é do que a fração dos fótons interagindo no cristal que são totalmente absorvidos, incluindo todas as partículas secundárias. A eficiência total é a fração da emissão total da fonte de raios gama que interage pelo menos uma vez no cristal. Estes fatores podem ser facilmente calculados quando o espectro de perda de energia é conhecido. Seus valores variam sensivelmente com a variação das dimensões do cristal, da geometria das fontes e da energia dos fótons incidentes. Porém, na ausência de qualquer outro tipo de simulação cuja incidência das fontes se dê lateralmente, como no caso da perfilagem *Wireline*, cumpre - nos modificar o nosso sistema, adotando incidência frontal ao cilindro composto pelo cristal cintilador e fazendo comparações com os sistemas simulados por outros autores. Para o caso mais geral de simulação, adotaremos uma fonte gama monoenergética de Cs^{137} ($E_\gamma = 0.662 MeV$), distante 10 cm da face do cristal.

Para estas comparações, utilizamos dados colhidos por Franzen² e da simulação GINASB desenvolvida no *Instituto de Energia Atômica* da USP. Estes resultados são mostrados na 6.1 e 6.2. No caso da simulação MC desenvolvida neste trabalho, em lugar de calcular os erros médios e os intervalos de confiança de cada medida, optamos por fixar o número de interações dos fótons com o cristal cintilador em um valor tal que resultasse em um erro médio de exatos 1%. Este número foi calculado de acordo com a estatística de Poisson como sendo 10000. Ressalto ainda que uma mesma simulação foi repetida cinco vezes para cinco diferentes sementes geradoras da série de número pseudo-aleatórios do subprograma URAND. As contagens em cada canal do espectrômetro foram tomadas como sendo os valores médios destas contagens. Estas médias foram utilizadas nos cálculos da fotofração e da eficiência total, constantes das tabelas aqui apresentadas, com seus respectivos intervalos de confiança.

²FRANZEN, H. R. et al. 1968. ANL (*Argonne National Laboratory*). Microfilme

Tabela 6.2 - Eficiência total para o cristal NaI de 2 x 2 in.

E(MeV)	GINASB	ANL-6318	ANL-5902	MC
0.279	0.996	0.966	0.957 ± 0.004	0.952 ± 0.003
0.662	0.764	0.754	0.749 ± 0.005	0.743 ± 0.003
1.330	0.612	0.602	0.613 ± 0.005	0.611 ± 0.004
2.620	0.501	0.495	0.509 ± 0.003	0.498 ± 0.003
4.450	0.477	0.471	0.484 ± 0.002	0.472 ± 0.001

6.4 EFEITO DA RESOLUÇÃO SOBRE O ESPECTRO DE PERDA DE ENERGIA

O espectro de perda de energia calculado pelo programa MC não levou em conta o efeito da resolução acompanhando a coleção da luz dentro do cristal cintilador e a sua amplificação através do sistema fotomultiplicador. Nesta seção, incluiremos estes efeitos nos cálculos. Vimos na seção 4.4 que a função usada para corrigir os efeitos da resolução é a curva gaussiana dada pela equação 4.10.

As contagens $n(k)$, em cada canal k do espectrômetro, podem ser obtidas pelo seguinte modelo convolucional

$$n(k) = \sum_{i=1}^N \frac{w_i L(i)}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} e^{(E_i - E_k)^2 / 2\sigma_i^2}, \quad (6.51)$$

onde $L(i)$ são as contagens no i - ésimo canal do espectro ideal, calculado pelo programa MC, e w_i , um peso que assume os valores

$$w_i = \begin{cases} 1/2 & \text{se } i \text{ é o primeiro ou último canal} \\ 1 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.52)$$

A Figura 4.4 mostra a função $n(k)$ para o caso da fonte monoenergética de Cs^{137} e variações no detector. Sua semelhança com os espectros experimentais (KOGAN et al., 1971) é um bom indicativo da qualidade da simulação aqui desenvolvida.

6.5 MODELO PARA O ACOPLAMENTO FEM x MC

Nesta seção, tratamos do sistema de acoplamento entre o fluxo escalar calculado pelo algoritmo FEM e a função resposta do detector, determinada pela simulação MC. A geometria adotada no modelamento é aquela mostrada na Figura 6.5(a).

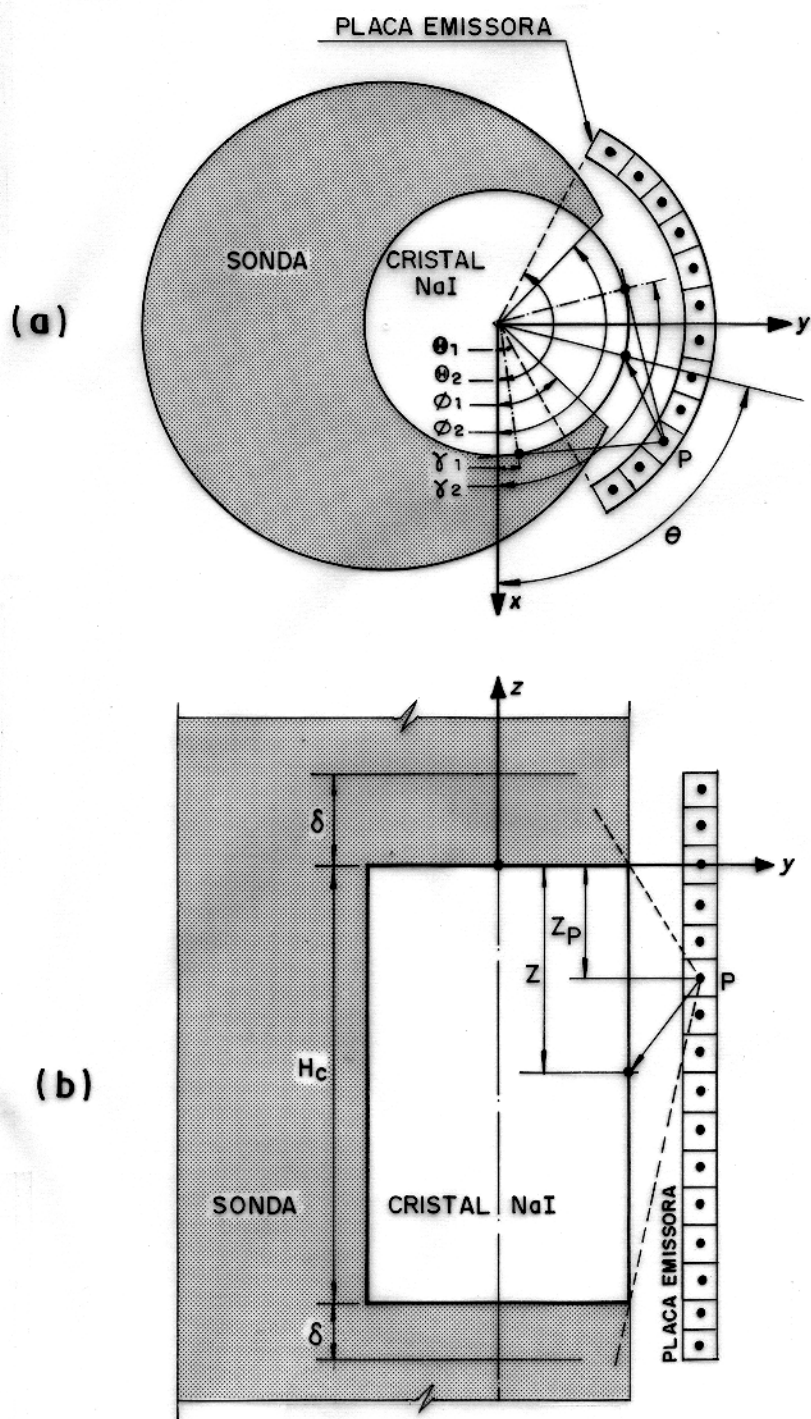


Figura 6.5 - Geometria adotada na simulação da função resposta do detector NaI(Tl). (a) Vista em planta, mostrando o posicionamento do cristal na sonda de perfilagem, os ângulos envolvidos na simulação e a localização da placa emissora; (b) Vista lateral, mostrando o ponto p , selecionado da placa emissora e a cordenada Z_p deste ponto, bem como a cordenada Z de incidência do fóton na superfície do cristal.

A principal função deste item é a seleção do bloco da placa fictícia emissora do fóton cuja história se pretende seguir e o ponto na face lateral do cristal onde ele incide após percorrer, em média, a distância de um livre percurso médio que separa o centro da placa da face do cristal.

Conforme indicado na Figura 6.5(a), a incidência se restringe ao intervalo $(\phi_1, \phi_2) = (\pi/4, 3\pi/4)$ e representa a porção da face lateral do cristal efetivamente exposta ao fluxo de radiação. Vamos considerar, para efeito de eficácia da simulação, a primeira interação do fóton incidente, como uma interação forçada. A simulação de interações forçadas é descrita por Zerby.³

A seleção do bloco-emissor é feita através de um número aleatório ρ_1 e representa a probabilidade de emissão de cada bloco individual. Para tal, selecionamos um ponto qualquer p sobre o eixo da placa emissora, restrito ao intervalo angular $(\Theta_1, \Theta_2) = (\pi/6, 5\pi/6)$,

$$\phi_p = \Theta_1 + (\Theta_2 - \Theta_1) \cdot \rho_1 \quad (6.53)$$

enquanto sua posição, em relação à vertical, é dada por $Z_p = (Hc + 2\delta)\rho_2 - (Hc - \delta)$. A variável δ é aquela mostrada na Figura 6.5(b). As coordenadas do ponto de incidência na superfície do cristal podem ser determinadas também com o auxílio de números aleatórios na forma

$$Z = -Hc \cdot \rho_3, \quad (6.54)$$

$$\theta = \max(\phi_1, \gamma_1) + [\min(\phi_2, \gamma_2) - \max(\phi_1, \gamma_1)] \cdot \rho_4. \quad (6.55)$$

onde o par $[\gamma_1, \gamma_2]$ assume os valores

$$\gamma_1 = \phi_1 - \alpha_0$$

$$\gamma_2 = \phi_2 + \alpha_0$$

sendo $\alpha_0 = \arccos[Rc/(Rc + mfp)]$, a coordenada angular que determina as tangentes que têm como ponto comum o ponto p sobre a placa emissora.

As coordenadas cartesianas X e Y do ponto de incidência são agora calculadas sem dificuldades pelas expressões abaixo, juntamente com as coordenadas do ponto p sobre a placa

$$X = Rc \cdot \cos \theta \quad X_p = Rc \cdot \cos \phi_p$$

$$Y = Rc \cdot \sin \theta \quad Y_p = Rc \cdot \sin \phi_p.$$

³ZERBY, C. D. & MORAN, H. S. ORNL 3169. Microfime.

Os cossenos diretores assumem os valores

$$\begin{aligned}\cos \alpha &= (X - X_p) / [(X - X_p)^2 + (Y - Y_p)^2 + (Z - Z_p)^2]^{1/2}, \\ \cos \beta &= (Y - Y_p) / [(X - X_p)^2 + (Y - Y_p)^2 + (Z - Z_p)^2]^{1/2}, \\ \cos \gamma &= (Z - Z_p) / [(X - X_p)^2 + (Y - Y_p)^2 + (Z - Z_p)^2]^{1/2}.\end{aligned}$$

Enfim, o acoplamento propriamente dito se completa quando a probabilidade de emissão de cada bloco é determinada para cada grupo de energia. Seja P_{ij} a probabilidade de emissão do bloco i , relativo ao grupo j , e ϕ_{ij} é o fluxo escalar para o grupo j . O índice i representa o número do nó da malha de elementos finitos, coincidente com o centro de gravidade do i -ésimo bloco da placa emissora. Podemos, enfim, calcular o fluxo global para os G grupos na forma

$$\Phi_j = \sum_{i=1}^M P_{ij} \phi_{ij} \quad j = 1, 2, \dots, G \quad (6.56)$$

sendo M o número total de blocos.

Se G é uma matriz onde cada coluna é a função resposta do detector $n(k)$ ao fluxo de radiação gama, para diversos grupos de energia, normalizada pelo número total de histórias utilizadas na sua simulação, podemos estabelecer o seguinte modelo convolucional para o espectro de altura do pulso

$$G\Phi = \Theta. \quad (6.57)$$

Neste trabalho, adotamos um sistema de detecção onde o fotopico relativo à energia do primeiro grupo corresponde ao canal de número 256. Isto equivale à cerca de 300 canais de energia na escala do espectrômetro, após a inclusão dos efeitos da resolução sobre o espectro ideal. Assim,

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} & \cdots & g_{1,G} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & \cdots & \vdots \\ g_{31} & g_{32} & \vdots & \cdots & g_{D,G} \\ g_{41} & \vdots & g_{C,3} & \cdots & \\ \vdots & g_{B,2} & & & \\ g_{A,1} & & & & \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \\ \Theta_4 \\ \vdots \\ \Theta_A \end{bmatrix}, \quad (6.58)$$

onde Θ_k é o valor lido no espectro de altura de pulsos no k - ésimo canal do espectrômetro.

7 - SIMULAÇÃO DE PERFIS NUCLEARES

Neste capítulo, passaremos à aplicação da metodologia desenvolvida neste trabalho. Os resultados obtidos a partir dos modelos geológicos propostos serão de grande utilidade na avaliação de formações complexas.

7.1 SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA NGS

A sonda NGS responde à radiação gama natural da formação. Esta radiação pode ser considerada como o produto da desintegração de alguns radioisótopos que tomam parte na constituição dos minerais comuns formadores de rochas, mas que são raramente encontrados como ocorrências isoladas nos perfis.

Entre os dois tipos de ferramentas normalmente usadas na determinação da radioatividade natural, a sonda GR mede a radioatividade total da formação, enquanto a sonda NGS, mede e quantifica as concentrações dos três elementos naturais mais importantes utilizados como determinadores da argilosidade das formações : Potássio, Urânio e Tório.

7.1.1 Fontes de Radioatividade Natural

As principais fontes de radioatividade natural das formações são resultados do decaimento dos três radioisótopos dos elementos acima mencionados : K^{40} , U^{238} e Th^{232} . O decaimento do Potássio-40 é acompanhado pela emissão de um raio gama característico de energia igual a 1.460 MeV. O Tório-232 e o Urânio-238 decaem através de séries complexas, constituídas por cerca de doze isótopos intermediários e um isótopo final, estável, do Chumbo. A Figura 7.1 mostra o espectro de linhas para estes isótopos. A composição espectral das séries fica melhor visualizada pelos valores constantes da 7.1 e 7.2, onde, além das energias de cada linha, temos também identificado suas intensidades relativas.

Podemos ver que as energias dos raios gama associados com a série do Urânio-238, estão distribuídas entre 186.0 MeV e 2.448 MeV. As principais linhas monocromáticas, ou sejam, aquelas com intensidades relativas acima de 5%, são as linhas de 0.295, 0.352, 0.609, 1.12, 1.238, 1.764 e 2.204 MeV. Cerca de 98% da energia de emissão gama da série total e 80% do número de quanta, são emitidos por dois isótopos apenas (KOGAN et al., 1971): o

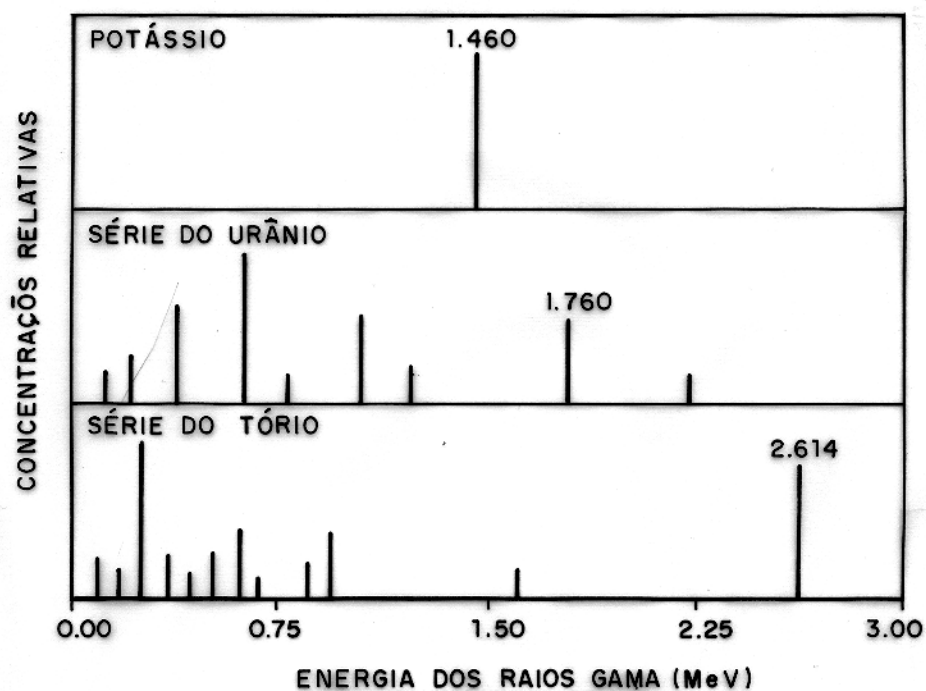


Figura 7.1 - Espectro de linhas para os isótopos K^{40} , U^{238} e Th^{232} , mostrando as concentrações relativas de cada elemento no estado de equilíbrio secular. Apenas as linhas com frequência acima de 5 % estão mostradas nesta figura (Adaptado de WITTERBROOD, 1980).

Tabela 7.1 - Espectro de linhas dos raios gama dos radionuclídeos naturais da série do U-238 (Extraído de WAHL, 1983)

ENERGIA(KeV)	FREQ.(cps)	ENERGIA(KeV)	FREQ.(cps)
2448	1.6	1120	15.3
2293	0.3	1070	0.3
2204	5.0	1052	0.3
2118	1.2	1001	0.6
1873	0.2	934	3.2
1843	2.1	839	0.6
1838	0.4	806	1.2
1764	16.0	786	1.4
1729	3.1	768	5.0
1684	0.2	720	0.4
1661	1.2	703	0.5
1595	0.3	665	1.6
1583	0.7	609	42.8
1543	0.4	580	0.4
1538	0.4	487	0.4
1509	2.2	455	0.3
1408	2.5	389	0.5
1402	1.5	387	0.4
1385	0.8	352	36.7
1378	4.0	295	18.9
1281	1.5	274	0.5
1238	6.0	259	1.0
1208	0.5	242	7.6
1155	1.7	186	5.5
1134	0.3	-	-

Tabela 7.2 - Espectro de linhas dos raios gama dos radionuclídeos naturais da série do Th-232 (Extraído de WAHL, 1983).

ENERGIA(KeV)	FREQ.(cps)	ENERGIA(KeV)	FREQ.(cps)
2614	35.9	860	4.6
1639	0.5	836	3.4
1630	1.9	794	4.8
1620	1.3	784	1.4
1587	4.4	772	2.4
1510	0.8	727	5.5
1501	0.8	583	31.6
1496	1.0	562	1.4
1459	1.0	511	9.7
1288	0.1	463	5.3
1247	0.7	409	2.5
1158	0.3	338	12.9
1111	0.4	328	3.9
1094	0.2	300	4.9
1079	0.6	277	4.6
1065	0.2	270	4.0
1035	0.3	239	43.1
986	0.3	209	5.3
969	17.0	154	1.6
964	5.5	129	14.2
911	29.9	115	4.7

Chumbo-214 e o Bismuto-214. A energia dos raios gama provenientes da série do Tório-232 se estende desde algumas dezenas de KeV até 2.614 MeV. As principais linhas são aquelas com energias de 0.239, 0.338, 0.583, 0.911, 0.969 e 2.614 MeV. A energia total destas linhas é da ordem de 70% da energia total da série. Aqui também, dois isótopos apenas liberam a quase totalidade da intensidade da radiação: o Ac^{228} e o Tl^{208} . Assim, concluímos que o raio gama mais proeminente da série do U^{238} vem do Bi^{214} , com pico a 1.764 MeV, enquanto aquele da série do Tório-232, vem do Tl^{208} , com pico de energia a 2.614 MeV. São estes dois isótopos que identificam suas respectivas séries, em lugar do Urânio-238 e do Tório-232, desde que elas estejam no estado de equilíbrio secular.

Temos, finalmente, o K^{40} , um isótopo do Potássio, com abundância relativa de apenas 0.00118% e frequência igual a 11. Junto com outros radioisótopos menos importantes (*Lantânio-138, Lutécio-176 e Bérílio-7*), ele não forma cadeia ou família. A 7.3 mostra uma lista dos principais minerais formadores das rochas e seus conteúdos de Potássio, Urânio e Tório, a serem usados como fontes para os modelos de simulação da resposta da sonda NGS. É importante ressaltar que as concentrações mostradas na 7.3 e Figura 7.1, são dadas para as séries já no estado de equilíbrio secular.

Existem numerosos minerais ou formações sedimentares contendo Potássio. Um exemplo típico é a Silvita (KCl), um evaporito reconhecidamente rico em Potássio. Os feldspatos, que juntamente com o quartzo, estão entre os minerais mais abundantes encontrados nos arenitos, possuem uma família de membros ricos em Potássio. Um grande grupo das argilas também os contém como parte da estrutura de sua rede. Igual associação se faz para o grupo das micas.

Por outro lado, os minerais contendo Tório e Urânio são mais raros. Devido à sua alta solubilidade, os compostos de Urânio são facilmente transportados, o que torna sua ocorrência limitada aos folhelhos orgânicos e fosfatos. O Tório, por sua vez, apresenta baixas solubilidade e mobilidade, o mesmo ocorrendo para o Potássio. O Tório tende por este motivo, a concentrar-se preferencialmente em minerais residuais, rochas detríticas e argilas (WITTEBROOD, 1980). Podemos, pois, correlacioná-lo com os elementos mais pesados encontrados das rochas.

7.1.2 Modelos para Calibração da Ferramenta

Esta etapa tem como função principal, estabelecer uma relação direta entre a taxa de contagem total e a distribuição e quantidade de material radioativo presente na formação, levando-se em conta, o tipo, tamanho, eficiência do detector utilizado e geometria entre o

Tabela 7.3 - Composição isotópica dos constituintes mineralógicos das formações mais importantes para a indústria do petróleo.(Extraído de SERRA, 1984;WILLIE, 1984)

Nº	MINERAL/FLUIDO	% K-40	ppm U-238	ppm Th-232
1	Quartzo	0.00 - 0.15	0.00 - 0.40	0.00 - 0.20
2	Calcita	0.00 - 0.10	0.00 - 1.00	0.00 - 0.50
3	Dolomita	0.00 - 0.40	0.00 - 1.00	0.00 - 1.50
4	Anidrita	0.00 - 0.10	0.00 - 0.35	0.00 - 0.10
5	Gypsum	0.00 - 0.15	0.00 - 1.20	0.00 - 1.00
6	Caolinita	0.00 - 0.42	1.50 - 3.00	6.00 - 19.00
7	Ilita	0.00 - 4.50	0.00 - 1.50	6.00 - 19.00
8	Montmorilonita	0.00 - 0.16	2.00 - 5.00	14.00 - 24.00
9	K-Feldspato	11.80 - 14.00	0.00 - 1.50	0.00 - 0.10
10	Muscovita	7.90 - 9.80	0.00 - 1.00	0.00 - 1.00
11	Biotita	6.70 - 8.30	0.00 - 1.00	0.00 - 1.00
12	Pirita	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00
13	Barita	0.70 - 1.50	0.20 - 1.40	9.00 - 15.00
14	(Sonda)	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00
15	Água	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00	0.00 - 0.00
16	Óleo	0.00 - 0.15	0.10 - 0.30	0.00 - 0.15
17	Gás (Metano)	0.10 - 0.00	0.00 - 0.15	0.00 - 0.10

detector e a formação. Sabendo-se que a unidade API (*American Petroleum Institute*) de radioatividade utilizada em geofísica, refere-se a uma formação artificial padrão, contendo 4% de K, 24 ppm de Th e 12 ppm de U em peso e à qual foi atribuída o valor de 200 unidades API, o modelo aqui proposto consiste na elaboração de um programa computacional com os dados especificados para a formação padrão e outros tantos modelos quanto necessários, com diferentes níveis de contaminação, suficientes para a inversão da relação funcional universalmente empregada no cálculo de GR,

$$GR_{(API)} = b_1 \cdot C_K + b_2 \cdot C_U + b_3 \cdot C_{Th}, \quad (7.1)$$

onde cada constante b_i , depende, obviamente, do tipo de detector e do desenho da ferramenta. As variáveis C_K , C_U e C_{Th} , são as concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, respectivamente.

O detector considerado é semelhante àquele utilizado na sonda NGS da Schlumberger, isto é, um cristal NaI(Tl) de 300 mm de comprimento e 55mm de diâmetro, associado a um sistema MCA de seleção de altura de pulsos, de 256 canais, tendo janelas de K, U e Th cujos valores, para os intervalos de energia e seus respectivos canais, são:

$$K = 1.37 - 1.55 MeV \quad [\#134 - \#152], \quad (7.2)$$

$$U = 1.58 - 1.95 MeV \quad [\#155 - \#191], \quad (7.3)$$

$$Th = 2.40 - 2.85 MeV \quad [\#235 - \#276] \quad (7.4)$$

O poço padrão tem 200 mm de diâmetro, preenchido com água de densidade 1000 Kg/m^3 e sonda centralizada.

A Figura 7.2 mostra os espectros dos três isótopos considerados e as janelas utilizadas para suas medições.

A calibração em formações padrões permite também a determinação da concentração em massa dos radioisótopos presentes. Com a utilização de diferentes litologias para os modelos de calibração, podemos observar que a intensidade dos raios gama de uma fonte uniformemente distribuída e de concentração em massa constante, independe da densidade da formação, embora a atenuação destes raios gama seja uma função da densidade do meio.

7.1.3 Análise Espectral do Sistema K-U-Th

O método de análise desenvolvido neste trabalho, tem como base a combinação dos modelos propostos por KOIZUMI (1988) e SMITH et al. (1983), para calibração e correções

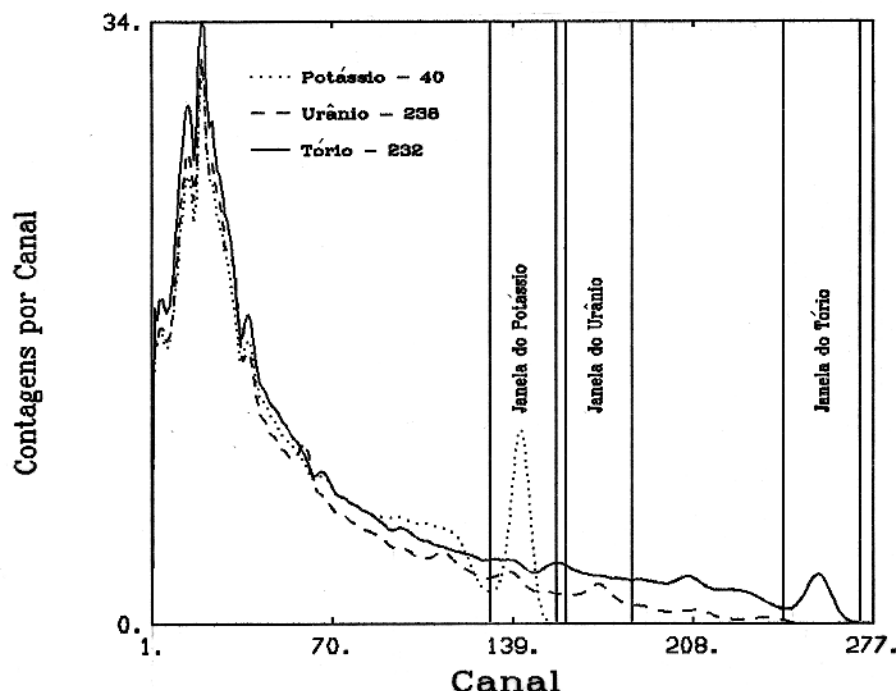


Figura 7.2 - Espectro dos raios gama naturais e a localização das três janelas utilizadas nas medidas das concentrações de K^{40} , U^{238} e Th^{232} .

ambientais de um sistema geral de perfilagem usando raios gama naturais. Partindo do fato de que as concentrações $[c_1, c_2, c_3]$ dos radioelementos presentes na formação são estipuladas a partir do conhecimento das taxas de contagem $[r_1, r_2, r_3]$, em cada janela, e que estas relações são lineares, podemos formar o seguinte sistema,

$$\begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \quad (7.5)$$

onde cada elemento a_{ij} , da matriz de sensibilidade, é uma constante determinada diretamente dos modelos de calibração, para um arranjo geométrico específico da sonda. Cada elemento a_{ij} representa a contribuição do radioelemento j na i -ésima janela de detecção.

