

**Instytut Fizyki Jądrowej
im. Henryka Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków**

www.ifj.edu.pl/publ/reports/2016/

Kraków, lipiec 2016

Raport Nr 2093/AP

Symulacja Monte-Carlo odpowiedzi spektrometrycznej sondy geofizyki otworowej sPNG w ośrodku modelowym stanowiska kalibracyjnego w Zielonej Górze

Dominik Dworak, Urszula Wiqcek

Praca wykonana została w ramach realizacji umowy pt. "Opracowanie modeli cyfrowych trzech typów sond otworowej geofizyki jądrowej (gamma-gamma, neutron – neutron epitermiczne i termiczne, neutron – neutron termiczne) w formie zestawów danych wejściowych dla oprogramowania MCNP i wykonanie obliczeń testowych przy użyciu tych modeli dla zadanego ośrodka skalnego" w ramach współpracy z Wydziałem Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Umowa nr ZDN/006/140/2016 w ramach zadania 10, projektu Blue Gas pt.: „Adaptacja do warunków polskich metodologii wyznaczania sweet spot’ów na podstawie korelacji pomiarów geofizycznych z rdzeniami wiertniczymi”.

Abstract

The MCNP model of the spectrometric well-logging tool, sPNG, was designed and coded. Responses of the sPNG probe were simulated, and obtained gamma spectra compared with measurements performed at Zielona Góra calibration facility. Good agreement of the calculated and measured spectra seems to confirm correctness of the modelling.

1. Wprowadzenie

Poszukiwania ropy naftowej i innych surowców mineralnych wymagają wykonywania odwiertów o głębokościach sięgających nawet do kilku kilometrów. Z takich odwiertów pobierane są próbki skalne w postaci tak zwanych rdzeni wiertniczych i na podstawie przeprowadzonych analiz uzyskiwana jest informacja o składzie badanej formacji skalnej. Ze względu na długi czas, wysokie koszty oraz trudności w uzyskiwaniu kompletnych rdzeni wiertniczych, obecnie wykonuje się tańsze i szybsze wiercenia bezrdzeniowe. Polegają one na tym, że do wykonanego odwiertu wprowadza się sondy pomiarowe połączone kablem z aparaturą naziemną. Przeprowadzone w ten sposób badania skał wzdłuż osi odwiertu skrótowo określa się jako profilowanie odwiertu. Pierwsze, stosowane metody profilowania odwiertów zostały opracowane w latach dwudziestych ubiegłego wieku w USA i polegały na oznaczeniu różnych parametrów elektrycznych skał [1]. Jednakże, tego typu profilowania elektryczne możliwe są tylko w odwiertach bez stalowych rur okładzinowych, zabezpieczających odwiert przed zawałem. Dopiero wprowadzenie metod jądrowych spowodowało ogromny postęp w tej dziedzinie. Dzięki dużej przenikliwości neutronów i fotonów gamma w materii, rury okładzinowe w odwiercie nie stanowią istotnej przeszkody w przeprowadzaniu profilowań radiometrycznych.

Jedną z odmian profilowania odwiertu jest spektrometria neutron-gamma, do której wyznaczenia używana jest sonda sPNG. Profilowanie to polega na pomiarze energii kwantów gamma, generowanych w oddziaływaniach neutronów z jądrami atomów ośrodka skalnego. Najważniejsze elementy sondy sPNG to: źródło neutronów prędkich (najczęściej Am-Be), detektor (w naszym przypadku jest nim kryształ scyntylacyjny BGO - $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$), oraz układ ekranów pomiędzy źródłem a detektorem. Neutrony emitowane są ze źródła do ośrodka skalnego wokół odwiertu. W wyniku oddziaływań z neutronami, pierwiastek może emitować promieniowanie gamma o charakterystycznym spektrum umożliwiającym jego identyfikację. Po stosownych obliczeniach otrzymuje się profil składu mineralogicznego przewierconych skał, wraz z szacunkową zawartością węgla organicznego.

Rzeczywiste pomiary w otworze wiertniczym są zazwyczaj bardzo kosztowne, często trudne technicznie. Do ich interpretacji konieczne są także pomiary kalibracyjne we wzorcowych blokach skalnych o znanym składzie mineralogicznym – chemicznym. Liczba wzorców skalnych dostępnych na kalibracyjnym stanowisku pomiarowym Geofizyki Kraków w Zielonej Górze jest ograniczona i wzorce te odnoszą się wyłącznie do typowych formacji skalnych występujących w Polsce. Sytuacja jest jeszcze bardziej skomplikowana w przypadku łupków gazonośnych, charakteryzujących się zwiększoną promieniotwórczością, zwiększonym oporem elektrycznym oraz znikomą porowatością. W takich sytuacjach pomocne stają się symulacje komputerowe (metodą Monte Carlo), będące odpowiednikiem rzeczywistego eksperymentu, dzięki którym jesteśmy w stanie wyliczyć w pełni wiarygodne odpowiedzi sondy w zadanej geometrii odwiertu. Zaletą symulacji jest to, że odpowiedzi sondy uzyskujemy dla dokładnie znanego - bo wprowadzonego do programu przez użytkownika - składu atomowego ośrodka skalnego. W tym znaczeniu symulacje komputerowe w pełni odpowiadają pomiarom kalibracyjnym.

Prace prowadzone we współpracy z Wydziałem Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH służą przygotowaniu narzędzia, programu komputerowego, do symulacji profili odwiertów charakterystycznych dla łupków skalnych, a następnie poddanie takich krzywych interpretacji geofizycznej. Głównym celem tych prac jest uzyskanie odpowiedzi na pytanie w jaki sposób należy prowadzić pomiary w tego typu formacjach, aby uzyskać

możliwie najlepsze rozpoznanie takiego profilu, przy zastosowaniu dostępnych obecnie, geofizycznych technik interpretacji.

W ramach prezentowanej pracy została wymodelowana numerycznie spektrometryczna sonda sPNG. Dla układu składającego się z sondy, odwiertu i otaczającego go wzorcowego ośrodka skalnego (o znanym składzie chemicznym) zaplanowano i przeprowadzono eksperymenty numeryczne. Metodą symulacji komputerowych, przy zastosowaniu programu komputerowego MCNP5 (Monte Carlo N - Particle Transport Code) [2], wyliczono odpowiedzi sondy sPNG w geometrii otworowej, w zadanych ośrodkach skalnych.

2. Założenia modelu obliczeniowego

Symulacja profilowania w otworze wiertniczym wymaga przygotowania szczegółowych danych wejściowych do stosowanego programu komputerowego. W celu uzyskania wiarygodnych, symulowanych odpowiedzi sondy, istotne jest by model sondy odzwierciedlał jak najdokładniej jej rzeczywistą budowę, z uwzględnieniem wszystkich niezbędnych szczegółów konstrukcyjnych. Zwłaszcza, szczegółów istotnych z punktu widzenia fizyki transportu neutronów i fotonów na interesującej nas drodze: źródło sondy - otaczający ośrodek skalny – detektor sondy.

