

## **SIMULACIONES NUMÉRICAS DE SONDAS TIPO NEUTRÓN COMPENSADO**

**Oscar M. Zamonsky\*** y **Mario O. Azcurra\*†**

\*División Física de Reactores Avanzados  
Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro  
Av. Bustillo Km. 9,500, San Carlos de Bariloche, 8400 Río Negro, Argentina  
e-mail: zamonsky@cab.cnea.gov.ar

†CONICET  
e-mail: azcurram@ib.cnea.gov.ar

**Palabras clave:** Neutrón Compensado, Monte Carlo, Ordenadas Discretas, Perfilaje neutrónico.

**Resumen.** *Las sondas de neutrón compensado utilizadas para perfilaje petrolero consisten básicamente en una fuente de neutrones de Am-Be y dos detectores de  $^3\text{He}$  colocados a distintas distancias de la fuente. A través de cocientes espectrales entre las respuestas de ambos detectores es posible estimar el contenido de hidrógeno de la formación y por lo tanto la porosidad de la misma.*

*En este trabajo se presentan simulaciones numéricas de sondas de neutrón compensado, realizadas con métodos probabilísticos y determinísticos. El objetivo de dichas simulaciones es comparar la performance de ambos métodos, usualmente empleados en cálculo neutrónico. Se ha empleado el código MCNP para los cálculos probabilísticos y DORT para los determinísticos, este último con la aproximación de Ordenadas Discretas. Las bibliotecas de secciones eficaces para los cálculos determinísticos han sido obtenidas por medio del sistema SCALE.*

*El sistema resuelto es similar a sondas comerciales de neutrón compensado, y se analizan los espectros en cada detector así como la distribución espacial del flujo neutrónico en función de la distancia a la fuente.*

*Los resultados que se presentan muestran que es posible simular el comportamiento neutrónico de estas sondas con ambos métodos, con tiempos de cálculo del orden de 100 veces menores en los métodos determinísticos para la misma precisión en los resultados.*

## 1. INTRODUCCIÓN

En exploración petrolera resulta de interés determinar características del medio físico tales como porosidad, permeabilidad y saturación en hidrocarburos, a los fines de evaluar económicamente un yacimiento. En pozos entubados y cementados, en donde los perfilajes eléctricos o sónicos pierden exactitud o no son aplicables, las sondas tipo Neutrón Compensado son útiles a los fines de determinar el contenido de hidrógeno en un reservorio. A partir de esta medición se estima la porosidad del medio, previa calibración de la herramienta de acuerdo a las características del pozo, asumiendo que el hidrógeno se encuentra solo en los fluidos que saturan el espacio poral de la roca, esto es agua o hidrocarburos. La determinación del contenido en hidrógeno se realiza a partir del cociente entre la tasa de contaje en un detector de neutrones térmicos lejano a la fuente respecto de uno cercano a la misma; una mayor tasa de contaje en el detector cercano y menor en el lejano indica mayor contenido de hidrógeno en el medio. Comunmente estas herramientas utilizan dos detectores de  $^3\text{He}$  colocados a distancias diferentes de una fuente de Am-Be de 20 Curies de intensidad.<sup>1</sup>

Las simulaciones numéricas de las sondas de neutrón compensado suelen realizarse con métodos probabilísticos ya que éstos resultan muy aptos para resolver problemas de penetración profunda, es decir, para el transporte de neutrones a grandes distancias de la fuente. Sin embargo, los tiempos de cálculo asociados a estos métodos suelen ser muy elevados, hecho que se hace muy notorio en tareas de diseño donde suele ser necesario realizar cálculos paramétricos.

En este trabajo se simula una sonda típica de neutrón compensado utilizando el método determinístico de Ordenadas Discretas o SN, y los resultados se comparan con un cálculo probabilístico de referencia. Dichos cálculos han sido realizados con códigos comerciales ampliamente validados en el campo de la neutrónica. Para los cálculos probabilísticos se utilizó el código MCNP-4C<sup>2</sup> y para los determinísticos el DORT3.2.<sup>3</sup>

El código MCNP posee bibliotecas de datos nucleares con información continua en energía, por lo que esta información (para una dada temperatura) es transparente para el usuario. Por otra parte, los modelos determinísticos utilizan secciones eficaces macroscópicas en estructura multigrupo, es decir, valores medios en intervalos prefijados de energía. Estas secciones eficaces son entonces dependientes del problema a tratar, por lo que es necesario generarlas para un conjunto de problemas de similares espectros. En este trabajo se han utilizado diversos módulos del sistema SCALE<sup>4</sup> para la generación de dichos datos nucleares.

