

# GEOTRAN: VLIV ZMĚN VLASTNOSTÍ GEOSFÉRY NA VÝVOJ TRANSPORTU RADIONUKLIDŮ Z PROSTORU HÚ DO BIOSFÉRY

## GEOTRANtools

### Uživatelská příručka

**Software vznikl jako výsledek projektu v programu TAČR THETA**

**Číslo projektu: TK02030120**

**Název projektu: Vliv změn vlastností geosféry na vývoj transportu radionuklidů  
z prostoru HÚ do biosféry**

**Hlavní příjemce: Technická univerzita v Liberci (TUL)**

**Další účastníci: Česká geologická služba (ČGS)  
PROGEO, s. r. o. (PROGEO)  
Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava (VŠB-TUO)**

**Hlavní řešitel: prof. Dr. Ing. Jiří Maryška CSc.**

**Dílčí část projektu: Realizace software GEOTRANtools**

**Název zprávy: GEOTRANtools – uživatelská příručka**

**Pracoviště autorů: Technická univerzita v Liberci**

**Autoři zprávy: Jiřina Královcová, Michal Balatka, Jakub Říha**

**Místo, datum: Liberec, září 2022**

## Obsah

Úvod.....	4
1 Instalace.....	4
2 Spuštění programu.....	4
3 Menu File.....	6
4 Menu „Balance Output Files Processing“ .....	6
4.1 Volba <i>Select Balance Files</i> .....	6
4.2 Volba <i>Save Balance Report</i> .....	7
4.3 Volba <i>Save Balance Sumary Report</i> .....	7
4.4 Volba <i>Options</i> .....	7
5 Menu „Transport Output Files Managing“ .....	8
5.1 Volba <i>Select Transport Output Files</i> .....	8
5.2 Volba <i>Load All Transport Output Data</i> .....	9
5.3 Volba <i>Load Additional Selected Transport Output Data</i> .....	9
5.4 Volba <i>Clear Loaded Output Data</i> .....	9
5.5 Volba <i>Point Grids Configuration</i> .....	9
5.6 Volba <i>Add Depth Grid</i> .....	10
5.7 Volba <i>Add Level Grid</i> .....	10
5.8 Volba <i>Show/Delete Grids</i> .....	10
5.9 Volba <i>Add Element Set from Depth Range</i> .....	10
5.10 Volba <i>Add Element Set from Level Range</i> .....	11
5.11 Volba <i>Add Element Set from Regions Group</i> .....	11
5.12 Volba <i>Show/Delete Element Sets</i> .....	11
5.13 Volba <i>Options</i> .....	12
6 Menu „Transport Output Reports“ .....	12
6.1 Volba <i>Maximum at the Element Set</i> .....	13
6.2 Volba <i>Maximum Difference between Element Sets</i> .....	14
6.3 Volba <i>Quantile at the Element Set</i> .....	14
6.4 Volba <i>Maximum at the Grid</i> .....	14
6.5 Volba <i>Maximum Difference between Grids</i> .....	14
6.6 Volba <i>Area over Limit at the Grid</i> .....	14
6.7 Volba <i>Quantile at the Grid</i> .....	14
6.8 Volba <i>Save Grid as Text File</i> .....	14
6.9 Volba <i>Save Grid Difference as Text File</i> .....	14
6.10 Volba <i>Save Grid as Text File by Percentiles Form</i> .....	14

6.11	Volba <i>Save Grid Difference as Text File by Percentiles Form</i> .....	14
6.12	Volba <i>Save Grid as Image</i> .....	15
7	Menu „Models“ .....	15
8	Reference .....	15

## Úvod

Tento dokument obsahuje základní informace pro uživatele počítačového programu (software) GEOTRANtools. Software je jedním z hlavních výsledků projektu, který byl finančně podpořen z programu **TAČR THÉTA**, číslo projektu **TK02030120**, název „*Vliv změn vlastností geosféry na vývoj transportu radionuklidů z prostoru HÚ do biosféry*“, akronym projektu GEOTRAN. Projekt byl řešen v období 07/2019–09/2022. Byl zaměřený na výzkum možných dlouhodobých geologických, geomorfologických a klimatických změn a jejich vlivu na vývoj transportu radionuklidů (RN) z prostoru hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů (HÚ VJP a RAO, též jen HÚ) do biosféry.

**Projekt byl realizován s podporou Aplikačního garanta SÚRAO**, která pro jeho řešení poskytla především data důležitá pro realizaci jednotlivých aktivit, v rámci jednotlivých kontrolních dnů zároveň postup dílčích aktivit do jisté míry usměrňovala.

V průběhu řešení projektu byl jako jeden z plánovaných hlavních výsledků vytvořen na pracovišti Technické univerzity v Liberci *software pro podporu simulací se zahrnutím geologického vývoje horninového prostředí*. Na základě realizace transportních modelů a následných analýz jejich výsledků je software zaměřen především na postprocessing dat, které jsou výsledkem výpočtů transportu sestávajících z dílčích fází. V souladu s původním záměrem se jedná o modely, respektive výstupy modelů, realizovaných v simulačním kódu Flow123D (<https://flow123d.github.io/>), (Březina a kol. 2022). Software byl vyvíjen pod licencí **GNU General Public License v3.0**.

## 1 Instalace

Uživatelé je k dispozici zkompileovaný instalační balíček dostupný ke stažení na stránkách <https://omp-cxi-tul.github.io/GeoTran/>. Instalační balíček byl vytvořen pro 64-bitovou verzi systému MS Windows.

V případě, že počítač, na kterém má být SW nainstalován, používá jiný operační systém, nebo v případě, kdy instalační proces z jakéhokoli nelze použít, je možno z výše uvedené adresy stáhnout balíček se všemi potřebnými zdrojovými soubory. Je třeba mít instalovaný Python ve verzi 3.9 (nebo vyšší, <https://www.python.org/downloads/>). Součástí instalace Python musí být (samostatně instalovatelné) balíčky, které jsou k běhu programu nezbytné. Jedná se o:

- PyYAML
- Numpy
- Matplotlib
- psutil

Jednotlivé balíčky lze doinstalovat pomocí příkazu „`pip install název_balíčku`“ zadaného z příkazové řádky.