A convenção adotada na definição dos subscritos dos elementos da matriz de calibração A , e dos vetores r e c , é:

- 1 = Potássio,
- 2 = Urânio,
- 3 = Tório.

Como exemplo, citamos o caso genérico de um modelo com as seguintes concentrações : $c_1 = 4.0\%$, $c_2 = 0$, $c_3 = 0$. Levando estes valores no sistema de equações (7.5), as constantes

referentes às contribuições da concentração de Potássio, nas três janelas selecionadas, serão dadas pelas relações

$$a_{11} = \frac{r_1}{c_1} \quad a_{21} = \frac{r_2}{c_1} \quad a_{31} = \frac{r_3}{c_1}. \quad (7.6)$$

No entanto, a matriz de sensibilidade **A** pode ser obtida completamente, perfilando $M \geq 3$ modelos de calibração a fim de se obter uma matriz resposta **R**, cujos elementos da *j*-ésima coluna são as taxas de contagem devidas ao modelo *j*, nas três janelas de detecção,

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1M} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2M} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & \dots & r_{3M} \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \dots & c_{1M} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & \dots & c_{2M} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & \dots & c_{3M} \end{pmatrix}, \quad (7.7)$$

ou de uma forma mais compacta,

$$\mathbf{R} = \mathbf{A}\mathbf{C}. \quad (7.8)$$

A solução deste sistema será obtida pós-multiplicando ambos os lados por $\mathbf{C}^T$.

$$\mathbf{R}\mathbf{C}^T = \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{C}^T \quad (7.9)$$

e podemos, finalmente, determinar a matriz de sensibilidade invertendo o sistema anterior,

$$\mathbf{A} = (\mathbf{R}\mathbf{C}^T)(\mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1}. \quad (7.10)$$

De posse da matriz de sensibilidade, as concentrações, para quaisquer modelos, podem ser determinadas pela seguinte expressão

$$\mathbf{c} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{r}, \quad (7.11)$$

onde a matriz de transformação **T**, é dada por

$$\mathbf{T} = \mathbf{A}^{-1} = (\mathbf{C}\mathbf{C}^T)(\mathbf{R}\mathbf{C}^T)^{-1}. \quad (7.12)$$

A seguir, reproduzimos um modelo geral de calibração, baseado numa formação artificial padrão existente em Clamart, França (SERRA, 1984), similar ao modelo API (K, U, Th) de Houston, conforme mostra a Figura 7.3. A estrutura básica desta formação consiste de quatro zonas com diferentes níveis de contaminação. Cada uma das três zonas de topo contém os três isótopos radioativos, Tório, Urânio e Potássio, com as concentrações mostradas na Figura 7.3, permitindo estabelecer o maior contraste possível entre elas. A zona 4, de base, foi projetada originalmente para avaliar a contribuição da radioatividade do concreto. Contudo,

180 cm	ZONA 1 $C_K = 0.68 \%$ $C_U = 1.94 \text{ ppm}$ $C_{Th} = 35.7 \text{ ppm}$	SONDA	
180 cm	ZONA 2 $C_K = 1.06 \%$ $C_U = 14.2 \text{ ppm}$ $C_{Th} = 2.26 \text{ ppm}$		
180 cm	ZONA 3 $C_K = 4.77 \%$ $C_U = 1.08 \text{ ppm}$ $C_{Th} = 2.06 \text{ ppm}$		
180 cm	ZONA 4 $C_K = 4.00 \%$ $C_U = 12.0 \text{ ppm}$ $C_{Th} = 24.0 \text{ ppm}$		

Figura 7.3 - Formação artificial padrão, construída visando a calibração da sonda NGS a ser utilizada na medida da radioatividade total das formações, bem como das concentrações em massa de K^{40} , U^{238} e Th^{232} .

substituímos esta zona por outra, composta por uma mistura dos três isótopos, de forma que a contagem total veio a ser de 200 API.

As medições foram feitas posicionando o detector no ponto médio de cada zona. As taxas de contagem em cada janela foram usadas como dados de entrada na matriz $\mathbf{R}$, permitindo determinar a matriz de transformação $\mathbf{T}$ como sendo:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1.4644 & -3.5677 & 2.4555 \\ -0.0002 & 4.1848 & -9.3616 \\ 0 & -0.0273 & 5.9426 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

onde os elementos desta matriz, volto a repetir, foram gerados levando-se em conta os valores médios da simulação MC e observando-se intervalos de confiança capazes de fixar o erro médio de cada medida em torno de 1 %. Já a resposta do perfil de raios gama total, em unidades API, fica definida pela relação

$$GR_{(API)} = 13.0559C_K + 5.8586C_U + 3.5188C_T. \quad (7.14)$$

O perfil da Figura 7.5 mostra os resultados obtidos usando a equação (7.14) no modelo geológico da Figura 7.4. Percebemos que à exceção do Tório, as demais concentrações medidas foram severamente afetadas por variações estatísticas. Verifica-se isto pelo aparecimento de leituras negativas, explicadas por anti-correlações observadas entre Tório e Urânio, por exemplo. Na prática, estes efeitos são minimizados por diversas técnicas de filtragem, sendo a principal delas, a que utiliza o filtro de Kalman. Apontamos ainda que grande parte dos erros de calibração e interpretação ocorrem pelo fato das concentrações nos modelos de calibração serem medidas em um único ponto ao longo do poço. Ao assumirmos uma relação linear entre as taxas de contagens e as concentrações em massa dos radioisótopos mencionados, estamos supondo que os elementos de interesse estão uniformemente distribuídos em volta da sonda e em concentrações relativamente altas. Isso porém não ocorre na prática, pois aí se verificam concentrações bastante reduzidas. Nestes casos, as respostas são consideradas não lineares por causa da degradação da energia dos raios gama nas janelas de menor energia. Neste trabalho, adotaremos uma nova técnica de correção. Tendo em vista o fato de que a concentração de Tório foi determinada satisfatoriamente, e em menor proporção a de Potássio, seu valor C_{Th} , será mantido e utilizado para corrigir o valor das outras concentrações.

Seja $f(x, y)$ um fator que determina a contribuição exclusiva da concentração do radioelemento y na janela correspondente ao radioelemento x . Se construirmos uma formação artificial igual aquela da Figura 7.6, com as concentrações indicadas, podemos determinar as concentrações necessárias à introdução da técnica referida acima.

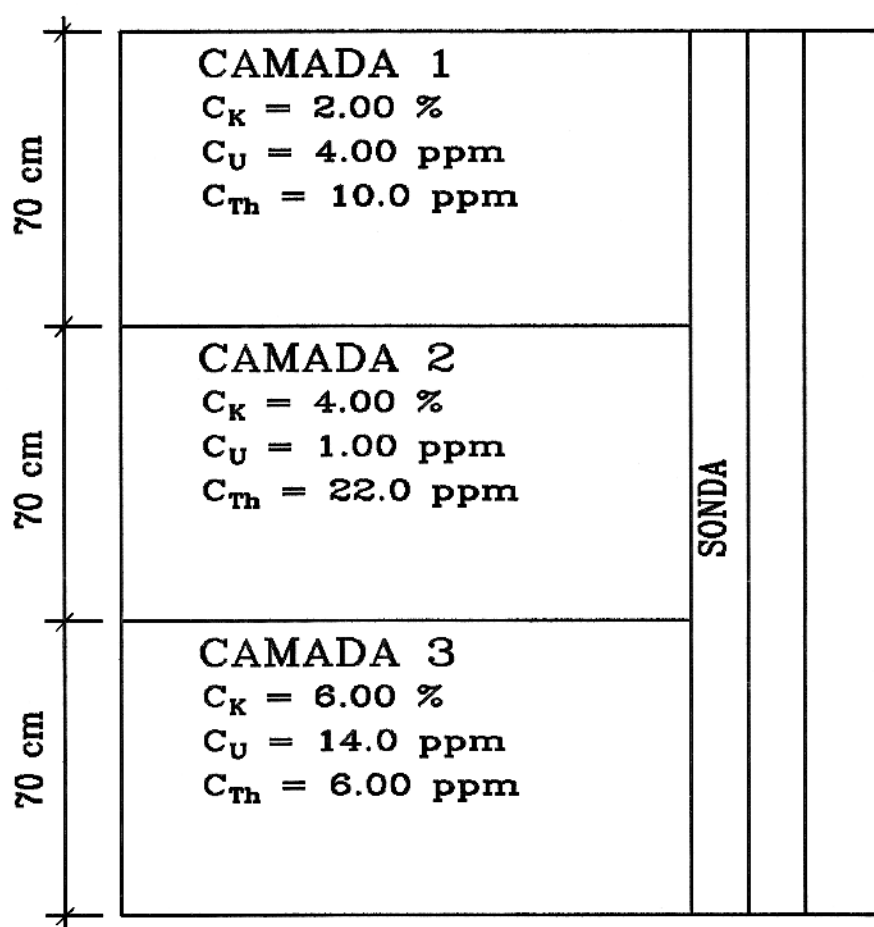


Figura 7.4 - Modelo geológico mostrando as concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório.

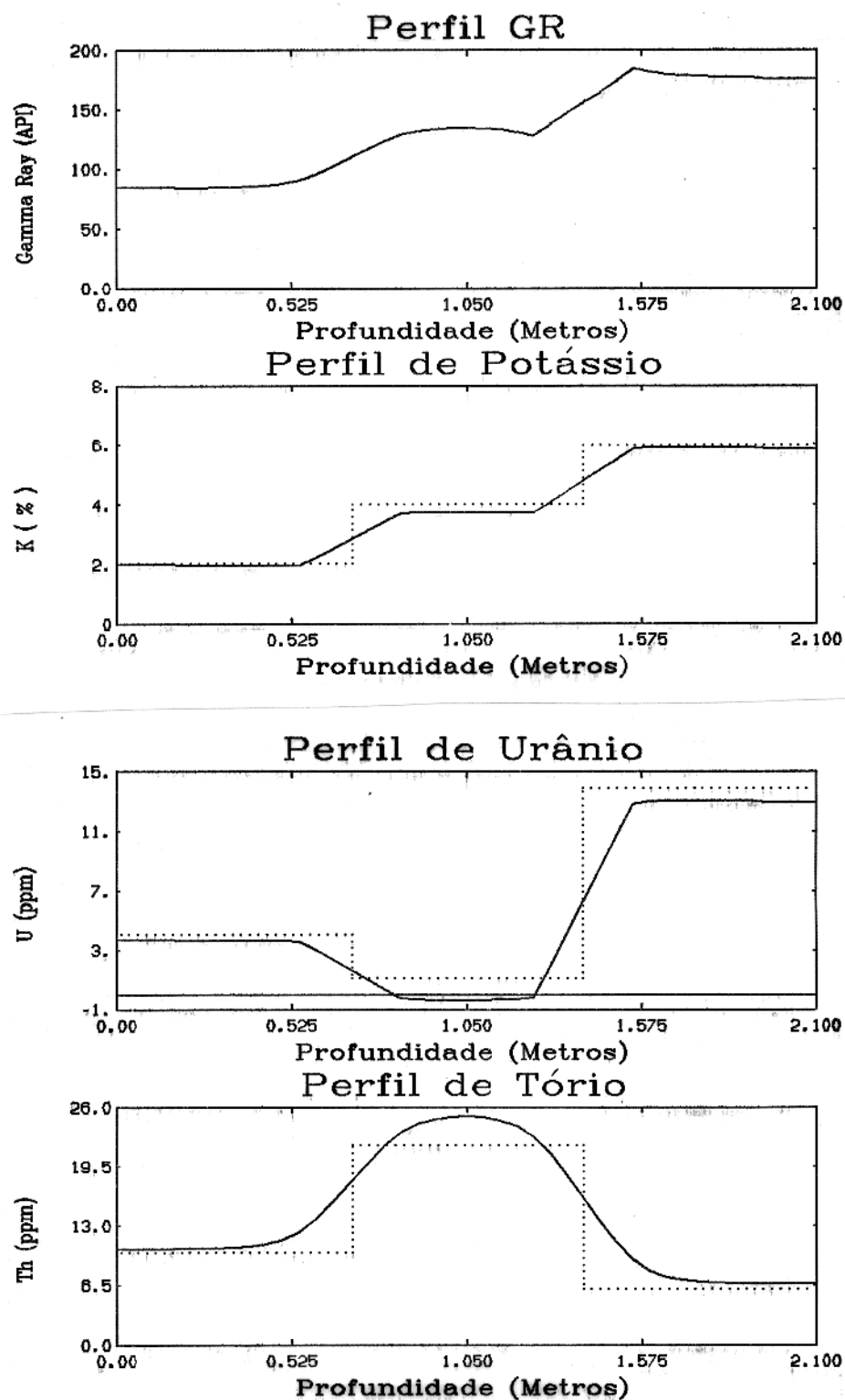


Figura 7.5 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.4.

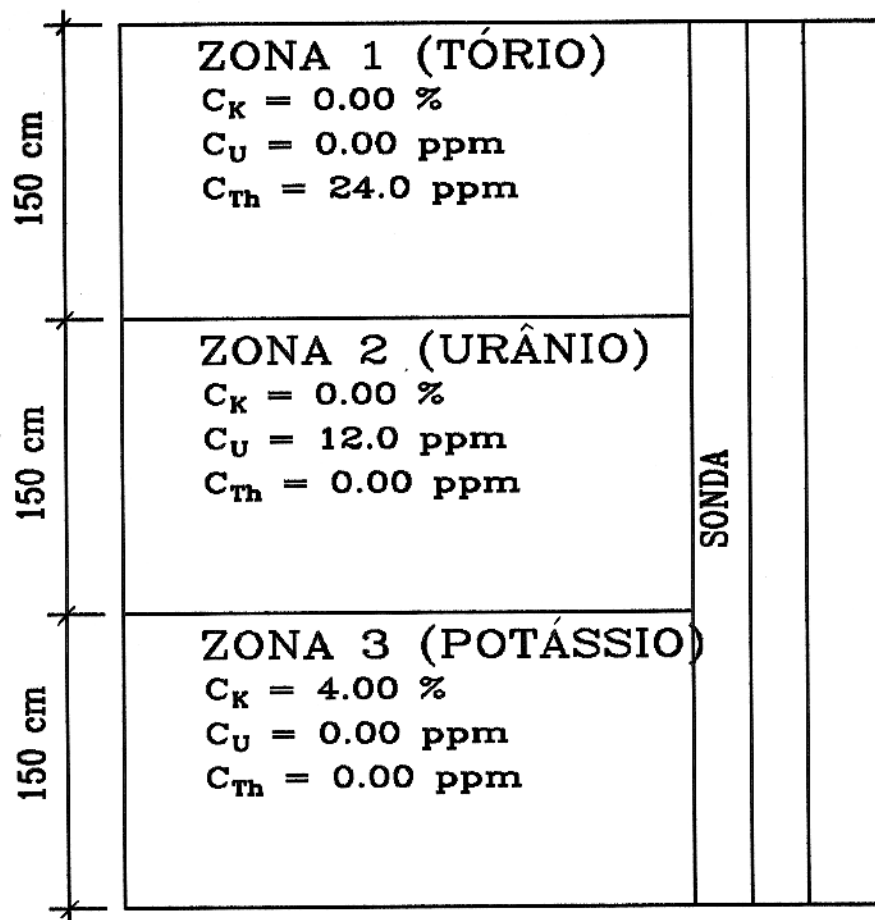


Figura 7.6 - Modelo adotado para as correções do empilhamento dos pulsos dos canais de maior energia sobre aqueles de menor energia.

Sejam $r_{(K,Th)}$, $r_{(U,Th)}$ e $r_{(Th,Th)}$, as taxas de contagem nas janelas de Potássio, Urânio e Tório, respectivamente, devidas à concentração de Tório ($C_{Th} = 24$ ppm). Os fatores de contribuição $f(K,Th)$ e $f(U,Th)$, foram determinados, posicionando o detector na zona 1:

$$f(K,T) = \frac{r_{(K,T)}}{24} = 0.7642 \text{ cps/ppm de Tório} \quad (7.15)$$

$$f(U,T) = \frac{r_{(U,T)}}{24} = 0.4196 \text{ cps/ppm de Tório.} \quad (7.16)$$

Deslocando agora o detector até o ponto médio da zona 2, repetimos a tarefa anterior, medindo as taxas de contagem $r_{(K,U)}$ e $r_{(U,U)}$, devidas à concentração de Urânio ($C_U = 12$ ppm). Assim, podemos da mesma forma, determinar o fator $f(K,U)$ da contribuição do Urânio na janela de Potássio:

$$f(K,U) = \frac{r_{(K,U)}}{12} = 0.6233 \text{ cps/ppm de Urânio.} \quad (7.17)$$

A partir destes fatores de contribuição, podemos, finalmente, corrigir as taxas de contagem r_K e r_U , medidas pela sonda de perfilagem NGS. As taxas corrigidas serão denotadas por r'_K e r'_U e assumirão os seguintes valores:

$$r'_U = r_U - f(U,T) \cdot C_T \quad (7.18)$$

$$r'_K = r_K - f(K,U) \cdot C_U - f(K,T) \cdot C_T. \quad (7.19)$$

De posse das taxas corrigidas, podemos calcular as concentrações em massa definitivas de Potássio (C_K) e Urânio (C_U). Para isto, posicionamos o detector no ponto médio da zona 3 e medimos $r_{(K,K)}$, a taxa de contagem na janela de Potássio devido a uma concentração em massa $C_T = 4.0\%$ de Potássio. Os fatores t_K e t_U , para a transformação das taxas de contagem r'_K e r'_U em concentrações de Potássio e Urânio, serão

$$t_K = \frac{r_{(K,K)}}{4} = 0.6832 \rightarrow C_K = t_K \cdot r'_K \quad (7.20)$$

$$t_U = \frac{r_{(U,U)}}{12} = 0.2664 \rightarrow C_U = t_U \cdot r'_U \quad (7.21)$$

Esta considerações permitem reconstruir a matriz $\mathbf{T}$, para as taxas de contagem corrigidas, e supondo que $t_{32} \approx 0$, ou seja, o Urânio apresenta contribuição desprezível na janela do Tório:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_K & -f(K,U)t_K t_U [r_U - f(U,T)t_{33}] & -f(K,T)t_{33}t_K \\ 0 & t_U & -f(U,T)t_{33}t_U \\ 0 & 0 & t_{33} \end{pmatrix}. \quad (7.22)$$

É importante lembrar que os valores numéricos obtidos nas análises acima, só se aplicam à ferramenta idealizada neste trabalho. Outros casos devem ser revistos a fim de produzirem resultados condizentes com os modelos geológicos propostos.

A Figura 7.7 mostra o jogo de perfis corrigidos. A nova técnica de calibração apresenta algumas melhoras se comparada com a técnica anterior. A seguir, será mostrada uma série de perfis, simulados a partir da metodologia desenvolvida nesta seção.

Na Figura 7.7 percebemos que mesmo após a correção do empilhamento do espectro do Tório sobre a janela de Urânio, a concentração deste, na segunda camada do modelo geológico, ficou aquém daquela estipulada, embora tivesse sido eliminado o valor de concentração negativa. Este fato vem evidenciar uma anti-correlação entre Tório e Urânio, desde que este último apresente concentração insignificante.

As concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório a serem adotadas como fontes no modelamento FEM, serão determinadas aleatoriamente na forma

$$C_j = C_{j,min} + (C_{j,max} - C_{j,min})\rho, \quad (7.23)$$

onde $C_{j,min}$ e $C_{j,max}$ são as concentrações mínima e máxima do j-ésimo isótopo da Tabela 7.3, enquanto ρ é um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo (0, 1).

Na Figura 7.7, podemos perceber que o grande contraste entre as concentrações de cada um dos três radioisótopos entre camadas adjacentes, bem como os valores relativamente elevados dessas concentrações, comparáveis mesmo às daquelas dos modelos de calibração, permitiram determinar estas concentrações satisfatoriamente. Outra observação importante tirada desta figura é que os perfis adquiridos em camadas espessas não apresentam nenhum indicativo de dificuldades quanto à sua interpretação.

Já o modelo representado pelo perfil da Figura 7.9 tem a importante propriedade de mostrar que camadas finas ou delgadas, apresentando concentrações que contrastam pouco com aquelas das camadas adjacentes, espessas ou não, não são satisfatoriamente detectadas. Devido às concentrações relativamente altas de Potássio, Urânio e Tório, ou seja, da mesma magnitude que aquelas dos modelos de calibração, mesmo as camadas de menor espessura puderam pelo menos ser qualitativamente detectadas.

Nas Figuras 7.11, 7.12 e 7.13, passamos à análise dos efeitos qualitativos e quantitativos que a variação da espessura de uma camada tem sobre o perfil. A Figura 7.11 representa um modelo com uma camada central suficientemente espessa capaz de gerar um perfil de boa qualidade. Notamos que uma estimativa otimista na concentração de Tório na camada central, implicou numa estimativa pessimista na concentração de Urânio nesta mesma camada. Este fato deve-se aos efeitos da correção do Tório na janela do Urânio. Por outro lado, verificamos que a medida da concentração de Potássio é pouco afetada pela estimativa otimista na concentração de Tório, visto que os possíveis efeitos foram aliviados pelo menor valor de correção associada ao Urânio. Ao reduzir a espessura da camada central, verificamos uma

redução tanto da concentração em massa de Tório bem como da amplitude do perfil GR, situando-se esta última em torno de 20 %. Nota-se ainda que tanto neste quanto no perfil anterior, tivemos igual sucesso com relação à determinação da interface de separação entre as camadas do modelo. A Figura 7.13 apresenta um caso extremo, em que a espessura da camada é reduzida a um valor inferior à altura do cristal no detector. Neste caso verifica-se uma redução de cerca de 50 % na amplitude do perfil de contagem total GR. Verifica-se também uma diminuição sensível na estimativa da concentração de Tório e por conseguinte uma estimativa otimista da concentração de Urânio. Isto dá inclusive a falsa idéia de que o modelo constitui-se apenas de uma única camada, se observamos apenas o perfil de Urânio.

O modelo representado pelo perfil da Figura 7.15 foi escolhido a fim de estudar o comportamento da curva de Urânio quando seus contrastes, numa sequência de camadas espessas é baixa. Os resultados permitem dizer que ficamos impossibilitados de qualquer tipo de avaliação, visto ser impossível identificar o número e as espessuras destas camadas.

Alguns resultados interessantes podem ser identificados na Figura 7.17. Este modelo é ideal para o estudo de uma sequência de camadas delgadas apresentando diferentes níveis de contaminação. Quando o detector atravessa estas sequências, percebemos uma inversão nos valores das concentrações em massa de cada um dos isótopos. Isto deve-se ao fato de que se fizermos com que o centro do cristal cintilador coincida com o ponto médio de uma dessas camadas delgadas, duas outras de mesma espessura se posicionarão nas extremidades do cristal, tornando responsáveis por cerca de 67 % do sinal, considerando que dentro do volume de investigação desta sonda, a região mais próxima do detector contribui mais fortemente para o sinal.

Na Figura 7.19 voltamos a mostrar que em uma formação de camadas espessas e cujas concentrações em massa dos radioisótopos são da mesma magnitude que aquelas dos modelos de calibração, não apresentam quaisquer problemas de interpretação; ao contrário das formações onde se observam baixos níveis de contaminação, Figura 7.21.

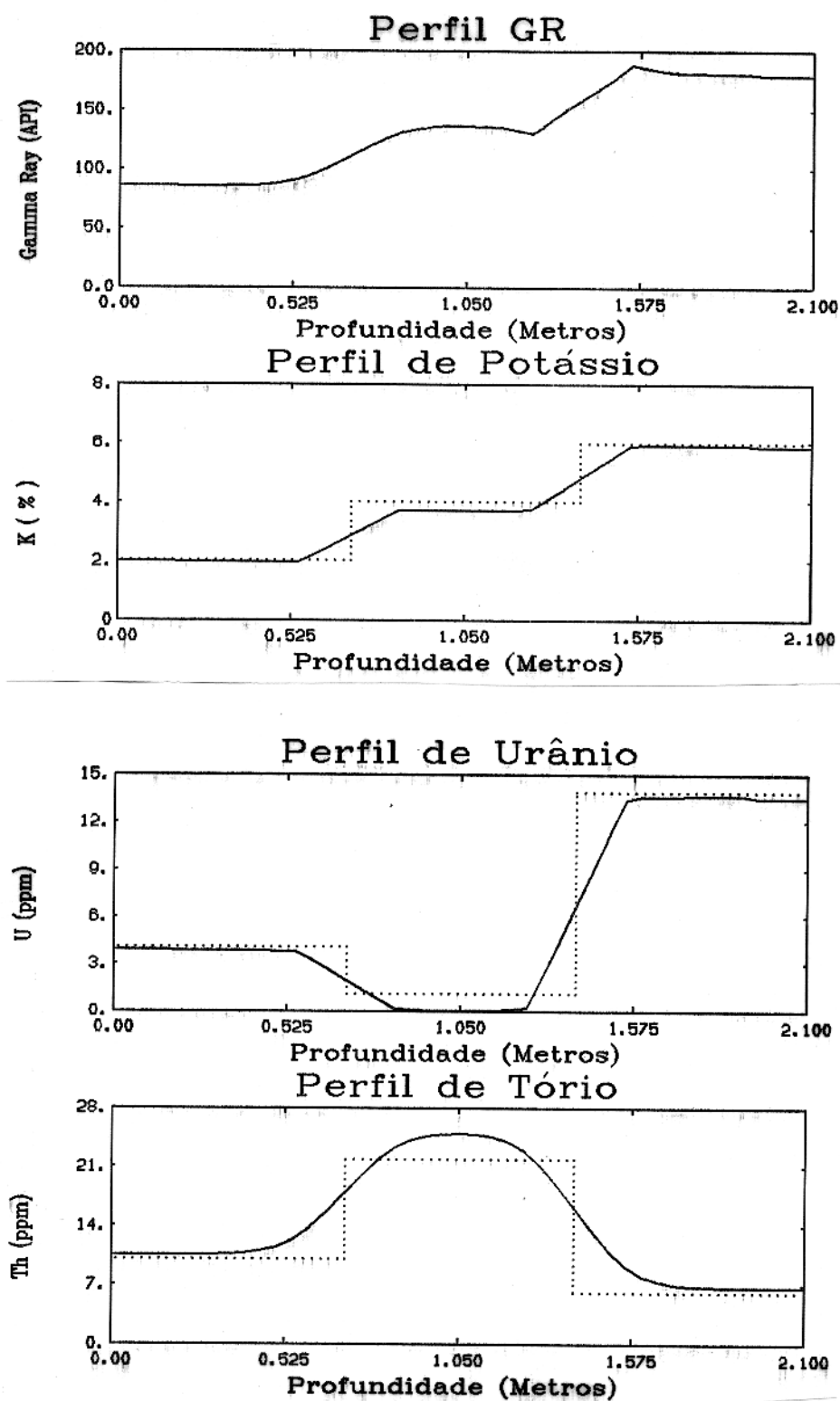


Figura 7.7 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório corrigidos, baseados no modelo da Figura 7.4.

