

Uživatelská příručka SW BioRad

Verze 1.0.x

Cílem tohoto dokumentu je seznámit uživatele s prací v rámci grafického uživatelského rozhraní (GUI) programu BioRad. Vlastní principy, na nichž je SW založen, jsou popsány v samostatném dokumentu a nebudou zde pojednány.

INSTALACE

K instalaci SW slouží zkompileovaný instalační balíček dostupný ke stažení na stránkách <https://omp-cxi-tul.github.io/BioRad/>. Instalační balíček byl vytvořen pro 64-bitovou verzi systému MS Windows.

V případě, že počítač, na nějž má být SW nainstalován, používá jiný operační systém, nebo v případě, kdy instalační proces z jakéhokoli důvodu selže, je možno z výše uvedené adresy stáhnout balíček se všemi potřebnými soubory. Je třeba jednak nainstalovat Python ve verzi 3.x (doporučená je aktuálně nejnovější verze 3.8.3, <https://www.python.org/downloads/>). V prostředí Windows lze aktuálně nainstalovanou verzi Pythonu ověřit zadáním příkazu *python* do příkazového řádku.

Dále je třeba doinstalovat balíčky, které jsou k běhu programu nezbytné. Jedná se o:

- PyYAML
- Numpy
- Scipy
- Matplotlib
- Virtualenv
- Pysqlite3.

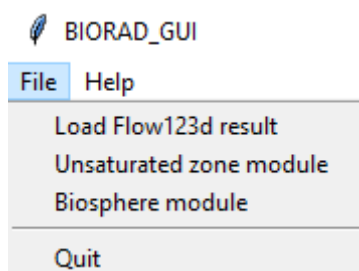
Jednotlivé balíčky lze nainstalovat pomocí příkazu *pip install název_balíčku* v příkazovém řádku.

SPUŠTĚNÍ

Grafické uživatelské rozhraní programu lze spustit přímo pomocí ikony vytvořené na ploše nebo v nabídce Start. Pro efektivnější práci s programem je nicméně doporučeno spuštění pomocí souboru „BioRad.bat“ v adresáři bin, který se nachází v místě instalace SW (výchozím umístěním je složka „c:\Users\account_name\AppData\Local\BioRad\“); v takovém případě jsou totiž případné chyby a varování vypisovány v okně příkazového řádku.

POUŽITÍ

SW BioRad má tři hlavní funkcionality dostupné přes rozbalovací menu (Obr. 1). Ovládání každé z nich bude popsáno v následujících odstavcích.

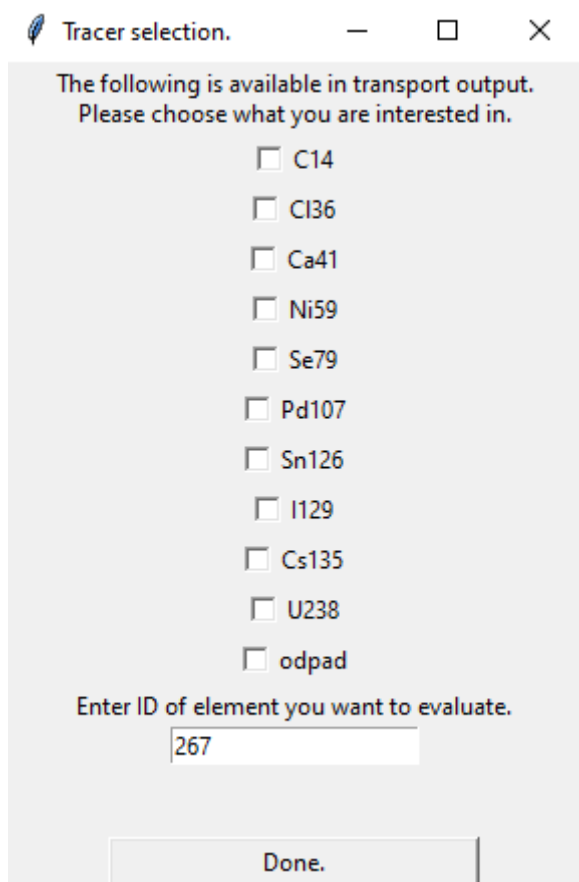


Obr. 1 Rozbalovací seznam hlavního menu

Načtení výsledků simulace transportu

SW předpokládá, že existuje soubor s výstupem simulace transportu provedené v modelu Flow123d.