Przeprowadzane symulacje numeryczne mają wszelkie cechy wiarygodnego eksperymentu fizycznego i pozwalają uzyskać odpowiedzi sondy we wzorcach o różnych, praktycznie dowolnych parametrach geofizycznych. Jest to więc efektywny sposób na „przeprowadzenie eksperymentu” w przypadku ośrodków skalnych o różnorodnej i skomplikowanej budowie, gdzie pomiar rzeczywisty byłby trudny, obarczony dużą niepewnością.

Cały modelowy układ charakteryzują trzy zasadnicze grupy danych: parametry geometryczne układu sonda – odwiert – skała, parametry materiałowe - składy chemiczne ośrodka skalnego, sondy, i wypełnienia otworu, oraz parametry związane z samą procedurą symulacji MC (dane jądrowe, zasady estymacji, generatory liczb losowych, etc.).

2.1 Ośrodek skalny

Odpowiedzi spektrometrycznej sondy sPNG wyznaczone zostały w modelowych warunkach, symulujących rzeczywiste pomiary we wzorcowych blokach skalnych o znanych parametrach fizycznych i geometrycznych. W Tabeli 1 przedstawione zostały wymiary i podstawowe parametry geofizyczne modelowanych bloków, wzorów skalnych stanowiska kalibracyjnego w Zielonej Górze.

Wszystkie bloki, wzorce skalne, mają kształt prostopadłościanów, o wymiarach zewnętrznych podanych w kolejności: długość (L), szerokość (W) i wysokość (H). Bloki te dzielą się na dwa zasadnicze typy. Podział ten związany jest z wielkością średnicy otworu przewierconego wzdłuż wysokości bloku. I tak, typ 1 charakteryzuje się mniejszymi (~140 mm), a typ 2 większymi średnicami (~220 mm). Parametry skał, takie jak gęstość szkieletu (ρ_{szk}) czy porowatość matrycy skalnej, przyjęte zostały w oparciu o dane zamieszczone w pracy [3]. Gęstość objętościową (ρ_{obj}) wyznaczona została przy założeniu pełnego nasycenia skał czystą wodą, o gęstości 1 g/cm^3 .

Tabela 1. Wymiary i podstawowe parametry geofizyczne bloków skalnych stanowiska kalibracyjnego BGW Zielona Góra.

Nazwa	L x W x H [cm x cm x cm]	Średnica otworu [mm]	rho_szk [g/cm ³]	Porowatość [%]	rho_obj [g/cm ³]
Typ bloku 1					
Biała Marianna_1	130 x 130 x 145	141.9	2.712	0.098	2.71032
Brenna_1	163 x 163 x 153	141.8	2.649	6.910	2.53505
Józefów_1	120 x 120 x 145	142.9	2.691	11.190	2.50178
Libiąż_1	120 x 120 x 145	142.5	2.823	11.020	2.62211
Morawica_1	100 x 100 x 120	138.3	2.677	2.990	2.62686
Mucharz_1	156 x 156 x 182	141.9	2.670	2.300	2.63159
Pińczów_1	108 x 108 x 145	145.3	2.716	36.820	2.08417
Radków_1	128 x 128 x 158	142.2	2.620	13.740	2.39741
Żerkowice_1	118 x 118 x 131	134.5	2.643	24.470	2.24096
Typ bloku 2					
Biała Marianna_2	130 x 130 x 145	214.6	2.713	0.115	2.71103
Brenna_2	163 x 163 x 174	215.5	2.651	7.140	2.53312
Józefów2	120 x 120 x 145	215.5	2.686	13.770	2.45384
Libiąż_2	120 x 120 x 163	215.5	2.824	13.000	2.58688
Morawica_2	100 x 100 x 120	218.4	2.674	2.570	2.63098
Mucharz_2	156 x 156 x 155	214.3	2.710	2.540	2.66657
Pińczów_2	108 x 108 x 140	220.3	2.694	34.890	2.10296
Radków_2	128 x 128 x 158	216.7	2.620	14.630	2.38299
Żerkowice_2	118 x 118 x 131	223.0	2.645	24.470	2.24247

Składy chemiczne każdej z zastosowanych skał zestawione zostały w Tabeli 2. Liczby podane w Tabeli 2 są wartościami średnimi uzyskanymi z analiz różnych fragmentów bloków (3 - 9 próbek). Analizy te, znane jako "analizy XRAL" zostały przeprowadzone ok. roku 2005 [4]. Wielkość oznaczona w pierwszej kolumnie przez LOI oznacza tzw. straty prażenia. Zakłada się, iż w skład strat prażenia wchodzi głównie CO₂ oraz tzw. woda związana (szkieletowa). Ich ilości wyznacza się na podstawie dodatkowych założeń.

Tabela 2. Składy chemiczne wzorców - bloków skalnych stanowiska w Zielonej Górze.

Tlenek / pierwiastek	Jednostka	Próg detekcji	Mucharz	Brenna	Radków	Żerkowice	Libiąż	Morawica	Pińczów	Józefów	Biała Marianna
SiO ₂	% wag	0.01	61.017	80.078	95.252	98.300	0.414	2.394	0.823	1.600	2.203
Al ₂ O ₃		0.01	8.589	8.099	2.124	0.857	0.042	0.312	0.147	0.037	0.528
CaO		0.01	8.405	1.805	0.074		31.266	53.360	54.860	54.177	52.903
MgO		0.01	3.597	0.811	0.150	0.113	21.054	0.618	0.437	0.573	1.513
Na ₂ O		0.01	1.157	1.360	0.056			0.020	0.023	0.030	
K ₂ O		0.01	1.903	2.565	1.392	0.050	0.034	0.062	0.047	0.043	0.213
Fe ₂ O ₃		0.01	3.511	2.497	0.156	0.143	0.342	0.220	0.180	0.210	0.280
MnO		0.01	0.051	0.021				0.028	0.010	0.043	0.028
TiO ₂		0.01	0.519	0.355	0.034	0.073	0.014	0.026	0.013	0.010	0.033
P ₂ O ₅		0.01	0.081	0.076				0.036	0.060	0.060	0.040
Cr ₂ O ₃		0.01	0.013								
LOI		0.01	10.510	2.369	0.360	0.467	47.140	42.760	43.250	43.133	42.388
S		0.01	0.592	0.020				0.042	0.020	0.023	
Gd		ppm	0.05	3.042	2.990	0.658	0.573	0.086	1.062	0.520	0.693
Sm	0.10		3.140	3.246	0.720	0.667		0.840	0.400	0.567	0.400
Eu	0.05		0.668	0.724	0.196	0.107		0.180	0.087	0.137	0.085
Th	0.10		6.133	6.377	1.500	1.367		0.480	0.433	0.433	0.450
U	0.05		1.874	1.338	0.382	0.310	1.880	0.220	1.350	1.653	0.100
Zr	0.50		138.633	135.392	37.740	48.100	1.540	3.960	4.033	7.033	7.600
Pb	10.00		19.833	15.545	11.000						
Cl	50.00		121.533	92.455	81.800		370.000	87.000	72.333	73.000	76.500
B	10.00		39.267	36.846		11.500					
Cd	0.20						0.560	0.400	0.333		