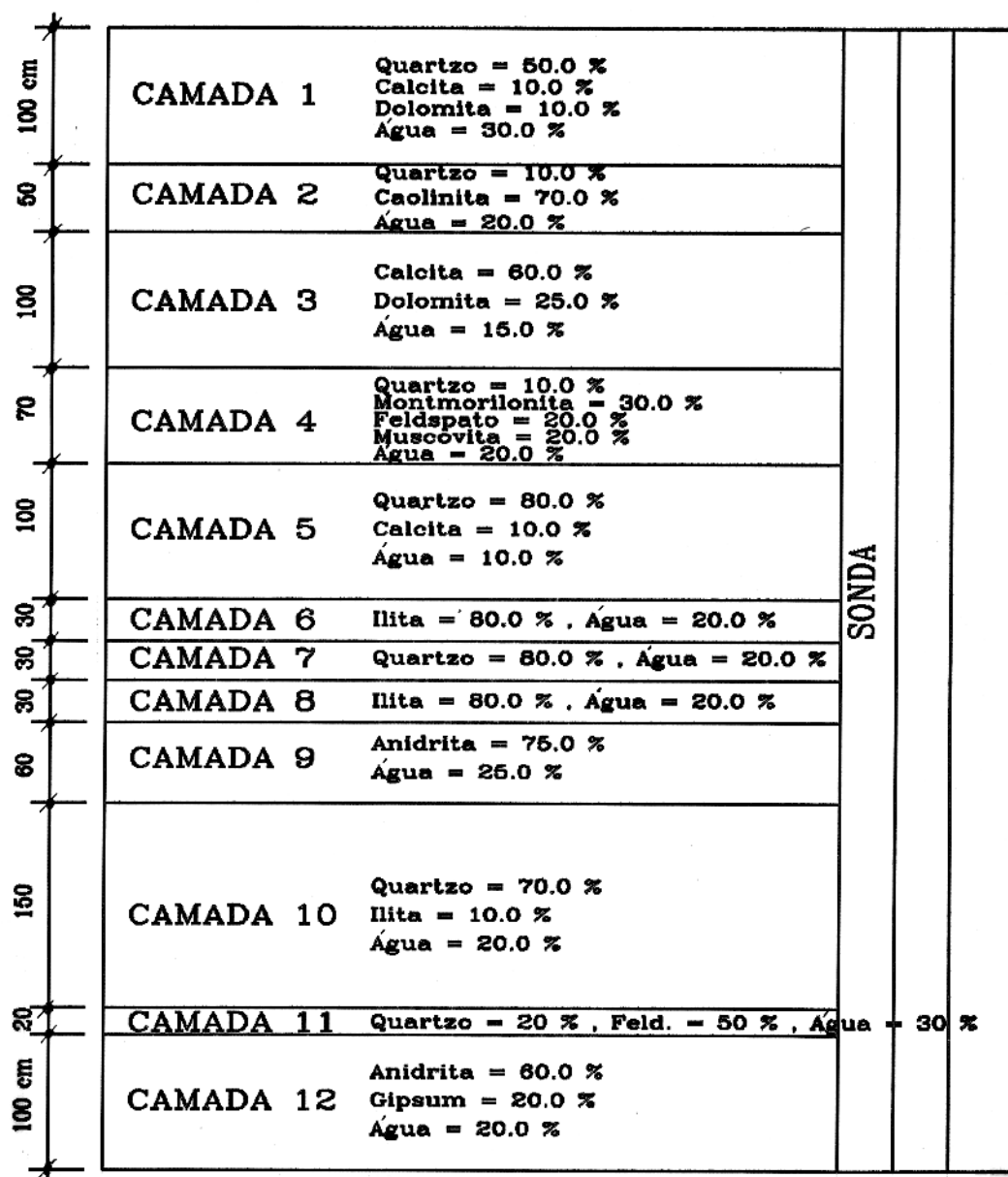


Figura 7.8 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume.

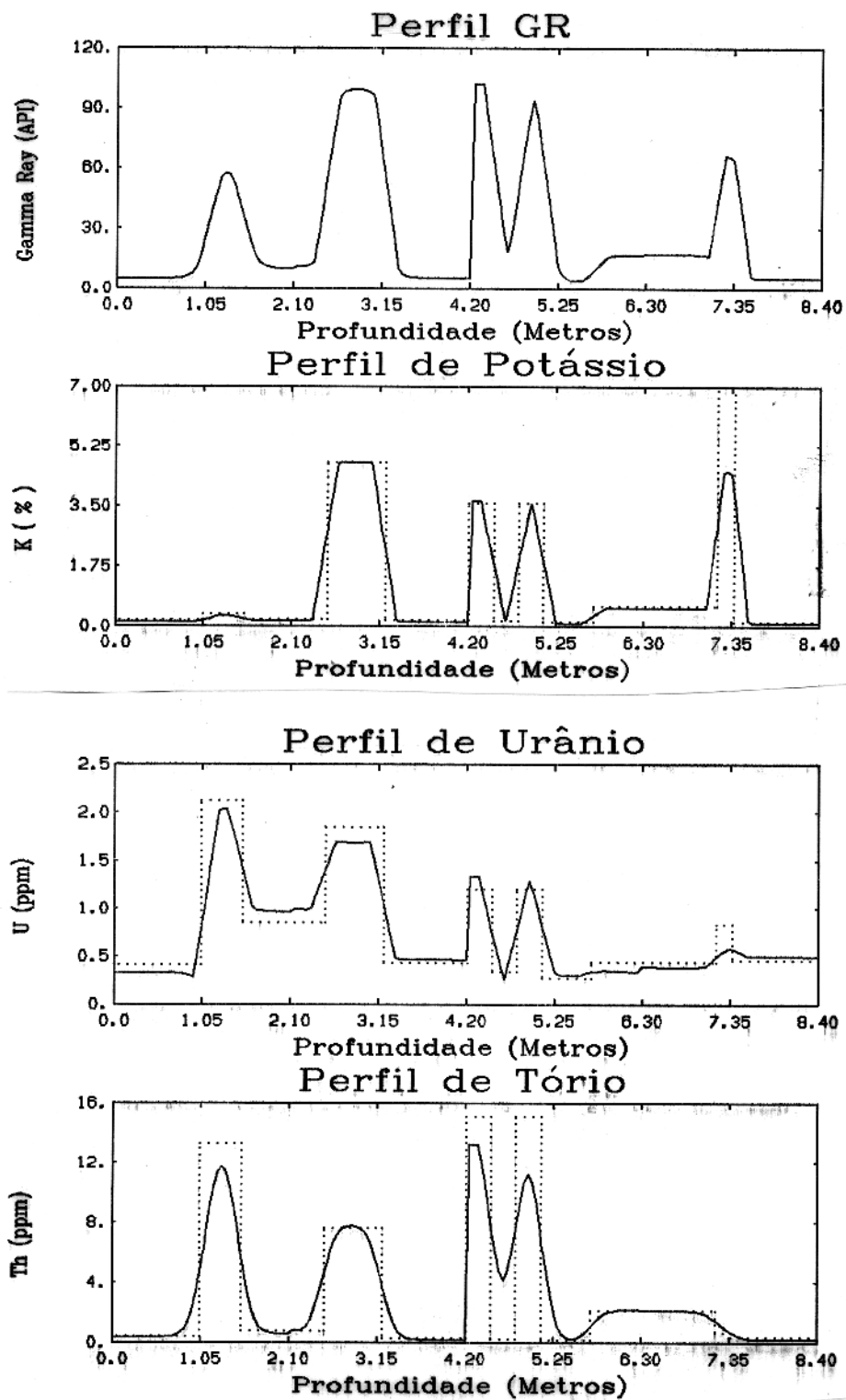


Figura 7.9 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.8.

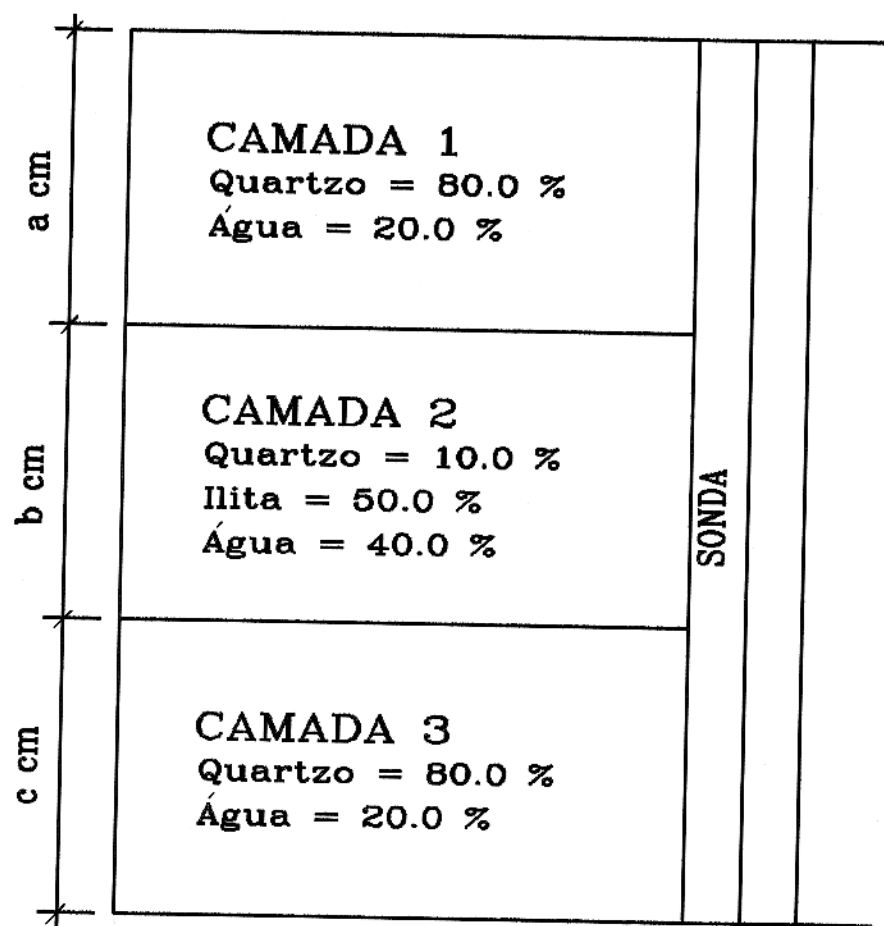


Figura 7.10 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume. As espessuras a , b e c de cada camada, serão definidas junto com os perfis a seguir.

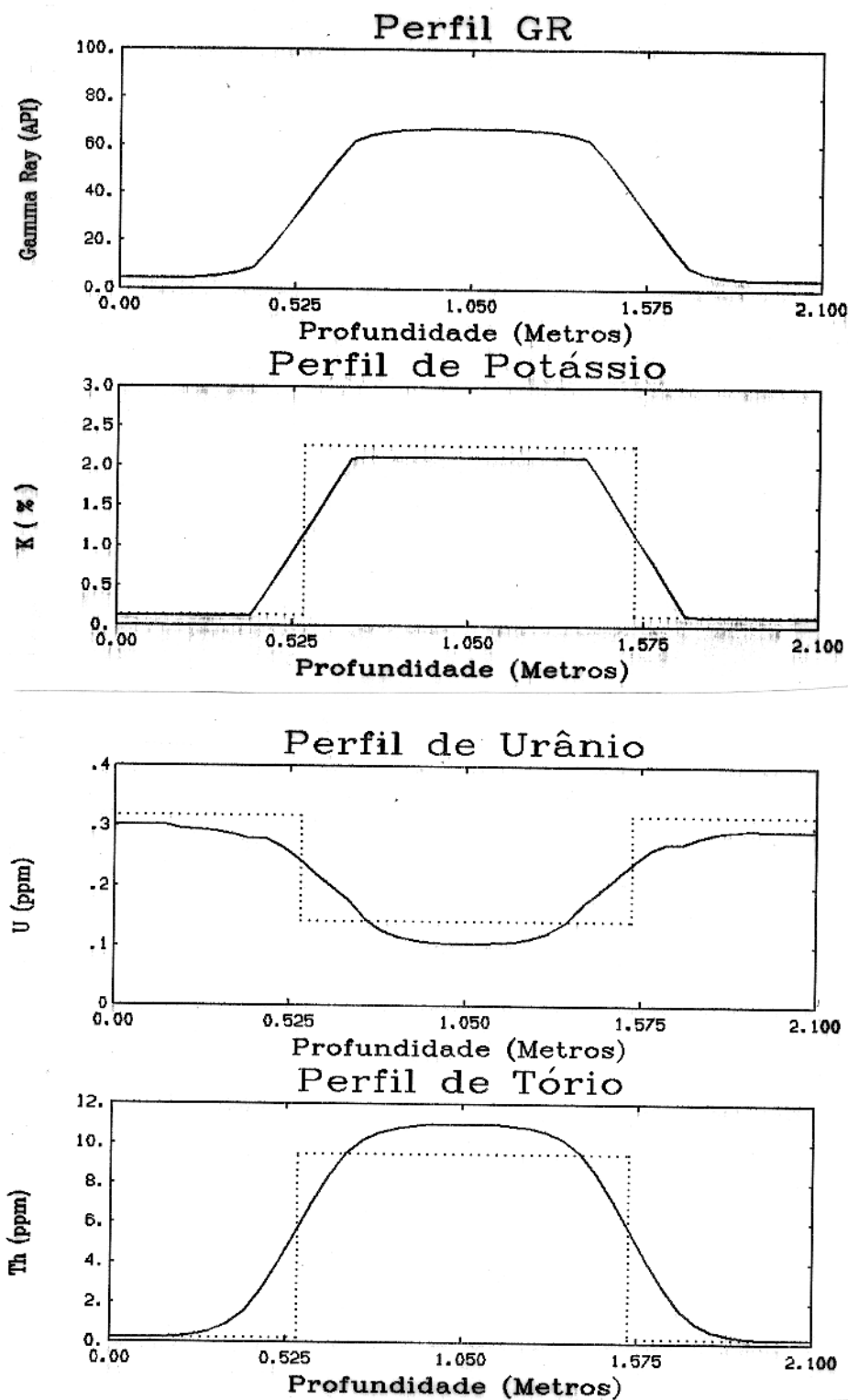


Figura 7.11 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.10, com a , b e c valendo 55, 100 e 55 cm, respectivamente.

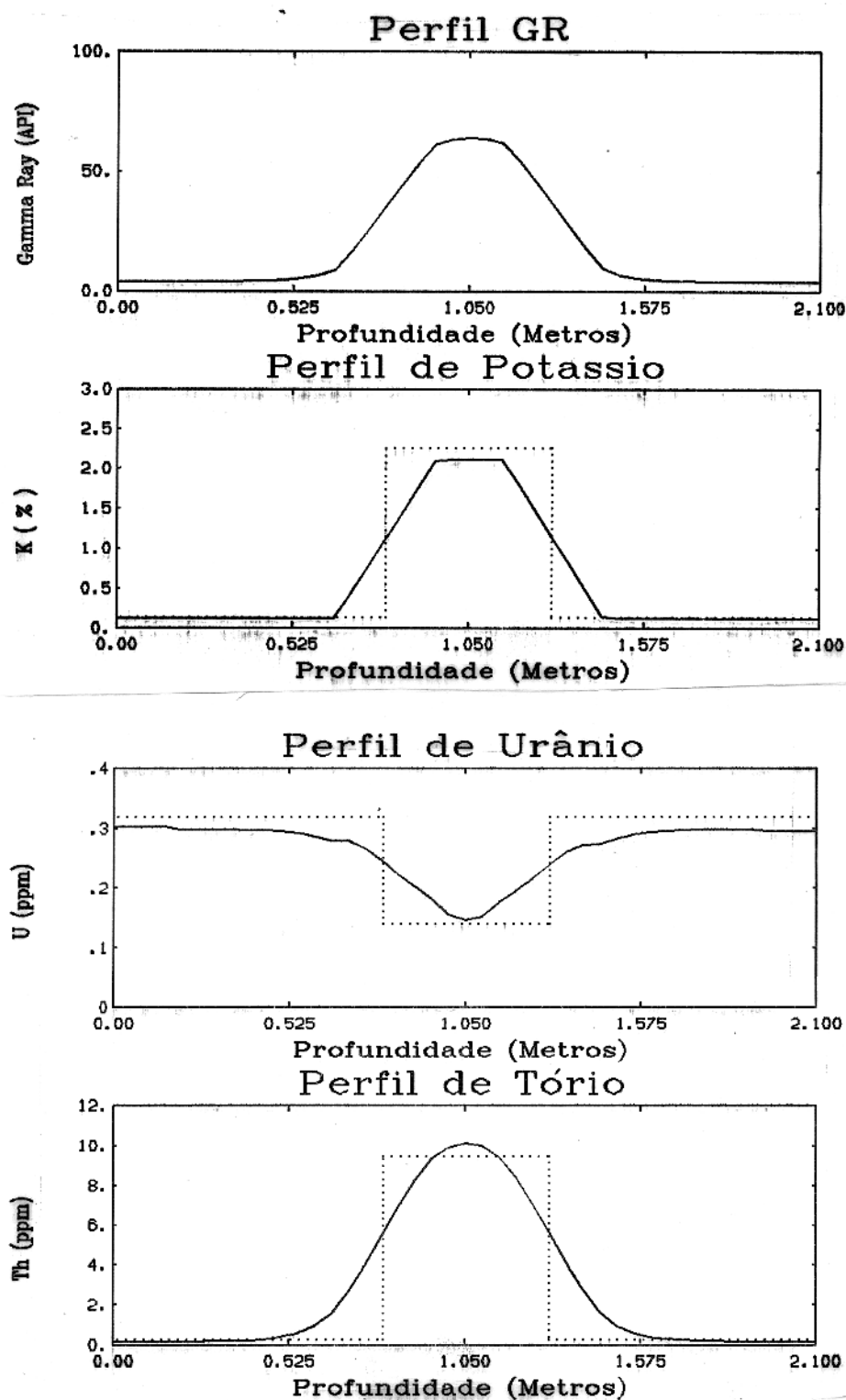


Figura 7.12 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.10, com a , b e c valendo 80, 50 e 80 cm, respectivamente.

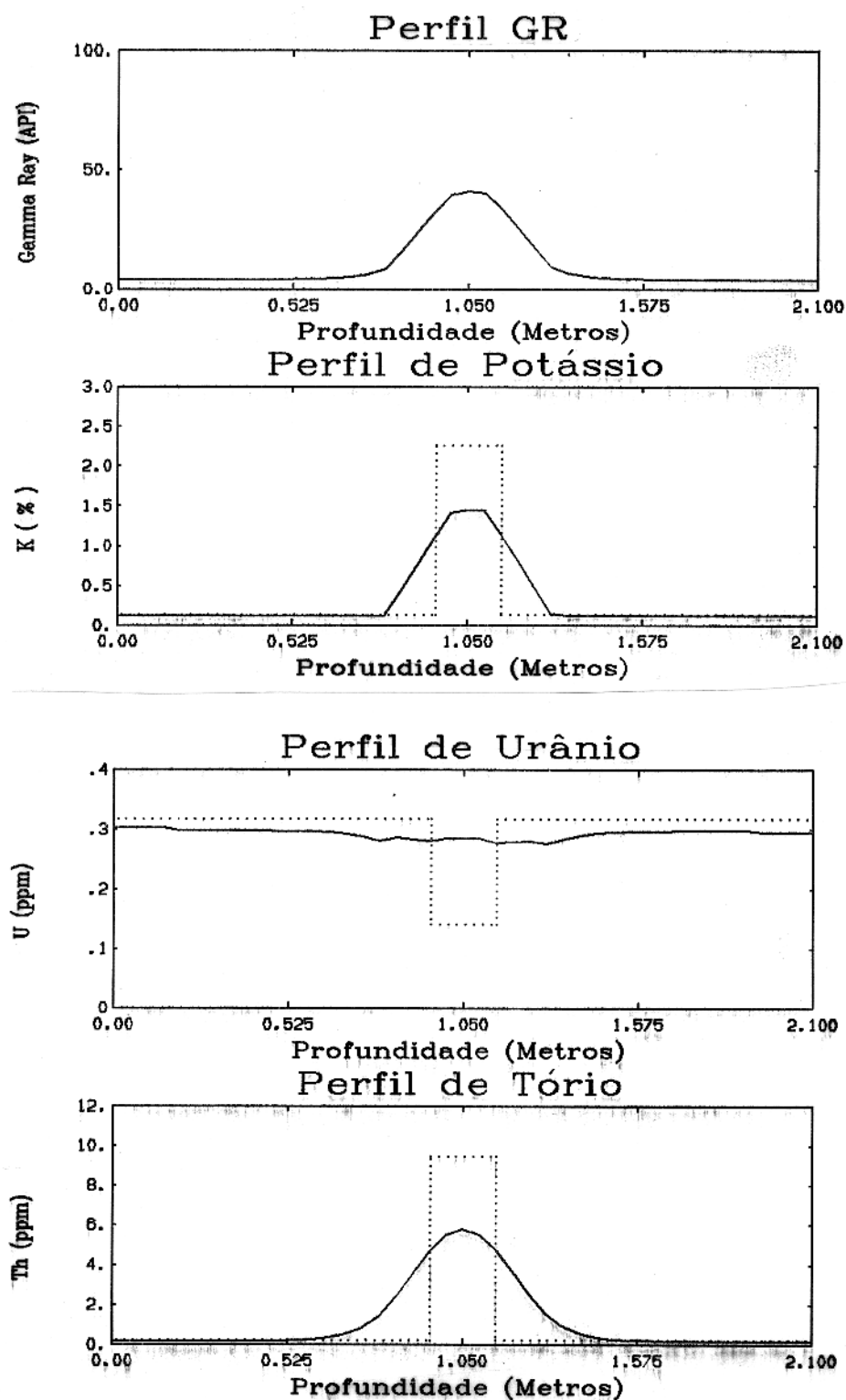


Figura 7.13 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.10, com a , b e c valendo 95, 20 e 95 cm, respectivamente.

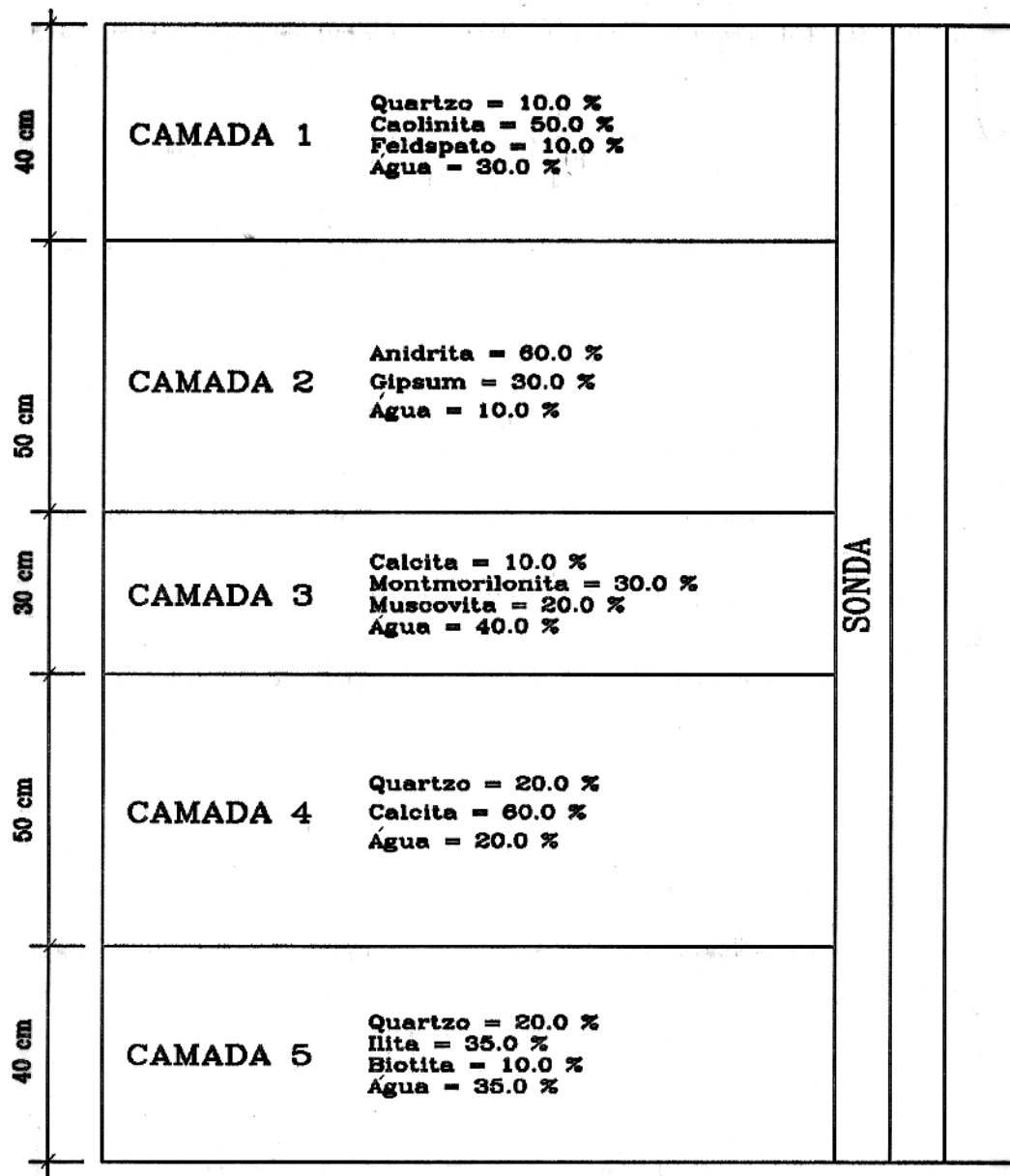


Figura 7.14 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume.

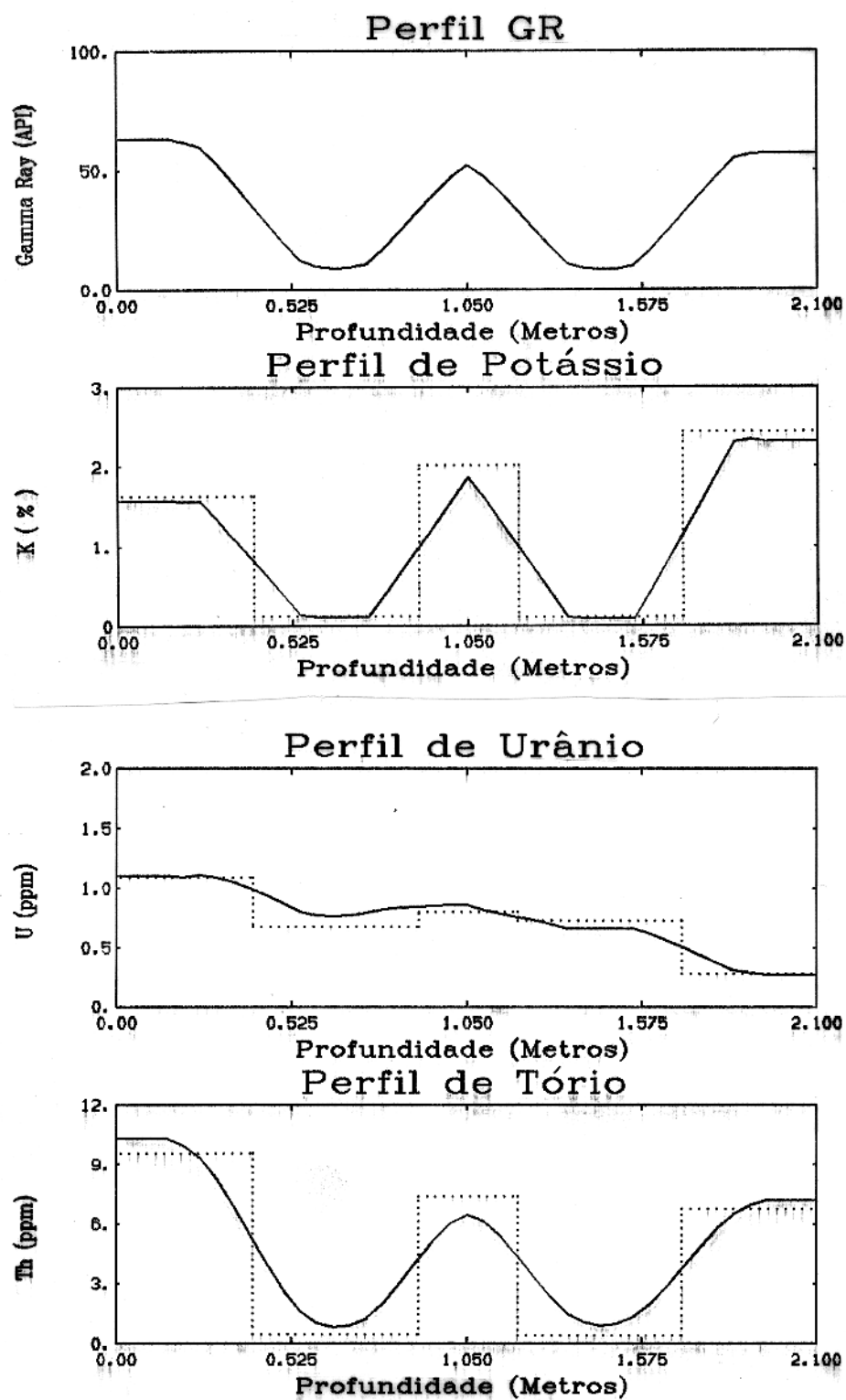


Figura 7.15 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.14.

