

Influência das Secções Macroscópicas de Choque dos Elementos Químicos de um Solo na Curva de Calibração de Sondas de Nêutrons

Marcos L. Crispino*, Clemente J. G. Carneiro**, Antonio C. D. Antonino*,
Carlos A. B. O. Lira*, Attilio Dall'Olio*

* Departamento de Energia Nuclear - DEN/UFPE Av. Prof. Luis Freire 1000, Cidade Universitária, CEP - 50740-540, Recife, PE

** Departamento de Engenharia Nuclear, DEN/UFMG, Av. Antonio Carlos, 6627 Pampulha CEP 31270-901

Recebido em 8 de Agosto, 2003. Versão revisada recebida em 10 de Maio, 2004

O fluxo de nêutrons térmicos em um meio homogêneo, no ponto onde se situa uma fonte de nêutrons rápidos, depende das secções de choque macroscópicas dos elementos que compõem a matriz do solo e da umidade do solo. Quando a umidade do solo cresce, tem-se um aumento da densidade de átomos de H e conseqüentemente também da moderação de nêutrons e do fluxo de nêutrons térmicos. Utilizando-se dados das secções microscópicas de espalhamento e de absorção dos vários elementos químicos de um solo da Zona da Mata Norte de PE, foi calculado o fluxo de nêutrons térmicos para dois horizontes desse solo. Os resultados mostraram que a relação entre o fluxo de nêutrons térmicos e a umidade do solo é linear na faixa de densidades que variam de $1,2 \text{ g.cm}^{-3}$ a $1,8 \text{ g.cm}^{-3}$. A curva teórica de calibração foi então comparada àquela obtida em condições de campo para o solo considerado.

The thermal neutron flux in a homogeneous soil, at the point where is located a fast neutron source, depends on the microscopic cross sections of the soil elements and also on their density and water content. When the soil water content increases, both hydrogen atomic density and thermal neutron flux increase because more neutrons are slowed down by H nuclei. Microscopic cross sections of the soil elements were obtained from the literature on nuclear data for all soil elements. Thermal neutron fluxes were calculated using values of water content from air-dry soil to saturation. The results showed that the relation between thermal neutron flux and soil water content could be considered linear in a range of water content. The theoretical calibration curve for a known soil has an excellent agreement with that obtained in field conditions for the same soil.

1 Introdução

A curva de calibração de uma sonda de nêutrons que correlaciona o fluxo de nêutrons térmicos com a umidade volumétrica do solo, pode ser calculada analiticamente utilizando a teoria de espalhamento de nêutrons a três grupos de energia [1]. Esses fluxos são calculados para valores de umidade que variam de zero (solo seco em estufa a 105°C) até a saturação. Para isto é necessário conhecer a composição e a densidade global do solo, a geometria da fonte em relação ao detector e as secções microscópicas de espalhamento e de absorção dos nêutrons para cada grupo de energia. Apesar da curva de calibração teórica apresentar uma pequena curvatura, experimentalmente ela pode ser aproximada por uma relação linear conforme equação (1), já que ela é obtida pelo ajuste estatístico entre as variáveis: contagem por minuto de nêutrons no solo normalizada pela contagem na água (CR) e umidade (θ), ambas sujeitas a flutuações [2].

$$\theta = \frac{1}{\alpha\rho_s + \beta} CR - \frac{(\gamma + \delta)}{\alpha\rho_s + \beta} \quad (1)$$

ρ_s é a densidade global do solo e α , β , γ e δ são constantes que dependem da composição química do meio e podem ser determinadas a partir das características de espalhamento e de absorção dos nêutrons térmicos e intermediários.

Vários problemas associados ao uso da sonda de nêutrons têm sido analisados em trabalhos recentes. O cálculo do fluxo de nêutrons térmicos também baseado na teoria multigrupo, usando elementos finitos, foi realizado por diversos autores [1,2,3]. Esses cálculos mostraram que os espaços vazios entre o tubo de acesso e o solo causam desvios não desprezíveis na curva de calibração das sondas de nêutrons. As medidas das contagens podem ser subestimadas em até 45% e dependem da extensão desses espaços e dos diâmetros dos tubos [4]. Porém, quando esses vazios são preenchidos por água as medidas são superestimadas. Além disso, medidas das variações da quantidade de água armazenada em um perfil de solo arenoso obtidas com uma sonda de nêutrons são imprecisas devido ao rápido movimento da água através dos macroporos desse solo [5].