Po stisknutí volby „Load Flow123d results“ v rozbalovacím seznamu (Obr. 1) je uživatel vyzván k volbě cesty k souboru s výstupem simulace transportu (formát *.msh). SW soubor projde, aby zjistil, jaké kvantitativy jsou v něm vystoupeny. Z nich následně uživatel vybere ty, které chce zahrnout do následných simulací (Obr. 2). Tato volba se uloží do souboru temp.txt ve složce outputs v místě instalace. Soubor je nezbytný pro další moduly SW BioRad. Pokud by ho chtěl uživatel vytvořit ručně, jeho formát je jednoduchý: vždy jeden název radionuklidu na jeden řádek. Dále uživatel zvolí číslo elementu, na němž chce provádět navazující analýzy (jako vstup je akceptováno výhradně přirozené číslo z rozsahu indexů elementů ve zvoleném výstupním souboru). Následně dojde k načtení souboru, jeho zpracování a zapsání výstupu.



Obr. 2 Výběr kvantit ze souboru s výsledky simulace transportu a volba elementu, na němž budou prováděny analýzy

V případě, že je soubor velký (mohou nastat i případy, kdy má stovky GB), může načtení tohoto souboru trvat delší dobu. Výstupem je soubor `saturated_concentrations.csv` ve složce `inputs` v místě instalace. Soubor je nezbytný pro další moduly SW BioRad. Jeho formát je následující: V prvním řádku index zvoleného elementu v hranatých závorkách, v druhém řádku hlavička (názvy kvantit oddělené středníky, první kvantitou je vždy čas), ve zbylých řádcích hodnoty oddělené středníky (čas a následně koncentrace či aktivity vybraných radionuklidů v daném čase).

SW automaticky detekuje, zda jsou koncentrace z Flow123d vystupovány v uzlech elementů výpočetní sítě či v jejich těžišti, a soubor zpracuje bez nutnosti uživatelského zásahu.

Modul pro simulaci proudění a transportu v nesaturované zóně

Model proudění a transportu v nesaturované zóně předpokládá existenci souborů `temp.txt` (seznam radionuklidů zahrnutých do simulace) a `saturated_concentrations.csv` (data v něm slouží jako okrajová podmínka transportu), jejichž struktura, umístění a vznik jsou popsány výše.

Na Obr. 3 je znázorněno uživatelské rozhraní pro zadávání vstupů modelu nesaturované zóny. Jednotlivá pole jsou okomentována níže v textu.

Pro všechna pole platí, že za **desetinný oddělovač je považována tečka**.

Unsatrated zone module user options

Select units:

Length:

Mass:

Time:

Flow boundary conditions (TOP):

Transport simulation options:

Include tortuosity: ☒

Enter dispersivity:

Select numerical scheme:

Simulation time parameters:

Simulation period:

Simulation time step:

Flow iterations per step:

Output time step:

Flow boundary conditions (BOTTOM):

Radionuclide data:

Model geometry and mesh:

Select number of geometry layers:

Element size:

Flow initial conditions:

Pressure head at the TOP:
(must be negative)

Pressure head at the BOTTOM:
(must be positive)

Geometry layers (bottom to top):