W Tabeli 2 nie zostały zamieszczone wartości średnie obarczone zbyt dużą niepewnością (pola puste), gdy znaczna część indywidualnych pomiarów, czasem wszystkie, dawała wyniki "poniżej progu detekcji". W niektórych przypadkach możliwe było uzupełnienie tych brakujących wartości w oparciu o dodatkowe pomiary, dane lub informacje.

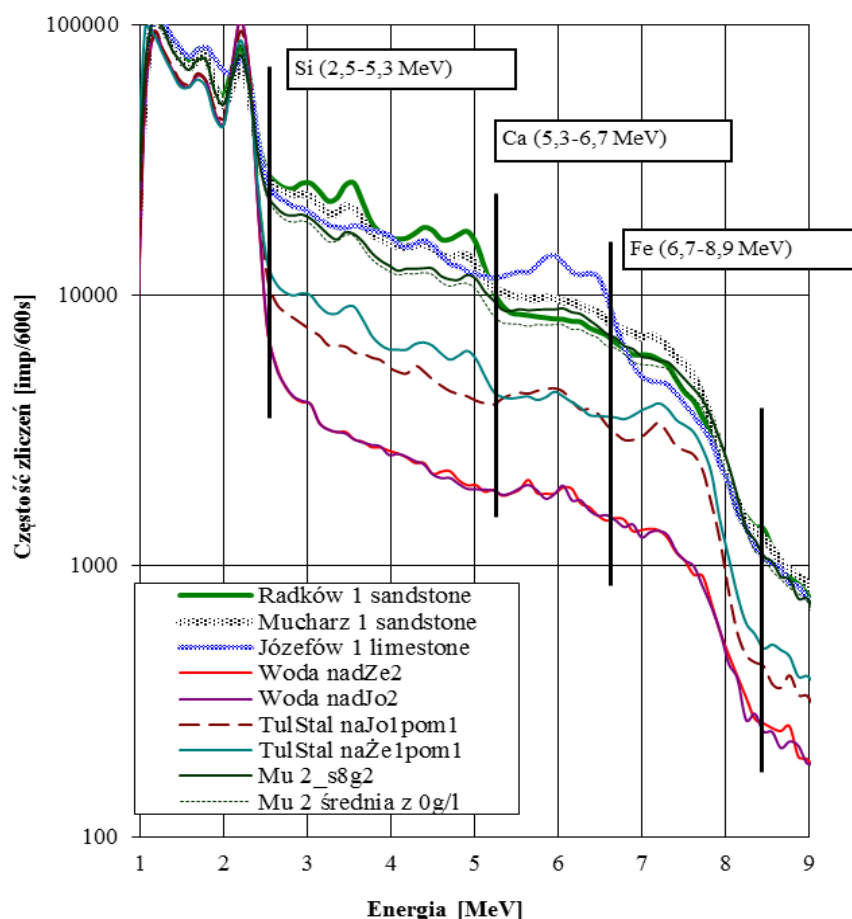
Tabela 3. Znormalizowane gęstości atomowe pierwiastków wchodzących w skład wybranych bloków skalnych.

Pierwiastek	Gęstość atomowa skały [atom/cm ³]		
	Mucharz_1	Radków_1	Józefów_1
H	6.02209E-02	1.15881E-01	8.99355E-02
B	6.88586E-05	0.00000E+00	0.00000E+00
C	3.67424E-02	6.84544E-04	1.69659E-01
Na	7.07544E-03	3.02443E-04	1.67576E-04
Mg	1.69197E-02	6.22893E-04	2.46243E-03
Al	3.19385E-02	6.97301E-03	1.24501E-04
Si	1.92511E-01	2.65334E-01	4.60971E-03
P	2.15462E-04	0.00000E+00	1.46343E-04
S	3.50040E-03	5.22043E-05	1.25985E-04
Cl	6.49888E-05	3.86195E-05	3.56461E-05
K	7.66084E-03	4.94665E-03	1.59268E-04
Ca	2.84116E-02	2.20860E-04	1.67237E-01
Ti	1.23109E-03	7.12513E-05	2.16745E-05
Cr	2.57761E-05	0.00000E+00	0.00000E+00
Mn	1.37179E-04	0.00000E+00	1.05744E-04
Fe	8.33666E-03	3.27006E-04	4.55287E-04
Zr	2.88083E-05	6.92409E-06	1.33462E-06
Cd	2.20526E-08	0.00000E+00	5.13309E-08
Sm	3.95874E-07	8.01439E-08	6.52380E-08
Eu	8.33310E-08	2.15872E-08	1.55682E-08
Gd	3.66715E-07	7.00334E-08	7.63232E-08
Pb	1.71014E-06	5.97740E-07	0.00000E+00
Th	5.01064E-07	1.08193E-07	3.23269E-08
U	1.49244E-07	2.68597E-08	1.20236E-07
O	6.04907E-01	6.04538E-01	5.64753E-01
Suma:	1.00000E+00	1.00000E+00	1.00000E+00

Dla trzech wybranych bloków skalnych, które zgodnie z założeniem zleceńodawcy posłużyły do porównań symulacja - pomiar, wyliczone zostały znormalizowane gęstości atomowe pierwiastków wchodzących w ich skład, które to wyniki zawiera Tabela 3. Bloki te to: Mucharz_1 *sandstone* (zailony, wapnisty piaskowiec), Radków_1 *sandstone* (czysty piaskowiec) i Józefów_1 *limestone* (czysty wapień). W symulacjach MC transportu

neutronów, zamiast niektórych pierwiastków zawartych w Tabeli 3, wprowadzane są ich izotopy - w ilościach proporcjonalnych do ogólnie znanych, naturalnych abundancji. Podział na poszczególne izotopy, nawet jeżeli nie jest konieczny z punktu widzenia samych obliczeń, wynika najczęściej z potrzeby dostosowania się do wymogów stawianych przez dostępne bazy danych jądrowych, stanowiących integralną część programu MCNP. Po prostu, przekroje czynne wielu pierwiastków podawane są, zwłaszcza w najnowszych bibliotekach, oddzielnie dla każdego z izotopów, a nie dla naturalnych ich kompozycji. Rozkłady poszczególnych pierwiastków na izotopy nie zostały przedstawione w Tabeli 3 (by ograniczyć wielkość tabeli).