Apesar do método de moderação de nêutrons ser considerado como um método estabelecido para se medir umidade em condições de campo [6], a extrapolação da reta de calibração obtida em laboratório para o campo continua um

Tabela 1. Composição química dos horizontes A e B de um solo da zona da mata norte do estado de Pernambuco.*

Constituintes	Fração de Massa	
	Horizonte A	Horizonte B
SiO ₂	0,444	0,25
Fe ₂ O ₃	0,036	0,037
FeO	0,004	0,004
Al ₂ O ₃	0,104	0,041
MnO	0,002	0,002
TiO ₂	0,0003	0,0003
CaO	0,355	0,621
MgO	0,042	0,03
Na ₂ O	0,005	0,008
K ₂ O	0,003	0,003
SrO	0,001	0,003
P ₂ O ₅	0,001	0,0003
Cl	0,001	0,0006

* [1]

problema ainda controverso [7]. Os objetivos desse trabalho são: i) aplicar a teoria de difusão multigrupo para calcular a curva de calibração de uma sonda de nêutrons para dois horizontes do solo da Zona da Mata –PE e comparar os resultados da calibração de uma sonda para esse solo em condições de laboratório ii) avaliar os efeitos das secções de choque de espalhamento em cada um desses grupos e das secções de choque de absorção no grupo térmico na reta de calibração dessa sonda.

2 Metodologia

As hipóteses que foram consideradas para determinar o fluxo térmico na posição de uma fonte de nêutrons rápidos em um meio homogêneo e infinito utilizando a teoria de difusão à três grupos de energia foram as seguintes: i) fonte pontiforme; ii) meio homogêneo e uniforme; iii) estacionariedade dos fluxos neutrônicos em cada grupo de energia; iv) perda de nêutrons por absorção apenas no grupo térmico e v) simetria esférica. A teoria de difusão de nêutrons monoenergéticos foi então aplicada para três grupos de energia definidos por E_0 , energia máxima dos nêutrons emitidos pela fonte, E_1 , energia limite entre os grupos rápido e intermediário, E_2 , energia limite entre os grupos intermediário e térmico. Tem-se assim os seguintes intervalos para cada grupo:

$$E_0 \geq E > E_1 \text{ (rápido)}$$

$$E_1 \geq E > E_2 \text{ (intermediário)}$$

$$E_2 \geq E > E_3 \text{ (térmico)}$$

E_0 , E_1 , E_2 e E_3 foram considerados respectivamente 2 MeV, 1 MeV, 0,025 eV e 0 eV.

Para todos os elementos constituintes do solo (tabela 1), a perda de energia do nêutron em uma única colisão não é suficiente para que ele passe diretamente do grupo rápido para o grupo térmico. Pode-se dizer então que os grupos são diretamente acoplados, e assim, obter as equações de difusão abaixo:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi_1}{dr} \right) - \frac{1}{L_1^2} \Phi_1 = 0, r \neq 0 \quad (2)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi_2}{dr} \right) - \frac{1}{L_2^2} \Phi_2 = -\frac{S_1}{D_2} \Phi_1 \quad (3)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi_3}{dr} \right) - \frac{1}{L_3^2} \Phi_3 = -\frac{S_2}{D_3} \Phi_2 \quad (4)$$

Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 são respectivamente os fluxos para cada um desses grupos de energia.

Os fluxos podem ser determinados considerando um sistema de coordenadas esféricas com a fonte de nêutrons rápidos no centro da esfera. Nas equações 2-4, D_i e L_i são respectivamente os coeficientes e comprimentos de difusão para cada um dos grupos. Apesar das equações serem acopladas, o sistema pode ser resolvido analiticamente por substituições sucessivas a partir da primeira delas, para as condições de contorno, definidas nas equações 5 e 6.

$$\lim_{r \rightarrow 0} \iiint_V \nabla^2 \Phi_i dV = \delta_{1i} \frac{Q}{D_i}, i = 1, 2, 3 \quad (5)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Phi_i(r) = 0, i = 1, 2, 3 \quad (6)$$

Na equação 5 é definido que o termo de fonte é pontual e que existe apenas no grupo rápido, δ_{1i} representa o coeficiente “delta de Kroneker” e Q a surgência de nêutrons da fonte do grupo rápido. Na equação 6 está definido que para qualquer grupo o fluxo torna-se nulo quando r tende para infinito. As secções de choque macroscópicas de espalhamento para os grupos rápido, intermediário e térmico ($k=1,2$ e 3) e de absorção da água ($k=4$) para o grupo térmico, são calculadas através da equação 7.