Se presentan comparaciones entre los resultados de MCNP y de SCALE-DORT donde puede apreciarse una muy buena concordancia entre ambos con tiempos de CPU del orden de cinco horas en los primeros contra veinte minutos en los segundos.

En la Sec. 2 se introduce el código MCNP. El código DORT y una introducción al método de Ordenadas Discretas se detalla en la Sec. 3. En la Sec. 4 se analizan las bibliotecas de datos nucleares utilizadas en este trabajo y la forma en que se han generado los conjuntos de secciones eficaces macroscópicas para los cálculos determinísticos. En las secciones 5 y 6 se presenta el sistema modelado y los resultados obtenidos. Finalmente en la Sec. 7 se dan las conclusiones.

## 2. CÓDIGO MCNP-4C

El código MCNP, desarrollado en Los Alamos National Laboratory, permite el tratamiento probabilístico del transporte de neutrones, fotones y electrones en forma independiente o acoplada. La representación de materiales y geometría es muy general en cualquier configuración tridimensional. Si bien es posible emplear con MCNP secciones eficaces puntuales o multigrupo, el uso de las primeras constituye una de las principales ventajas del código ya que éstas no son dependientes del problema a resolver.

## 3. CÓDIGO DORT3.2

El código DORT, desarrollado en Oak Ridge National Laboratory, resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann con la aproximación de Ordenadas Discretas, SN. La dependencia energética es tratada a través de la aproximación multigrupo y la espacial con Diferencias Finitas. La anisotropía del scattering es tratada a través de expansiones en polinomios de Legendre de orden arbitrario. Si bien DORT puede ser utilizado para cálculos de factor de multiplicación en reactores nucleares, el mismo es principalmente apto para resolver problemas de transporte de penetración profunda de neutrones o fotones. Debido a la necesidad de utilizar datos nucleares en forma de secciones eficaces macroscópicas, éstas deben ser generadas para cada problema en particular, o al menos para un conjunto de problemas similares.

En las siguientes Secciones se detalla el procedimiento empleado en este trabajo para generar las secciones eficaces y las aproximaciones usadas por el código DORT para resolver el problema tratado.

### 3.1. Método de Ordenadas Discretas

La ecuación de transporte de Boltzmann en estado estacionario se expresa como:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sigma(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int dE' d\Omega' \left[ \sigma_s(\vec{r}, E, E', \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi(\vec{r}, E' \Omega') \right] + q(\vec{r}, E \vec{\Omega}) \quad (1)$$

donde  $d\vec{\Omega}$  es el diferencial de ángulo sólido alrededor de la dirección de vuelo del neutrón  $\vec{\Omega}$ ,  $E$  es la energía del neutrón y  $\vec{r}$  es el vector posición. El flujo angular  $\Psi$  está definido de forma tal que el número de partículas moviéndose en el volumen  $d\vec{r}$  alrededor de  $\vec{r}$  con energías  $dE$  alrededor de  $E$  y direcciones  $d\vec{\Omega}$  alrededor de  $\vec{\Omega}$  es  $\Psi d\vec{\Omega} dE d\vec{r}$ . La sección eficaz total es  $\sigma$  y  $\sigma_s$  es la sección eficaz de scattering desde  $E'$  y  $\vec{\Omega}'$  hacia  $E$  y  $\vec{\Omega}$ . La fuente externa (independiente del flujo angular) en la posición  $\vec{r}$  que emite neutrones de energía  $E$  en la dirección  $\vec{\Omega}$  está representada por  $q(\vec{r}, E \vec{\Omega})$ . Las condiciones de contorno para la Ec. (1) se dan para  $\Psi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}, E)$  en la frontera del sistema  $\vec{r}_s$ .