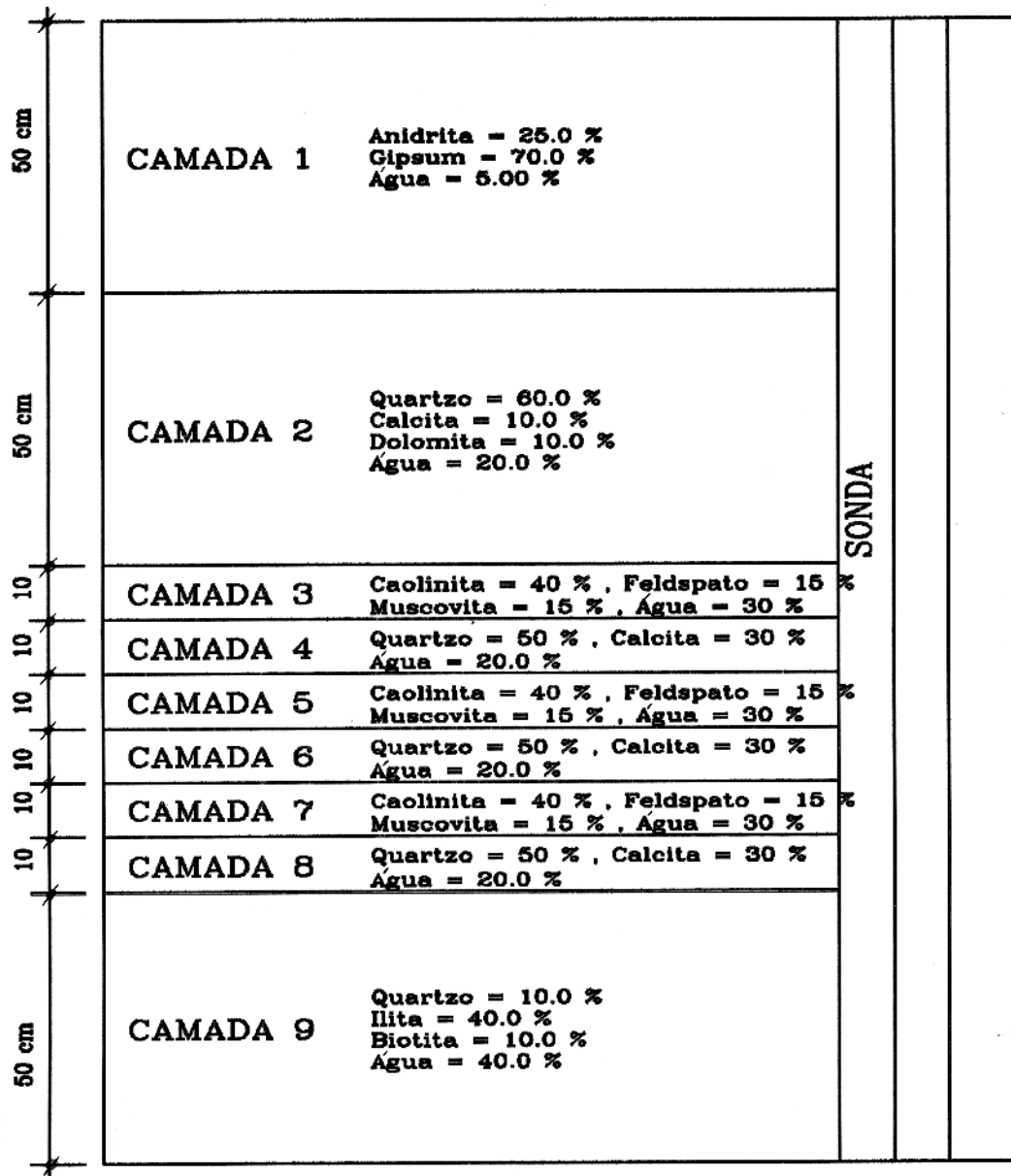


Figura 7.16 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume.

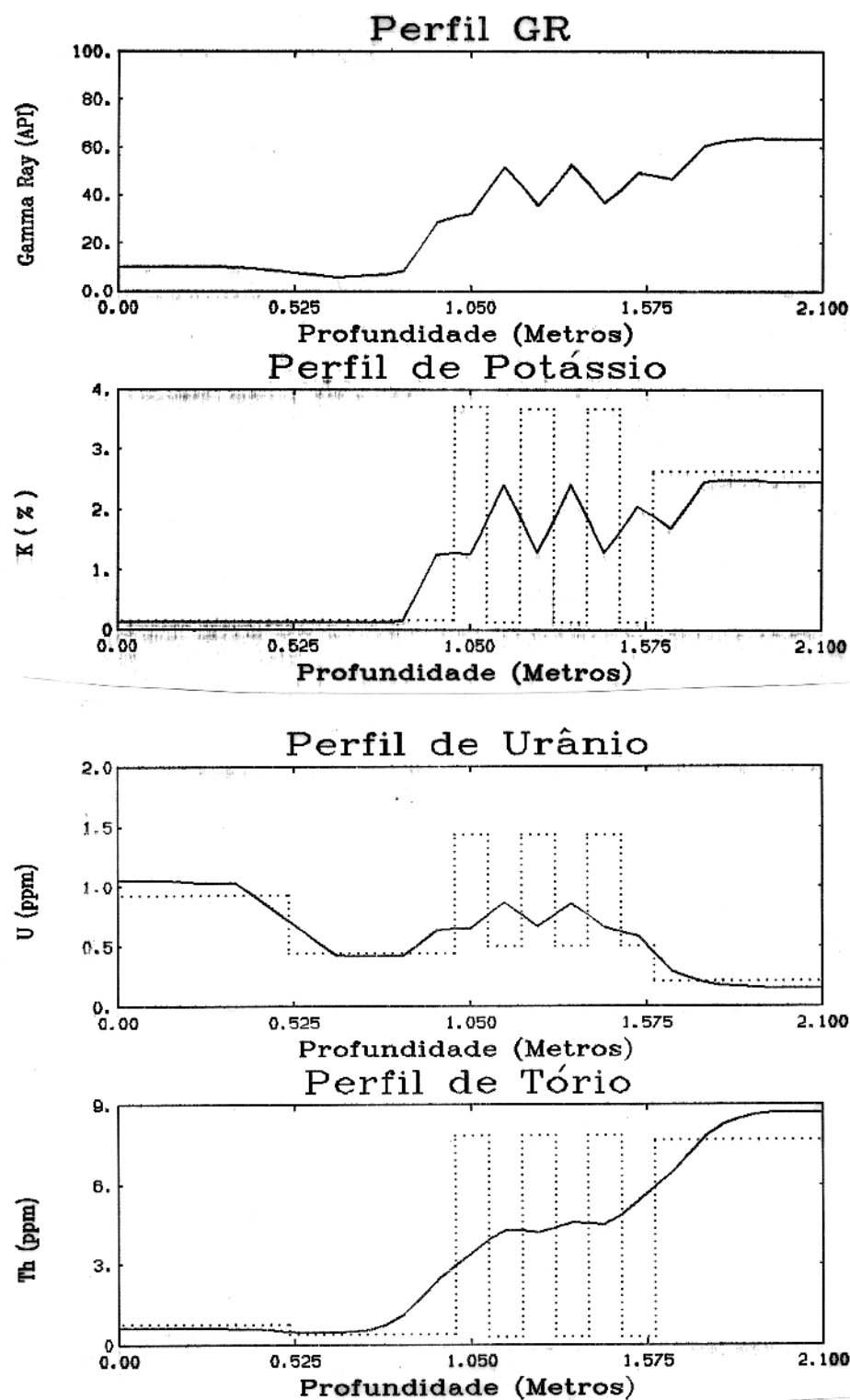


Figura 7.17 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.16.

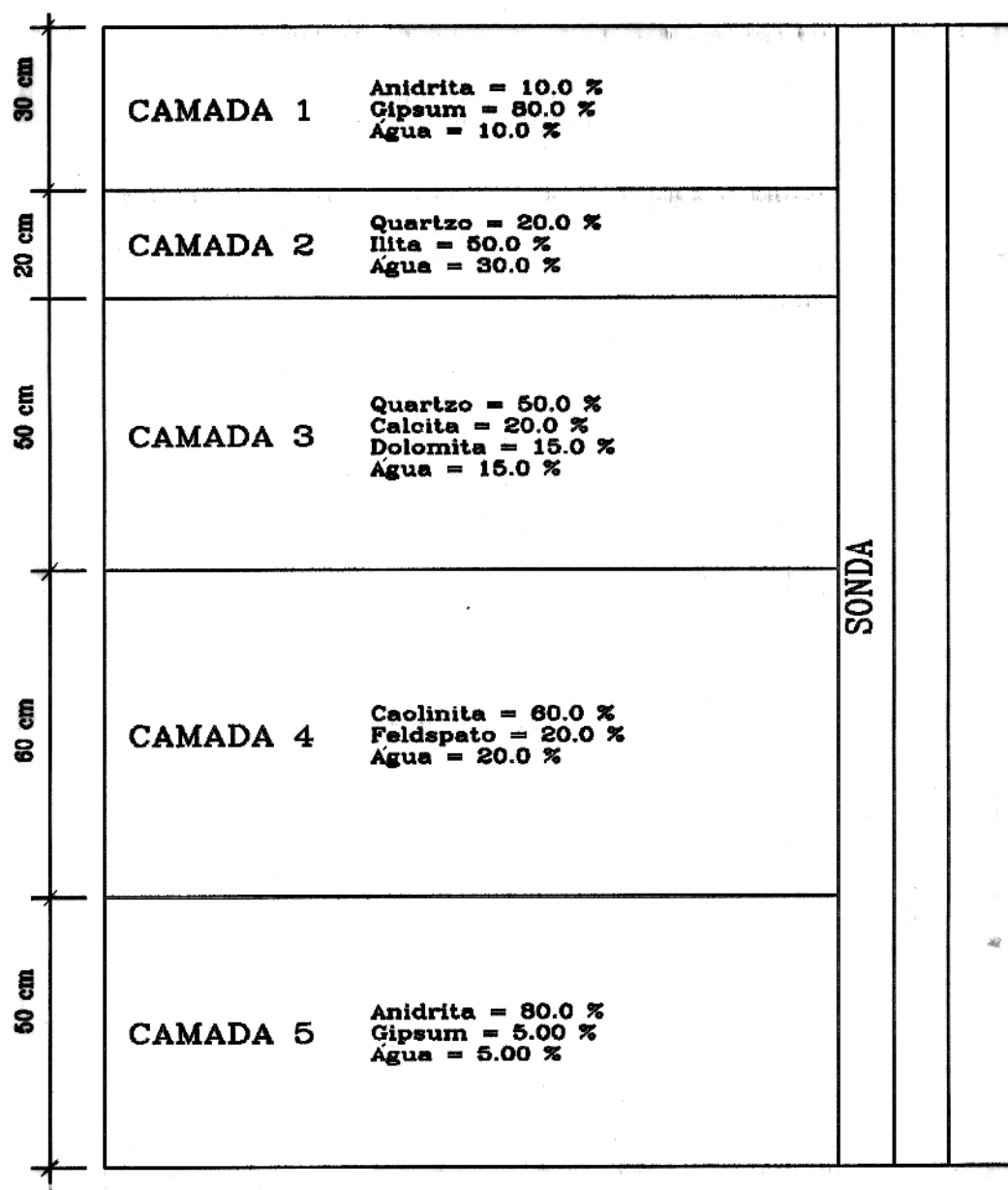


Figura 7.18 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume.

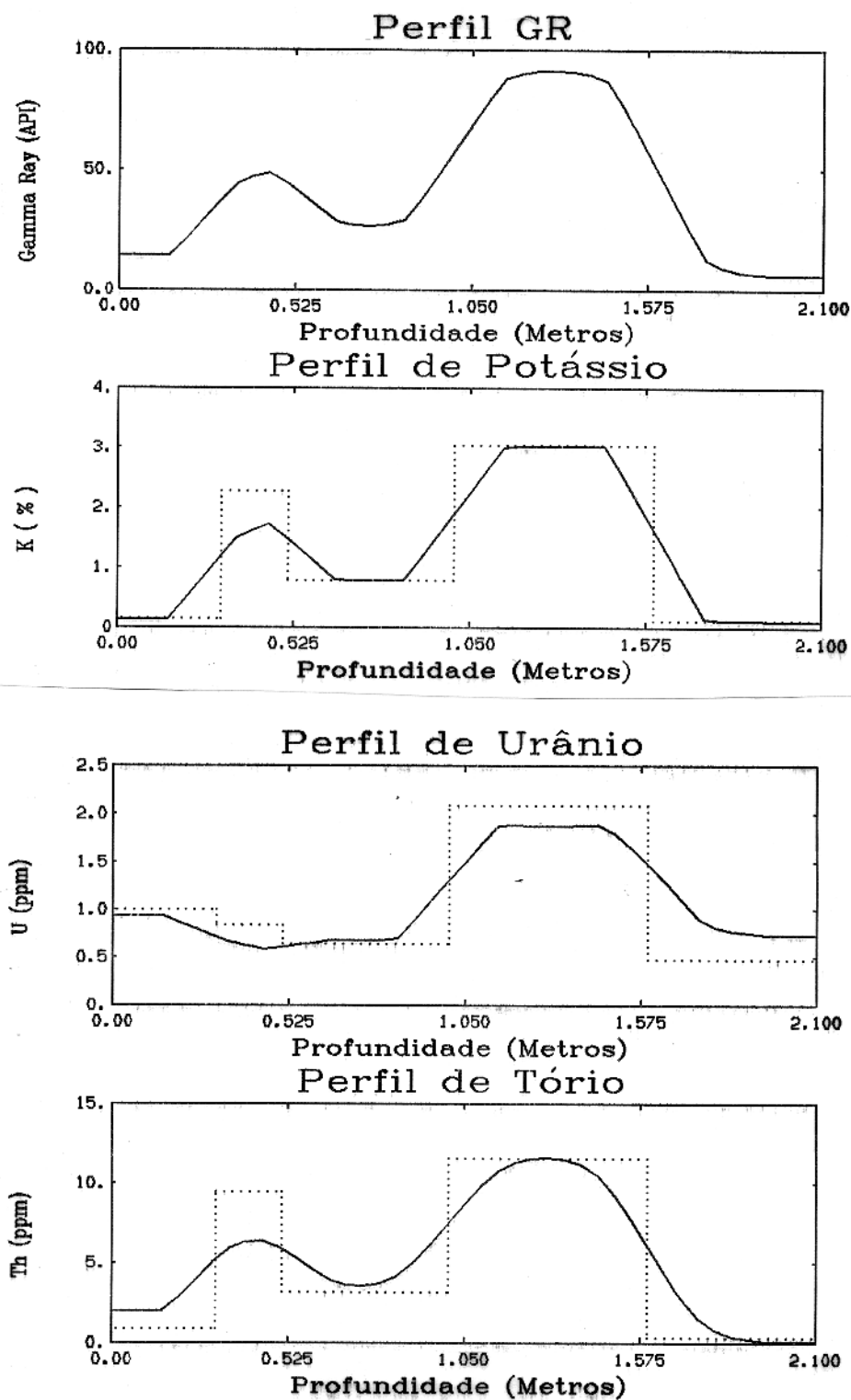


Figura 7.19 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.18.

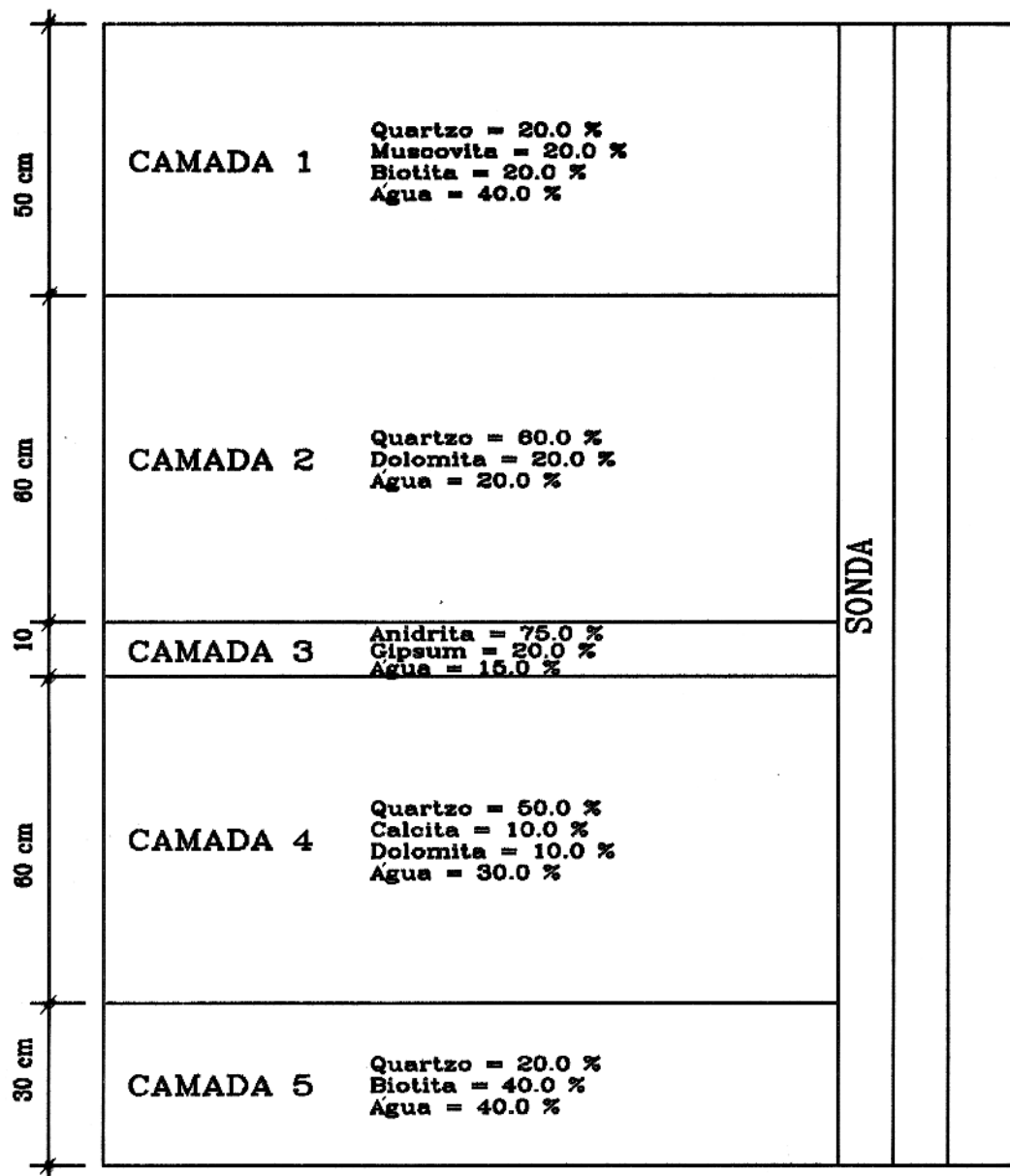


Figura 7.20 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada e suas concentrações por volume.

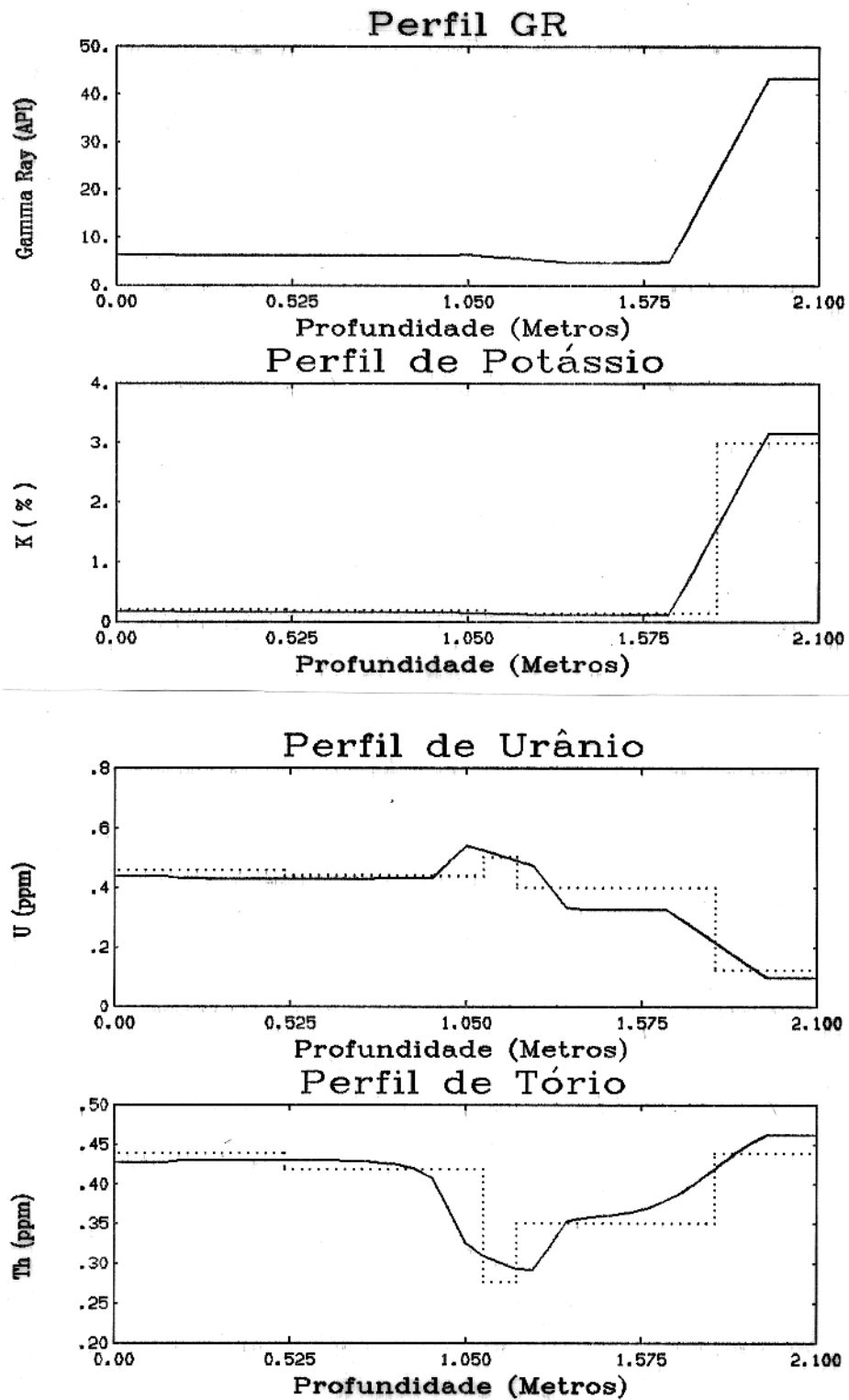


Figura 7.21 - Simulação dos perfis de raios gama total e das concentrações em massa de Potássio, Urânio e Tório, baseados no modelo da Figura 7.20.

7.2 SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA LDT

O sistema de perfilagem LDT pertence a uma nova geração de sistemas compensados, utilizados na determinação da densidade das formações. Ele consiste, basicamente, de dois detectores NaI, distantes 15 e 32cm de uma fonte pontual de raios gama, composta por uma cápsula de Cs^{137} de 1.5 a 2.0 Curie de atividade ¹. O espectro dos raios gama interagindo no detector mais distante é dividido eletronicamente em duas janelas, conforme mostra o esquema da Figura 7.22(a).

A janela J_2 , centrada na região de predominância do espalhamento Compton, é utilizada na determinação da densidade da formação, enquanto a janela J_1 , centrada na região de baixas energias, onde os raios gama são afetados predominantemente pelo efeito fotoelétrico, é utilizada para calcular Pe , o fator ou índice de absorção fotoelétrica.

Conforme o estabelecido pela Schlumberger, a janela J_1 compreende o intervalo de 40 a 80 KeV, e a janela J_2 , o intervalo de 180 a 540 KeV. Estes intervalos de energia correspondem aos seguintes canais na escala do espectrômetro:

$$J_1 = [\#15 - \#31] \quad J_2 = [\#70 - \#209]. \quad (7.24)$$

Uma vez feitas as medidas espectrais, podemos estabelecer uma relação funcional entre as taxas de contagem na janela J_2 e a densidade da formação:

$$C_2^{(f)} = f(\rho_B). \quad (7.25)$$

Similarmente, uma outra relação aproximada pode ser estabelecida entre a taxa de contagem na janela J_1 e certas funções de Zef e ρ_B .

$$C_1^{(f)} = f(\rho_B) \cdot f(Zef) \quad (7.26)$$

sendo Zef e ρ_B , o número atômico efetivo e a densidade volumétrica da formação, respectivamente.

7.2.1 Calibração da Ferramenta

A fim de obter as medidas de densidade e efeito fotoelétrico das formações, o sistema LDT deve ser preliminarmente calibrado em uma série de modelos padrões, tendo densidades e fatores de absorção fotoelétricas precisamente conhecidos.

¹H. B. Evans (informação verbal).

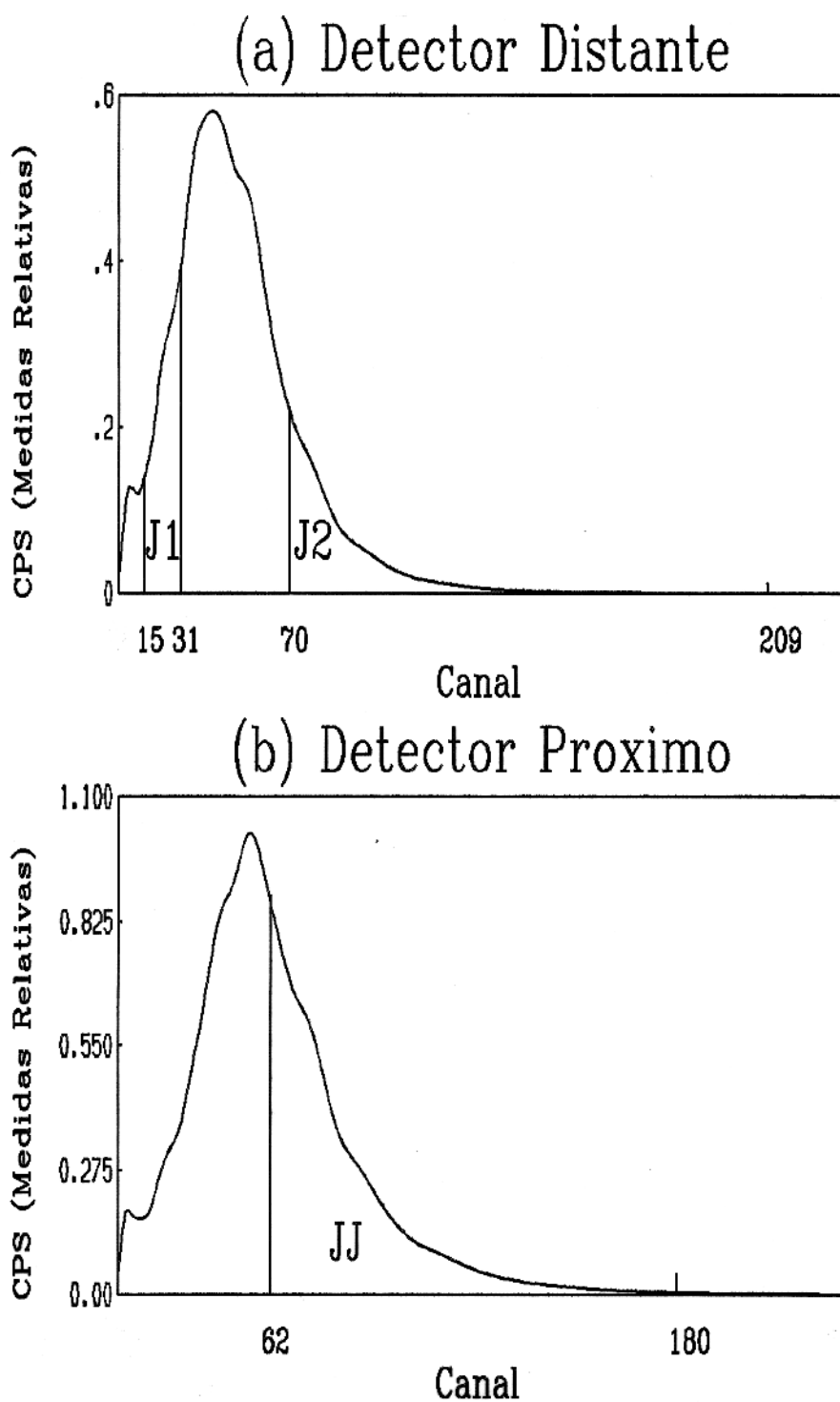


Figura 7.22 - Localização das janelas para o sistema de perfilagem LDT. (a) A janela J1 está compreendida entre os canais de número 15 e 31 ou no intervalo de energia de 40 a 80 KeV, enquanto a janela J2 situa-se entre os canais 70 e 209 ou no intervalo de energia de 180 a 540 KeV; (b) posicionamento da janela JJ no espectro do detector próximo. O limite inferior desta janela coincide com o canal de número 62 e o superior, com o canal de número 180.