$$S_k = \rho_a \frac{N_0}{M_a} \sigma_{ka} \theta + \rho_s \sum_{i=1}^m \left(\frac{N_0}{M_i} \right) \sigma_{ki} z_i \quad (7)$$

N_0 representa o número de Avogadro; M_a a massa molecular da água; σ_{ka} a secção de choque microscópica de espalhamento da água para o grupo de energia k , quando $k=1,2,3$, e a secção de choque microscópica de absorção da água quando $k=4$; θ é a umidade volumétrica do solo; ρ_s é a densidade aparente seca do solo; M_i é a massa molecular do i -ésimo constituinte; σ_{ki} as secções de choque microscópicas de espalhamento do i -ésimo constituinte para o grupo de energia k , quando $k=1,2,3$ e a secção de choque microscópica de absorção do i -ésimo constituinte quando $k=4$; e z_i a fração de massa do i -ésimo constituinte.

O fluxo de nêutrons térmicos na origem do sistema de coordenadas, expresso na equação 8, foi calculado resolvendo-se o sistema de equações 2, 3, 4 com as condições de contorno, equações 5 e 6.

$$\Phi_3 = \frac{QL_3^2}{4\pi D_3} \frac{1}{(L_1 + L_2)(L_1 + L_3)(L_2 + L_3)} \quad (8)$$

sendo,

$$L_1 = \frac{1}{c_1 S_1}; L_2 = \frac{1}{c_2 S_2}; L_3 = \left(\frac{D_3}{S_4}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

$$D_2 = \frac{1}{3(1 + d_2)^2 S_2}; D_3 = \frac{S_3}{3(S_3 + S_4)^2} \quad (10)$$

Os valores de c_1 , c_2 , c_3 e d_2 podem ser calculados a partir das equações abaixo:

$$c_j = (1 + d_j)(3d_j)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

$$d_j = \left[\frac{(E_{j-1} - E_j)(E_j - E_{j+1})}{E_{j-1} E_j \ln\left(\frac{E_{j-1}}{E_j}\right)} \right]$$

Para $j=1,2$.

A curva de calibração teórica foi aplicada para dois horizontes A e B, de um solo representativo da zona da mata norte do estado de Pernambuco. As frações de massa, z_i , apresentadas na tabela 1, foram determinadas pela técnica da espectrometria de absorção.

As secções de choque microscópicas desses elementos químicos foram obtidas da literatura [8,9]. Os fluxos térmicos foram calculados no centro de uma esfera de solo de raio infinito utilizando a equação 8 para umidades do solo seco ao saturado. Esse mesmo fluxo foi também calculado substituindo-se a esfera de solo por uma de água é denominado de $\Phi_{3\text{agua}}$. Ele foi utilizado para calcular o valor de CR normalizado que é igual a $\Phi_3/\Phi_{3\text{agua}}$. A partir da correlação entre CR e θ , foram determinados os coeficientes linear e angular, considerando uma aproximação linear para a curva de calibração teórica da sonda de nêutrons nos horizontes A e B do solo. A influência da densidade do solo nos valores dos coeficientes angular e linear, definidos na equação 1, foi obtida calculando-se os fluxos térmicos como descritos acima para densidades do solo variando de 1,2 a 1,8 g/cm³.

3 Resultados e Discussão

Os fluxos de nêutrons térmicos normalizados para o fluxo na água, calculados pela teoria de difusão a três grupos de energia para dois horizontes de solo em função da umidade volumétrica, são mostrados na figura 1. Essa normalização além de tornar a curva de calibração independente das características geométricas e nucleares da sonda de nêutrons utilizada, permite também comparar curvas de calibração de diferentes solos, já que a dispersão dos valores dos coeficientes angulares e lineares encontrada na literatura seria dependente apenas da composição e da densidade dos solos. Pode-se observar a existência de uma pequena curvatura na função CR(θ). Em experimento de campo para esse mesmo solo não foi possível evidenciar a existência dessa curvatura devido à dispersão tanto das contagens como da umidade volumétrica [10].