La sección eficaz de scattering no depende en general de la dirección incidente sino del ángulo de scattering:

$$\mu_0 = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'. \quad (2)$$

Dado que en la mayoría de los casos prácticos el scattering es isotrópico azimutalmente, en los métodos determinísticos la dependencia del mismo con  $\mu_0$  es tratada con expansiones en polinomios de Legendre de la forma:

$$\sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \mu_0) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{sl}(\vec{r}, E \rightarrow E') P_l(\mu_0). \quad (3)$$

El orden  $L$  de truncamiento de la expansión es llamado orden de scattering y los coeficientes  $\sigma_{sl}$  suelen estar disponibles en bibliotecas de datos nucleares.

Otra característica de los métodos determinísticos es que la variable energética es tratada a través de un esquema multigrupo. En éste la energía es discretizada en intervalos con límites  $E_1, E_2 \cdots E_G, E_g > E_{g+1}$ , dentro de los que todas las magnitudes son constantes. Por ejemplo, el flujo escalar se define en cada grupo  $E \in [E_g, E_{g+1}]$  como

$$\phi_g \equiv \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(E) dE, \quad (4)$$

y las secciones eficaces dentro de cada grupo,  $\sigma_g$  están definidas de forma tal de conservar el ritmo de reacción asociado,

$$\sigma_g \equiv \frac{1}{\phi_g} \int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(E) \phi(E) dE \quad (5)$$

En el método de Ordenadas Discretas SN, la Ec. (1) se resuelve en direcciones discretas  $\vec{\Omega}_m$  de acuerdo a la cuadratura  $\{(\vec{\Omega}_m, w_m), m = 1, \cdots M(N)\}$ , en la que  $M(N)$  es la cantidad de direcciones y  $w_m$  los pesos para integración aproximada sobre la variable angular. Por ejemplo el flujo escalar  $\phi$  se calcula como:

$$\phi = \int_{4\pi} \Psi(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \approx \sum_{n=1}^{M(N)} w_n \Psi_n, \quad (6)$$

estando definida

$$\Psi_n \equiv \frac{1}{4\pi} \Psi(\vec{\Omega}_n). \quad (7)$$

El código DORT resuelve la ecuación de transporte resultante de la aproximación de Ordenadas Discretas utilizando diversos esquemas en Diferencias Finitas para el tratamiento espacial.

#### 4. DATOS NUCLEARES

Como se mencionó en la Sección 2, los datos nucleares usados por el código MCNP están en bibliotecas puntuales, es decir, dados en forma continua para toda energía. De esta manera no se requiere ningún procesamiento previo a la resolución del problema a tratar.

Dado que los códigos determinísticos utilizan como dato secciones eficaces macroscópicas en una estructura multigrupo, éstas deben ser obtenidas previo a la resolución del problema de transporte. Básicamente debe obtenerse para cada tipo de reacción la sección eficaz multigrupo correspondiente,  $\sigma_g$ , tal como se ha definido en la Ec. 5. Es importante notar que la incógnita del problema a resolver es  $\phi(E)$ , por lo que suelen utilizarse soluciones aproximadas de éste para obtener los datos dados por la Ec. 5.

En las siguientes secciones se describe el procedimiento empleado en este trabajo para generar los datos nucleares que han sido utilizados luego para resolver el problema determinístico.

#### 4.1. Biblioteca VITAMIN-B6

La biblioteca maestro utilizada para obtener los datos nucleares es VITAMIN-B6.<sup>5</sup> La misma es generada de la ENDF/B-VI<sup>6</sup> y contiene 120 isótopos en una estructura multigrupo de 199 grupos de neutrones y 42 de fotones. Por ser una biblioteca maestro posee datos para realizar cálculo resonante y tratamientos por temperatura. En el presente trabajo no ha sido necesario realizar este tipo de tratamientos ya que se ha calculado una sonda a  $300^\circ K$ .

Los datos de VITAMIN-B6 han sido procesados con módulos del sistema SCALE a efectos de reducir la cantidad de grupos energéticos como se detalla en la siguiente Sección.

#### 4.2. Generación de los datos nucleares

A partir de la biblioteca maestro VITAMIN-B6 se utilizaron los módulos BONAMI<sup>7</sup> y NITAWL<sup>8</sup> del sistema SCALE para generar secciones eficaces microscópicas corregidas con tratamiento resonante. Debido a que los cálculos de transporte se realizaron a  $300^\circ K$  no ha sido necesario realizar correcciones por temperatura, las cuales pueden hacerse con los módulos mencionados antes.