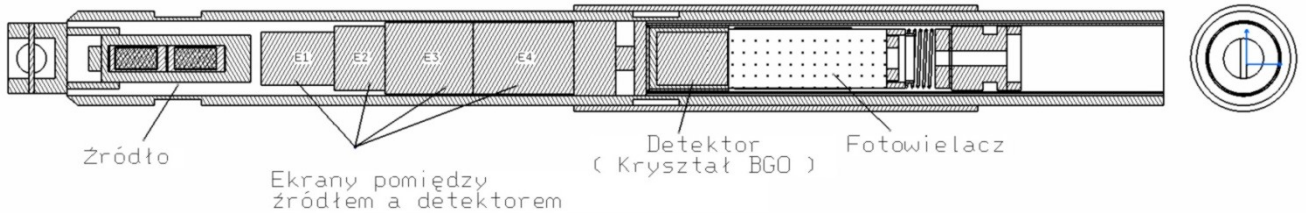
Na Rys.1 zamieszone zostały wyniki rzeczywistych pomiarów dla wyżej wymienionych, reprezentatywnych ośrodków skalnych, wykonanych przy pomocy spektrometrycznej sondy sPNG. Wg założeń zlecniodawców, te właśnie wykresy z Rys.1 miały posłużyć jako wzorcowe dane do weryfikacji wyników obliczeń, naszych symulacji MC. Oczywiście, w/w dane pomiarowe - jak na Rys.1 - otrzymaliśmy także w postaci cyfrowej.



Rys.1 Zestawienie zmierzonych odpowiedzi detektora sondy sPNG dla wzorcowych ośrodków skalnych.

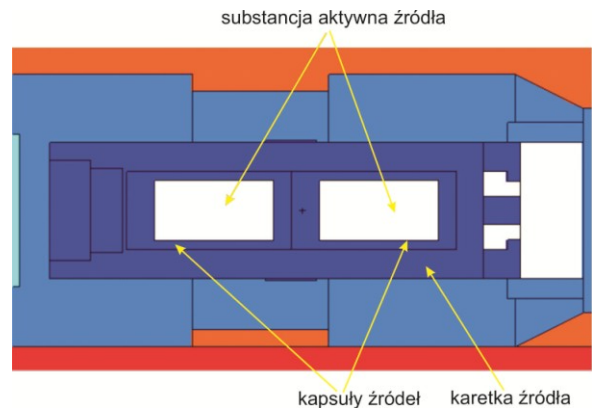
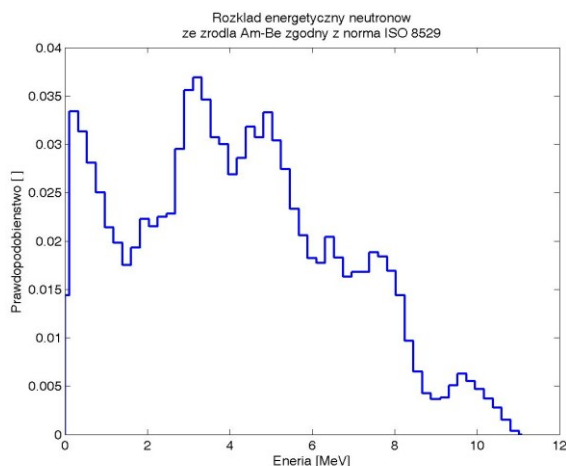
2.2 Spektrometryczna sonda sPNG

Modelowana, spektrometryczna sonda SPNG posiada konstrukcję typową dla sond neutron-gamma stosowanych we współczesnym przemyśle naftowym. Jej schemat przedstawiono na Rys.2. Ze względu na prawa autorskie wymiary geometryczne sondy nie zostały na szkicu zaznaczone.



Rys.2 Schematyczny rysunek sondy sPNG. Rysunek nie jest w skali.

Jednym z głównych elementów sondy jest źródło neutronów Am-Be (Amersham X4). Założony rozkład energii neutronów źródła [5], zgodny z normą ISO 8529, przedstawia Rys.3. Sonda sPNG zawiera faktycznie dwa źródła, dwie identyczne kapsuły Amersham X4 umieszczone w stalowej obudowie zewnętrznej, zwanej karetką (Rys.4). Całkowita wydajność źródła sondy sPNG wynosi więc ok. $2 \times 6.6 \cdot 10^6 \text{ n/s} = 1.32 \cdot 10^7 \text{ n/s}$.



Rys.4 Model MCNP źródła Am-Be.

Rys.3 Rozkład energii neutronów źródła Am-Be, według normy ISO-8529.

Neutrony ze źródła emitowane są w kierunku ośrodka skalnego, gdzie w wyniku wielokrotnych zderzeń z jądrami atomów ośrodka tracą energię. W wyniku nieelastycznych zderzeń neutron-gamma, zwłaszcza tzw. wychwytu radiacyjnego, poszczególne pierwiastki emitują kwanty gamma o charakterystycznym spektrum, co umożliwia ich późniejszą identyfikację. To charakterystyczne promieniowanie gamma, po przejściu przez ośrodek skalny, dociera częściowo do objętości czynnej detektora scyntylacyjnego (w sondzie sPNG jest to kryształ BGO). Następnie mamy już tylko klasyczny dla detektorów scyntylacyjnych tor pomiarowy, tj. scyntylacje – fotokatoda – fotopowielacz – pomiar impulsu napięciowego i akwizycja końcowych danych - impulsów sondy. Elektronika sondy działa na tej samej zasadzie jak w zwykłych analizatorach wielokanałowych.