**Upozornění: Instalací a používáním tohoto SW uživatel potvrzuje, že bez výhrad souhlasí s licenčními podmínkami tohoto SW** (tj. podmínkami GNU General Public License v3.0).

**Poznámka:** Součástí instalačního balíku nejsou datové soubory, se kterými by bylo možné alespoň v omezeném režimu software vyzkoušet. Uživatel je odkázán na vytvoření vlastního transportního modelu ve Flow123D, jehož výstupy lze pak podrobit zpracování v GEOTRANtools softwaru, popřípadě lze v omezené míře využít datové soubory, které jsou k dispozici v repozitáři projektu ve větvi `test-data`: <https://github.com/OMP-CXI-TUL/GeoTran/tree/test-data> (zde pak v podadresáři `data`).

## 2 Spuštění programu

GEOTRANtools je program s grafickým uživatelským rozhraním. Uživatelské rozhraní je realizované v anglickém jazyce. Základními vstupy programu jsou výstupní soubory výpočtu transportu simulátoru

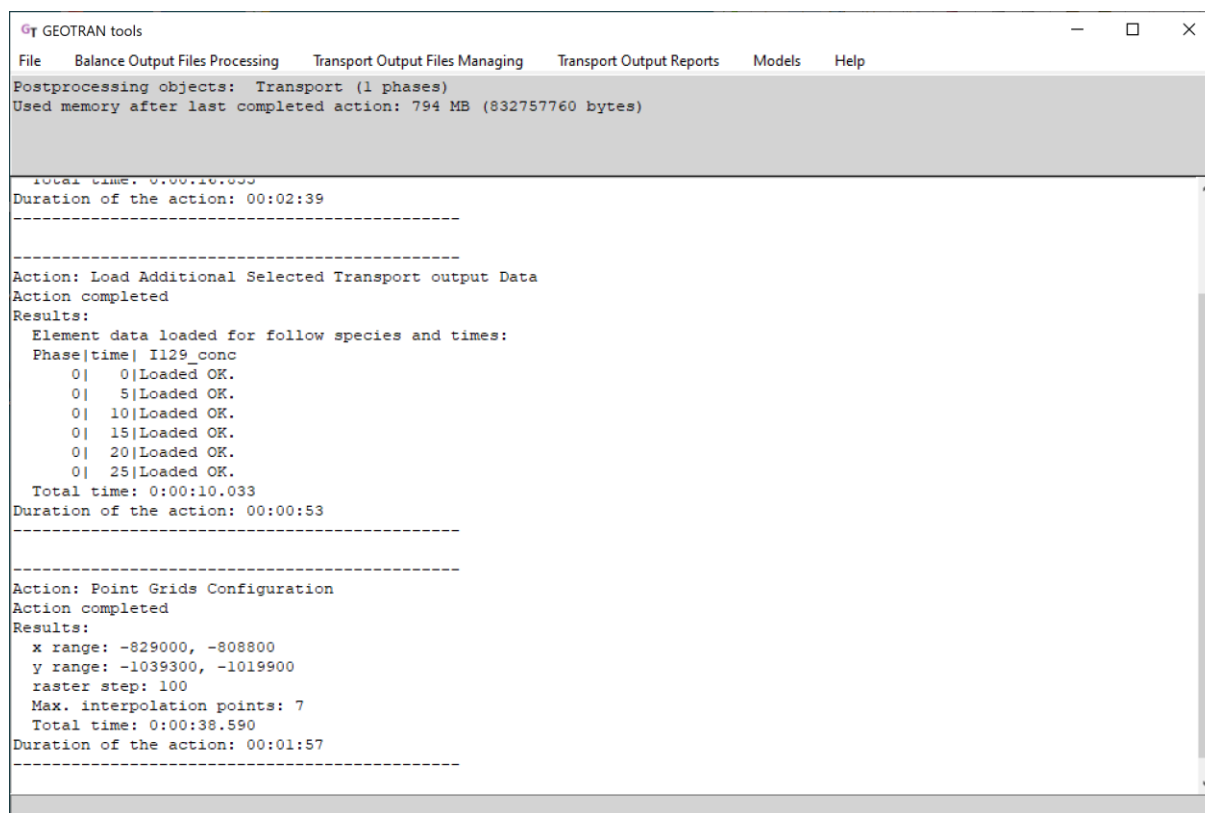
Flow123d, konkrétně verze 3.9.0, umožňuje vystupovat data ve dvou základních formátech, a to GMSH (přípona souborů \*.msh) a VTK (přípona souborů \*.vtk). Základní informace o používaných formátech jsou uvedeny v uživatelské manuálu Flow123d (Březina a kol. 2022). Podrobnější informace pak jsou v dokumentaci programu GMSH (<https://gmsh.info/>), (Geuzaine C., Remacle J. F. 2022) a ParaView (<https://www.paraview.org/about/>), (Paraview). GEOTRANtools pak z těchto formátů umožňuje načítat výstupu ve formátu GMSH, který byl jako výhradní v průběhu řešení projektu používán.

Flow123d dále pracuje s některými dalšími formáty, z hlediska GEOTRANtools jsou podstatné výstupní soubory s informacemi o bilanci hmoty pro jednotlivé regiony zahrnuté v modelu. Tyto informace je třeba načítat ze souborů prostého textového formátu v tabulkovém tvaru.

V době implementace GEOTRANtools byla souběžně připravována nová verze Flow123d (verze 4), v níž se podstatné změny týkají mimo jiné právě výstupních souborů. Vzhledem k prozatím neupřesněnému formátu ovšem nebylo možné tyto předběžně avizované změny do funkcionalit GEOTRANtools zahrnout. Je tedy možné, že po aktualizaci Flow123d nebudou některé soubory v GEOTRANtools bez dalších zásahů zpracovatelné.

Po spuštění programu je uživateli zobrazeno hlavní okno programu (Obr. 1). Všechny ovládací prvky/volby jsou uspořádány dle zaměření v dílčích submenu hlavního menu programu v horní liště okna. V horní části okna je pruh zobrazující základní informace. V pracovní ploše okna je pak uživateli zobrazován „protokol práce s programem“, tj základní informace o prováděných akcích/činnostech. Tento protokol lze následně uchovávat v diskovém souboru.