La condensación se realizó a la estructura de 47 grupos de la biblioteca BUGLE-96<sup>9</sup> utilizando el módulo XSDFN<sup>10</sup> de SCALE. Este módulo resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann unidimensional con la aproximación de Ordenadas Discretas. El sistema resuelto en geometría plana unidimensional se muestra en la Fig. 1, con condiciones de contorno de reflexión especular a la izquierda y vacío a la derecha. El sistema ha sido resuelto con una cuadratura simétrica S16 y las secciones eficaces han sido condensadas para cada zona material mostrada de la misma figura. La región de la izquierda con aire contiene una fuente homogéneamente distribuida con un espectro típico de Am-Be.<sup>11</sup>

La composición de los materiales empleados se detalla en la Tabla 1. La formación geológica modelada consiste de una roca carbonática impura típica, cuya composición ha sido tomada a partir de un análisis químico por fluorescencia de rayos X de una roca caliza de la provincia de Madrid, España. La misma está clasificada petrológicamente como una biomicrita, estando compuesta principalmente por calcita ( $\text{CaCO}_3$ ) como mineral principal, con cuarzo, óxidos de hierro, biotita, muscovita, plagioclasa y feldespato potásico como minerales secundarios y accesorios.<sup>12</sup> A esta composición se le agregó un 10 % en volumen de agua con 100.000 ppm de ClNa, valor de salinidad típico de agua de reservorios.<sup>13</sup>

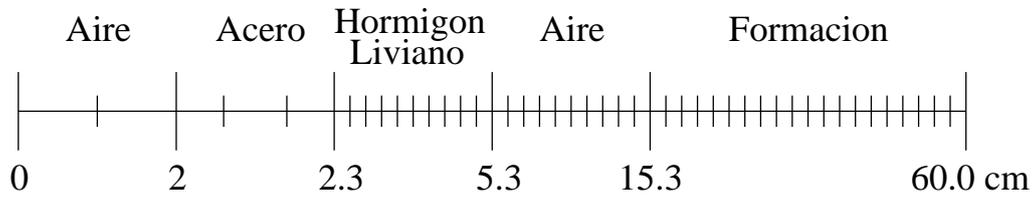


Figura 1: Modelo unidimensional para XSDRN.

Las secciones eficaces obtenidas de esta forma a 47 grupos de energía se utilizaron para realizar los cálculos determinísticos con el código DORT.

## 5. CÁLCULOS NUMÉRICOS

La sonda de neutrón compensado ha sido modelada en geometría cilíndrica según se muestra en la Fig. 2, donde las dimensiones están expresadas en centímetros.

Los cálculos probabilísticos han sido realizados con el código MCNP-4C, utilizando las secciones eficaces puntuales de la biblioteca ENDF/B-VI.

Los cálculos determinísticos han sido realizados con el código DORT con las secciones eficaces macroscópicas obtenidas como se explicó anteriormente con el sistema SCALE. En este sentido, cabe notar que las constantes para el aire en la región de fuente de la Fig. 2 corresponden a la zona izquierda de aire de la Fig. 1 mientras que el resto del aire modelado tiene las secciones eficaces correspondientes a la zona interior de aire de esta última figura.

Los cálculos determinísticos han sido realizados en geometría  $(r, z)$  con una cuadratura simétrica S16 y orden de scattering P5 en todo el dominio.

La fuente fija tiene un espectro típico de Am-Be<sup>11</sup> y está ubicada en la zona central inferior de la Fig. 2.

## 6. RESULTADOS

En la Fig. 3 se muestra el valor medio espacial del espectro obtenido con los códigos MCNP y DORT en las posiciones de los detectores mostrados en la Fig. 2, donde se identifican los detectores *Det. 1* y *Det. 3* como el más cercano y el más lejano a la fuente de neutrones respectivamente.

El espectro graficado está dado por el producto  $E\phi(E)$ , que en el esquema multigrupo se aproxima como  $\bar{E}_g\phi_g/\Delta E_g$ , donde  $\bar{E}_g$  es la energía media del grupo  $g$  de ancho  $\Delta E_g$  y  $\phi_g$  es el flujo total definido por la Ec. 4.