Layer number 1:	Layer number 2:	Layer number 3:
Enter layer height: <input type="text" value="0"/>	Enter layer height: <input type="text" value="0"/>	Enter layer height: <input type="text" value="0"/>
UZ parameters from: <input type="text" value="Soil type"/>	UZ parameters from: <input type="text" value="Grain structure"/>	UZ parameters from: <input type="text" value="van Genuchten"/>
Select soil type: <input type="text"/>	sand [%]: <input type="text"/>	Theta_r: <input type="text"/>
	silt [%]: <input type="text"/>	Theta_s: <input type="text"/>
	clay [%]: <input type="text"/>	Alpha: <input type="text"/>
	density [kg/m3]: <input type="text"/>	n: <input type="text"/>
		Ks: <input type="text"/>
		Density [kg/m3]: <input type="text"/>

Actions:

Obr. 3 Nastavení modelu proudění a transportu v nesaturované zóně

V sekci „Select units“ je třeba zvolit jednotky (délky, hmotnosti a času), v nichž bude model počítat. Jednotky musí být shodné s jednotkami v souboru `saturated_concentrations.csv` (výsledky simulace transportu v saturované zóně). V těchto jednotkách jsou dále zadávány všechny kvantitativní údaje v tomto okně (krom těch, u nichž je očekávaná jednotka explicitně uvedena).

V sekci „Simulation time parameters“ jsou specifikovány časové konstanty simulace. Jedná se o celkovou simulační periodu (Simulation period, kladné reálné číslo), krok časové diskretizace (Simulation time step, kladné reálné číslo), počet iterací na jeden krok simulace (Flow iteration per step, přirozené číslo, vhodnou implicitní hodnotou může být 10) a krok výpisu (Output time step, kladné reálné číslo).

V sekci „Model geometry and mesh“ je specifikována jednak velikost elementu výpočetní sítě (Element size, kladné reálné číslo) a jednak počet geometrických vrstev (Select number of geometry layers). Geometrických vrstev může být jedna až tři. Každá vrstva má své parametry, větším počtem vrstev tak lze lépe postihnout případnou heterogennost prostředí. Parametry jednotlivých vrstev jsou definovány v sekci „Geometry layers (bottom to top)“. Vrstva číslo jedna je vždy ta nejhlubší. Pro každou vrstvu (může být jedna až tři) je třeba zadat její mocnost (Enter layer height, kladné reálné číslo). Dále je třeba zvolit formu zadání parametrů simulace proudění v dané zóně (UZ parameters from); na výběr jsou tři možnosti:

- Půdní typ (Soil type) – volí se kategorie půdního typu (Select soil type) dle zrnitostního složení (například písčítá, písčito-hlinitá, atp.).
- Zrnitostní složení – přímo se zadávají procentuálně podíly jednotlivých frakcí (písčítá/sand, hlinitá/silt, jílovitá/clay). Dále je třeba zadat hustotu v kilogramech na metr krychlový. Všechna pole očekávají kladná reálná čísla. Součet podílů jednotlivých frakcí musí být roven stu.
- Van Genuchtenova křivka – je třeba zadat parametry van Genuchtenovy křivky. Všechna pole očekávají kladná reálná čísla.

V sekcích „Flow boundary conditions (TOP)“ a „Flow boundary conditions (BOTTOM)“ je třeba zadat cesty k souborům, v nichž jsou definovány časové vývoje okrajových podmínek proudění na obou hranicích modelové domény. Oba souboru mají stejnou strukturu. Jejich první řádek tvoří hlavička („Time;Type;Value“) a v každém dalším řádku jsou vždy postupně hodnoty času, od něž je okrajová podmínka platná (kladné reálné číslo), typu okrajové podmínky (0 pro Dirichleta a 1 pro Neumana) a hodnoty okrajové podmínky (reálné číslo).

V sekci „Flow initial conditions“ jsou definovány počáteční podmínky proudění. Jedná se o definování polohy volné hladiny v rámci modelové domény. Je tak třeba předepsat hodnotu tlakové výšky na obou koncích modelové domény (v jednotkách délky) s tím, že horní hranici musí být záporná (záporné reálné číslo) a dolní kladná (kladné reálné číslo), aby bylo zaručeno, že volná hladina se vyskytuje v modelové doméně.