Následující kapitoly obsahují popis jednotlivých položek hlavního menu a voleb v nich obsažených. U každé z voleb je základní popis činnosti, kterou daná volba vyvolá.



Obr. 1 Hlavní okno programu

### 3 Menu File

Menu obsahuje volby pro práci s protokolem a pro ukončení programu. Jedná se o následující položky:

- *Save Protocol to File* – Umožňuje uložení protokolu do diskového souboru. Po výběru volby je zobrazeno dialogové okno umožňující výběr umístění a zadání jména diskového souboru. Implicitní přípona souboru je \*.gtp. Protokol je ukládán do souboru ve formě prostého textu.
- *Clean Protocol* – Po výběru volby je smazán obsah pracovní plochy hlavního okna. V případě doposud neuloženého, modifikovaného protokolu je uživatel vyzván k potvrzení akce.
- *Exit* – Ukončení programu. Uživatel je vyzván k potvrzení akce.

### 4 Menu „Balance Output Files Processing“

Menu *Balance Output Files Processing* obsahuje několik málo položek, které podporují postprocessing souborů s daty bilance v jednotlivých regionech a časech. Uživateli je umožněno vybrat sadu těchto souborů (předpokládá se, že se jedná o sadu souborů jediného modelu, jehož celý výpočet je složený z dílčích výpočtů několika po sobě jdoucích fází). Následně lze provést uložení vybrané množiny dat do výstupních souborů.

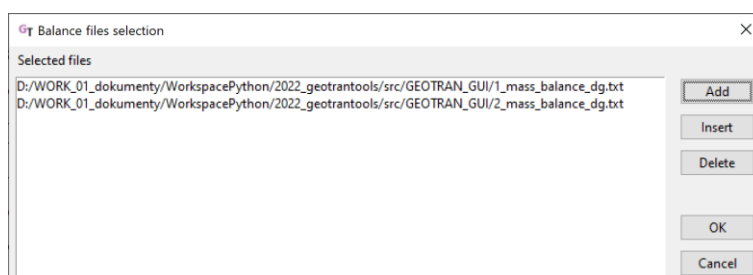
Menu *Balance Output Files Processing* obsahuje následující položky/volby:

- *Select Balance Files*
- *Save Balance Report*
- *Save Balance Sumary Report*
- *Options*

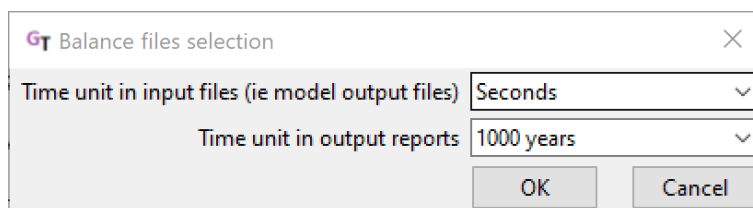
#### 4.1 Volba *Select Balance Files*

Po výběru je zobrazeno dialogové okno, které umožní sestavit/vybrat sadu souborů z libovolné umístění na disku (Obr. 2). Musí se jednat o soubory obsahující data bilancí (buď vody, nebo látek). Pokud jsou soubory v různých adresářích, je nutno je přidávat jednotlivě. Seznam vybraných souborů je průběžně zobrazován uživateli. Soubory musí být v chronologickém pořadí (dle pořadí jednotlivých fází v simulaci).

Po ukončení výběru souborů je zobrazeno dialogové okno umožňující zadat časové jednotky (Obr. 3), ve kterých jsou jednak načítaná data a jednak následně realizované výstupní sestavy (report).



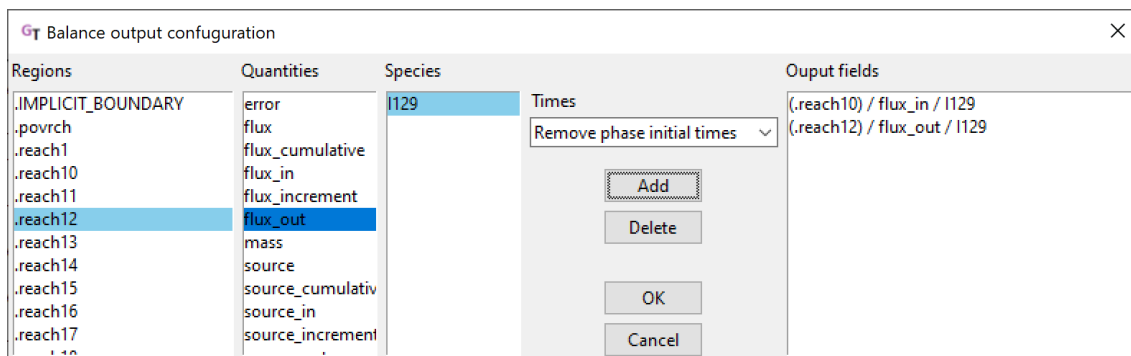
Obr. 2 Dialogové okno umožňující sestavení sady vstupních souborů s daty bilance



Obr. 3 Dialogové okno umožňující zadat časové jednotky

## 4.2 Volba Save Balance Report

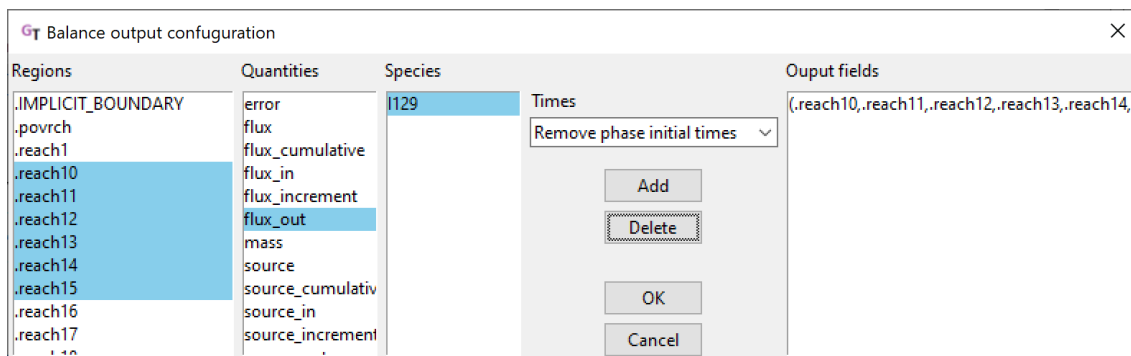
Po výběru této volby je uživateli zobrazeno dialogové okno, které uživateli umožní definovat, co má být zahrnuto do výstupní sestavy (Obr. 4). Každá položka výstupní sestavy (zobrazeno na seznamu v pravé části dialogového okna) je tvořen a výběrem vždy jedné z položek každého ze seznamů v pravé části dialogového okna. Po ukončení výběru uživatel zadá jméno a vybere umístění souboru s výstupní sestavou (report). Výstup je ve formátu CSV.