ELLIS et al. (1985) propôs um modelo geral para calibração da ferramenta, para ρ_B e P_e , tomando como base o espectro apresentado pelos dois detectores. Nele, as estimativas de densidade são obtidas a partir das taxas de contagem $C_2^{(f)}$ na janela J_2 do detector distante ($f = \text{far detector}$) e $C_1^{(n)}$, da janela JJ do detector próximo ($n = \text{near detector}$). Esta última está compreendida entre os canais de número #62 e #180, conforme indicado pela Figura 7.22(b). Como o limite inferior da janela J_2 ainda sofre algum efeito residual da absorção fotoelétrica, uma nova relação deve ser obtida a fim de corrigir este efeito, representado, logicamente, por $C_1^{(f)}$. Assim, podemos descrever uma equação geral para a densidade aparente da formação, livre dos efeitos de P_e , utilizando apenas os dados fornecidos pelo espectro do detector distante,

$$\rho^{(f)} = a_1 + a_2 \cdot \ln C_2^{(f)} + a_3 \cdot \ln C_1^{(f)} \quad (7.27)$$

onde as constantes a_1 , a_2 e a_3 , que na verdade poderão assumir diferentes valores para diferentes litologias, serão determinadas a partir dos resultados obtidos com os modelos de calibração.

Para isto, propomos os seis modelos geológicos com as composições mostradas na Tabela 7.4, juntamente com os valores de densidade e fator de absorção fotoelétrica. Estes parâmetros foram calculados através das seguintes expressões:

$$\rho_B = \sum_{i=1}^N v_i \rho_{B,i} \quad \text{e} \quad P_e = \frac{1}{\rho_B} \sum_{i=1}^N v_i \rho_{B,i} P_{e,i}, \quad (7.28)$$

onde v_i é a fração volumétrica do i -ésimo mineral presente na formação, enquanto $\rho_{B,i}$ e $P_{e,i}$ são a densidade e o fator de absorção fotoelétrica destes minerais, respectivamente. Estes parâmetros são encontrados na literatura (SERRA, 1984).

Nas medições, a fonte e os dois detectores são posicionados no ponto médio em frente de cada modelo. Conhecidas as taxas de contagem nas janelas estipuladas, entramos com elas na equação 7.27, determinando $\rho^{(f)}$:

$$\rho^{(f)} = 3.1046 + 0.9868 \cdot \ln C_2^{(f)} - 0.4525 \cdot \ln C_1^{(f)}, \quad (7.29)$$

onde o último termo corresponde à correção feita sobre o valor de $\rho^{(f)}$, devido aos efeitos residuais de P_e . Os valores numéricos na equação acima foram determinados através de regressão linear sobre os seis modelos de calibração.

Para efeito de compensação, uma nova densidade é estimada a partir do espectro do detector próximo, utilizando a taxa de contagem da janela JJ , normalizada pela densidade previamente determinada a partir do espectro observado no detector mais distante,

$$\rho^{(n)} = b_1 + b_2 \cdot \ln \left[\frac{C^{(n)}}{\rho^{(f)}} \right]. \quad (7.30)$$

e as constantes b_j são determinadas da mesma forma que os a_j , resultando na seguinte equação:

$$\rho^{(n)} = 1.6509 + 0.2362 \cdot \ln \left[\frac{C^{(n)}}{\rho^{(f)}} \right] \quad (7.31)$$

A técnica em questão é universalmente conhecida como *spine*. Ela representa a resposta da ferramenta em um poço padrão de 20 cm de diâmetro, preenchido com água de densidade 1000 Kg/m³ e sem a presença de reboco.

O fator de absorção fotoelétrica Pe , usado para inferir a litologia, pode ser obtido através de comparações entre as taxas de contagem nas janelas J_1 e J_2 . Tomando como base as relações indicadas pelas equações (7.25) e (7.26), verificamos que ao dividirmos $C_1^{(f)}$ por $C_2^{(f)}$, obtemos uma nova função, proporcional apenas à litologia e Zef ou

$$\frac{C_1^{(f)}}{C_2^{(f)}} = F(Zef). \quad (7.32)$$

Com base no comportamento da curva de $F(Zef)$ em função de Pe , BERTOZZI et. al (1981) propôs para $F(Zef)$, o seguinte valor:

$$F(Zef) = \frac{\alpha}{Pe + \beta} \quad (7.33)$$

onde as constantes α e β estão relacionadas com as taxas de contagem de fundo, para um tipo específico de detector. Estas constantes foram determinadas a partir dos mesmos modelos de calibração da Tabela 7.4, resultando na seguinte equação para Pe :

$$Pe = 7.9013 - \frac{11.3153}{F(Zef)} \quad (7.34)$$

7.2.2 Correções Ambientais

Após a perfilagem, quaisquer medidas de densidade e Pe devem ser corrigidas para os efeitos ambientais. Neste trabalho, as correções se restringirão aos efeitos oriundos das variações nos tipos de lamas e rebocos. Estas correções são feitas comparativamente, valendo-se das diferenças de sensibilidade dos dois detectores com relação ao reboco interposto. Nos modelos padrões devemos assegurar a igualdade $\rho^{(f)} = \rho^{(n)}$. Percebemos, no entanto, que a presença do reboco induzirá uma discrepância $\Delta\rho$, entre as medidas das duas densidades aparentes. Esta correção é então aplicada a $\rho^{(f)}$. Este método é conhecido como *spine and ribs* (TITTMAN & WAHL, 1965) e o valor de $\Delta\rho$ depende da espessura, densidade e composição do reboco.

Algumas observações importantes podem ser introduzidas neste ponto. Os perfis de densidade e fator fotoelétrico da Figura 7.23 mostram a aplicação da metodologia no modelo da Figura 7.8. Devidos aos contrastes relativamente altos nos parâmetros físicos de camadas adjacentes e suas respectivas espessuras, as medidas destes parâmetros mostraram-se satisfatórias. Na Figura 7.25(a), (b) e (c) percebe-se que à medida que a espessura de uma camada diminui, ambas, a densidade e a definição da interface entre as camadas do modelo, tornam-se visivelmente prejudicadas. Nos casos extremos como aqueles da Figura 7.26(a), (b) e (c), que além da diminuição das espessuras das camadas, os contrastes entre as propriedades requeridas são pequenos, não se consegue identificar estas camadas. Esta mesma análise pode ser feita com relação ao conjunto de perfis das Figuras 7.27 e 7.28. A sequência de camadas delgadas das Figuras 7.27(b) e 7.28(b) chegam ao ponto de passarem despercebidas. Na Figura 7.28(a), o valor de P_e na quinta camada foi superestimado, em vista desta apresentar um valor de P_e acima de 5.0 barns/e^- . Para valores acima deste, não foi possível a calibração da sonda pois verificou-se uma migração excessiva do ponto de máximo do espectro na direção das altas energias, o que leva obrigatoriamente a uma redução na taxa de contagem na janela de baixas energias, diminuindo a eficácia das medidas. Dessa forma, nos limitamos a modelos cujo valor máximo de P_e não ultrapassassem em muito este limite.

Tabela 7.4 - Série de seis modelos geológicos utilizados na calibração da sonda LDT.
As densidades e os fatores de absorção fotoelétrica de cada modelo são aquelas indicadas, juntamente com as composições mineralógicas.

MODELO	LITOLOGIA	$\rho_B(g/cm^3)$	$P_e(barns/el.)$
1	Quartzo=61.0 % Água=39.0 %	2.000	1.763
2	Quartzo=50.0 % Calcita=30.0 % Água=20.0 %	2.333	2.825
3	Quartzo=75.0 % Calcita= 5.0 % Água=20.0 %	2.430	3.250
4	Quartzo=88.0 % Água=12.0 %	2.500	4.820
5	Quartzo=70.0 % Calcita=10.0 % Água=20.0 %	2.548	4.671
6	Quartzo=65.0 % Calcita=15.0 % Água=20.0 %	2.666	5.966

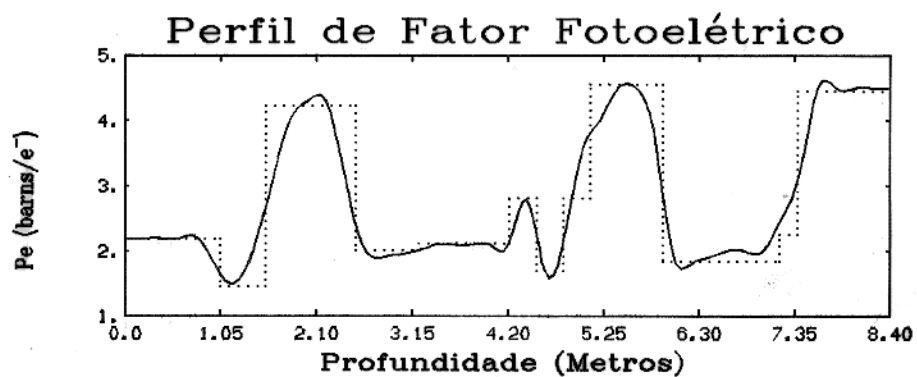
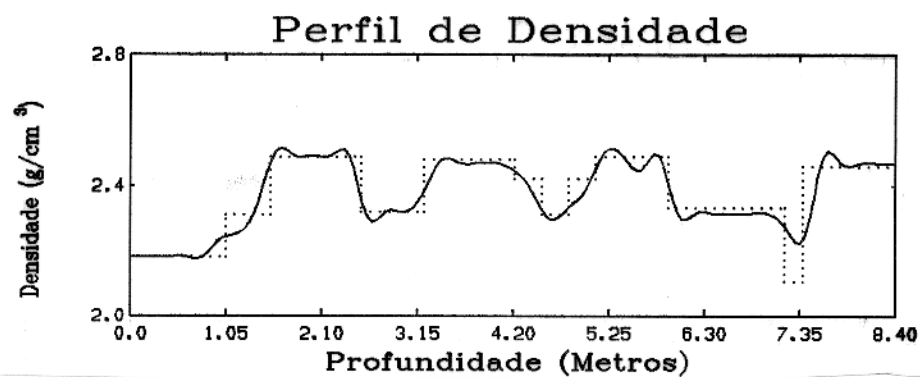


Figura 7.23 - Perfis de densidade e fator de absorção fotoelétrica para o mesmo modelo geológico mostrado na Figura 7.8.

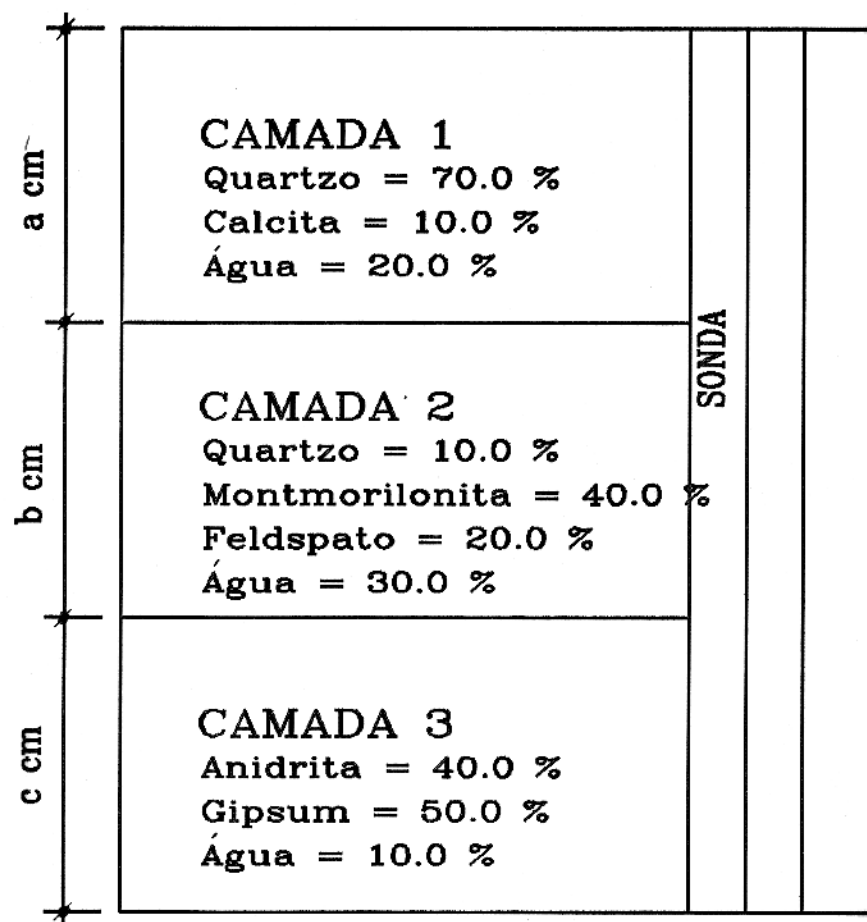


Figura 7.24 - Modelo geológico mostrando os constituintes mineralógicos de cada camada. As espessuras a , b e c de cada camada, serão definidas junto com os perfis da Figura 7.25 da próxima página.

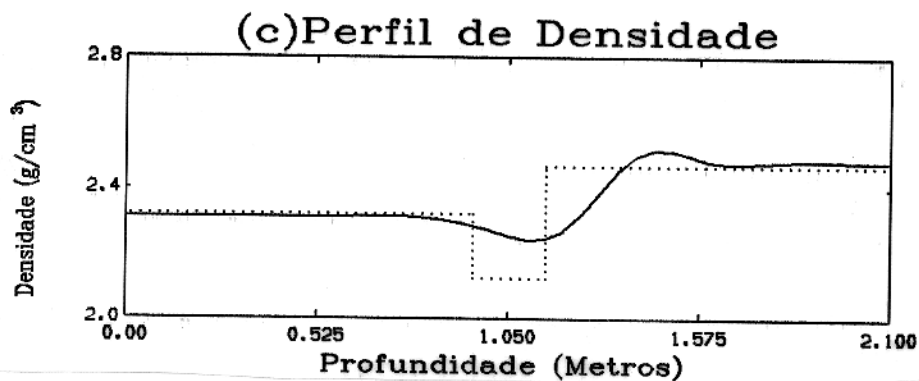
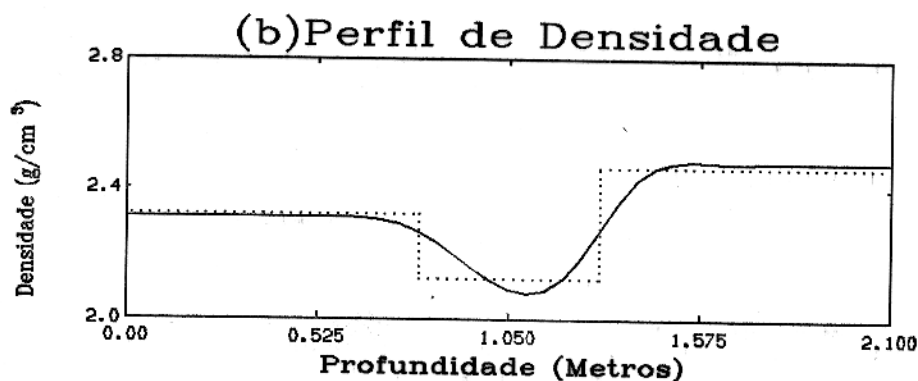
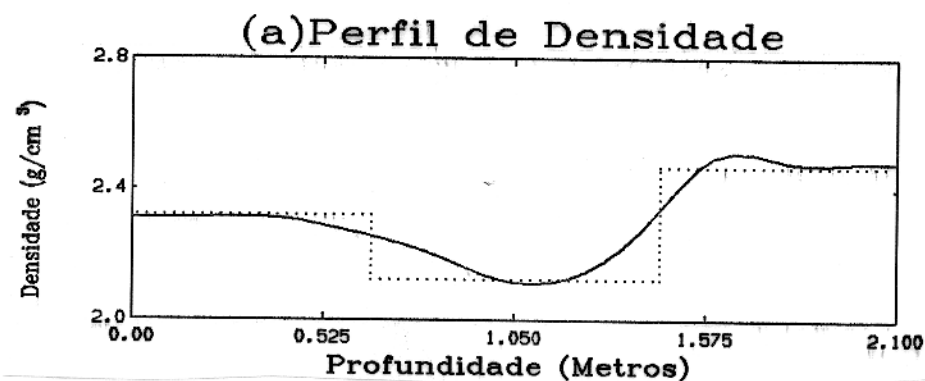


Figura 7.25 - Perfis de densidade para estudar os efeitos da variação da espessura da camada central, conforme o modelo da Figura 7.24, para altos contrastes de densidade: (a) modelo com as espessuras a , b e c valendo 65, 80 e 65 cm, respectivamente; (b) modelo para a , b e c valendo 80, 50 e 80 cm e finalmente (c), modelo com as espessuras a , b e c valendo 95, 20 e 95 cm, respectivamente.

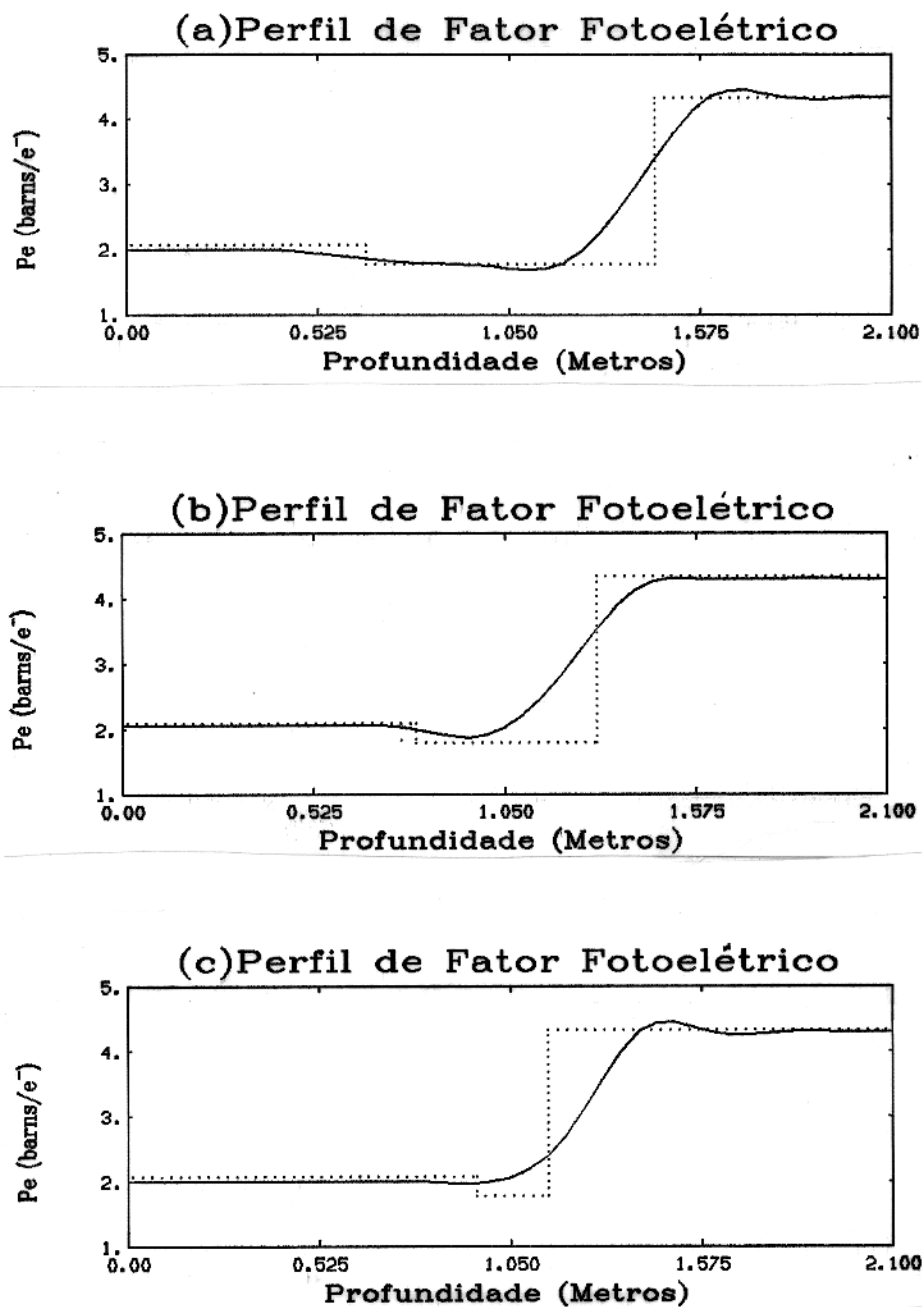


Figura 7.26 - Simulação dos fatores de absorção fotoelétrica baseados no modelo da Figura 7.24, para baixos contrastes de efeito fotoelétrico: (a) modelo com as profundidades a , b e c valendo 65, 80 e 65 cm, respectivamente; (b) modelo para a , b e c valendo 80, 50 e 80 cm e, finalmente, (c) modelo com as profundidades a , b e c valendo 95, 20 e 95 cm, respectivamente.

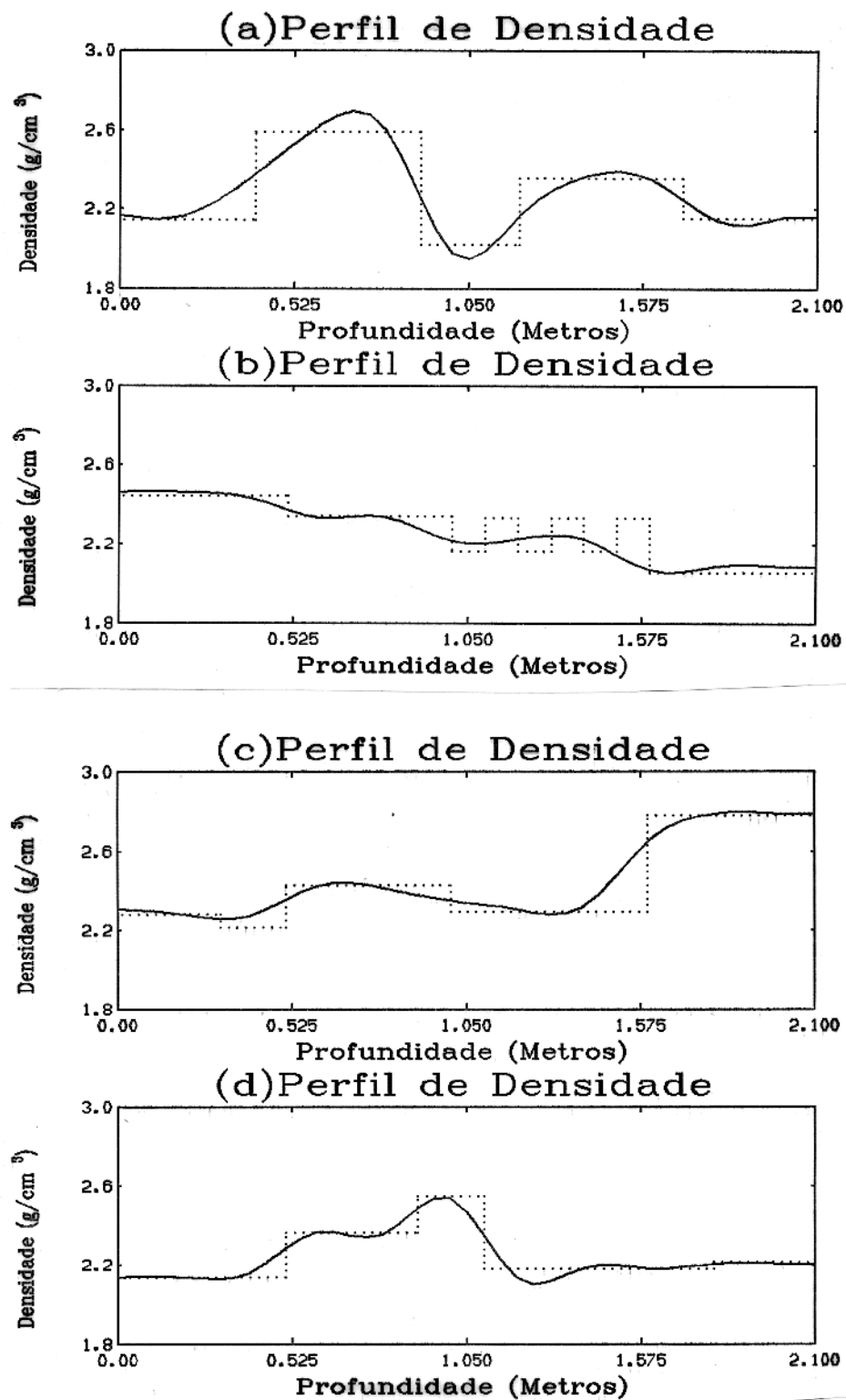


Figura 7.27 - Simulação dos perfis de densidade baseados nos seguintes modelos: perfil (a) - Figura 7.14, perfil (b) - Figura 7.16, perfil (c) - Figura 7.18 e perfil (d) - Figura 7.20.

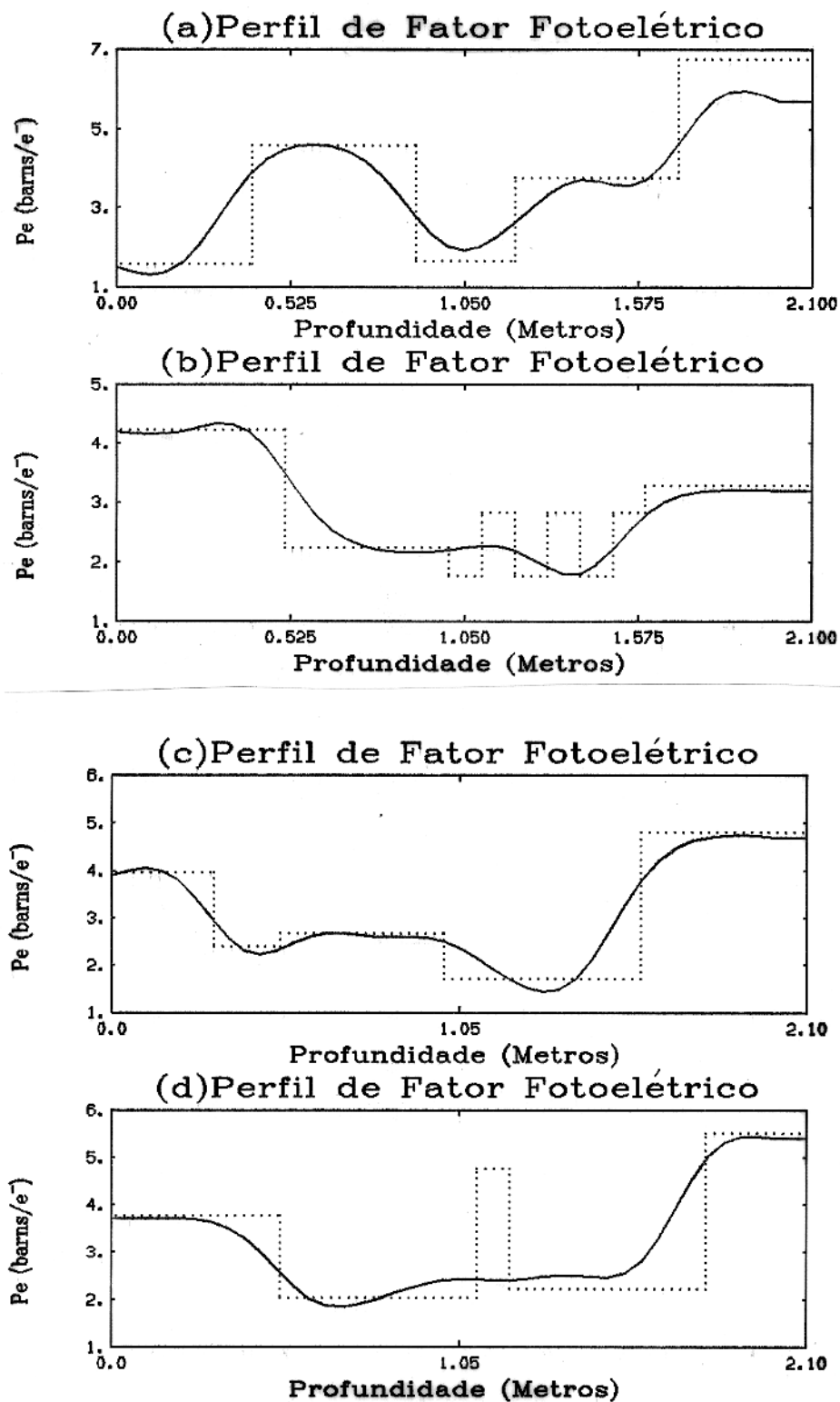


Figura 7.28 - Simulação dos perfis de fator de absorção fotoelétrica baseados nos seguintes modelos: perfil (a) - Figura 7.14, perfil (b) - Figura 7.16, perfil (c) - Figura 7.18 e perfil (d) - Figura 7.20.