V sekci „Transport simulation options“ jsou volby pro simulaci transportu. Jednak je zde možno zvolit, zda model bude počítat s tortuozitou (Include tortuosity). Dále je zde třeba zadat disperzivit (reálné kladné číslo), vhodnou implicitní hodnotou může být desetina celkové mocnosti modelové domény. Konečně je třeba ze tří možností zvolit numerické schéma simulace (viz technická dokumentace modelu).

V sekci „Radionuclide data“ je třeba specifikovat transportní parametry jednotlivých radionuklidů. Po stisknutí tlačítka „Specify“ se otevře nové dialogové okno (Obr. 4). V něm je předpřipravena struktura s poli pro každý radionuklid, který je uveden v souboru temp.txt (viz výše), společně s fiktivním stopovačem „residual“, který je na konci všech rozpadových řetězců (sám se již dále nerozpadá).

Pro každý radionuklid je třeba zadat efektivní difuzivitu D_e [m^2/s], distribuční koeficient lineární sorpce K_d [m^3/kg], poločas rozpadu ve zvolených jednotkách času a ze seznamu vybrat, na co se daný stopovač rozpadá. Všechna numerická pole očekávají kladná reálná čísla. Stiskem tlačítka „Save and close“ se data uloží do souboru `nuclide_parameters.csv` ve složce `inputs` v místě instalace a dialogové okno se zavře. Data není třeba zadávat ručně, jsou-li již uložena v souboru. V takovém případě je lze stiskem tlačítka „Load from file“ rovnou načíst a případně modifikovat. Struktura souboru intuitivně kopíruje strukturu tabulky v dialogovém okně (včetně hlavičky).

Unsaturated zone nuclide transport parameters

Load from file
Save and close

Nuclide	D_e [m^2/s]	K_d [m^3/kg]	Half-life [units of time]	Product
C14	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Cl36	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Ca41	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Ni59	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Se79	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Pd107	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Sn126	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
I129	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
Cs135	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
U238	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	residual ▼
residual	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>		

Obr. 4 Model nesaturované zóny – transportní parametry jednotlivých radionuklidů

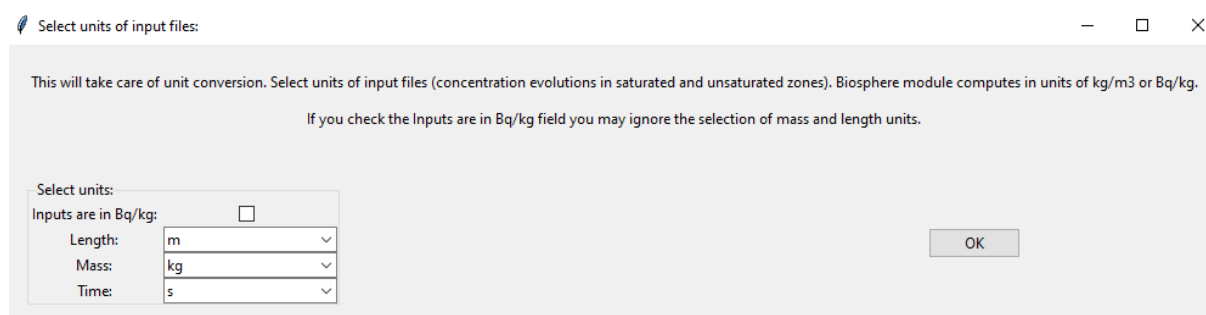
Po zadání všech vstupů je třeba stisknout tlačítko „Write input YAML and run“. Ve složce `inputs` v místě instalace je vytvořen řídicí soubor modelu nesaturované zóny (`UZ_conf_file.yaml`) a model je spuštěn. Simulace může být časově poměrně náročná. V případě, že byl SW spuštěn z příkazové řádky (užitím souboru „BioRad.bat“, viz sekce spuštění), je možné sledovat průběh simulace (stejně jako případné chyby či varování) dle průběžných výpisů do příkazové řádky.