Obr. 4 Volba datových sad, které mají být zahrnuty do výstupní sestavy

## 4.3 Volba Save Balance Summary Report

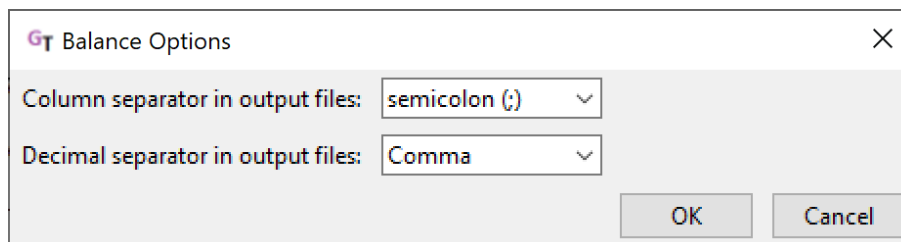
Tato volba poskytuje akci obdobnou jako ve volbě *Save Balance Report* s tím, že pro každou položku výstupní sestavy je možno zvolit několik regionu (viz vícenásobný výběr regionů ze seznamu v pravé části dialogového okna na Obr. 5), přes které má být v příslušném poli sestavy (sloupci) proveden součet. Po vytvoření podoby výstupní sestavy uživatel zadává/vypírá soubor, data jsou uložena v CSV formátu.



Obr. 5 Volba datových sad, které mají být zahrnuty do výstupní sestavy

## 4.4 Volba Options

Po výběru volby je uživateli zobrazeno dialogové okno, ve které je možno vybrat jaké oddělovače (oddělovač polí/sloupců, oddělovač desetinným míst v reálných číslech) mají být použity při ukládání výstupních sestav do diskových souborů (Obr. 6).



Obr. 6 Nastavení oddělovačů ve výstupních souborech s vybranými daty bilance hmoty

## 5 Menu „Transport Output Files Managing“

Menu obsahuje volby, které umožňují vybrat sadu souborů ke zpracování. V tomto případě se jedná o soubory, které obsahují výsledné hodnoty koncentrací látek v jednotlivých časech celé simulace. Soubory musí být formátu MSH. Program umožňuje analyzovat data v určených gridech nebo množinách elementů. Zde v tomto menu jsou dále volby, které umožňují definovat parametry analyzovaných gridů a množin elementů. Pro zpracování takto učených pohledů na data transportu je pak až v následující menu *Transport Output Reports* (kapitola 6).

Menu *Balance Output Files Processing* obsahuje následující položky/volby:

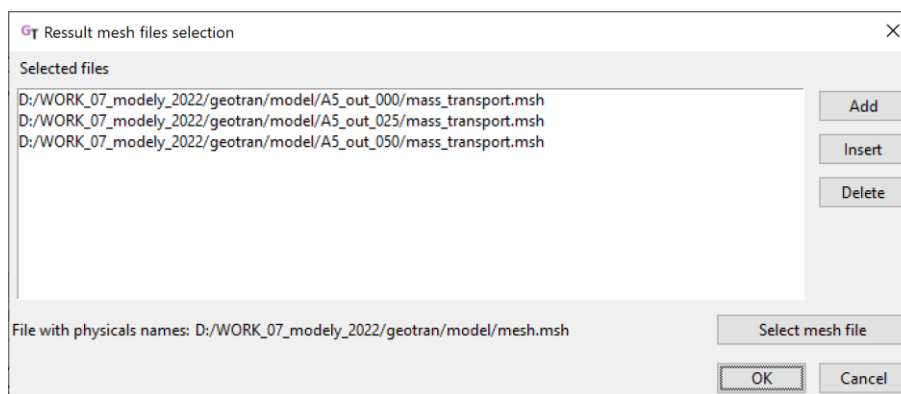
- *Select Transport Output Files*
- *Load all Transport Output Data*
- *Load selected Transport output Data*
- *Clear loaded output data*
- *Point Grids Configuration*
- *Add Depth Grid*
- *Add Level Grid*
- *Show/Delete Grids*
- *Add Element Set from Depth Range*
- *Add Element Set from Level Range*
- *Add Element Set from Regions Group*
- *Show/Delete Element Sets*
- *Options*

### 5.1 Volba *Select Transport Output Files*

Po výběru této volby je uživateli zobrazeno dialogové okno, které umožňuje výběrem z disku vytvořit seznam v dalších navazujících akcích zpracovávaných souborů MSH souborů s výsledky výpočtu transportu (Obr. 7). Software předpokládá, že se jedná o výstupní soubory několika po sobě následujících fází jednoho simulačního výpočtu. Mimoto je možné v tomto dialogovém okně zadat MSH soubor s výpočetní sítí, který zároveň obsahuje informace o pojmenování jednotlivých regionů sítě (výstupní soubory Flow123d do verze 3.9 tuto informaci neobsahují).

Po ukončení výběru souborů je zobrazeno dialogové okno umožňující zadat časové jednotky (viz výše na Obr. 3), ve kterých jsou jednak načítaná data a jednak následně realizované výstupní sestavy.

Následně jsou z jednotlivých souborů načteny informace o síti. Načítání většího množství a/nebo větších souborů může být časově náročné. Po dobu načítání program nevypisuje informace o postupu zpracování.