3. Symulacje MC odpowiedzi spektrometrycznej sondy sPNG w modelowym ośrodku skalnym

Bazujący na metodzie Monte Carlo program MCNP5 pozwala na symulowanie transportu promieniowania w dowolnym ośrodku materialnym. Zjawiska rozpraszania i absorpcji, oddziaływania transportowanych cząstek z atomami ośrodka, symulowane są w oparciu o znane prawdopodobieństwa poszczególnych reakcji, a te wyznaczone są z dostępnych w programie tablic przekrojów czynnych, czy raczej olbrzymich baz danych jądrowych. Dlatego też wszystkie elementy rozpatrywanego układu fizycznego, elementy sondy, otwór wiertniczy i ośrodek skalny, muszą być zdefiniowane jako dokładnie określone obszary geometryczne o jednoznacznie określonym składzie pierwiastkowym, tak, aby w każdym punkcie rozpatrywanego układu można było określić możliwe zdarzenia – reakcje i ich prawdopodobieństwa. Od jakości danych jądrowych i dokładności z jaką jesteśmy w stanie określić faktyczny skład ośrodka zależą historie poszczególnych cząstek, a w efekcie także sumaryczne, makroskopowe wielkości takie jak strumienie, liczby reakcji w jednostce objętości, rozkłady liczby impulsów, etc. Ostatecznie, obliczenia wykonano przy następujących założeniach geofizycznych, oraz założeniach technicznych - dotyczących samych tylko zasad symulacji MC:

1. Litologie: bloki skalne stanowiska kalibracyjnego w Zielonej Górze.
2. Porowatości: zmienne (od ~ 0 % do ~ 40 %).
3. Zasolenie wody wypełniającej pory skały: brak (czysta woda).
4. Średnice otworów: zmienne (~140 mm (bloki typu 1) lub ~220 mm (typ 2)).
5. Zasolenie płuczki w otworze wiertniczym: brak (czysta woda).
6. Detektory: kryształ BGO d=45 mm, h=60 mm.
7. Źródło: 2 standardowe źródła Am-Be (Amersham AmBe X4-Capsule) o łącznej wydajności $1.32e+7$ n/s ($2 \times 6.6e+6$), spectrum zgodne z ISO 8529.
8. Sonda umieszczona jest w każdym z bloków w takim położeniu by środek odległości "źródło-detektor" (44.97 cm) pokrywał się z geometrycznym środkiem bloku.
9. Dane jądrowe: oparto się na standardowych zbiorach danych jądrowych, rekomendowanych przez twórców programu MCNP, z preferencją przekrojów czynnych dla naturalnych mieszanin izotopów, na ogół opartych na danych źródłowych z bibliotek ENDF/B-VI-VII. W przypadku konieczności użycia przekrojów czynnych dla poszczególnych izotopów, uwzględniano najistotniejsze izotopy, pomijając mało znaczące z punktu widzenia transportu neutronów i fotonów w ośrodku izotopy o niskich abundancjach naturalnych, poniżej 0.005. Dla Zr-nat i Cd-nat wybrano dane z biblioteki LLNL (brak danych na produkcje gamma w nieelastycznych reakcjach (n, gamma) w innych bibliotekach).
10. Szerokości przedziałów zliczanych energii przyjęto zgodnie z krzywą kalibracji urządzenia pomiarowego otrzymaną od zleceniodawcy:
$$\text{Energia [MeV]} = 0.1041 (\text{nr kanału}) - 0.0813,$$
tj. o szerokości $\langle \Delta E \rangle = 0.1041$ MeV, tak, aby środek każdego przedziału energii pokrywał się ze środkiem kanału analizatora.
11. W przypadku każdego z prezentowanych w tym raporcie wyników przeprowadzono symulacje historii 1 mld neutronów źródła Am-Be, co w dobrym przybliżeniu odpowiada pracy podwójnego źródła Am-Be typu Amersham X4 przez ok. 76 sekund.
12. Wszystkie obliczenia zostały przeprowadzone przy pomocy programu MCNP5 (ver. 1.60). Do wyznaczenia odpowiedzi detektora sondy zastosowana została metoda estymacji znana w literaturze przedmiotu jako *tally 8 – pulse high tally*. W wyniku tych

obliczeń otrzymujemy histogramy liczby zliczeń impulsów sondy (ang. *pulse high distribution*), które w pełni odpowiadają obrazowi jaki otrzymujemy na monitorach spektrometrów wielokanałowych. Program, oprócz najważniejszych w przypadku oddziaływań elektro-magnetycznych zjawisk fizycznych, tj. absorpcji fotoelektrycznej, rozpraszania Comptona, tworzenia par e+e-, promieniowania hamowania elektronów, może również uwzględniać inne, mniej istotne, zjawiska fizyczne jakie zachodzą w oddziaływaniach kwantów gamma i elektronów z materią, jak np. straty jonizacyjne - wielokrotne rozpraszania elektronów. Jest to w gestii użytkownika programu i pozwala na prowadzenie symulacji transportu z dużą precyzją, co jednak na ogół związane jest ze znacznym wydłużeniem czasu obliczeń.

13. Obliczenia wykonane zostały na klastrze komputerowym McRadiat, należącym do Zakładu Fizyki Transportu Promieniowania (NZ54) IFJ PAN. Klaster składa się z dziesięciu równolegle pracujących komputerów, z których każdy jest wyposażony w dwa procesory cztero-rdzeniowe (razem 80 rdzeni, częstotliwości taktowania zegarów od 2.33 GHz do 2.66 GHz). Czas obliczeń zależał istotnie od ośrodka. W przypadku bloków skalnych o pełnych wymiarach, symulacja dla jednego bloku wymagała ok. 7 - 8 godzin pracy klastra.

4. Wyniki obliczeń

Zgodnie z zaleceniem zleceniodawcy obliczeń, zasadnicze wyniki symulacji dotyczą trzech wzorcowych bloków skalnych: Radków_1 *sandstone* (czysty piaskowiec), Mucharz_1 *sandstone* (zailony, wapnisty piaskowiec) i Józefów_1 *limestone* (czysty wapień).

Dodatkowo, wykonano obliczenia dla sondy umieszczonej w ośrodku czystej wody, co pozwala na pominięcie wpływu skomplikowanego składu bloków kalibracyjnych. Tego typu pomiary w wodzie, ponad blokami skalnymi, również zostały wykonane w trakcie pomiarów kalibracyjnych w Zielonej Górze. Prócz tego obliczono także tło generowanego przez samą sondę (umieszczoną w powietrzu – pomiar tego typu może zostać w przyszłości wykonany), oraz tła generowanego przez sam tylko, wypełniony wodą, otwór wiertniczy (merytorycznie istotna wielkość, niedostępna dla eksperymentu). Wyniki tych obliczeń są dokładne – w tym znaczeniu, iż uzyskane przy idealnej zdolności rozdzielczej wirtualnego detektora i zostały przeliczone na impulsy sondy [imp/s], co zostało przedstawione na Rys.5. . Pozwala to na łatwą identyfikację poszczególnych linii gamma, oczywiście, z dokładnością do szerokości zastosowanych do wyznaczenia rozkładów przedziałów energii. Rzeczywisty detektor charakteryzuje się skończoną zdolnością rozdzielczą. W celu wiarygodnego porównania ze sobą odpowiedzi rzeczywistej i symulowanej detektora, konieczne jest „rozmycie” odpowiedzi symulowanej.. W programie MCNP o wielkości tego rozmycia decyduje się przy pomocy tzw. opcji *GEB*. Każda z energii rejestrowanych w detektorze uzyskuje wartość losowaną z rozkładu Gaussa przy zadanej przez użytkownika funkcji – zależności szerokości połówkowej rozkładu (FWHM) od energii. Znając tę zależność dla danego typu detektora można otrzymać rozkład uwzględniający jego zdolność rozdzielczą. W naszych obliczeniach, przy porównaniu z wynikami pomiarów, wyniki symulacji zostały w ten właśnie sposób „rozmyte”, przy założeniu, iż dla detektora BGO:

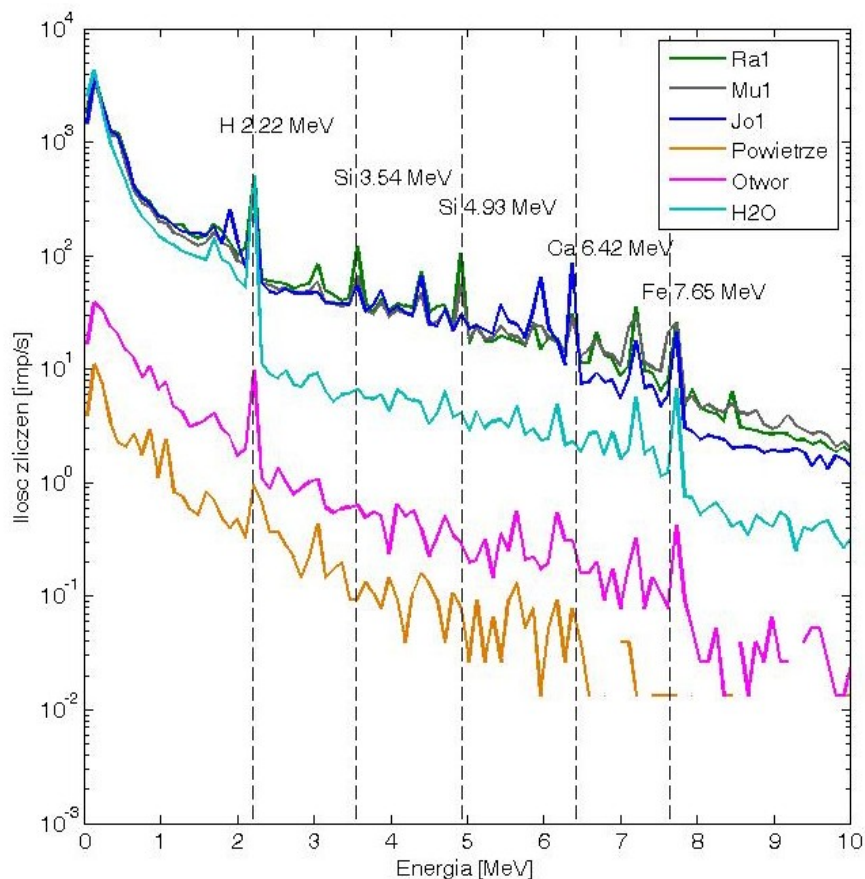
$$FWHM(E) = 0.09645 * (E + 0.14009 * E^2)^{1/2}$$

gdzie E oznacza dokładną wartość energii rejestrowanej w detektorze. Wartości parametrów funkcji FWHM(E) dla kryształu BGO obliczono na podstawie danych z pracy [6].

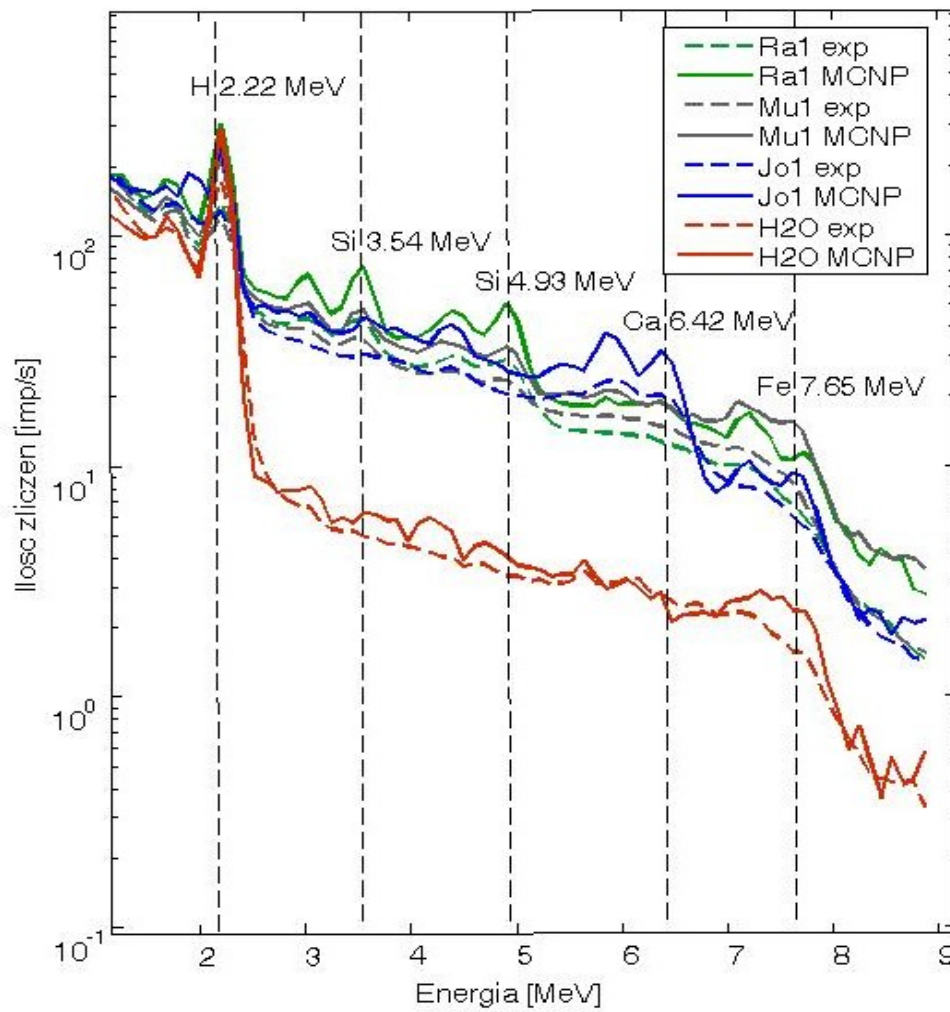
Porównanie bezwzględnej ilości zliczeń - symulowanych i mierzonych - przedstawiono na Rys.6. Jedne i drugie wyniki zostały przeliczone do jednostek [imp/s]. Wyniki symulowane

uzyskano z zastosowaniem opcji GEB o parametrach FWHM jak powyżej. Znormalizowane odpowiedzi spektrometrycznej sondy sPNG i porównanie z wartościami mierzonymi w wybranych ośrodkach skalnych stanowiska kalibracyjnego w Zielonej Górze zostały przedstawione ponownie na rysunkach Rys.7a - d. Normalizacja pozwala na bezpośrednie, wzrokowe porównanie samych tylko kształtów odpowiedzi detektora, z pominięciem przesunięć zależnych od rzeczywistych, fizycznych wydajności detektorów BGO – utrudniających takie porównanie przy bezwzględnych wartościach zliczeń.