Výstupem (tak, jak ho vyžaduje modul pro výpočet efektivní dávky, viz dále) je soubor `unsaturated_concentrations.csv` ve složce `inputs` v místě instalace. Jeho struktura je totožná se strukturou souboru `saturated_concentrations.csv` (viz kapitola Načtení výsledků simulace transportu). Kompletní výsledky simulace (časové průběhy na všech elementech výpočetní sítě) jsou

v souboru UZ_results.msh ve složce outputs v místě instalace. Lze je vizualizovat například pomocí programu GMSH (<https://gmsh.info/>).

Modul pro výpočet efektivní dávky (model biosféry)

Po spuštění biosférického modulu je nejprve třeba zvolit jednotky (viz Obr. 5) za účelem jejich konverze. Zvolené jednotky musí korespondovat s těmi ve vstupních souborech (časový vývoj koncentrací/aktivit v saturované a nesaturované zóně; saturated_concentrations.csv a unsaturated_concentrations.csv). Biosférický model počítá v jednotkách kg/m^3 případně Bq/kg . Je třeba zvolit jednotky délky, hmotnosti a času. Je-li zaškrtnuta možnost „Inputs are in Bq/kg“, pak na volbě jednotek hmotnosti a délky nezáleží. Jednotku času je třeba zadat v každém případě.



Obr. 5 Model biosféry – výběr jednotek


Po stisknutí tlačítka „OK“ v dialogovém okně výběru jednotek (Obr. 5) se toto okno zavře a otevře se dialogové okno modelu biosféry (Obr. 6). V něm je nejprve třeba vybrat cestu k souboru s databází BioRad („Open database file“). Ten je součástí instalace (nachází se ve složce database v místě instalace). Po jejím otevření se dialogové okno rozšíří (Obr. 7). V jeho rámci je možné zvolit jednak to, zda bude biosférický model počítán výhradně na základě koncentrací/aktivit v saturované zóně (méně přesná varianta, která zavádí některé zjednodušující předpoklady, výhodou je možnost přeskočit krok simulace proudění a transportu v nesaturované zóně; viz technická dokumentace modelu) nebo na základě koncentrací/aktivit v saturované i nesaturované zóně. Druhou volbou je volba spotřebního koše, kdy na výběr jsou všechny spotřební koše definované v rámci načtené databáze.

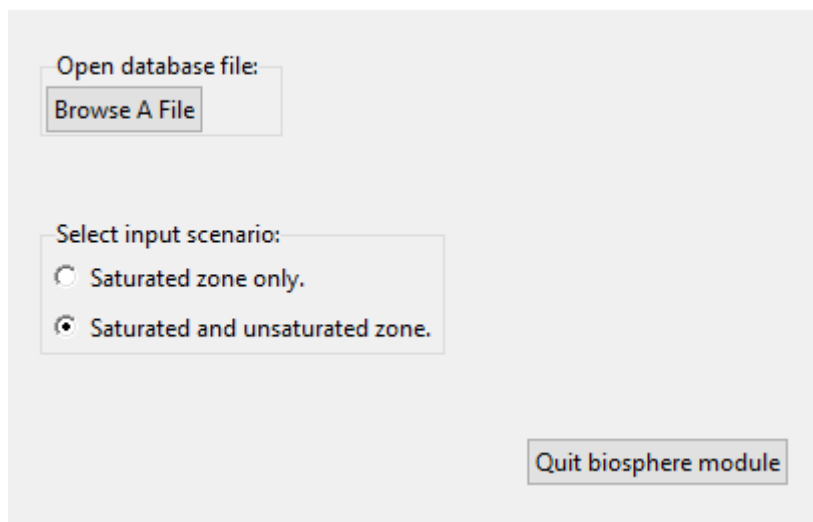
Po stisknutí tlačítka „Write configuration file and run Biosphere module“ se ve složce inputs v místě instalace vytvoří řídicí soubory modelu biosféry (UZ_conf_file.yaml a Biosphere_configuration_file.yaml) a spustí se simulace.