Obr. 7 Dialogové okno umožňující sestavení sady vstupních souborů s výstupy transportu

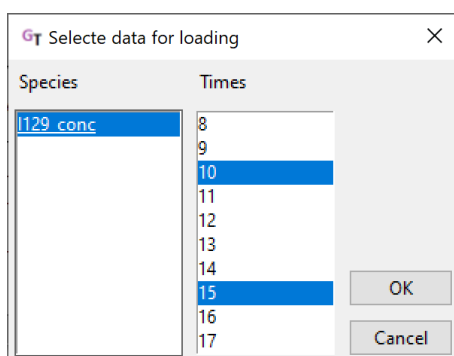


## 5.2 Volba *Load All Transport Output Data*

Po výběru této volby dojde k načtení všech datových polí ze souborů vybraných prostřednictvím předešlé volby *Select Transport Output Files*. Načítání většího množství a/nebo větších souborů i v závislosti počtu datových polí v jednotlivých souborech může být časově náročné. Doba zpracování je podstatně delší než v případě načítání sítí ze souborů. Po dobu načítání program nevypisuje informace o postupu zpracování.

## 5.3 Volba *Load Additional Selected Transport Output Data*

Tato volba poskytuje obdobnou činnost jako *Load all Transport Output Data* s tím, že uživateli je umožněno vybrat/konfigurovat, jaká datová pole budou ze souborů načtena (Obr. 8). Volba je vhodná v případě, že má uživatel jasný záměr následně zpracovávat data pouze vybraných transportovaných látek/specií a/nebo pouze ve vybraných časech. Dle volby jsou následně data načtena ze souborů.



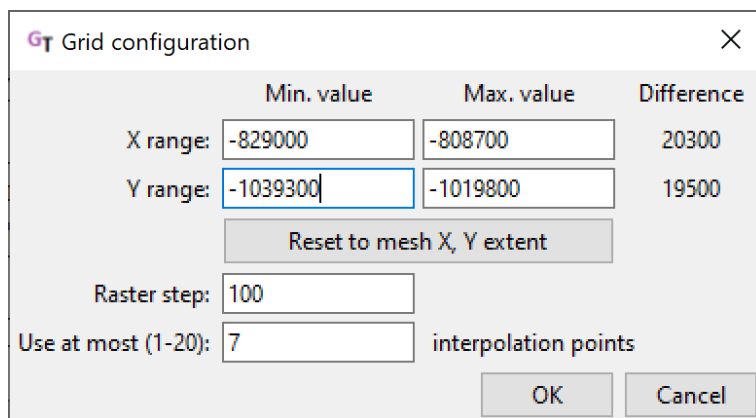
Obr. 8 Výběr dat pro čtení datových polí ze MSH souborů

## 5.4 Volba *Clear Loaded Output Data*

Po této volbě jsou dříve načtená data odstraněna z paměti. Uživatel je požádán o potvrzení této akce. Jsou odstraněna pouze načtená datová pole a nikoli všechny sítě z dříve vybraných souborů s výsledky transportu. Uživatel může dále pokračovat načtením jiné skupiny datových polí ze souboru atd.

## 5.5 Volba *Point Grids Configuration*

Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje zadat v jakém rozsahu a s jakou podrobností (krokem) budou vytvářeny dále přidávané datové gridy (ať se jedná o grid v zadané hloubce nebo v zadané nadmořské výšce). Po výběru jsou vytvářené datové struktury pro vytváření sad rastrových dat.



Obr. 9 Konfigurace vytvářených rastrových dat – rozsah souřadnic, krok rastru

## 5.6 Volba Add Depth Grid

Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje zadat hloubku (hloubka od úrovně terénu) a jméno nově vytvářeného gridu. Pokud není zadáno jméno, bude vygenerováno implicitní označení gridu.

Obr. 10 Parametry nově vytvářeného gridu

## 5.7 Volba Add Level Grid

Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje zadat úroveň (z-souřadnici / úroveň nadmořské výšky) a jméno nově vytvářeného gridu. Pokud není zadáno jméno, bude vygenerováno implicitní označení gridu.

Obr. 11 Parametry nově vytvářeného gridu

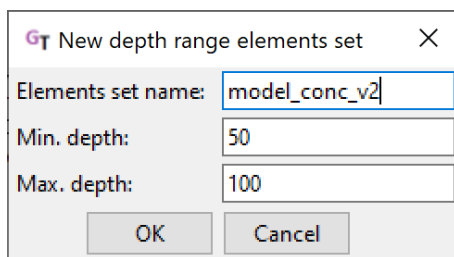
## 5.8 Volba Show/Delete Grids

Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, ve kterém je zobrazen seznam všech dříve definovaných/vytvořených gridů. Vybraný grid je možné ze seznamu odstranit. Manipulaci s daty (datovými rastry) vytvořených na základě definovaných gridů jsou pak dostupné v menu „Transport Output Reports“ (kapitola 6).

Obr. 12 Dialogové okno zobrazující seznam definovaných gridů s možností odstranění vybraného gridu

## 5.9 Volba Add Element Set from Depth Range

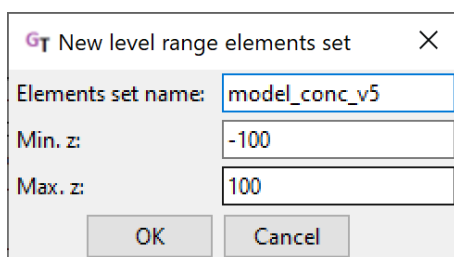
Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje definovat nově přidávanou množinu elementů (elementů výpočetní sítě) hloubkovým rozsahem (hloubka od povrchu /úrovně terénu). Uživatel může zadat název definované množiny elementů, pokud toto pole zůstane prázdné, je generováno implicitní pojmenování.