7.3 SIMULAÇÃO DA RESPOSTA DA SONDA CNL

Um grande esforço tem sido desenvolvido no sentido de se modelar eficientemente a resposta das ferramentas neutrônicas para porosidade. TITTLE (1988) apresentou uma forma quantitativa de relacionar os parâmetros macroscópicos da formação, conhecidos como comprimentos de freiamento (L_s) e difusão (L_d), com o índice de porosidade, para a sonda CNL. Ao contrário dos algoritmos desenvolvidos anteriormente pela Schlumberger, a regressão desenvolvida por ele era na forma de um polinômio o qual era linear com respeito aos seus coeficientes, o que implicava em grande simplificação para os cálculos.

7.3.1 O Modelo de Regressão Polinomial de Tittle

Em seu modelo de regressão polinomial, TITTLE (1988) estabeleceu uma relação funcional entre o índice de porosidade da formação P , conforme medido pela sonda CNL, e os parâmetros L_s e L_d , a serem definidos adiante.

$$P = \exp[\mathbf{c}^T \mathbf{v}(\phi)]. \quad (7.35)$$

O vetor $\mathbf{v}(\phi)$, contendo os dados de entrada, é dado, para uma formação de porosidade ϕ , por

$$\mathbf{v}(\phi) = \begin{bmatrix} 1 \\ \ln L_s(\phi) \\ \ln L_d(\phi) \\ L_s(\phi)L_d(\phi) \\ L_s^2(\phi) \\ L_d^2(\phi) \\ L_s(\phi)L_d^2(\phi) \\ L_s^2(\phi)L_d(\phi) \\ L_s^3(\phi) \\ L_d^3(\phi) \end{bmatrix}. \quad (7.36)$$

e os coeficientes $\mathbf{c}^T = [c_1 c_2 \cdots c_{10}]$ calculados por Tittle apud WILEY & PATCHETT (1989),

assumem os seguintes valores,

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ c_6 \\ c_7 \\ c_8 \\ c_9 \\ c_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10.170855005000 \\ -3.374540125000 \\ 0.862550153800 \\ -0.125041551200 \\ 0.040002713110 \\ 0.095834636120 \\ -0.010249391950 \\ 0.009061921508 \\ -0.002382906914 \\ 0.002899102389 \end{bmatrix} \quad (7.37)$$

O comprimento de freiamento L_s é proporcional à distância que um nêutron viaja desde o ponto de sua emissão pela fonte até o ponto onde ele atinge o equilíbrio térmico com os átomos da formação. O comprimento de difusão L_d é a distância que ele viaja desde o ponto de termalização até o ponto de captura ou absorção.

TITTLE (1988) observou que o polinômio valia apenas naqueles casos em que os parâmetros L_s e L_d limitavam-se ao intervalo utilizado por ele na determinação dos coeficientes c_i do polinômio de regressão. Além desta restrição, o polinômio só valia para camadas cujas espessuras eram maiores que a distância entre o detector mais distante e a fonte pontual de nêutrons (Am - Be).

Comparando dados de campo com aqueles obtidos via algoritmo de Tittle, WILEY & PATCHETT (1989) demonstraram que a seção de choque macroscópica de absorção é, sobre vários aspectos, o parâmetro realmente importante afetando a resposta da sonda CNL. Além do mais, não são apenas as seções de choque dos constituintes principais da rocha que confirmam este fato, mas também, a dos minerais acessórios, principalmente aqueles tidos como fortes moderadores ou absorvedores. A este grupo inclui-se também os componentes que apresentam baixo índice de hidrogênio, tais como os gases. Enfim, são estes fatores que atuam mais efetivamente sobre as incertezas associadas com as leituras dos perfis da sonda CNL.

Estas discrepâncias podem ser no entanto facilmente compreendidas. Para tal, tomemos como base a teoria probabilística acerca da união de conjuntos. A Figura 7.29 mostra dois casos distintos de união de conjuntos quaisquer M_1 e M_2 , representando dois constituintes da formação, contidos no mesmo conjunto universo U . Se a parcela da probabilidade total de interação de cada conjunto for representada pela seção de choque de cada mineral individual, $\Sigma(M_1)$ ou $\Sigma(M_2)$, vamos encontrar duas situações básicas: na Figura 7.29(a), ambos

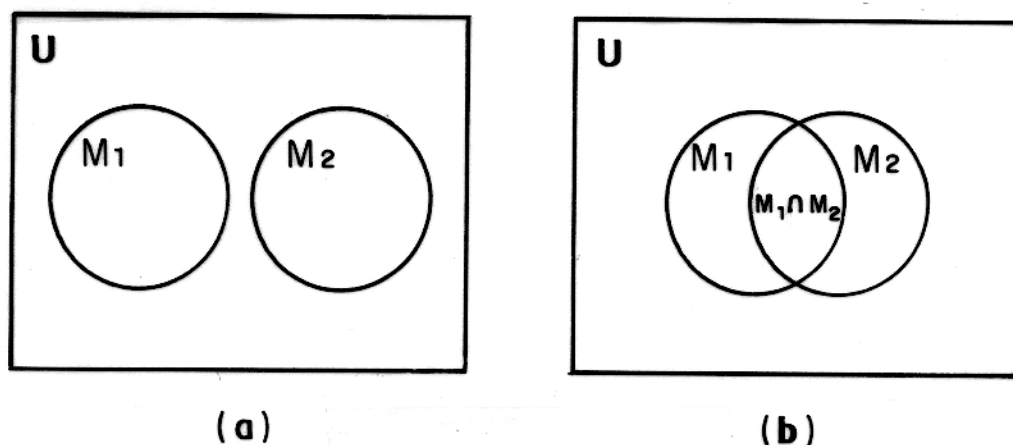


Figura 7.29 - Diagramas de Venn utilizados na análise de união de conjuntos, levando-se em conta o fato de que as seções de choque de absorção são consideradas medidas de probabilidade. (a) união de conjuntos disjuntos ou independentes; e (b) união de conjuntos dependentes.

os conjuntos são considerados minerais padrões e, portanto, as componentes M_1 e M_2 são independentes, e os conjuntos são ditos disjuntos e contribuirão de forma satisfatória para a seção de choque total, ou seja,

$$\Sigma(M_1 \cup M_2) = \Sigma(M_1) + \Sigma(M_2). \quad (7.38)$$

Já na Figura 7.29(b), podemos observar que os dois conjuntos não são mais disjuntos ou independentes. Isto imporá um certo grau de perturbação no sistema, visto que

$$\Sigma(M_1 \cup M_2) = \Sigma(M_1) + \Sigma(M_2) - \Sigma(M_1 \cap M_2). \quad (7.39)$$

Neste caso, pelo menos um dos elementos, representado pelo conjunto M_1 ou M_2 , é considerado um mineral perturbador. O termo de perturbação será dado pela parcela $\Sigma(M_1 \cap M_2)$ e poderá ser visto como sendo o efeito da ligação ou agregação dos minerais constituindo a rocha.

Se este efeito for desprezível com relação às diversas seções de choque padrões, utilizadas por TITTLE (1988) na determinação dos coeficientes do polinômio, os minerais utilizados poderão ser incluídos no modelo sem grandes problemas; mas se ao contrário, o fator de perturbação assumir um valor considerável, capaz de provocar efeitos não lineares no sistema, os macroparâmetros L_s e L_d , relacionados com estes minerais, deverão ser adequadamente corrigidos antes de serem incluídos como dados de entrada naquele polinômio.

7.3.2 Determinação dos Macroparâmetros da Formação

Ambos, os comprimentos de freiamento e difusão de uma formação constituída 100% do mineral m e tendo porosidade ϕ , totalmente saturada pelo fluido f , podem ser calculados pelas equações a seguir,

$$L_s(\phi) = L_{s,m} \cdot L_{s,f} \left[\frac{D_s}{(1 - \phi) \cdot D_{s,m} \cdot L_{s,f}^2 + \phi \cdot D_{s,f} \cdot L_{s,m}^2} \right]^{1/2}, \quad (7.40)$$

$$L_d(\phi) = L_{d,m} \cdot L_{d,f} \left[\frac{D_d}{(1 - \phi) \cdot D_{d,m} \cdot L_{d,f}^2 + \phi \cdot D_{d,f} \cdot L_{d,m}^2} \right]^{1/2}, \quad (7.41)$$

onde $L_{s,m}$ e $L_{s,f}$ são os comprimentos de freiamento individuais para o mineral m e fluido f , respectivamente; o mesmo ocorrendo para os comprimentos de difusão. Os parâmetros D_s e D_d , são os coeficientes de difusão total para nêutrons epitérmicos e térmicos, respectivamente. Por sua vez, os parâmetros $D_{s,m}$ e $D_{s,f}$ são os coeficientes de difusão parciais para o mineral m e o fluido f , relativos à fase de freiamento. Igual analogia se faz para os nêutrons na fase de difusão. No entanto, percebe-se que para calcular de L_s e L_d devemos determinar previamente os coeficientes de difusão D_s e D_d , independentemente. WILLIE (1984) considera que quando a absorção de nêutrons adquire a mesma importância que o espalhamento, estes coeficientes podem ser determinados sem problemas pela expressão simples

$$D = \frac{\Sigma_s}{3\Sigma_{tr}\Sigma_T}, \quad (7.42)$$

onde Σ_{tr} , Σ_s e Σ_T são as seções de choque macroscópicas de transporte, espalhamento e total, respectivamente. Estas seções de choque têm seus valores tabelados para cada átomo particular e para uma determinada energia do nêutron (LONGLEY, 1956). Para efeito de cálculos neste trabalho, consideramos os parâmetros na fase de freiamento correspondendo a nêutrons de 2.5 MeV de energia e para a fase de difusão, à nêutrons de 0.1 eV de energia. Os valores destes parâmetros foram interpolados ou extrapolados logaritmicamente da tabela de seções de choque ANL-612 (LONGLEY, 1956).

7.3.3 Interpolação entre Pontos Extremos

Nos últimos anos, vários autores têm construído modelos capazes de prever a resposta da ferramenta de porosidade neutrônica em formações homogêneas, com combinação binária de minerais na matriz e saturada com um único tipo de fluido.

Contudo, estes modelos simples, baseados nos conceitos de comprimentos de freiamento e difusão, são incapazes de gerar dados realísticos para formações heterogêneas e complexas, ou

seja, aquelas constituídas por três ou mais combinações de minerais e diferentes saturações fluidas. Isto se explica pelos efeitos de não-linearidade verificados nas relações existentes entre os parâmetros físicos ditos perturbadores.

Este cálculo do índice de porosidade $N(\phi)$ interpola linearmente entre duas curvas de pontos extremos que representa uma matriz de constituição mineralógica pura,

$$N(\phi) = v_1 N_1(\phi) + v_2 N_2(\phi) \quad (7.43)$$

onde $N_1(\phi)$ e $N_2(\phi)$ são os índices de porosidade para uma formação de porosidade ϕ , constituída 100% pelos minerais M_1 e M_2 , respectivamente. Vale ressaltar neste ponto, que o índice de porosidade $N(\phi)$, conforme medido pela sonda CNL, é apenas um indicativo da porosidade aparente da formação identificado como sendo o seu conteúdo de hidrogênio. Este índice não apresenta uma relação definida com a porosidade verdadeira da formação, exceto quando esta é constituída 100% por calcareo e tendo os poros totalmente saturados com água.

Generalizando, o modelo de interpolação da equação (7.43), pode ser extendido às formações constituídas por três ou mais minerais,

$$N(\phi) = \mathbf{v}^T \mathbf{N}(\phi), \quad (7.44)$$

onde, para cada $N_i(\phi)$, o espaço poroso é suposto totalmente preenchido com um fluido base, normalmente a água. No entanto, vale salientar que os índices de porosidade são calculados como se os diferentes constituintes da formação fossem independentes. Porém, nós vimos na seção anterior, que os efeitos dos moderadores e absorvedores fortes de nêutrons não são independentes, o que faz com que exista uma dependência complexa entre eles, constituindo-se numa fonte potencial de erros, principalmente nos casos em que dois ou mais componentes perturbadores estão presentes simultaneamente.

DAHLBERG (1989) assumiu a formação como tendo um mineral base M , cujo índice de porosidade é $B(\phi)$. Assim, a equação (7.44) pode ser reformulada como uma perturbação sobre este caso base:

$$N(\phi) = B(\phi) + \mathbf{v}^T \Delta \mathbf{N}(\phi), \quad (7.45)$$

onde os elementos do vetor perturbação $\Delta \mathbf{N}(\phi)$ são calculadas da seguinte forma

$$\Delta N_i(\phi) = N_i(\phi) - B(\phi). \quad (7.46)$$

Além disso, podemos ainda considerar que o espaço poroso está preenchido por uma mistura de vários tipos de fluidos, $f_1, f_2, \dots$; sendo um deles, o fluido base. Se a cada fluido

f_j corresponder uma saturação s_j , para $s_1 + s_2 + \dots = 1$, então, cada saturação pode ser igualmente tomada como uma perturbação sobre o caso base,

$$\Delta F_j(\phi) = F_j(\phi) - B(\phi), \quad (7.47)$$

sendo $F_j(\phi)$, o índice de porosidade de uma rocha constituída pelo mineral base e totalmente saturada com o fluido f_j . Isto permite definir o modelo de interpolação entre pontos extremos como sendo:

$$N(\phi) = B(\phi) + \mathbf{v}^T \Delta \mathbf{N}(\phi) + \mathbf{s}^T \Delta \mathbf{F}(\phi) \quad (7.48)$$

cujo resultado, volto a repetir, vale unicamente para camadas espessas.

7.3.4 Extrapolação para a Presença de Minerais Perturbadores

O índice de porosidade determinado através da equação (7.48) só será uma estimativa aceitável da porosidade verdadeira, quando os índices de porosidade para cada um dos constituintes mineralógicos da formação em questão, não sofrerem quaisquer tipos de perturbações, provocadas pelos índices relacionados com os outros minerais presentes. Para que este fato se verifique, é indispensável que tanto os minerais quanto os fluidos tenham suas seções de choque dentro do intervalo de valores adotado por TITTLE (1988) na construção do seu algoritmo. Neste caso, pode-se verificar uma transição linear entre os conjuntos de pontos extremos representativos de cada mineral. Assim, podemos verificar pelas Figuras 7.30 e 7.31, que as presenças de argila e pirita, por exemplo, induzem efeitos visivelmente não lineares no índice de porosidade à medida que suas concentrações aumentam. Para utilizar o algoritmo de Tittle, que é exclusivamente linear, nestes tipos de litologias e outras tantas similares, devemos antes extrapolar os dados de porosidade, conforme sugerido por DAHLBERG (1989).

A presença de argila superestima o índice de porosidade, desde que sua concentração em volume ultrapasse cerca de 30%. Devemos então extrapolar os valores do índice de porosidade até esta concentração. Com a pirita o problema da não linearidade mostra-se mais sério. Ele acentua-se já à cerca de 10% em concentração por volume de pirita. Mesmo neste caso extremo, podemos ainda adotar o mesmo esquema de extrapolação utilizado para a argila, modificando, no entanto, o intervalo de extrapolação. Assim, temos estabelecido um novo índice de porosidade para estes minerais ditos perturbadores:

$$N_i = \frac{H_i(\phi) - (1 - P_i) \cdot B(\phi)}{P_i}, \quad (7.49)$$

onde i é o índice referente ao mineral perturbador, P_i é o ponto de extrapolação calculado para o mineral i , podendo ser a argila, pirita, etc., H_i é o índice de porosidade para uma

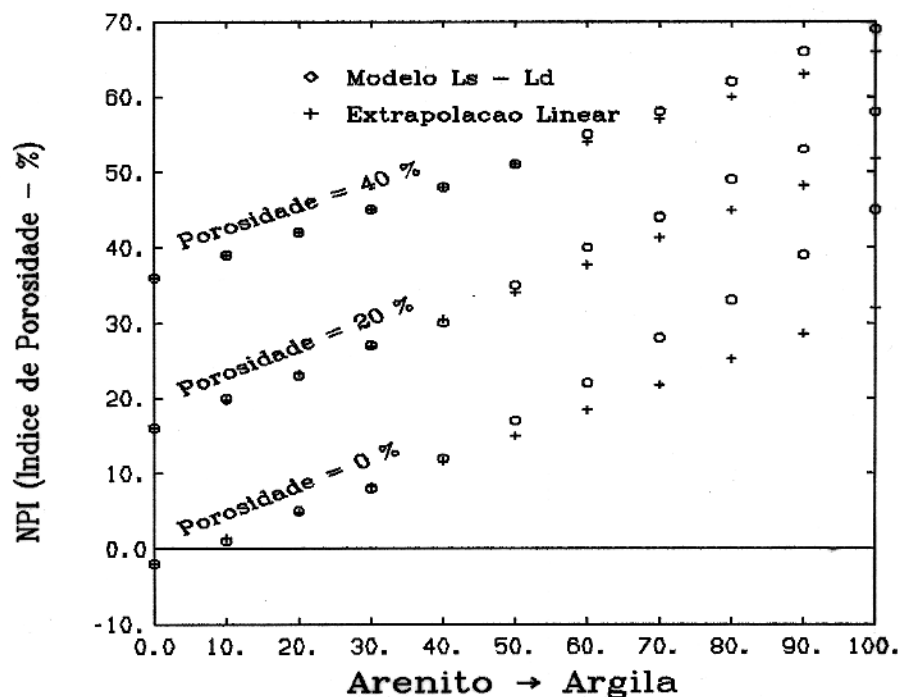


Figura 7.30 - Influência da presença de argila numa formação cujo mineral base é o quartzo. Os efeitos não lineares observados são extrapolados a partir de 30 % em volume de argila (Ilita).

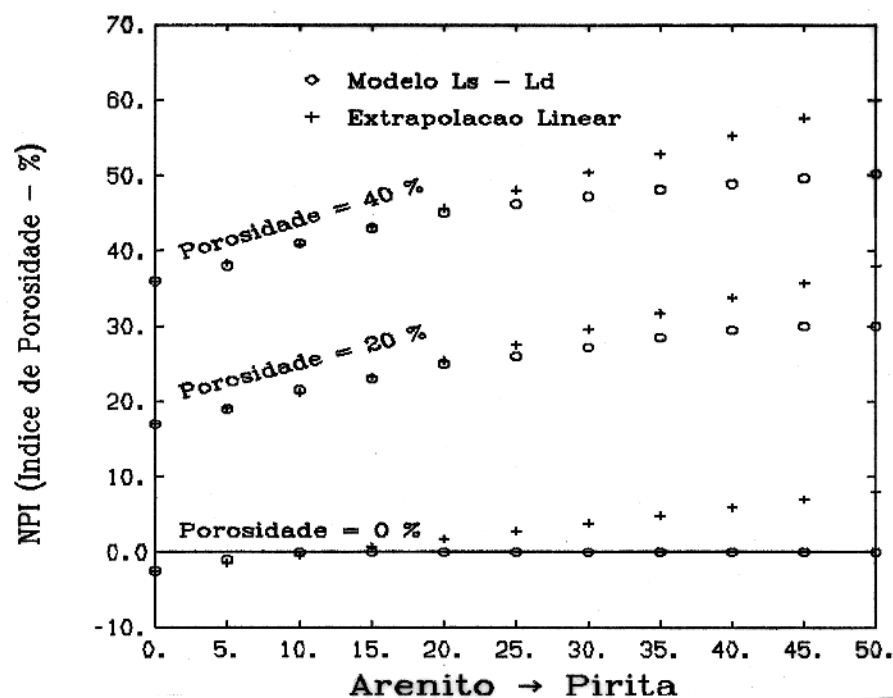


Figura 7.31 - Influência da presença de pirita numa formação cujo mineral base é o quartzo. Os efeitos não lineares observados são extrapolados a partir de 10 % em volume de pirita.

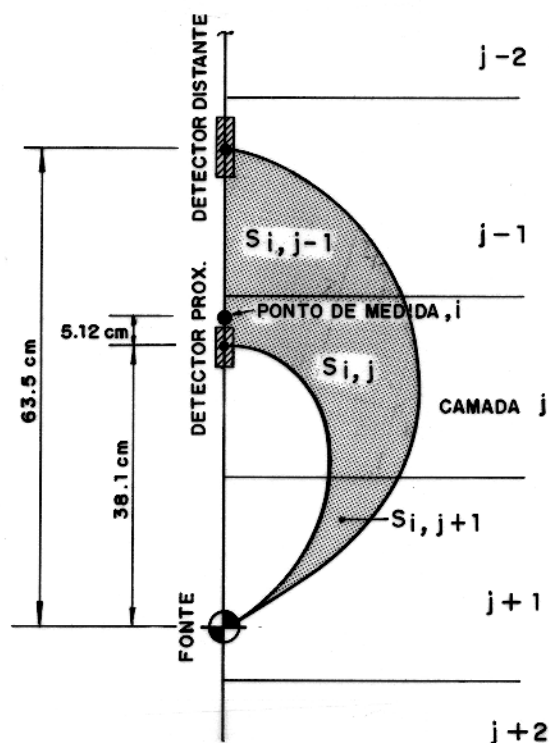


Figura 7.32 - Modelo de definição da zona de máxima informação a ser utilizada como suporte na convolução com o modelo geológico, supondo que todas as suas camadas são espessas.

formação com $(100 - P_i)\%$ de matriz base e $P_i\%$ do mineral perturbador considerado. É importante ressaltar que o comportamento dos minerais do grupo dos feldspatos e das micas são em geral semelhantes àqueles das argilas, exceto a biotita, que em função da presença de ferro, apresenta comportamento similar ao da pirita.

7.3.5 Modelo Geral para Camadas Finas

Tendo em vista que o índice de porosidade neutrônica medido pela sonda CNL, tem desenho e calibração adequados somente quando em formações espessas, algumas modificações devem ser introduzidas a fim de determinar a sua resposta em modelos de camadas finas.

O modelamento proposto, introduz o conceito de zona de máxima informação. Esta zona, conforme pode ser vista na Figura 7.32, situa-se entre dois elipsóides cujos eixos maiores coincidem com as distâncias da fonte aos dois detectores, posicionados a 38.1 cm e 63.5 cm da fonte. Os eixos menores coincidem com as profundidades de investigação, levando-se em conta o afastamento entre a fonte e cada um dos dois detectores da sonda CNL.

Percebemos no entanto, que o ponto teórico de medida ou de atribuição, definido como sendo o ponto médio entre os dois detectores, resulta num deslocamento vertical do perfil,

Figura 7.33(a). Este deslocamento impossibilita a definição exata da profundidade da interface de separação entre duas camadas. Esta verificação exigiu redefinir o ponto de medida como sendo aquele capaz de gerar uma curva cujo ponto de inflexão caia exatamente sobre a interface de separação de dois meios semi-infinitos. Este ponto é aquele que divide a zona de máxima de informação em duas áreas rigorosamente iguais e foi calculado como estando entre os dois detectores, afastado 5.12 cm do centro do detector mais próximo. O perfil da Figura 7.33(b) mostra o resultado após a correção.

O modelo representado na Figura 7.32 mostra, além da zona de máxima informação, as camadas por ela interceptadas. Cada área $S_{i,j}$, quando i é o ponto de atribuição da medida no modelo geológico, é usada para ponderar a resposta P_j , gerada pelo algoritmo de Tittle em uma formação espessa, com a mesma composição da camada j . Isto implica numa convolução entre a zona de máxima informação e o modelo geológico, supondo as camadas independentes e espessas.

$$\Phi_i = \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} S_{i,j} P_j, \quad (7.50)$$

onde j_{min} e j_{max} são os índices das camadas mais externas do modelo geológico, envolvidas pela zona de máxima informação. O modelo assim estabelecido permite determinar os índice de porosidade de quaisquer tipos de modelos, em um ponto qualquer i , sejam estes modelos de camadas espessas ou finas. A seguir são apresentados uma série de resultados utilizando esta metodologia.

Na Figura 7.35, observamos que certos trechos dos perfis ali mostrados apresentaram valores de porosidade ligeiramente diferentes daqueles assumidos pelos modelos geológicos. Isto deve-se ao fato de que a sonda CNL, sendo calibrada em calcáreos saturados com água, resulta em valores de porosidade aparente discordantes quando utilizada em outras litologias.

As camadas onde se verifica a predominância de minerais de argila, feldspatos, micas e os evaporitos, com destaque para o Gypsum, os altos valores lidos de porosidade devem-se, principalmente, à presença da água adsorvida naqueles minerais. Este fato é melhor verificado em camadas com porosidades relativamente baixas. Um exemplo típico pode ser visto no perfil da Figura 7.33(c), relativo á segunda camada do modelo geológico em questão. O valor elevado de porosidade deve-se ao fato de que a caolinita apresenta um índice de hidrogênio relativamente alto (0.37) se comparada com outros minerais de argila. Por outro lado, a presença de Gypsum, um Sulfato de Cálcio hidratado, resultou também em leituras igualmente elevadas nos perfis da Figura 7.35.