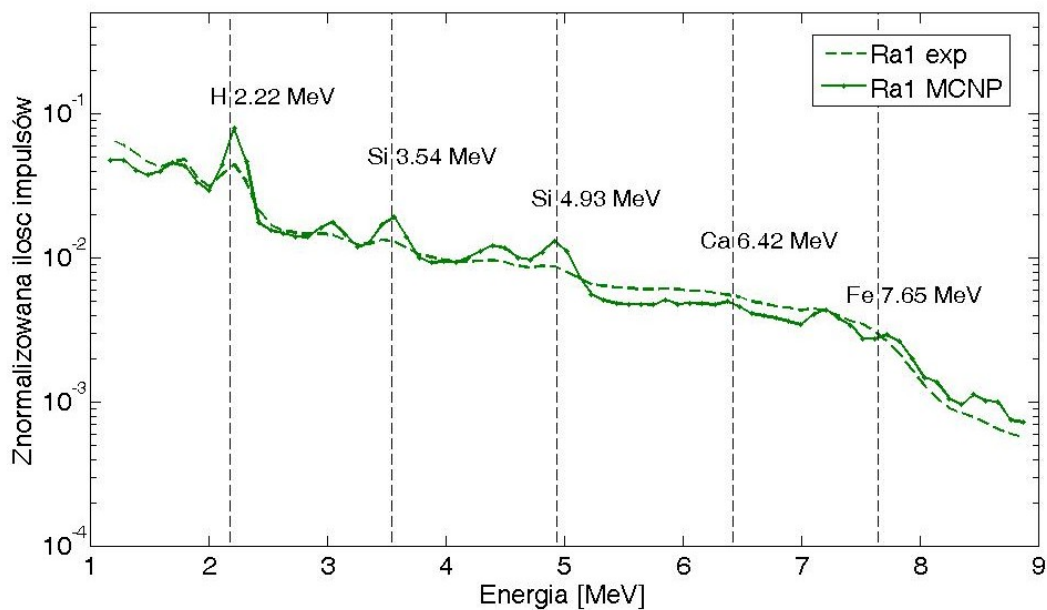
Wydaje się, iż uzyskana zgodność odpowiedzi symulowanych z odpowiedziami zmierzonymi jest zadowalająca, a w obszarach centralnych energii, gdzie pomiary obarczone są najmniejszym błędem, nawet bardzo dobra. Wszystkie z uzyskanych wyników zawierają charakterystyczne dla składów poszczególnych bloków cechy – widoczne wkłady wiodących w nich pierwiastków, emiterów promieniowania gamma: krzemu w przypadku bloku Radków, czy wapnia i żelaza w przypadku bloku Józefów i proporcjonalnie mniejsze piki dla bloku Mucharz. Linia wodorowa 2.22 MeV dominuje wyraźnie na wszystkich wykresach (wpływ wypełnionego wodą otworu). Z założenia zarówno projektu jak i samego zlecenia, szczegółowa analiza ilościowa będzie prowadzona na dalszym etapie prac projektu Blue Gas [7]. Prezentowane wyniki stanowią jedynie znikomą część całego zestawu wyników uzyskanych dla sondy sPNG. Całość, zgodnie z warunkami umowy, zostanie przekazana na nośnikach elektronicznych Zleceniodawcy obliczeń w ramach projektu „Blue Gas”, tj. uprawnionym pracownikom Wydziału GGIOŚ AGH Kraków.



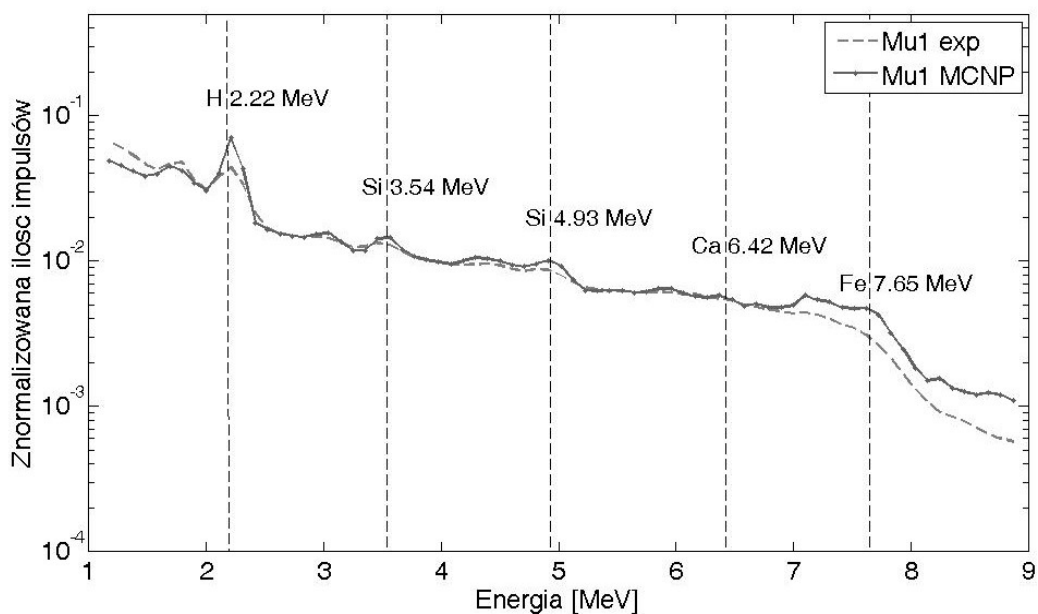
Rys.5 Zasadnicze wyniki symulacji MCNP dla: bloków skalnych (Radków_1 („Ra1”), Mucharz_1 („Mu1”), Józefów_1 („Jo1”)), czystej wody („H2O”), tła otworu („Otwór”, sonda umieszczona w otworze wypełnionym wodą, na zewnątrz otworu próżnia), oraz sondy umieszczonej w powietrzu („Powietrze”, tło własne sondy).