Obr. 13 Dialogové okno pro definici množiny elementů prostřednictvím rozsahu hloubek

### 5.10 Volba Add Element Set from Level Range

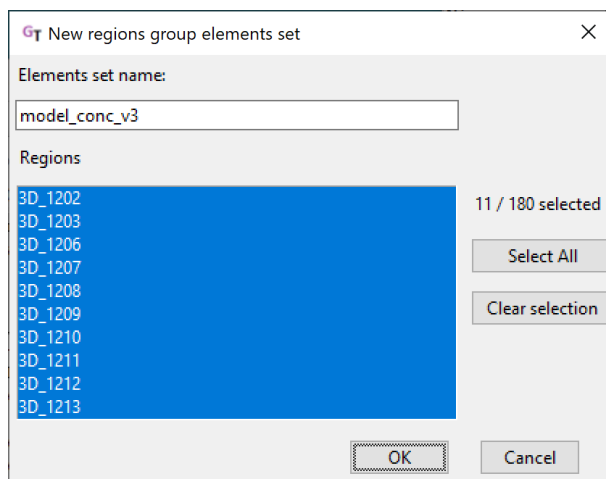
Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje definovat nově přidávanou množinu elementů (elementů výpočetní sítě) rozsahem z souřadnic (odpovídá zpravidla nadmořské výšce). Uživatel může zadat název definované množiny elementů, pokud toto pole zůstane prázdné, je generováno implicitní pojmenování.



Obr. 14 Dialogové okno pro definici množiny elementů prostřednictvím rozsahu zetových souřadnic

### 5.11 Volba Add Element Set from Regions Group

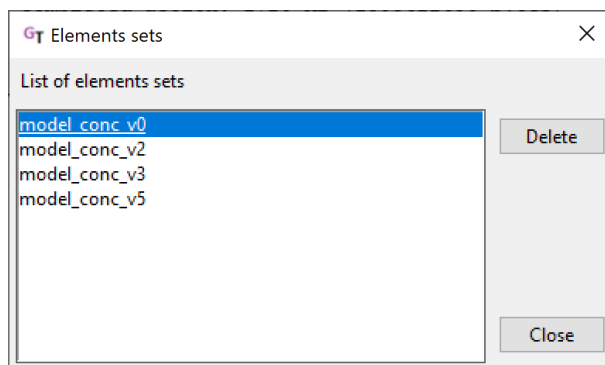
Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, které umožňuje definovat nově přidávanou množinu výčtem/seznamem regionů sítě. Uživatel může zadat název definované množiny elementů, pokud toto pole zůstane prázdné, je generováno implicitní pojmenování.



Obr. 15 Dialogové okno pro definici množiny elementů prostřednictvím seznamu regionů sítě

### 5.12 Volba Show/Delete Element Sets

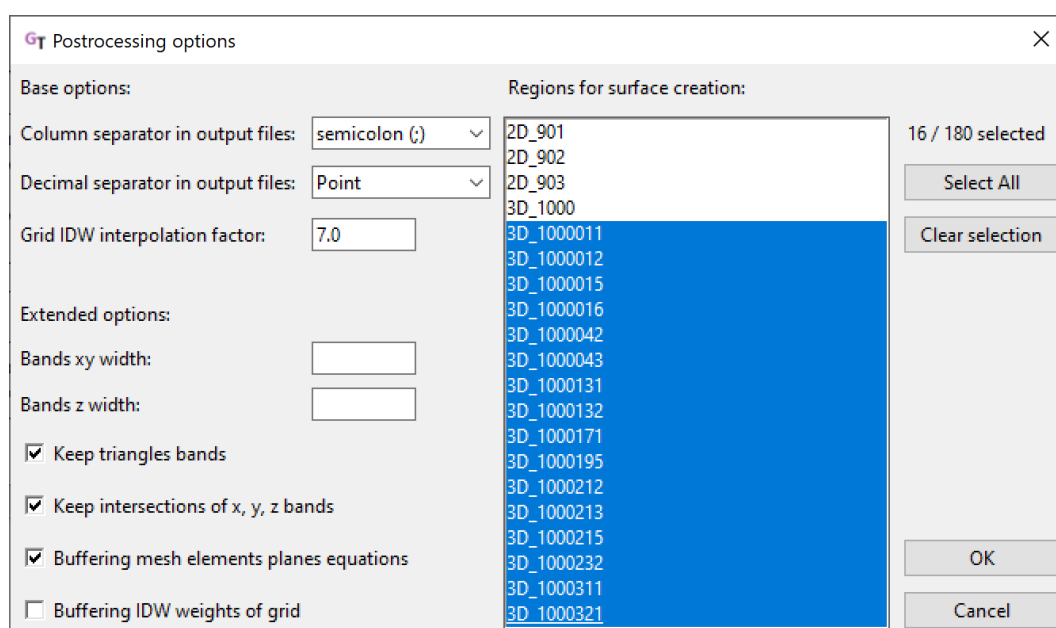
Po této volbě je zobrazeno dialogové okno, ve kterém je zobrazen seznam všech dříve definovaných/vytvořených množin elementů (množiny elementů definované hloubkovým rozsahem definované rozsahem z souřadnic, definované výčtem regionů sítě). Vybranou množinu elementů je možné ze seznamu odstranit. Manipulaci s daty vytvořenými na základě definovaných množin elementů jsou pak dostupné v menu „Transport Output Reports“ (kapitola 6).



Obr. 16 Seznam definovaných množin elementů s možností odstranění vybrané množiny/množin

### 5.13 Volba Options

Po této volbě je zobrazeno dialogové okno (Obr. 17), které umožňuje nastavit volby dílčích parametrů používaných při operacích aktivovaných volbami v menu „Transport Output Files Managing“.



Obr. 17 Nastavení základních parametrů souvisejících se zpracováním výstupních souborů modelů transportu

## 6 Menu „Transport Output Reports“

Menu obsahuje volby, které umožňují vybrat sadu souborů ke zpracování. V tomto případě se jedná o soubory, které obsahují výsledné hodnoty koncentrací látek v jednotlivých časech celé simulace. Soubory musí být formátu MSH. Program umožňuje analyzovat data v určených gridech nebo množinách elementů. Zde v tomto menu jsou dále volby, které umožňují definovat parametry analyzovaných gridů a množin elementů.

Jednotlivé analýzy a reporty jsou vytvářené na podkladě dříve načtených dat (výstupů transportu) a následně definovaných gridů a množin elementů – jedná se o akce provedené prostřednictvím voleb v menu *Transport Output Files Managing* (kapitola 5).