Na Figura 7.36 é apresentado um modelo final para a análise conjunta dos efeitos observados pela presença de um mineral de argila, no caso a montmorilonita, na porosidade aparente

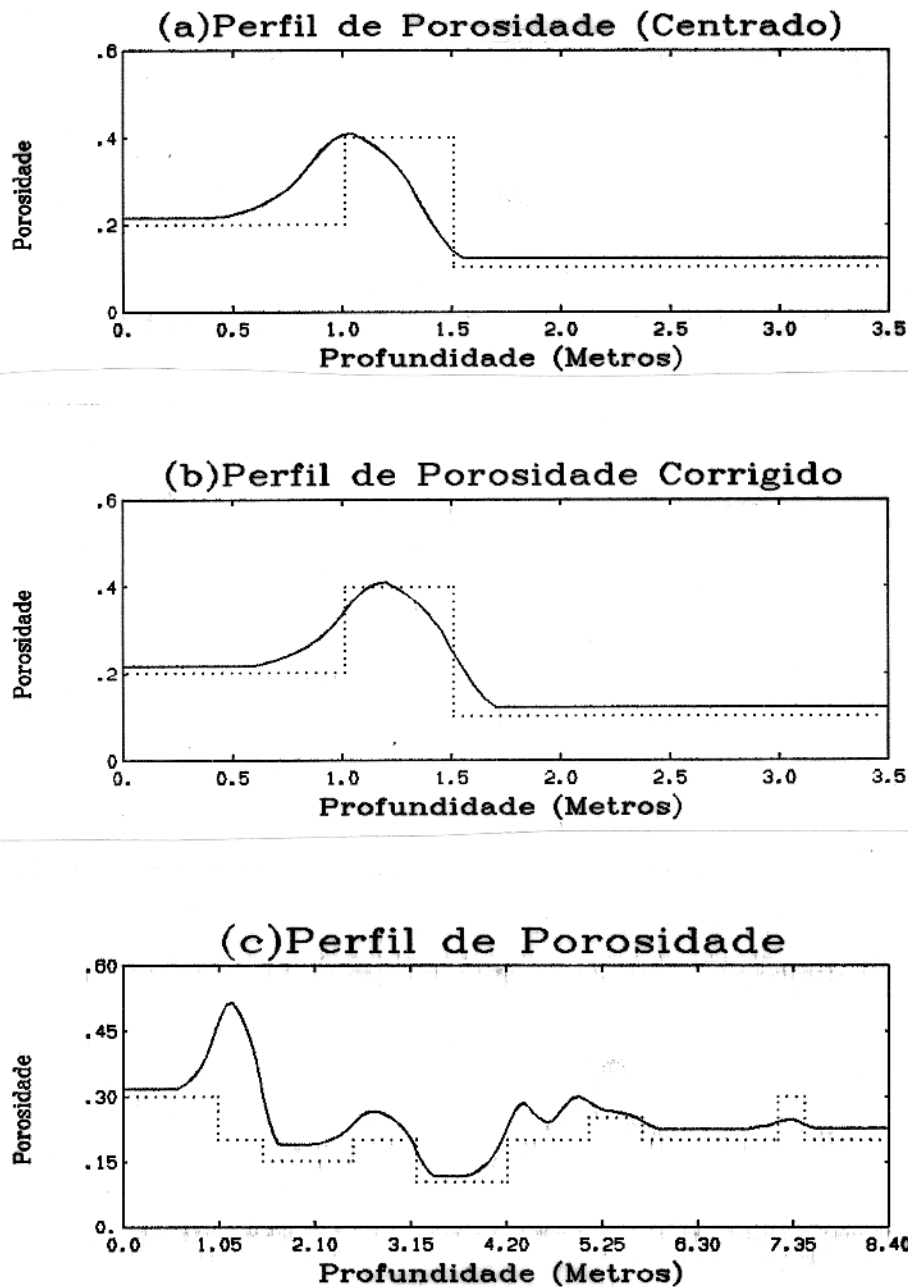


Figura 7.33 - Simulação de perfis de porosidade baseados na sonda CNL. O perfil (a) apresenta um deslocamento das interfaces de separação das camadas adjacentes, devidos ao fato de se considerar o ponto de medida como sendo o ponto médio entre os dois detectores. No perfil (b) mostramos o reposicionamento das interfaces após a adoção do novo ponto de medida. Em (c) está representado o perfil relativo ao modelo da Figura 7.8, totalmente saturado com água.

de uma formação cujas porosidades verdadeiras variam de 0 até 40 %. Podemos observar que à medida que a porosidade aproxima-se de zero, acentua-se cada vez mais o efeito do mineral de argila.

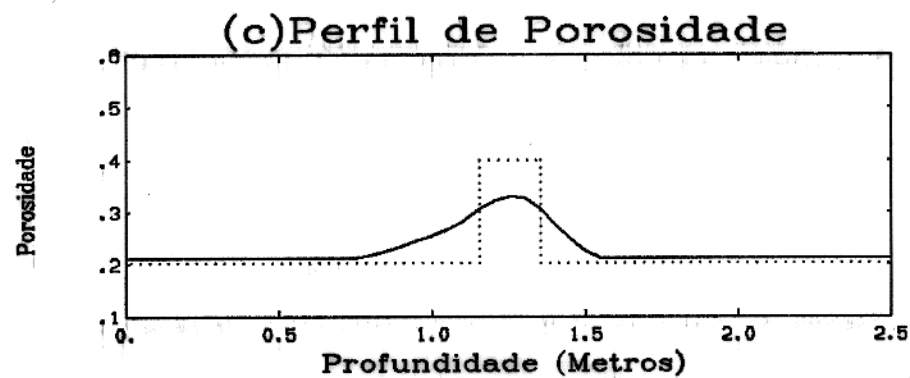
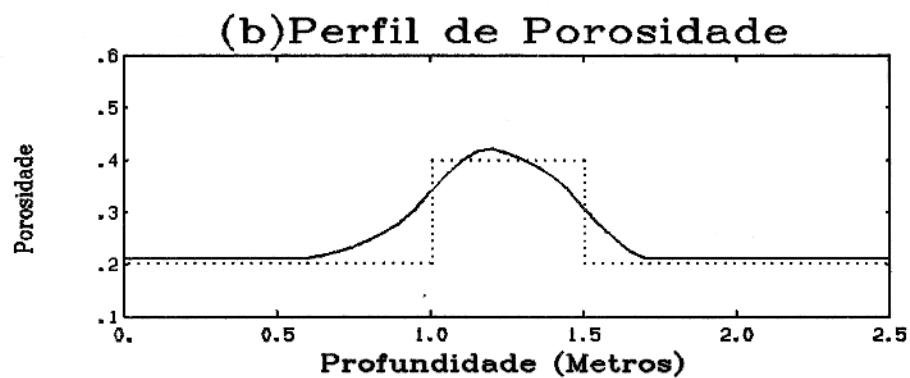
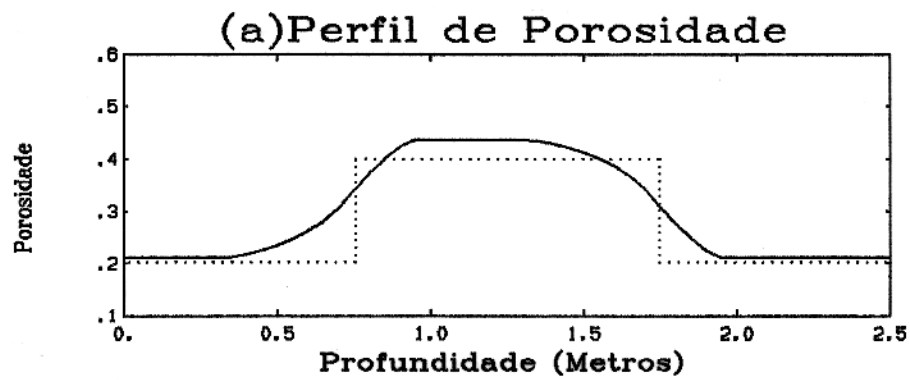


Figura 7.34 - Efeito da espessura da camada central nos perfis de porosidade neutrônica, tendo por base o modelo da Figura 7.10, saturado com água: (a) modelo com as espessuras a , b e c valendo 75, 100 e 75 cm, respectivamente; (b) modelo para a , b e c valendo 100, 50 e 100 cm e, finalmente, (c) modelo com as espessuras a , b e c valendo , 115, 20 e 115 cm, respectivamente.

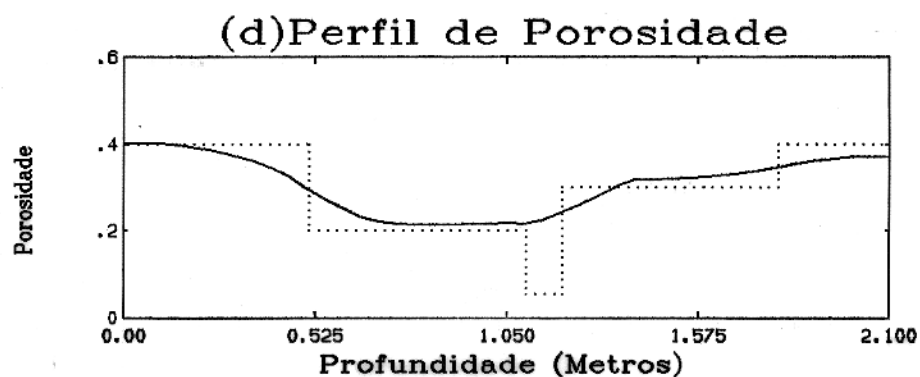
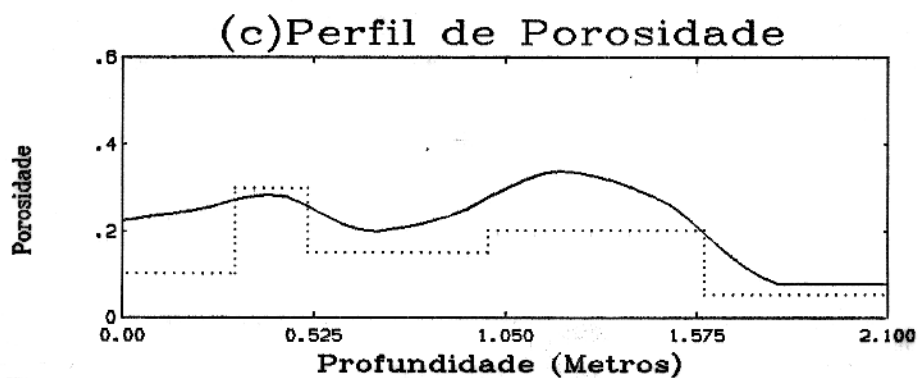
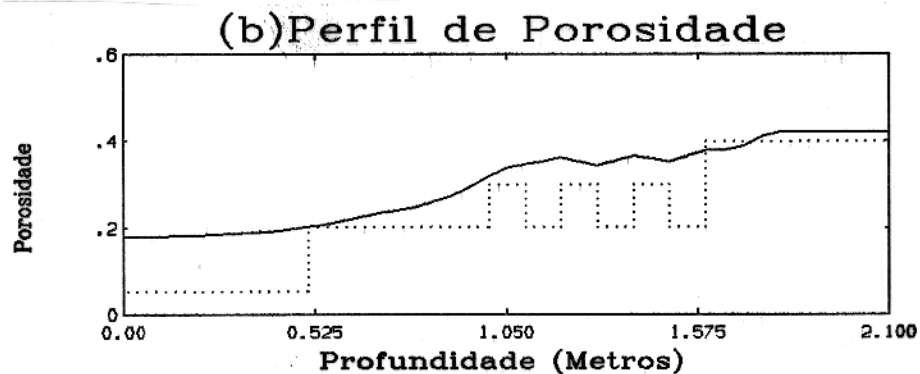
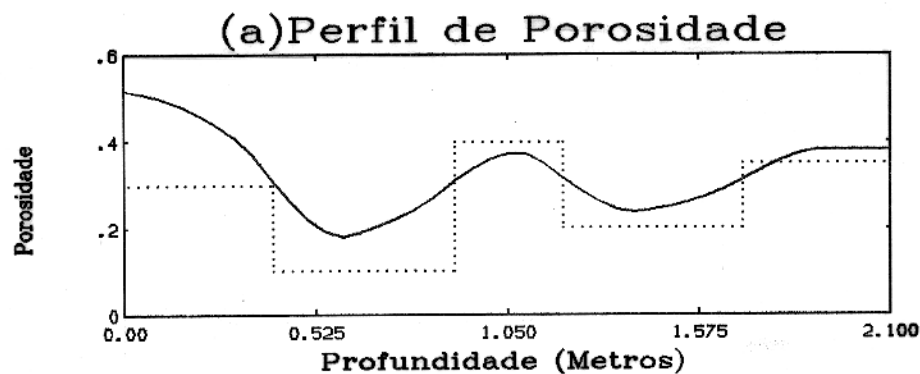
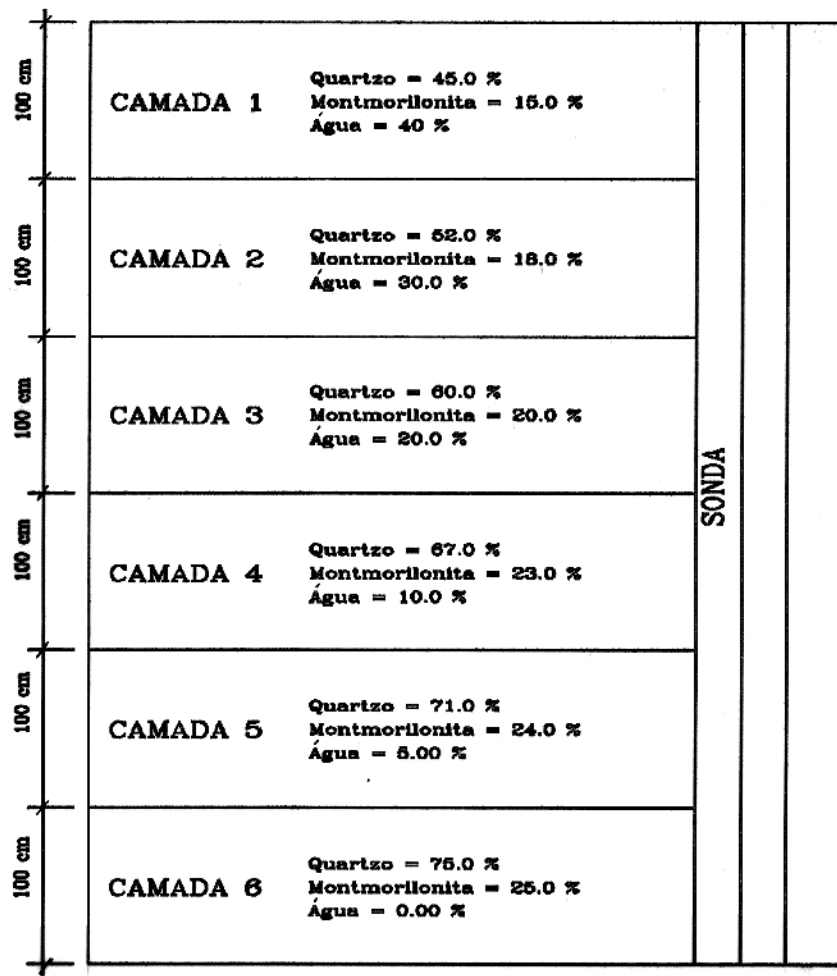


Figura 7.35 - Simulação dos perfis de porosidade neutrônica baseados nos seguintes modelos: perfil (a) - Figura 7.14, perfil (b) - Figura 7.16, perfil (c) - Figura 7.18 e perfil (d) - Figura 7.20.

(a) Modelo Geológico



(b) Perfil de Porosidade

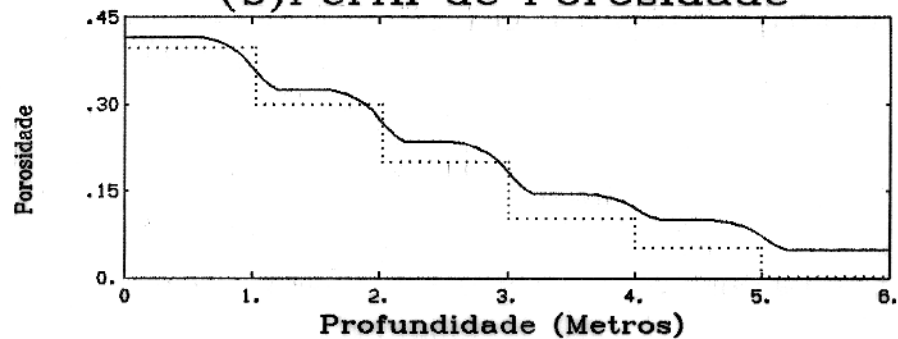


Figura 7.36 - Modelo geral para respostas da sonda CNL em formações com porosidades variando de 0 a 40%. Em (a) apresentamos o modelo geológico, enquanto em (b) está representado o perfil resultante desse modelo.

8 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Nos capítulos iniciais dessa tese, foi apresentado um amplo desenvolvimento teórico acerca das interações de raios gama e nêutrons com a matéria. O entendimento destes processos, além de estimular uma visão mais crítica dos mecanismos envolvidos no transporte e detecção de radiação, tem sido a base fundamental na análise dos perfis simulados neste trabalho.

Todas as operações relativas ao método Monte Carlo foram feitas com o auxílio de computadores. Os números aleatórios necessários ao desenvolvimento dos algoritmos foram estipulados através de técnicas estatísticas diversas, geradas por programas especiais (URAND). Para reduzir os tempos de CPU, alguns métodos foram adotados, de forma que a série de trajetórias obtidos apresentaram a melhor caracterização dos parâmetros medidos sobre o campo de radiação gama.

A simulação da função resposta do detector, quando comparada com simulações desenvolvidas por outros autores, mostrou-se satisfatória. Tanto a fotofração quanto a eficiência total, calculadas a partir do espectro de perda de energia, acharam-se dentro das especificações, levando-se em conta as propriedades físicas e geométricas do cristal cintilador utilizado.

O transporte da radiação gama, simulado através do algoritmo de elementos finitos (FEM), permitiu uma variabilidade geométrica exemplar. A calibração da malha foi feita comparando-se os resultados obtidos com este algoritmo e aqueles obtidos via solução analítica a partir de modelos geológicos mais simples. Da mesma forma, foi testada e aprovada a interação entre os grupos. A determinação da matriz de transição foi possível graças a um processo capaz de calcular os espalhamentos múltiplos da radiação e acumular integralmente estes valores sobre um determinado grupo de energia.

A técnica utilizada para promover o acoplamento entre o fluxo escalar e a função resposta do detector, permitiu simular uma situação prática real. A partir do conjunto de pontos emissores ao longo da parede do poço, foi possível incluir na resposta final, o efeito simultâneo de várias camadas dentro da zona de contribuição das emissões radioativas. Esta técnica permitiu reproduzir fielmente o comportamento das curvas no momento em que o detector cruza uma determinada interface.

Observamos que o cálculo das concentrações de Potássio, Urânio e Tório foram invariavelmente afetados pelas flutuações estatísticas, muito mais importantes nas janelas de Potássio e

Urânio. Este fato, revelou que as anti-correlações, especialmente entre Tório e Urânio, determinaram em alguns casos extremos, estimativas negativas para as concentrações de Urânio. A técnica adotada para a correção destes erros permitiu estabelecer em cada canal, taxas de contagem livres dos efeitos do empilhamento dos pulsos dos canais de maior energia sobre os demais. Assim, se a resposta da sonda NGS não for corretamente calibrada, ela pode resultar em erros grosseiros que inviabilizariam quaisquer tipos de interpretação feitas a partir dos resultados obtidos. Além do mais, para calibrações ideais, os conteúdos de Potássio, Urânio e Tório deveriam estar uniformemente distribuídos na formação. Tais arranjos são raros na natureza e possivelmente nem existem. As formações artificiais nestes padrões, são difíceis de serem construídos, visto as dificuldades encontradas na preparação destas amostras puras. Dessa forma, verificamos que entre as dificuldades mais comuns na interpretação dos perfis de raios gama naturais está a falta de unicidade. Da mesma que podem existir minerais de argila não radioativos, não é totalmente impossível a ocorrência de calcários radioativos. Nestes casos, vários tipos de litologias consideradas padrões podem ser interpretadas erroneamente como sendo folhelhos. Assim, as correlações estabelecidas entre minerais de argila e as concentrações em massa dos três isótopos considerados, podem resultar em sérios problemas de interpretação.

Algumas das aplicações práticas do perfil GR, tais como a correlação de zonas tomadas poço a poço, as estimativas do volume de argila nos folhelhos, etc., ficariam igualmente prejudicadas. O perfil GR, na verdade, não responde nem ao volume de argila, nem aos folhelhos em si. Ele responde, sim, às concentrações conjuntas daqueles elementos radioativos. No entanto, podemos assegurar que a melhor correlação possível seria aquela entre o Tório e os minerais a ele associados, visto a sua regularidade ao longo de cada litologia. O outro elemento importante nas correlações, o Potássio, traz consigo a propriedade de associar-se a outros minerais que não aqueles de argila. Entre estes citamos como exemplo, o feldspato.

No caso da simulação destes perfis em litologias ditas padrões, encontramos uma razão sinal-ruído excepcionalmente baixa, devido ao baixo nível de radiação. As correções do empilhamento aumentam um pouco esta razão, mas não o suficiente para impedir que erros menores de interpretação fossem cometidos.

É importante observar que a simulação da sonda LDT proporcionou o conhecimento mais apurado das litologias associadas com formações complexas. As medidas simultâneas da densidade e do fator de absorção fotoelétrica de uma formação permitiram introduzir novos conceitos relativos à diferenciação de litologias de difícil identificação. A metodologia adotada para calcular P_e , onde a razão entre as taxas de contagem da região de altas energias do detector mais distante para aquela de baixas energias, foram convertidos para valores de P_e ,

usando de transformações polinomiais, assumiram que esta razão não dependia da densidade da formação. Isto não é cem por cento verdade. Esta razão não pode ser transformada exatamente para P_e por causa do espalhamento coerente (Rayleigh) e das correções da energia de ligação sobre o espalhamento Compton, ambos dependentes da litologia. Além do mais, as taxas de contagem têm na verdade, uma dependência apenas exponencial sobre P_e , o que limita sobremaneira aquela transformação. Por estes e outros motivos é que os valores de P_e são de tão difícil aquisição. Junta-se a isto o fato de que o efeito fotoelétrico é uma função não linear com respeito ao peso atômico (A) e ao número atômico (Z) dos átomos do meio, podendo mesmo em alguns casos, interferir na determinação da densidade da formação. Para valores de P_e maiores de 5.0 barns/ e^- , detectamos uma redução sensível nas taxas de contagem para os canais de menor energia, refletindo negativamente na forma da correlação pré-estabelecida para o cálculo de P_e . Por isso não foi possível determinar fatores de absorção fotoelétrica acima deste valor, vindo pois a constituir-se em uma limitação na simulação deste perfil.

É importante ressaltar que a introdução de uma nova metodologia, visando simular a resposta da sonda CNL para porosidade em modelos de camadas finas, mostrou-se especialmente útil na análise de reservatórios com ocorrência de minerais raros ou de difíceis condições de medida. Entre estes, podemos destacar os arenitos apresentando inclusões de pirita, as misturas de argilas, feldspatos, micas, etc. A boa concordância observada entre os resultados desta simulação com uma série de dados colhidos de outros autores, têm-nos incentivados a ampliar um pouco mais o leque de conhecimentos acerca de outros fatores importantes que perturbam as medidas de porosidade das formações. As condições e as limitações encontradas puderam ser explicadas através dos modelamentos.

No conjunto, verifica-se a necessidade de correções para os efeitos ambientais, específicos para cada tipo de ferramenta. Outros tipos de perturbações têm se tornado visíveis à medida que se aprimora o estudo destas sondas. Temos provado por meio deste trabalho, que uma das principais características da medida de porosidade neutrônica é indicar valores mais elevados para a porosidade aparente de folhelhos. Estes valores estão normalmente associados aos elementos traço, como por exemplo o Boro, com grandes seções de choque de captura térmica. Inclui-se a estes, as hidroxilas (OH) associadas à estrutura do mineral de argila. Em resumo, os valores elevados de porosidade aparente são devidos primeiramente às altas concentrações de hidrogênio, comuns na matriz argilosa. Outro fato marcante que podemos observar é que as porosidades aparentes medidas em litologias constituídas de Caolinita são muito maiores do que aquelas constituídas por outros minerais de argila. Isto deve-se em parte, aos diferentes conteúdos de hidroxilas nestes minerais. Contudo, temos identificado que a causa principal é, na verdade, o valor elevado do índice de hidrogênio da Caolinita

(0.37), que é aproximadamente o dobro em relação aos outros minerais. Outra conclusão importante a que chegamos reflete a diferença nas respostas de porosidade neutrônica nos evaporitos. Enquanto a Anidrita provoca uma perturbação mínima nas medidas, o Gypsum provoca uma elevação subta nos valores de porosidade aparente, devido à presença de duas moléculas adicionais de água, formadas no fenômeno de hidratação.

Para um desfecho mais completo do trabalho iniciado com esta tese, é sugerido como continuação, a comparação das respostas dos perfis de densidade- P_e -CNL calculados (Logcalc), com as respostas destes mesmos perfis, porém registrados (Logrec) em uma seção do poço onde dados suficientes de testemunhos estejam disponíveis. Estes dados serão de grande importância na avaliação normal de perfis nucleares. Os sistemas de perfilagem aqui mencionados são comumente usados para comparar valores medidos de porosidade baseados em perfis de densidade, na escala de calcáreo, com perfis P_e e também de porosidade neutrônica tomado na mesma escala. Sua principal aplicação é a determinação da litologia dos intervalos perfilados. Algumas vezes isto é feito através de "cross-plots". Independente disto, estes mesmos algoritmos podem ser definidos com a finalidade anterior, principalmente quando combinados com perfis de espectrometria de raios gama naturais.

Assim, temos concluído que os modelamentos teóricos aqui desenvolvidos podem simular a maioria dos eventos particulares que ocorrem na realidade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADAIR, R. K. 1950. Neutron cross section of the elements. **Reviews of Modern Physics**, 22(3): 249 - 289.
- ALLEN, L. S.; TITTLE, C. W.; MILLS, W. R.; CALDWELL, R. L. 1967. Dual-spaced neutron logging for porosity. **Geophysics**, 32(1): 60 - 68.
- AMALDI, E. & FERMI, E. 1936. On the absorption and diffusion of slow neutron. **Physical Review**, 50(14): 899 - 928.
- BARBOSA, J. B. S. 1986. O sistema Si(Li) de espectrometria de raios X e sua aplicação na análise quantitativa de elementos de terras raras. Belo Horizonte, Universidade Federal de Minas Gerais. 146 p. Tese (Mestrado em Ciências e Técnicas Nucleares)- Curso de Pós - Graduação em Ciências e Técnicas Nucleares - Departamento de Engenharia Nuclear, UFMG, 1986.
- BARRY, J. M. & POLLARD, J. P. 1982. Solution of neutron diffusion linear equations by the method of implicit non-stationary iteration. In: NOYE, J. **Numerical solution of partial differential equations**. New York, North-Holland Publishing. p. 605 - 622.
- BARSCHALL, H. H. 1952. Methods for measuring fast neutron cross sections. **Review of Modern Physics**, 24(3): 120 - 132.
- BECKER, E. B.; CAREY, G. F.; ODEN, J. T. 1981. **Finite elements; an introduction**. New Jersey, Prentice-Hall. 258p.
- BERTOZZI, W.; ELLIS, V.; WAHL, J. S. 1981. The physical foundation of formation lithology logging with gamma rays. **Geophysics**, 46(10): 1439 - 1455.
- BURLHAM, W. E. 1973. **Nuclear physics ; an introduction**. London, Longman. 686p.
- CROSSLEY, D. J. & REID, A. B. 1982. Inversion of gamma ray for element abundance. **Geophysics**, 47(1): 117 - 126.
- DAHLBERG, K. E. 1989. A practical model for analysis of compensated neutron logs in complex formation. In: ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM, 30., Houston, 1989. **Proceedings**. Houston, SPWLA. v.2, p. PP.

- DAVIES, A. L. 1980. **The finite element method: a first approach**. Oxford, Clarendon Press. 287p.
- DAVISSON, C. M. & EVANS, R. D. 1952. Gamma - ray absorption coefficients. **Review of Modern Physics**, 24(2): 79 - 107.
- DEUPREE, R. G. & NOEL, S. D. 1988. Monte Carlo Simulation of an ephitermal neutron logging tool. **The Log Analyst**, 29(2): 95 - 102.
- DICKENS, J. K. 1989. Use of Monte Carlo techniques to derive yields for $n + {}^{12}\text{C}$ multibody breakup reactions: Programming the computer to simulate collisions by fast neutrons. In: **COMPUTER IN PHYSICS**, Tennessee, 1989. **Proceedings**. Tennessee, ORNL. p.62 - 68.
- EDMUNDSON, H. & RAYMER, L. L. 1979. Radioactive Logging Parameters for common Minerals. **The Log Analyst**, 20(5): 38 - 47.
- ELLIS, D.; FLAUM, C.; MARIENBACH, E; ROULET, C.; SEEMAN, B. 1985. Litho-density tool calibration. In: **ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION**, New Orleans, 1985. **Proceedings**. New Orleans, SPE. p. 515 - 520.
- ELLIS, D. V. 1987. **Well logging for earth scientist**. New York, Elsevier. 287p.
- ETHERINGTON, H. 1958. **Nuclear Engineering Handbook**. New York, McGraw-Hill. 1012p.
- EVANS, R. D. 1967. **The atomic nucleus**. New York, McGraw - Hill. 287p.
- GARDNER, J. S. & DUMANOIR, J. L. 1980. Litho - Density log interpretation. In: **ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM**, 21., Lafayette, 1980. **Proceedings**. Lafayette, SPWLA.
- GREEN, A. E. S. 1955. **Nuclear Physics**. New York, McGraw - Hill. 535p.
- KALOS, M. H. & WHITLOCK, P. A. 1986. **Monte Carlo Methods**. New York, J. Wiley & Sons. 186p.
- KOGAN, R. M.; NAZAROV, I. M.; FRIDMAN, S. D. 1971. **Gamma spectrometry of natural environment and formation**. Jerusalém, Israel Program for Scientific Translations. 337p.