El comportamiento espectral obtenido en cada detector es característico de los sistemas neutrónicos moderados, donde el espectro de fuente aparece deformado a bajas energías por un espectro del tipo  $1/E$  que predomina hasta energías térmicas. Notar en la Fig. 3 la diferencia entre el espectro a altas energías calculado en los detectores respecto al utilizado para la fuente de Am-Be (fuera de escala).

Cuadro 1: Composición de los materiales.

	$1/cm - barn$		$1/cm - barn$
<i>aire</i>		<i>acero</i>	
<i>N</i>	$4,5714E - 05$	<i>Fe</i>	$5,8418E - 02$
<i>O</i>	$1,2299E - 05$	<i>Cr</i>	$1,7309E - 02$
<i>formación</i>		<i>Ni</i>	$7,2580E - 03$
<i>H</i>	$7,1105E - 03$	<i>Mn</i>	$1,7211E - 03$
<i>O</i>	$4,5914E - 02$	<i>Si</i>	$1,6817E - 03$
<i>C</i>	$1,3815E - 02$	<i>C</i>	$1,1802E - 04$
<i>Ca</i>	$1,3815E - 02$	<i>hormigón</i>	
<i>Si</i>	$2,8767E - 04$	<i>H</i>	$1,3219E - 02$
<i>Mg</i>	$1,6090E - 04$	<i>O</i>	$4,3862E - 02$
<i>Al</i>	$5,9241E - 05$	<i>Na</i>	$9,2331E - 04$
<i>Fe</i>	$1,8040E - 05$	<i>Ca</i>	$1,4621E - 03$
<i>Cl</i>	$1,0971E - 05$	<i>Fe</i>	$1,3247E - 04$
<i>Na</i>	$1,0971E - 05$	<i>Si</i>	$1,5923E - 02$
		<i>Al</i>	$1,6724E - 03$
		<i>K</i>	$4,4163E - 04$
		<i>C</i>	$1,1016E - 04$

En estos resultados puede observarse una muy buena concordancia entre las soluciones probabilísticas y determinísticas para todas las energías.

En la Fig. 4 se observan los flujos medios en cada uno de los detectores obtenidos con MCNP y DORT para los intervalos de energía rápido,  $0,498 < E \leq 12,214 MeV$ , epitérmico,  $10^{-7} \leq E < 0,498 MeV$  y térmico,  $10^{-11} \leq E < 10^{-7} MeV$ , normalizados en el detector central. Cabe notar que estos límites de energía son generalmente utilizados en neutrónica dado que en sistemas moderados, por debajo de aproximadamente  $0,5 MeV$  el espectro se aproxima bastante a  $1/E$ , y el espectro térmico domina por debajo de  $0,125 eV$  a temperatura ambiente.

De los valores mostrados en la Fig. 4 puede notarse que la distribución espacial del flujo obtenida con MCNP y DORT es similar, validando de alguna manera el procedimiento empleado para los cálculos determinísticos.

Es importante recalcar que el tiempo de ejecución del código MCNP para obtener los resultados convergidos que se muestran ha sido del orden de 5 horas, mientras que el empleado por el código DORT ha sido de 26 minutos en la misma plataforma.

## 7. CONCLUSIONES

En este trabajo se han realizado comparaciones entre el uso de métodos probabilísticos y determinísticos para la simulación numérica de una sonda tipo neutrón compensado utilizada para perfilaje petrolero. Ambos métodos resultan aptos para este tipo de cálculo si se dispone de bibliotecas de secciones eficaces adecuadas. En este sentido, cabe notar que las bibliotecas