Výstupy simulace se zapíší do složky outputs v místě instalace do binárního souboru Biosphere_module_results.npz. Do téže složky je vystoupen také log s průběhem simulace (biosphere_module_log.txt).

Dialogové okno (Obr. 7) se uzavře a v hlavním okně SW BioRad se objeví tlačítko „Process and visualize Biosphere module results“. Po kliknutí na něj se otevře dialogové okno pro zpracování a vizualizaci výsledků (Obr. 8). V jeho levém horním rohu je uveden spotřební koš, pro nějž jsou výsledky spočteny. V levém sloupci si uživatel vybere cesty, jejichž výsledky ho zajímají, a v pravém sloupci analogicky radionuklidy. Následně stačí stisknout tlačítko „Plot and save as CSV“ a výsledky pro zvolenou kombinaci cest a radionuklidů se uloží do csv souboru ve složce outputs v místě instalace (BioRad_results_export.csv). Zároveň se vprostřed okna otevře náhled výsledků v podobě

vykreslených časových vývoji efektivní dávky pro zvolené kombinace cest a radionuklidů. Náhled lze přibližovat a ukládat jako obrázek. Pro lepší práci daty a vizualizaci je doporučeno pracovat s vyexportovaným csv souborem například v prostředí MS Excel.

 Biosphere module user options.



Open database file:

Browse A File

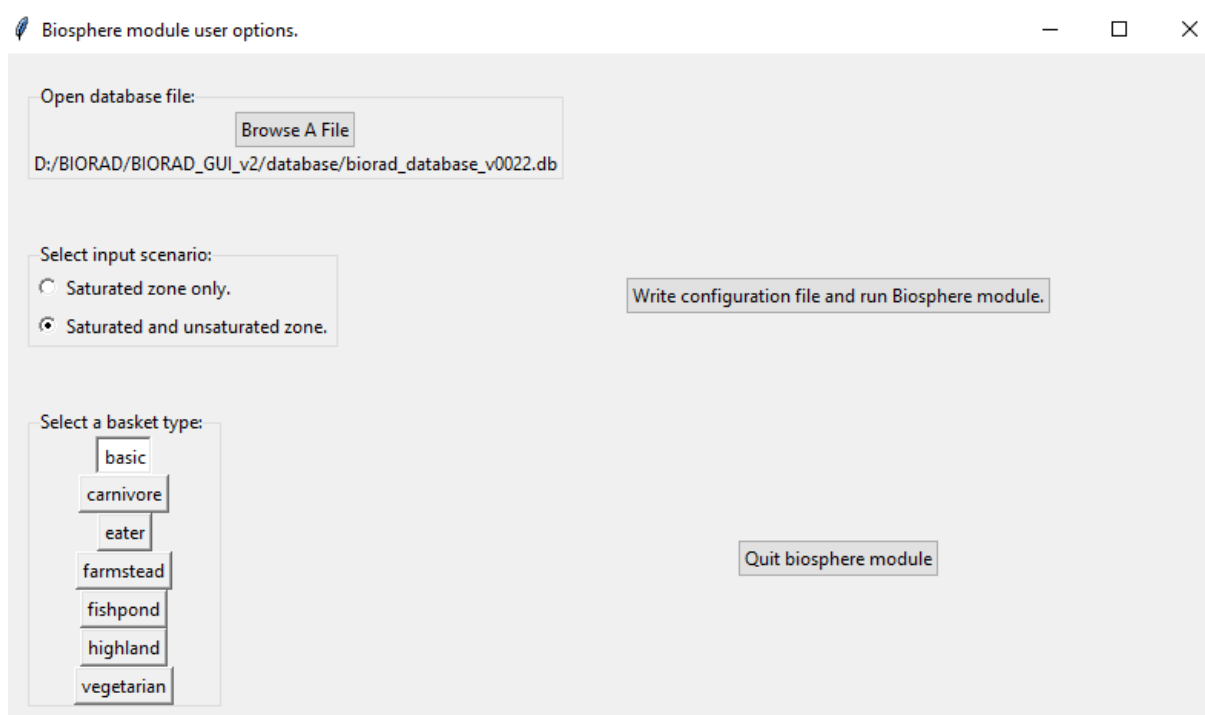
Select input scenario:

☐ Saturated zone only.