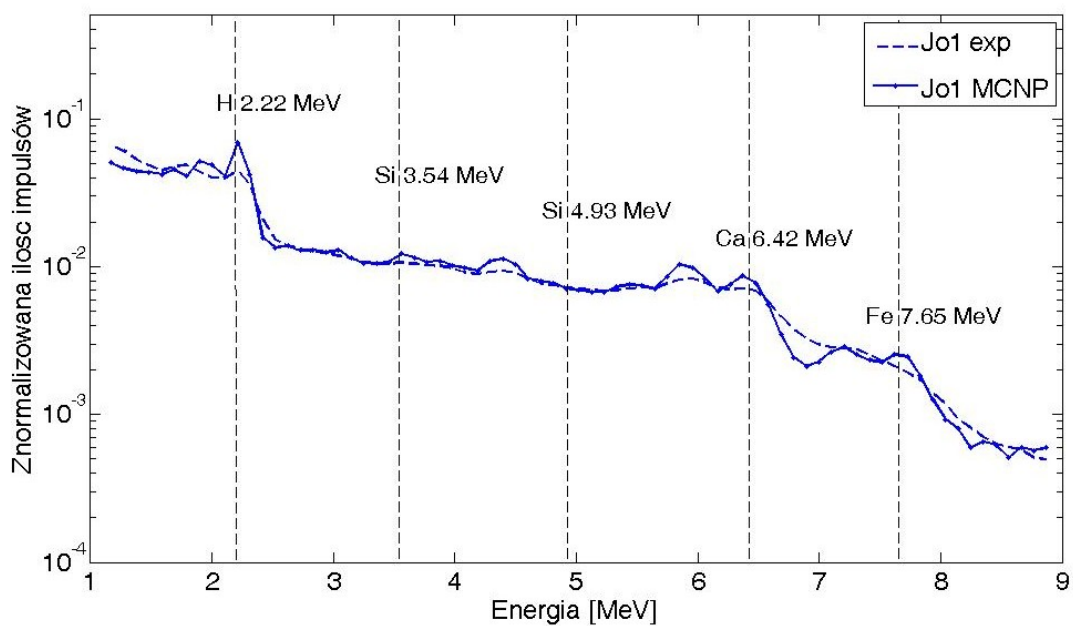
Rys.6 Porównanie wyników symulacji MCNP (z opcją GEB) i pomiarów kalibracyjnych dla bloków skalnych Radków_1 („Ra1”), Mucharz_1 („Mu1”) i Józefów_1 („Jo1”), oraz czystej wody („H2O”) (wartości bezwzględne ilości zliczeń [imp/s]).



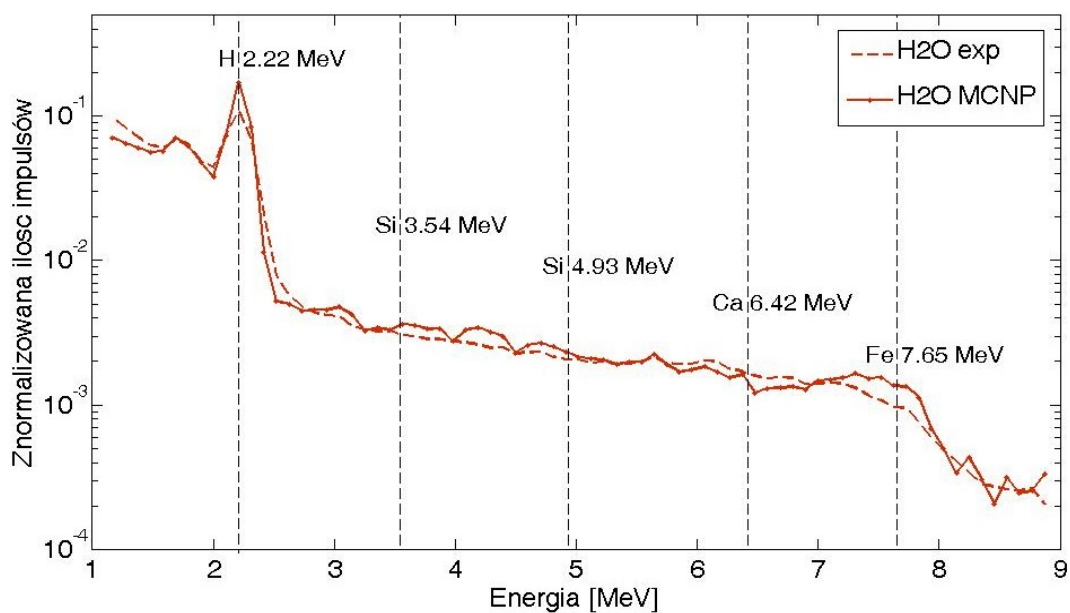
Rys.7a Porównanie wyników symulacji i pomiarów dla bloku Radków_1 (wartości znormalizowane w zakresie 1.12 - 8.92 MeV).



Rys.7b Porównanie wyników symulacji i pomiarów dla bloku Mucharz_1 (wartości znormalizowane w zakresie 1.12 - 8.92 MeV).



Rys.7c Porównanie wyników symulacji i pomiarów dla bloku Józefów_1 (wartości znormalizowane w zakresie 1.12 - 8.92 MeV).



Rys.7d Porównanie wyników symulacji i pomiarów dla bloku czystej wody (wartości znormalizowane w zakresie 1.12 - 8.92 MeV).

Literatura

1. B. Dziunikowski, , 2001
Profilowanie odwiertów,
Raport PTN ; 5/2001 - „Promieniowanie jako źródło informacji o właściwościach materii”
pod red. Piotra Urbańskiego ;
Polskie Towarzystwo Nukleoniczne, Warszawa : PTN, 2001, S.77–83,
Bibliogr. s.83.
2. X-5 Monte Carlo Team, MCNP—a general Monte Carlo N-particle transport code, version 5. LANL, LA-UR-03-1987, 2003, <https://mcnp.lanl.gov>
3. Zorski T., Massalski T., Drabina A., Stadtmüller M., 1996
*Metodyka pomiarów kalibracyjnych i standaryzacyjnych dla neutronowych sond geofizyki
wiertniczej w Zakładzie Geofizyka – Kraków.*
Nafta-Gaz **11**, 493-505.
4. dr Tomasz Zorski, Katedra Geofizyki AGH, wiadomość prywatna.
5. Klüge H., 1998, *Irradiation Facility with Radioactive Reference Neutron Sources: Basic
Principles*, PTB-Bericht N-34, Braunschweig.
6. E. Bissaldi, A. von Kienlin, and others, Ground-based calibration and characterization of
the Fermi gamma-ray burst monitor detectors, *Exp Astron* (2009) 24:47–88.
7. Blue Gas:
<http://infolupki.pgi.gov.pl/pl/technologie/program-blue-gas-polski-gaz-lupkowy>