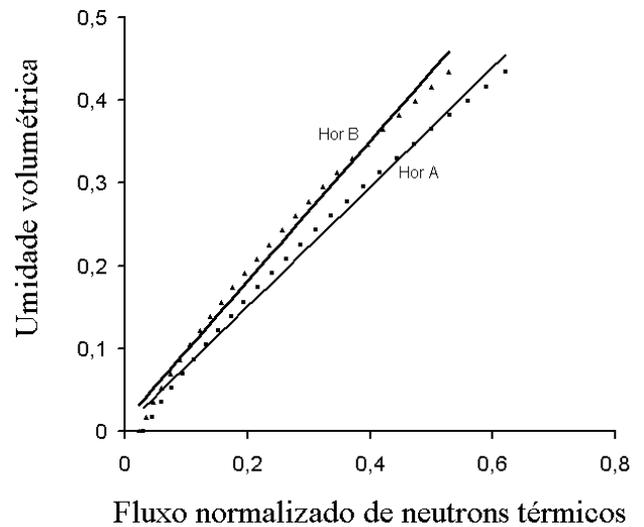


Figura 1. Fluxo normalizado de nêutrons térmicos para a água em função da umidade volumétrica: solução analítica e ajuste linear para dois horizontes (A e B) de um solo de densidade global $\rho=1,5$ g.cm⁻³.

Na tabela 2 são mostrados os valores dos coeficientes a e b da aproximação linear do modelo teórico, r^2 representa o coeficiente de correlação. Esses coeficientes, próximos a unidade, demonstram a validade de se aplicar um modelo linear na determinação experimental da curva de calibração de uma sonda de nêutrons. Pode-se verificar que quando se aumenta progressivamente a densidade do solo tem-se uma diminuição também progressiva tanto do coeficiente angular como do linear. Isto é, quanto mais denso for o solo, menor será o livre caminho médio dos nêutrons e conseqüentemente maior será a densidade dos nêutrons em torno da fonte. Pode-se assim explicar porque o coeficiente angular da reta de calibração, $\Delta\theta/\Delta CR$, diminui com o aumento da densidade do solo, já que para uma mesma variação de umidade, $\Delta\theta$, o valor de ΔCR será maior.

Tabela 2. Coeficientes linear e angular e respectivos desvios padrões e coeficiente de correlação do modelo linear do horizonte A e B de um solo em função da densidade do solo.

Horizonte	Densidade (g.cm^{-3})	Coeficiente angular	Coeficiente linear	Coeficiente de correlação
A	1,2	$0,7608 \pm 0,0085$	$0,0288 \pm 0,0033$	0,9878
	1,3	$0,7478 \pm 0,0077$	$0,0208 \pm 0,0029$	0,9895
	1,4	$0,7355 \pm 0,0071$	$0,0132 \pm 0,0025$	0,9910
	1,5	$0,7240 \pm 0,0064$	$0,0060 \pm 0,0022$	0,9922
	1,6	$0,7134 \pm 0,0059$	$-0,0009 \pm 0,0019$	0,9933
	1,7	$0,7038 \pm 0,0054$	$-0,0075 \pm 0,0016$	0,9942
	1,8	$0,6956 \pm 0,0049$	$-0,0139 \pm 0,0014$	0,9951
	B	1,2	$0,8630 \pm 0,0111$	$0,0370 \pm 0,0037$
1,3		$0,8567 \pm 0,0103$	$0,0284 \pm 0,0032$	0,9860
1,4		$0,8508 \pm 0,0095$	$0,0203 \pm 0,0028$	0,9878
1,5		$0,8454 \pm 0,0088$	$0,0125 \pm 0,0025$	0,9895
1,6		$0,8406 \pm 0,0081$	$0,0051 \pm 0,0022$	0,9909
1,7		$0,8367 \pm 0,0074$	$-0,0021 \pm 0,0019$	0,9922
1,8		$0,8338 \pm 0,0068$	$-0,0090 \pm 0,0016$	0,9934

Os coeficientes angular e linear obtidos teoricamente, apresentados na tabela 2 para o caso em que a densidade do solo é $1,5 \text{ g.cm}^{-3}$, são respectivamente $0,724 \pm 0,0064$ e $0,006 \pm 0,0022$. Esses coeficientes obtidos em condições de laboratório para o mesmo solo, foram respectivamente $0,745 \pm 0,02$ e $0,004 \pm 0,002$ para o horizonte A [10]. Essa diferença de cerca de 5% entre os valores teórico e experimental do coeficiente angular pode ser devido à grande sensibilidade das secções de choque microscópicas de espalhamento de nêutrons do grupo rápido utilizadas nos cálculos dos fluxos térmicos como pode ser observado na figura 2.