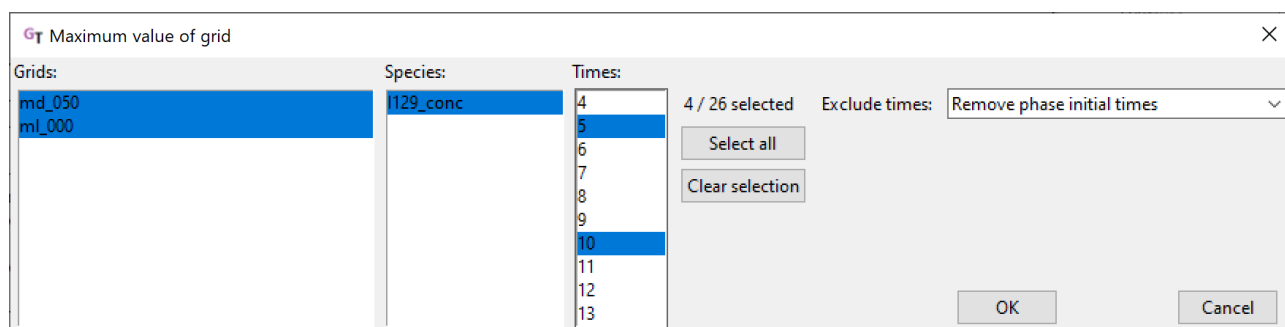
Menu *Transport Output Reports* obsahuje následující položky/volby:

- *Maximum at the Element Set*
- *Maximum Difference between Element Sets*
- *Quantile at the Element Set*
- *Maximum at the Grid*
- *Maximum Difference between Grids*

- *Area over Limit at the Grid*
- *Quantile at the Grid*
- *Save Grid as Text File*
- *Save Grid Difference as Text File*
- *Save Grid as Text File by Percentiles Form*
- *Save Grid Difference as Text File by Percentiles Form*
- *Save Grid as Image*

Prostřednictvím každé z uvedených voleb v tomto menu má uživatel možnost generovat výstupní sestavu obsahující zvolené informace analyzované z načtených výsledků transportu. Před vytvořením výstupní sestavy je nutno zvolit její rozsah – pro které rastry nebo množiny elementů má být analýza provedena, které látky a které simulační časy mají být do analýzy zahrnuty, popřípadě další parametry vymezující, co zahrnou do analýzy, popřípadě v jaké podobě má být výstup dané akce. Pro parametrizaci jednotlivých akcí obsažených v tomto menu je zobrazeno dialogové okno (Obr. 18), jehož rozhraní je do značné míry společné pro všechny výše uvedené volby.

Výsledky jednotlivých akcí jsou ukládány do diskových souborů ať už textových nebo grafického formátu. Ve většině případů (prvních sedm voleb) je výstupem příslušné akce textový soubor formátu CSV obsahující množinu dat dle konfigurace uživatele. Ukázka zobrazení dat jednoho z výstupů v MS EXCEL je na Obr. 19. Volby „Save Grid ... as Text File“ umožňují vystoupit rastrová data vybraných gridů do diskových souborů formátu ASC pro následné zpracování například v SW SURFER nebo GIS softwarech.



Obr. 18 Dialogové okno pro konfiguraci rozsahu dat ve výstupním souboru

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1			md_050	md_050	md_050	md_050	md_050	md_050	ml_000	ml_000	ml_000	ml_000	ml_000	ml_000
2			I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc	I129_conc
3	phase	time [1000	c (max)	xi	yi	x [m]	y [m]	z [m]	c (max)	xi	yi	x [m]	y [m]	z [m]
4	0	0	0	0	52	-829091.5	-1028914.2	492.2	0	0	52	-829091.5	-1028914.2	0.0
5	0	1	1427.43	59	55	-817291.5	-1028314.2	330.6	112491	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
6	0	2	3450.88	59	55	-817291.5	-1028314.2	330.6	189518	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
7	0	3	5071.55	59	55	-817291.5	-1028314.2	330.6	226024	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
8	0	4	6358.69	58	57	-817491.5	-1027914.2	326.6	241509	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
9	0	5	8403.82	58	57	-817491.5	-1027914.2	326.6	247813	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
10	0	6	10166.7	58	57	-817491.5	-1027914.2	326.6	250331	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0
11	0	7	11619.4	58	57	-817491.5	-1027914.2	326.6	251330	56	54	-817891.5	-1028514.2	0.0

Obr. 19 Ukázka zobrazení části dat jednoho z výstupů v MS EXCEL

## 6.1 Volba *Maximum at the Element Set*

Po výběru, pro které existující množiny elementů, látky a časy jsou do zvoleného diskového textového souboru formátu CSV o hodnotách a pozicích maximálních hodnot koncentrací.

## **6.2 Volba *Maximum Difference between Element Sets***

Předmětem analýzy jsou rozdíly maxim pro vybrané množiny elementů, látky a simulační časy.

## **6.3 Volba *Quantile at the Element Set***

Předmětem analýzy jsou kvantily koncentrací vybraných látek pro vybrané časy a množiny elementů. Uživatel může v dialogovém boxu ve vstupním poli „Quantiles“ zadat více hodnot navzájem oddělených mezerou.

## **6.4 Volba *Maximum at the Grid***

Po výběrů, pro které existující gridy, látky a časy jsou do zvoleného diskového textového souboru formátu CSV o hodnotách a pozicích maximálních hodnot koncentrací.

## **6.5 Volba *Maximum Difference between Grids***

Předmětem analýzy jsou rozdíly maxim koncentrací pro vybrané gridy, látky a simulační časy.

## **6.6 Volba *Area over Limit at the Grid***

Předmětem analýzy je rozsah plochy gridu, na které koncentrace vybrané látky přesahuje zadaný limit. Uživatel může v dialogovém boxu ve vstupním poli „Limites“ zadat více hodnot navzájem oddělených mezerou. Vyhodnocené plochy jsou závislé na podrobnosti dat v jednotlivých gridech (tj. jemnosti/kroku rastru).