- KOIZUMI, C. J. 1988. Computer determination of calibration and environmental corrections for a natural spectral gamma ray logging system. **SPE Formation Evaluation**, 20(5): 637 - 644.
- LONGLEY, H. J. 1956. **Neutron Cross Sections**. Los Alamos, LOS ALAMOS SCIENTIFIC LABORATORY OF THE UNIVERSITY OF CALIFORNIA. 227 p. (LA - 2016).
- MARTIN-MALMONGE, I. 1974. **Détermination des flux de photons gamma de basse energie dans l'atmosphère**. Toulouse, L' Université Paul Sabatier de Toulouse. 104p. Tese (Docteur de Spécialité), 1974.
- MICKAEL, M.; GARDNER, R. P.; VERGHESE, K. 1988. McDNL: a new specific purpose Monte Carlo code for simulation of dual - spaced neutron porosity logs. In: **ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM**, 29., Houston, 1988. **Proceedings**. Houston, SPWLA. v.2, p. MM.
- MOAKE, G. L. 1988. Definition of an improved lithology factor and a Laboratory technique for its measurement. In: **ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM**, 29., Houston, 1988. **Proceedings**. Houston, SPWLA. v.2, p. PP.
- MOAKE, G. L. 1991. A new approach to determining compensated density and Pe values with a spectral-density tool. In: **ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM**, 32., Houston, 1991. **Proceedings**. Houston, SPWLA. v.2, p. Z.
- MORLAND, A. M. 1984. Special log processing for thin zones using geological impulse response functions, with particular application to total and spectral gamma ray logs. **The log analyst**, 26(6): 23 - 35.
- NOWOSAD, P. 1978. Elementos da teoria dos reatores nucleares. In: NOWOSAD, P. ed. **Operadores positivos e otimização - aplicações à engenharia nuclear**. Rio de Janeiro, CBPF. p. 29 - 62.
- ODEN, J. T. & REDDY, J. N. 1976. **An introduction to the mathematical theory of finite elements**. New York, J. Wiley & Sons. 429 p.
- QUIREIN, J. A.; GARDNER, J. S.; WATSON, J. T. 1982. Combined natural gamma ray spectral / Litho-density measurements applied to complex lithologies. In: **ANNUAL FALL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION**, 57., New Orleans, 1982. **Proceedings**. New Orleans, SPE.

- RAMIREZ, J. A.; VASCONCELOS, J. A.; ANDRADE, J. C. 1991. Cálculo de campos eletrostáticos bidimensionais utilizando o método de elementos finitos com geração automática de malha. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE AUTOMÁTICA, 8., Belém, 1991. **Anais**. Belém, CBA. p. 542 - 547.
- RUBINSTEIN, R. Y. 1981. **Simulation and Monte Carlo Method**. New York, J. Wiley & Sons. 278p.
- SERRA, O. 1984. **Fundamentals of Well-log Interpretation**. Amsterdam, Elsevier. 423p.
- SCHIMSCHAL, U. 1980. Quantitative effects of lithology, borehole environment, and probe design in gamma spectral logging crystals. **The Log Analyst**, 21(5): 3-12.
- SHAO, H.; MILLER, D. W.; PEARSHALL, C. R. 1991. Scintillating fiber optics and their application in radiographic systems. **IEEE Transactions on Nuclear Science**, 38(2): 845 - 857.
- SMITH, H. D.; ROBBINS, C. A.; GARDNER, L. L. & DEATON, J. G. 1983. A multi-function compensated spectral natural gamma ray logging system. In: ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION, 58., San Francisco, 1983. **Proceedings**. San Francisco, SPE.
- SPANIER, J. & GELBARD, E. M. 1969. **Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems**. New York, Addison-Wesley. 224p.
- TITTLE, C. W. 1961. Theory of neutron logging I. **Geophysics**, 26(1): 27 - 39.
- TITTLE, C. W. 1988. Predicting the porosity response of the CNL from neutron parameter of the formation. In: ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM, 29., Houston, 1989. **Proceedings**. Houston, SPWLA. v.2, p. LL.
- TITTLE, C. W. & ALLEN, L. S. 1966. Theory of neutron logging II. **Geophysics**, 31(1): 214 - 224.
- TITTMAN, J. 1955. Moderation of Neutrons in SiO_2 and CaCO_3 . **Journal of Applied Physics**, 26(4): 394 - 398.
- TITTMAN, J. 1986. **Geophysical Well Logging. Methods of Experimental Physics**. Orlando, Academic Press. 175 p.
- TITTMAN, J. & WAHL, J. S. 1965. The physical foundation of formation density logging (gamma - gamma). **Geophysics**, 30(2): 284 - 294.

- VICTOREEN, J. A. 1948. The absorption of incident quanta by atoms as defined by the mass photoelectric absorption coefficient and the mass scattering coefficient. **Journal of Applied Physics**, 19(9): 855 - 860.
- WAHL, J. S. 1983. Gamma-ray logging. **Geophysics**, 48(11): 1536 - 1550.
- WILEY, R. & PATCHETT, J. G. 1989. CNL neutron porosity modeling, a step forward. **The Log Analyst**, 31(2):133-149.
- WILSON, R. D.; KOIZUMI, C. J.; DEAN, S. D.; DEAN, J. S. 1985. Spectral gamma-ray calculations with an efficient and accurate radiation transport model. In: ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM, 26., Dallas, 1985. **Proceedings**. Dallas, SPWLA. v.1, p. A.
- WILLIE, A. W. 1984. **Nuclear Assaying of Mining Borehole**; an introduction. Amsterdam, Elsevier. 344p.
- WITTEBROOD, R. T. 1980. **Critical evaluation of spectral and NGT - sondes; their operation, calibration, application, interpretation and borehole corrections**. Shell Canada Resources Limited, Canada. (no prelo)

ANEXO I - EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

O estudo do fluxo de nêutrons ou raios gama baseia-se em análise estatística conhecida como teoria do transporte cuja criação deve-se, entre outros, a Boltzmann que formulou no século passado a teoria cinética dos gases.

A teoria do transporte acima mencionada, baseia-se em linhas gerais, na formulação da equação do balanço de partículas em um volume elementar $dv = dsdl$. A posição deste volume no espaço é determinada pelo vetor r , sendo Ω a normal a área ds .

Considerando o caso no estado estacionário em que o fluxo não varia com o tempo, vamos descrever o balanço no volume dv em um intervalo de energia $E, E + dE$, para uma direção próxima de Ω . Se não há fontes no volume dv e nenhuma absorção ou espalhamento ocorre, o número de nêutrons ou raios gama entrando no volume dv em um segundo, tendo energias entre E e $E + dE$ e direções próximas de Ω , deve ser igual ao número de nêutrons ou raios gama deixando este mesmo volume, isto é, $\Psi_{in} = \Psi_{out}$. No entanto, se o volume dv é preenchido por um material qualquer, algumas das partículas serão absorvidas ou espalhadas, o que faz com que algumas delas, após terem alteradas sua energia e direção, sejam excluídas do grupo anterior. Além disso, algumas partículas com energia $E' > E$ e $\Omega' \neq \Omega$, podem entrar em dv . Como resultado desse processo de espalhamento, aquelas partículas terão adquirido energia e direção correspondentes a um determinado grupo.

Ao se estabelecer a equação de balanço para a função espectral angular $\Psi(r, \Omega, E)$, devemos definir $\Psi(r, \Omega, E)dsdEd\Omega$ como sendo o número de partículas radioativas de energia $E, E + dE$, dentro do ângulo sólido $d\Omega$, próximo de Ω , passando através de uma superfície de área ds em um segundo. Assumindo que as partículas entram em dv via ds e a deixam através de ds' , obtemos

$$\Psi_{in} = \Psi(r, \Omega, E)dsdEd\Omega, \quad (I.1)$$

$$\Psi_{out} = \Psi(r + \Omega dl, \Omega, E)ds'dEd\Omega, \quad (I.2)$$

$$(\Psi_{in})_{abs} = \mu dl \Psi(r, \Omega, E)dsdEd\Omega. \quad (I.3)$$

O número de partículas de energia e direção adequadas que são formadas como resultado do espalhamento de partículas mais energéticas, isto é, daquelas com $E' > E$, no volume dv

pode ser, enfim, calculada. Para tal, determinamos o número de partículas entrando em dv no intervalo $E', E' + dE'$, próximo de Ω' como sendo

$$\Psi(\mathbf{r}, \Omega, E') ds dE' d\Omega \cos \theta \quad (I.4)$$

onde θ é o ângulo entre Ω e Ω' . O percurso coberto por estas partículas em dv é $dl / \cos \theta$, e consequentemente, o número total de espalhamentos ao longo deste segmento será

$$\sigma_s(E') N_s \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E') ds dE' d\Omega dl / \cos \theta \quad (I.5)$$

onde σ_s é a seção de choque para o espalhamento das partículas com energia E' e N_s é a densidade de centros espalhadores.

De todas as partículas espalhadas, somente aquelas que caem no intervalo $E, E + dE$ e na direção Ω são relevantes. Este número é proporcional a

$$\frac{d\sigma_s(E', \Omega', E, \Omega)}{\sigma_s(E')} = \frac{K(E', \Omega', E, \Omega) dE' d\Omega'}{\sigma_s(E')}. \quad (I.6)$$

O número de partículas adequadas Δ_{scat} , produzidas por segundo, como resultado do espalhamento em dv , é dado por

$$\Delta_{scat} = \int_{\Omega'} \int_{E' > E} K(E', \Omega', E, \Omega) dE' d\Omega' \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E') ds dE d\Omega dl. \quad (I.7)$$

A equação do balanço toma a seguinte forma:

$$\Psi(\mathbf{r} + \Omega dl, \Omega, E) ds' dE d\Omega = \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) ds dE d\Omega - \mu dl \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \Delta_{scat} + S(\mathbf{r}, \Omega, E) \quad (I.8)$$

onde $S(\mathbf{r}, \Omega, E)$ é a fonte externa introduzida no sistema.

Dividindo ambos os lados da equação anterior por $ds dE d\Omega dl$, e admitindo que $ds' \approx ds$, obtemos

$$\frac{\Psi(\mathbf{r} + \Omega dl, \Omega, E) - \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E)}{dl} = -\mu \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \frac{\Delta_{scat}}{ds dE d\Omega dl} + S(\mathbf{r}, \Omega, E). \quad (I.9)$$

A diferença no lado esquerdo da equação é igual ao incremento da função escalar $\Psi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ ao longo do comprimento dl . Se dl é dirigido ao longo de Ω , o lado esquerdo da equação se torna $\Omega \cdot \text{grad} \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E)$, para $l \rightarrow 0$. Assim, a equação cinética do balanço torna-se,

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) = -\mu \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \int_{\Omega'} \int_{E' > E} K(E', \Omega', E, \Omega) \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E') dE' d\Omega' + S(\mathbf{r}, \Omega, E) \quad (I.10)$$

que é a equação integro-diferencial de transporte de Boltzmann, no espaço de fase e estado estacionário.

Se tomamos, agora, o caso em que

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}', E, E') = \sigma_s(\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}') \delta(E' - E_0), \quad (\text{I.11})$$

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \begin{cases} S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) & \text{se } E = E_0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (\text{I.12})$$

e,

$$\Sigma_T(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \begin{cases} \Sigma_T(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) & \text{se } E = E_0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (\text{I.13})$$

e chamando $\mu = \Sigma_T(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ e $K(E', \mathbf{\Omega}', E, \mathbf{\Omega}) = N_s \sigma_s(\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})$, podemos reescrever a equação de Boltzmann da seguinte forma,

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_T(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{\mathbf{\Omega}'} N_s \sigma_s(\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \quad (\text{I.14})$$

cuja solução será

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \quad \text{se } E = E_0, \quad (\text{I.15})$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = 0 \quad \text{se } E \neq E_0. \quad (\text{I.16})$$

Este caso é dito monoenergético, pois apenas as partículas de energia E_0 figuram no processo.

ANEXO II - SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

A solução analítica da equação de difusão monoenergética, consiste em resolver o seguinte problema de contorno numa dada região Ω ,

$$-\nabla \cdot [D(\mathbf{r})\nabla\Phi(\mathbf{r})] + \Sigma_T(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (\text{II.1})$$

$$\Phi(\mathbf{r})|_{\Omega_i} = \Phi(\mathbf{r})|_{\Omega_{i+1}} \quad (\text{II.2})$$

$$\Phi(\mathbf{r})|_{\partial\Omega} = 0 \quad (\text{II.3})$$

onde $\Omega = \sum_i \Omega_i$ tem como contorno a fronteira $\partial\Omega$. A solução da equação diferencial (II.1), observadas as condições impostas pela relações (II.2) e (II.3), só é possível analiticamente para o caso em que $S(\mathbf{r})$ representa uma fonte pontual centralmente localizada e as regiões no entorno dela, são cilindros concêntricos, cuja distinção das demais se faça em função de variações em suas propriedades físicas.

TITTLE (1961) analisou o caso de fluxo de nêutrons epitermais, para dois cilindros e expansão da fonte pontual em séries de funções ortogonais na coordenada radial (r), o que levou necessariamente a uma equação transcendental complicada no qual grande número de auto-valores devia ser obtido, tornando o problema um trabalho árduo e lento. Na tentativa de amenizar este problema, TITTLE & ALLEN (1966) refizeram o trabalho anterior, substituindo a expansão radial da fonte por uma expansão axial onde os auto-valores podiam ser determinados com maior eficiência. Além desta contribuição, eles adicionaram um terceiro cilindro, porém, adotaram para este, raio infinito.

Baseando-se nos cálculos desenvolvidos por TITTLE & ALLEN (1966), adotaremos a mesma geometria onde a , b , c são os raios dos cilindros 1, 2, e 3, respectivamente, e os parâmetros físicos D_1, D_2, D_3 e $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ são, por sua vez, as constantes de difusão e as seções de choque de cada região. Utilizando as propriedades de invariância a nosso dispor, transformamos a equação (II.1) para coordenadas cilíndricas adotando contudo o caso em que ambos o semicomprimento (h) e o raio externo do cilindro 3 sejam finitos. Assim, observada a condição de simetria radial e fonte pontual, temos

$$\frac{\partial^2 \Phi_i(r, z)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi_i(r, z)}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi_i(r, z)}{\partial z^2} - \frac{\Phi_i(r, z)}{L_i^2} = 0, \quad (\text{II.4})$$

$$\Phi(r, z)|_{\Omega_i} = \Phi(r, z)|_{\Omega_{i+1}} \quad (\text{II.5})$$

$$\Phi(r, z) = 0 \quad \text{para} \quad r = c, z = \pm h. \quad (\text{II.6})$$

Para os pontos $(r, z) \neq (r_0, z_0)$, de localização da fonte pontual de potência total Q , a equação diferencial (II.4) pode ser resolvida para cada região, separadamente. L_i é o comprimento de freiamento do neutron (ou fóton) dado por $L_i = (D_i/\Sigma_{r,i})^{1/2}$.

A solução da equação (II.4) pode ser obtida pelo método de separação de variáveis

$$\Phi_i(r, z) = R(r)Z(z). \quad (\text{II.7})$$

Substituindo a equação (II.7) em (II.4), obtemos

$$\frac{1}{R} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{rR} \frac{dR}{dr} = -\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{1}{L_i^2} = \alpha^2, \quad (\text{II.8})$$

onde α é uma constante real positiva. As soluções independentes $R(r)$ e $Z(z)$, da equação diferencial (II.8), serão dadas por

$$R(r) = A'I_0(\alpha r) + B'K_0(\alpha r) \quad (\text{II.9})$$

$$Z(z) = C' \cos \lambda z + D' \sin \lambda z \quad (\text{II.10})$$

onde A', B', C' e D' são constantes arbitrárias e $I_0(\alpha r)$ e $K_0(\alpha r)$ são funções modificadas de Bessel de ordem 0 e o auto-valor será:

$$\alpha = \left(\lambda^2 + \frac{1}{L_i^2} \right). \quad (\text{II.11})$$

Visto que a fonte está localizada no centro dos cilindros, as funções $\sin \lambda z$ são eliminadas para z 's ímpares o que equivale a considerar $D' = 0$ e as soluções nas três regiões se tornam

$$\Phi_1(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} [A_n I_0(\alpha_n r) + B_n K_0(\alpha_n r)] \cos \lambda_n z \quad \text{para} \quad 0 \leq r \leq a, \quad (\text{II.12})$$

$$\Phi_2(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} [C_n I_0(\beta_n r) + E_n K_0(\beta_n r)] \cos \lambda_n z \quad \text{para} \quad a \leq r \leq b, \quad (\text{II.13})$$

$$\Phi_3(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} [G_n I_0(\gamma_n r) + F_n K_0(\gamma_n r)] \cos \lambda_n z \quad \text{para} \quad b \leq r < c, \quad (\text{II.14})$$

$$\Phi_3(r, z) = 0 \quad \text{para} \quad r = c. \quad (\text{II.15})$$

onde $A_n = A'C'$, $B_n = B'C'$, etc; e os auto-valores λ_n são obtidos da equação (II.3), ou seja, da condição de $\Phi(r, z) = 0$ para $z = h$, o que leva a $\cos \lambda_n z = 0$, ou equivalentemente

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{2h} \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (\text{II.16})$$

Os auto-valores serão definidos pelas relações a seguir

$$\alpha_n = \left(\lambda_n^2 + \frac{1}{L_1^2} \right)^{1/2}, \quad (\text{II.17})$$

$$\beta_n = \left(\lambda_n^2 + \frac{1}{L_2^2} \right)^{1/2}, \quad (\text{II.18})$$

$$\gamma_n = \left(\lambda_n^2 + \frac{1}{L_3^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{II.19})$$

A determinação dos B_n , conforme sugerido por TITTLE & ALLEN (1966), pode ser feita a partir da normalização da fonte, enquanto as demais constantes arbitrárias podem ser obtidas das condições de continuidade do fluxo e da densidade de corrente, definidas pela equação (II.2) e (II.3). Supondo que a fonte emite Q nêutrons ou fótons por segundo, isotropicamente, podemos tomar a expansão axial da fonte em séries de Fourier,

$$Q\delta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} P_n \cos \lambda_n z \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (\text{II.20})$$

$$\int_{-h}^h Q\delta(z) \cos \lambda_n dz = \int_{-h}^h P_n \cos^2 \lambda_n dz = Q \quad (\text{II.21})$$

cuja solução é

$$P_n = \frac{Q}{h}. \quad (\text{II.22})$$

Consideremos agora um cilindro fictício de raio r_1 , com as mesmas propriedades físicas da região 1. quando $r_1 \rightarrow 0$, a corrente atravessando a superfície deste cilindro deve ser igual á potência da fonte Q . Assim, a corrente normal é $-D_1(\partial\Phi_1/\partial r)$, onde os termos derivados de $I_0(\alpha_n r)$ desaparecem. Identificando, termo a termo, o restante da série e tomando a expansão de Fourier da fonte, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{Q}{h} \cos \lambda_n z &= -D_1 \lim_{r_1 \rightarrow 0} \left[A_n \frac{\partial I_0(\alpha_n r)}{\partial r} 2\pi r + B_n \frac{\partial K_0(\alpha_n r)}{\partial r} 2\pi r \right]_{r=r_1} \cos \lambda_n z \\ &= -D_1 \lim_{r_1 \rightarrow 0} [A_n \alpha_n I_1(\alpha_n r_1) 2\pi r_1 - B_n \alpha_n K_1(\alpha_n r_1) 2\pi r_1] \cos \lambda_n z \\ &= 2\pi D_1 B_n \cos \lambda_n z, \end{aligned}$$

de onde concluímos que

$$B_n = \frac{Q}{2\pi D_1 h}. \quad (\text{II.23})$$

Aplicando, finalmente, as condições de interface nas equações (II.12)-(II.15), temos

$$\begin{aligned} \Phi_1(r, z)|_{r=a} &= \Phi_2(r, z)|_{r=a}, \\ A_n I_0(\alpha_n a) + B_n K_0(\alpha_n a) &= C_n I_0(\beta_n a) + E_n K_0(\beta_n a), \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

$$D_1 \frac{\partial \Phi_1(r, z)}{\partial r} \Big|_{r=a} = D_2 \frac{\partial \Phi_2(r, z)}{\partial r} \Big|_{r=a},$$

$$D_1 \alpha_n A_n I_1(\alpha_n a) - D_1 \alpha_n B_n K_1(\alpha_n a) = D_2 \beta_n C_n I_1(\beta_n a) - D_2 \beta_n E_n K_1(\beta_n a), \quad (\text{II.25})$$

$$\Phi_2(r, z) \Big|_{r=b} = \Phi_3(r, z) \Big|_{r=b},$$

$$C_n I_0(\beta_n b) + E_n K_0(\beta_n b) = G_n I_0(\gamma_n b) + F_n K_0(\gamma_n b), \quad (\text{II.26})$$

$$D_2 \frac{\partial \Phi_2(r, z)}{\partial r} \Big|_{r=b} = D_3 \frac{\partial \Phi_3(r, z)}{\partial r} \Big|_{r=b},$$

$$D_2 \beta_n C_n I_1(\beta_n b) - D_2 \beta_n E_n K_1(\beta_n b) = D_3 \gamma_n G_n I_1(\gamma_n b) - D_3 \gamma_n F_n K_1(\gamma_n b), \quad (\text{II.27})$$

$$\Phi_3(r, z) \Big|_{r=c} = 0,$$

$$G_n I_0(\gamma_n c) + F_n K_0(\gamma_n c) = 0. \quad (\text{II.28})$$

A combinação das equações (II.24)-(II.28) pode ser transformada no seguinte sistema linear

$$\mathbf{G}^{(n)} \mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{d}^{(n)}, \quad (\text{II.29})$$

onde os elementos da matriz $\mathbf{G}^{(n)}$ ($g_{ij}^{(n)}$, para $i, j = 1, 2, 3, 4, 5$), assumem os seguintes valores

$$\begin{aligned} g_{11}^{(n)} &= I_0(\alpha_n a), \\ g_{12}^{(n)} &= -I_0(\beta_n a), \\ g_{13}^{(n)} &= K_0(\beta_n a), \\ g_{21}^{(n)} &= D_1 \alpha_n I_1(\alpha_n a), \\ g_{22}^{(n)} &= -D_2 \beta_n I_1(\beta_n a), \\ g_{23}^{(n)} &= D_2 \beta_n K_1(\beta_n a), \\ g_{32}^{(n)} &= I_0(\beta_n b), \\ g_{33}^{(n)} &= K_0(\beta_n b), \\ g_{34}^{(n)} &= -I_0(\gamma_n b), \\ g_{35}^{(n)} &= -K_0(\gamma_n b), \\ g_{42}^{(n)} &= D_2 \beta_n I_1(\beta_n b), \\ g_{43}^{(n)} &= -D_2 \beta_n K_1(\beta_n b), \\ g_{44}^{(n)} &= -D_3 \gamma_n I_1(\gamma_n b), \\ g_{45}^{(n)} &= D_3 \gamma_n K_1(\gamma_n b), \\ g_{54}^{(n)} &= I_0(\gamma_n c), \\ g_{55}^{(n)} &= K_0(\gamma_n c), \end{aligned}$$

(II.30)

onde cada B_n é dado pela equação (II.23) e os elementos restantes de $G^{(n)}$ são nulos, isto é

$$g_{14}^{(n)} = g_{15}^{(n)} = g_{24}^{(n)} = g_{25}^{(n)} = g_{31}^{(n)} = g_{41}^{(n)} = g_{51}^{(n)} = g_{52}^{(n)} = g_{53}^{(n)} = 0. \quad (\text{II.31})$$

Por sua vez, os vetores $d^{(n)}$ e $p^{(n)}$ são dados por

$$d^{(n)} = \begin{bmatrix} -B_n K_0(\alpha_n a) \\ D_1 \alpha_n B_n K_1(\alpha_n a) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad p^{(n)} = \begin{bmatrix} A_n \\ C_n \\ E_n \\ G_n \\ F_n \end{bmatrix}. \quad (\text{II.32})$$

O sistema assim estabelecido, permite determinar diretamente $p_5^{(n)}$ em função de $p_4^{(n)}$, ou vice-versa,

$$p_5^{(n)} = -\frac{g_{54}^{(n)}}{g_{55}^{(n)}} p_4^{(n)} \quad (\text{II.33})$$

Eliminando agora as quintas linha e coluna da matriz $G^{(n)}$, após a substituição da equação anterior no sistema $G^{(n)} p^{(n)} = d^{(n)}$, podemos definir $p_1^{(n)}$ e $p_2^{(n)}$ em função de $p_3^{(n)}$, como segue

$$p_1^{(n)} = \frac{d_1^{(n)} g_{22}^{(n)} - d_2^{(n)} g_{12}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} - \frac{g_{13}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{23}^{(n)} g_{12}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} p_3^{(n)}, \quad (\text{II.34})$$

$$p_2^{(n)} = \frac{d_2^{(n)} g_{11}^{(n)} - d_1^{(n)} g_{21}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} - \frac{g_{12}^{(n)} g_{23}^{(n)} - g_{21}^{(n)} g_{13}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} p_3^{(n)}. \quad (\text{II.35})$$

Com a inclusão das equações (II.34) e (II.35) no sistema resultante, podemos determinar $p_3^{(n)}$ e $p_4^{(n)}$ como uma relação entre as séries $S_n, R_n e T_n$,

$$p_3^{(n)} = \frac{S_n}{R_n} \quad (\text{II.36})$$

$$p_4^{(n)} = \frac{T_n}{R_n}. \quad (\text{II.37})$$

As séries mencionadas são definidas na forma abaixo:

$$R_n = \left(g_{44}^{(n)} - \frac{g_{45}^{(n)} g_{54}^{(n)}}{g_{55}^{(n)}} \right) \left(g_{33}^{(n)} - g_{32}^{(n)} \frac{g_{11}^{(n)} g_{23}^{(n)} - g_{21}^{(n)} g_{13}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) - \left(g_{34}^{(n)} - \frac{g_{35}^{(n)} g_{54}^{(n)}}{g_{55}^{(n)}} \right) \left(g_{43}^{(n)} - g_{42}^{(n)} \frac{g_{11}^{(n)} g_{23}^{(n)} - g_{21}^{(n)} g_{13}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right), \quad (\text{II.38})$$

$$\begin{aligned}
S_n = & \left(g_{44}^{(n)} - \frac{g_{45}^{(n)} g_{54}^{(n)}}{g_{55}^{(n)}} \right) \left(d_3^{(n)} - g_{32}^{(n)} \frac{d_2^{(n)} g_{11}^{(n)} - d_1^{(n)} g_{21}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) - \left(g_{34}^{(n)} - \frac{g_{35}^{(n)} g_{54}^{(n)}}{g_{55}^{(n)}} \right) \\
& \left(d_4^{(n)} - g_{42}^{(n)} \frac{d_2^{(n)} g_{11}^{(n)} - d_1^{(n)} g_{21}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) \quad (\text{II.39})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_n = & \left(g_{33}^{(n)} - g_{32}^{(n)} \frac{g_{11}^{(n)} g_{23}^{(n)} - g_{21}^{(n)} g_{13}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) \left(d_4^{(n)} - g_{42}^{(n)} \frac{d_2^{(n)} g_{11}^{(n)} - d_1^{(n)} g_{21}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) \\
& - \left(g_{43}^{(n)} - g_{42}^{(n)} \frac{g_{11}^{(n)} g_{23}^{(n)} - g_{21}^{(n)} g_{13}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right) \left(d_3^{(n)} - g_{32}^{(n)} \frac{d_2^{(n)} g_{11}^{(n)} - d_2^{(n)} g_{21}^{(n)}}{g_{11}^{(n)} g_{22}^{(n)} - g_{12}^{(n)} g_{21}^{(n)}} \right). \quad (\text{II.40})
\end{aligned}$$