☒ Saturated and unsaturated zone.

Quit biosphere module

Obr. 6 Model biosféry – dialogové okno 1



Biosphere module user options.

Open database file:

Browse A File

D:/BIORAD/BIORAD_GUI_v2/database/biorad_database_v0022.db

Select input scenario:

☐ Saturated zone only.

☒ Saturated and unsaturated zone.

Write configuration file and run Biosphere module.

Select a basket type:

basic

carnivore

eater

farmstead

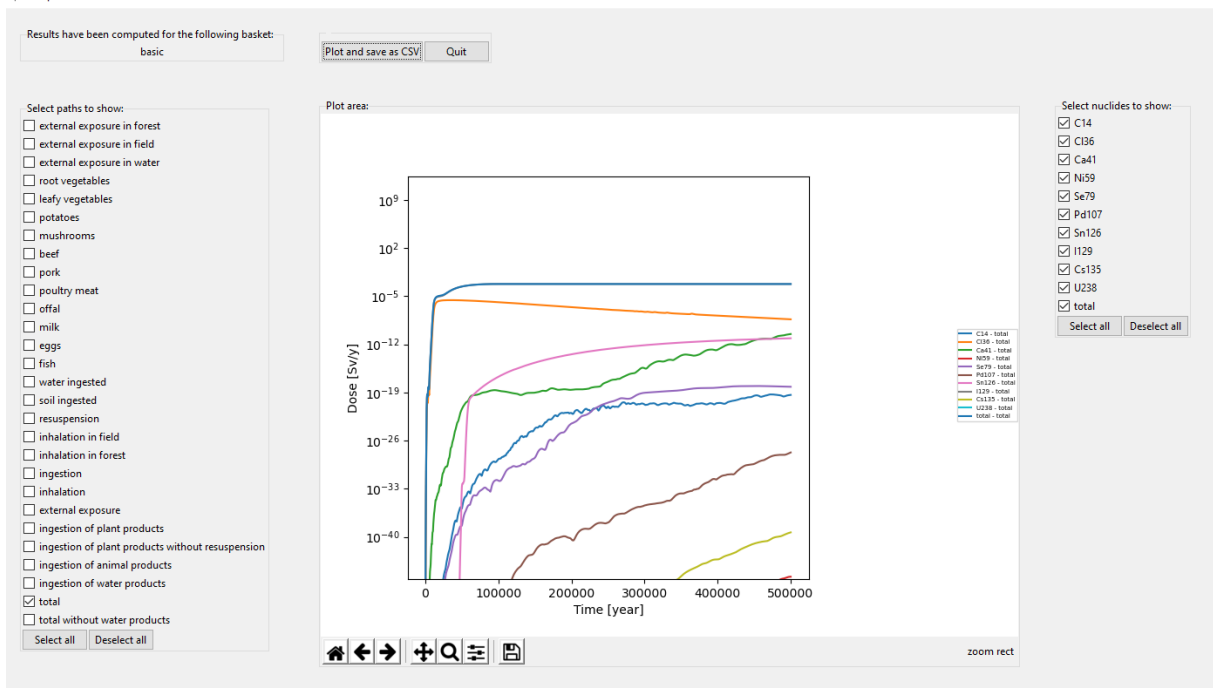
fishpond

highland

vegetarian

Quit biosphere module

Obr. 7 Model biosféry – dialogové okno 2



Obr. 8 Okno vizualizace výsledků