## **6.7 Volba *Quantile at the Grid***

Předmětem analýzy jsou kvantily koncentrací vybraných látek pro vybrané časy a gridy. Uživatel může v dialogovém boxu ve vstupním poli „Quantiles“ zadat více hodnot navzájem oddělených mezerou.

## **6.8 Volba *Save Grid as Text File***

Pro vybranou konfiguraci je do diskových souborů uložena sada gridů ve formátu ASC. Výstupem je obecně sada diskových souborů. Jména souborů jsou generována automaticky dle vybrané konfigurace, uživatel má možnost zadat „prefix“ jméno souborů a adresář, do kterého budou sobory uloženy.

## **6.9 Volba *Save Grid Difference as Text File***

Umožňuje do diskových souborů formátu ASC uložit data rozdílů koncentrací na vybraných gridech. Výstupem je obecně sada diskových souborů. Jména souborů jsou generována automaticky dle vybrané konfigurace, uživatel má možnost zadat „prefix“ jméno souborů a adresář, do kterého budou sobory uloženy.

## **6.10 Volba *Save Grid as Text File by Percentiles Form***

Obdoba předchozích dvou voleb. Do diskových souborů formátu ASC jsou uložena data v podobě percentilů. Výstupem je obecně sada diskových souborů. Jména souborů jsou generována automaticky dle vybrané konfigurace, uživatel má možnost zadat „prefix“ jméno souborů a adresář, do kterého budou sobory uloženy.

## **6.11 Volba *Save Grid Difference as Text File by Percentiles Form***

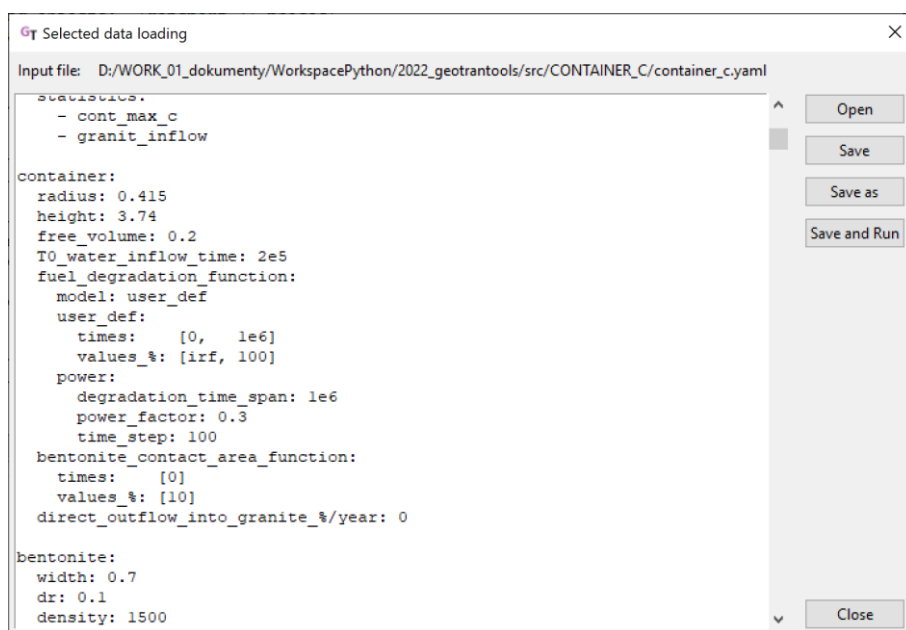
V exportovaných souborech jsou rozdílové hodnoty vybraných gridů v podobě percentilů. Výstupem je obecně sada diskových souborů. Jména souborů jsou generována automaticky dle vybrané konfigurace, uživatel má možnost zadat „prefix“ jméno souborů a adresář, do kterého budou sobory uloženy.

## 6.12 Volba *Save Grid as Image*

Uživatel v následně zobrazeném dialogovém okně volí rozsah výstupů. Rastrová data z jednotlivých gridů je možno uložit do souborů formátu PNG, BMP nebo JPG. Výstupem je obecně sada diskových souborů. Jména souborů jsou generována automaticky dle vybrané konfigurace, uživatel má možnost zadat „prefix“ jméno souborů a adresář, do kterého budou soubory uloženy.

## 7 Menu „Models“

Menu v aktuální verzi programu obsahuje jedinou volbu „*Container*“, která umožňuje spustit výpočet transportu radionuklidů z ukládacího kontejneru do okolního prostředí. Celý model byl původně vytvářen nezávisle na grafickém uživatelském prostředí, základní rozhraní k tomuto modelu je tvořeno textovým souborem ve formátu \*.YAML (konfigurační soubor modelu). Po volbě položky „*Container*“, je uživateli zobrazeno dialogové okno (Obr. 20), ve kterém je možné zadat konfigurační soubor modely výběrem z disku, upravit vstupní parametry modelu, nově editovaný obsah uložit, spustit výpočet modelu. Konfigurační soubor obsahuje několik sekcí, ve kterých je možné definovat časové parametry výpočtu, procesy zahrnuté do výpočtu, jaké výstupní kvantitativy a do jakého souboru mají být po výpočtu uloženy, parametry kontejneru, parametry obalové bentonitové vrstvy, parametry okolního horninového prostředí obklopujícího obalový soubor, seznam a parametry izotopů.



Obr. 20 Uživatelské rozhraní pro editaci a spuštění výpočtu modelu ukládacího kontejneru

## 8 Reference

Březina J., Stebel J., Flanderka D., Exner P. (2022): Flow123d, version 3.9.0, User Guide and Input Reference. Liberec (online: [https://flow.nti.tul.cz/packages/3.9.0/flow123d\\_3.9.0\\_doc.pdf](https://flow.nti.tul.cz/packages/3.9.0/flow123d_3.9.0_doc.pdf))

Geuzaine C., Remacle J. F.(2009): Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. International Journal for Numerical Methods in Engineering 79(11), pp. 1309-1331, 2009.

Geuzaine C., Remacle J. F.(2022): GMSH, Gmsh Reference Manual, The documentation for Gmsh 4.11.0 (online: <https://gmsh.info/doc/texinfo/gmsh.html>)

Paraview. Paraview User Guide. (online: <https://docs.paraview.org/en/latest/>)