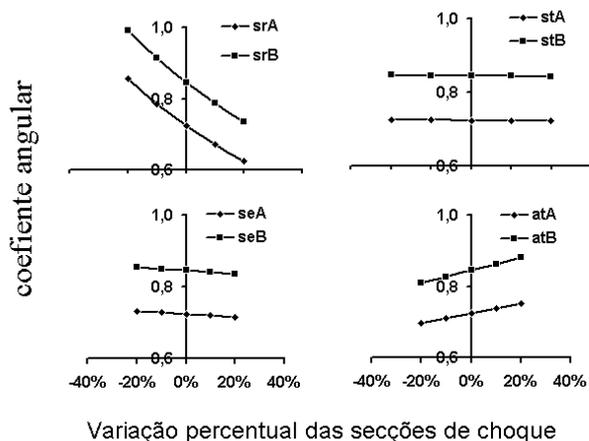


Figura 2. Variação do coeficiente angular das retas de calibração de uma sonda de nêutrons em função da variação percentual das secções de choque de espalhamento (s) em três grupos de energia (rápido-r, térmico-t e intermediário-e) e de absorção (a) no grupo térmico dos horizontes A e B do solo.

O coeficiente angular da reta de calibração é muito mais sensível às variações das secções de choque de espalhamento do grupo rápido do que às variações da secção

de absorção do grupo térmico. Como o fluxo térmico é medido na origem, onde se localiza a fonte de nêutrons rápidos, então é de se esperar que a densidade de colisões dos nêutrons rápidos nas proximidades da origem aumente e conseqüentemente se observe uma maior transferência de nêutrons para os grupos epitérmicos e térmicos. Em conseqüência, um aumento da secção de choque de espalhamento do grupo rápido deverá também aumentar a densidade dos nêutrons térmicos na origem. Por outro lado, um aumento da secção de choque de absorção do grupo térmico reduzirá o fluxo de nêutrons térmicos na origem. As variações das secções de choque de espalhamento dos elementos do solo nos grupos epitérmico e térmico são praticamente insignificantes na determinação do coeficiente angular da reta de calibração, pois devido à presença de água com suas propriedades moderadoras predominantes, a influência destas variações está limitada ao solo seco ou com umidade muito baixa.

4 Conclusões

O coeficiente angular da reta de calibração é muito mais sensível às variações das secções de choque de espalhamento do grupo rápido do que às variações das secções de choque de absorção do grupo térmico.

As variações das secções de choque de espalhamento dos grupos epitérmico e térmico influenciam muito pouco os valores dos coeficientes angulares.

Referências

- [1] Crispino, M.L., *Estudo teórico da influência da densidade global e da composição química na calibração de sondas de neutrons*, in *Departamento de Energia Nuclear*. 1980, Universidade Federal de Pernambuco: Recife. p. 71.

- [2] Couchat, P. *Determination de la courbe d'etalonnage de l'humidimetre a neutrons a partir de l'analyse chimique des sols.* in *Isotope and radiation techniques in Soil Physics and irrigation studies.* 1967.
- [3] Jensen, P.A. and E. Somer. *Isotope and Radiation Techniques in Soil Physics and Irrigation Studies.* in *Techniques in Soil-Moisture and Density Measurements.* 1967.
- [4] Li, J., D.W. Smith, and S.G. Fityus, *The effect of a gap between the access tube and the soil during neutron probe measurements.* Australian Journal of Soil Research, 2003. **41**(1): p. 151-164.
- [5] Gaze, S.R., M.A. Stalham, and E.J. Allen, *Accuracy of the neutron probe for measuring changes in soil water storage under potatoes.* Journal of Agricultural Science, 2002. **138**: p. 135-152.
- [6] Chanasyk, D.S. and M.A. Naeth, *Field measurement of soil moisture using neutron probes.* Canadian Journal of Soil Science, 1996. **76**(3): p. 317-323.
- [7] Carneiro, C.J.G., A.C.D. Antonino, and A. Dall'Olio. *Calibração de sonda de nêutrons: um problema ainda não resolvido?* in *IV Encontro de Aplicações Nucleares.* 1997. Poços de Caldas MG.
- [8] Hughes, D.J. and R.B. Schwartz, *Cross Sections (BNL-325).* 1958, Superintendent of Documents, U.S. Government Printing Office: Washington D.C.
- [9] Lamarsh, J.R., *Introduction to Nuclear Engineering.* 1975: Addison-Wesley Publishing Co.
- [10] Silva, I.J.O., Carneiro, C. J. G. C., Khoury, H. J. *Desenvolvimento de uma sonda de nêutrons para medida de umidade de solo utilizando um detector de ${}^6\text{Li}(\text{Eu})$.* Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento. 2002, 5(2) p.247-253,