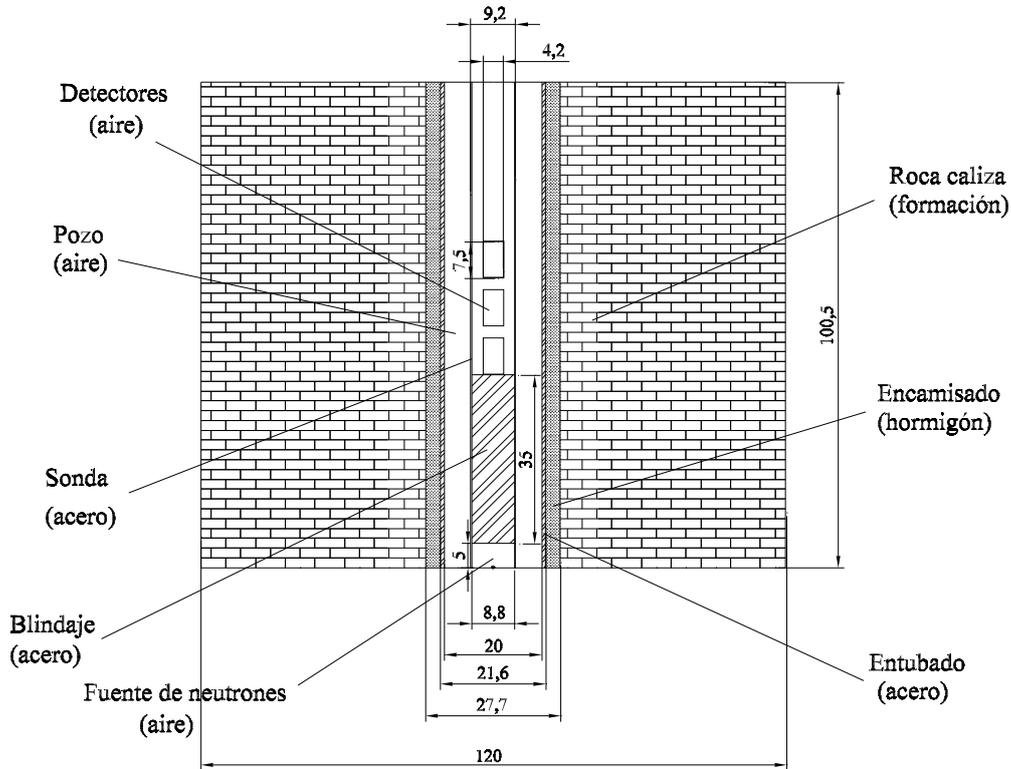


Figura 2: Geometría modelada de la sonda de neutrón compensado.

necesarias para los cálculos determinísticos son fuertemente dependientes del problema a tratar.

Los cálculos se han realizado a  $300^{\circ}K$  dado que los datos en la biblioteca disponible de MC-NP están a esa temperatura. Las secciones eficaces empleadas en DORT han sido generadas a través de una condensación en un sistema sencillo donde se han simulado pocas zonas materiales. Si bien estos pocos materiales fueron utilizados luego para representar el sistema completo bidimensional, los resultados finales obtenidos han sido aceptables. Este hecho se debe en parte a la elevada cantidad de grupos energéticos utilizados en DORT, 47. Es de esperar que si se utilizan menos grupos para el cálculo de transporte sea necesario realizar una condensación más detallada donde un mismo material quede determinado por un conjunto de secciones eficaces diferentes de acuerdo al espectro al que está sometido.

Finalmente puede concluirse que los métodos determinísticos resultan muy adecuados para resolver este tipo de problemas, ya que es posible obtener soluciones de similar orden de precisión que con métodos probabilísticos con tiempos de CPU mucho menores.

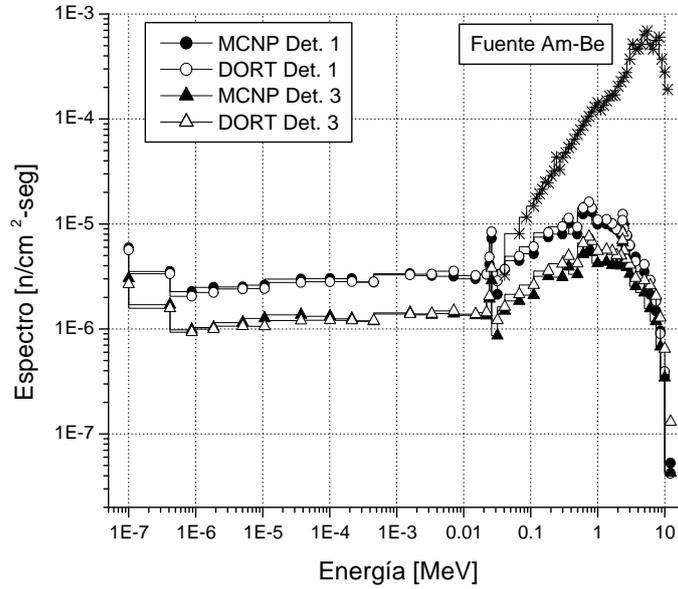


Figura 3: Espectro de neutrones en los detectores cercano (1) y lejano (3) a la fuente.

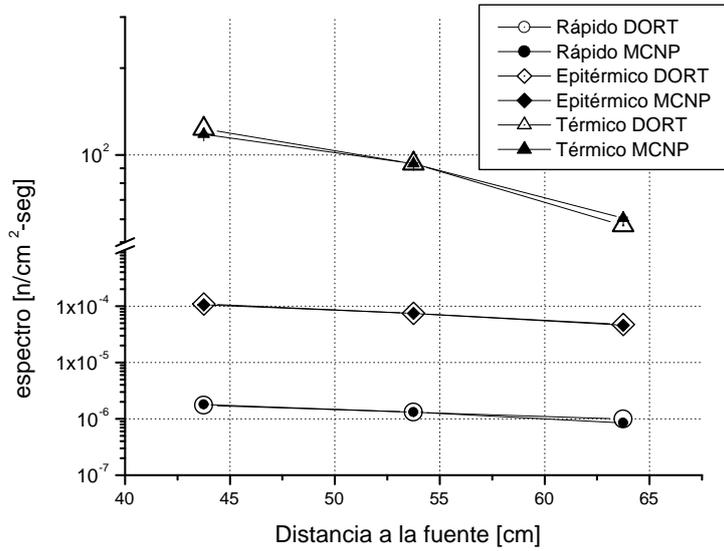


Figura 4: Espectro promedio en los tres detectores a tres grupos de energía.

## REFERENCIAS

- [1] L. S. Allen, W. R. Mills, K. P. Desai, and R. L. Cadlwell. Some Features of Dual-Spaced Neutron Porosity Logging. *SPWLA, Paper P in Gamma Ray, Neutron and Density Logging*, (1978).
- [2] J. F. Briesmeister. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. *RSICC Code Package CCC-660*, (1997).
- [3] W. A. Roades, M. B. Emmett, R. L. Childs, and J. O. Johnson. DORT: A Two-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code. *RSICC Computer Code Collection, DOORS3.2*, (1992).
- [4] L. M. Petrie. SCALE System. *NUREG/CR-0200*, **3** (2000).
- [5] J. E. White and D. T. Ingersoll. VITAMIN-B6:A Fine-Group Cross Section Library Based on ENDF/B-VI for Radiation Transport Applications. *RSICC Data Library Collection*, (1996).
- [6] J. S. Hendricks, S. C. Frankle, and J. D. Court. ENDF/B-VI Data for MCNP. *Los Alamos National Laboratory report LA-12891*, (1994).
- [7] N. M. Greene. BONAMI:Resonance Self-Shielding by the Bondarenko Method. *NUREG/CR-0200*, **2**, F1.iii–F.1.7.2 (2000).
- [8] N. M. Greene, L. M. Petrie, and R. M. Westfall. NITAWL-II: Scale System Module for Performing Resonance Shielding and Working Library Production. *NUREG/CR-0200*, **2**, F2.iii–F2.10.2 (2000).
- [9] J. E. White, D. T. Ingersoll, C. O. Slater, and R. W. Roussin. BUGLE-96: A Revised Multigroup Cross Section Library for LWR Applications Based on ENDF/B-VI Release 3. *RSICC Data Library Collection*, (1996).
- [10] N. M. Greene and L. M. Petrie. XSDRNPM: A One-Dimensional Discrete-Ordinates Code for Transport Analysis. *NUREG/CR-0200*, **2**, F3.iii–F3.C.2 (2000).
- [11] H. Kluge and K. Weise. The neutron energy spectrum of a  $^{241}\text{AmBe}(\alpha, n)$  source and resulting mean fluence to dose equivalent conversion factors. *Radiat. Prot. Dosim.*, **2**, 85–93 (1981).
- [12] A. J. Morano Rodríguez. Influencia en las características mecánicas de adiciones calizas de distinto tamaño de grano en cementos portland con diferentes contenidos de C3A. *Primeras Jornadas Iberoamericanas de Materiales de Construcción*, pages 1–10 (2001).
- [13] B. F. Wilson and P. A. Whichmann. The Compensated Neutron Log and the Effects of Environment. *SPWLA, Paper Q in Gamma Ray, Neutron and Density Logging*, (1978).