

Instrukcja obsługi programu

γS

Energia

dla Windows 95 / 98 / NT / ME / 2000 / XP / VISTA itd.

Przedmowa*

Instrukcja ta opracowana została przez nasz Zakład w celu umożliwienia Wam właściwego wykorzystania programu “Energia” – zgodnie z jego przeznaczeniem. Zapoznanie z jej treścią personelu bezpośrednio zatrudnionego przy instalacji, uruchomieniu i eksploataowaniu programu to podstawowy obowiązek Zakładu otrzymującego program.

Dokładne wykonywanie wszystkich naszych zaleceń ujętych niniejszą instrukcją bezwzględnie wpłynie dodatnio na wskazania oraz żywotność programu.

Życzymy Wam jak najlepszej pracy na otrzymanym programie “Energia”.

Elektronika Jądrowa

Kraków

*Napisana na wzór “Przedmowy” do instrukcji obsługi twardościomierza “ŁUCZNIK” z 1961 roku produkcji Zakładów Metalowych im. Gen. Waltera w Radomiu

Przeznaczenie

Program “Energia” przeznaczony jest do obliczania swobodnej energii powierzchniowej (SEP) ciał stałych na podstawie wartości kątów zwilżania kropli cieczy pomiarowych spoczywających na powierzchni badanego materiału. Energię powierzchniową oblicza się metodami Owensa - Wendta i Van Ossa – Gooda.

Dane wejściowe to ciąg plików tekstowych z symbolami cieczy pomiarowych i wartościami ich kątów zwilżania.

Dane wyjściowe to plik tekstowy z wyliczonymi wartościami SEP wraz z jej składowymi oraz z informacjami pomocniczymi (nazwy metod, symbole cieczy pomiarowych, odchylenia standardowe wyników, komentarze operatorów).

Obliczenie swobodnej energii powierzchniowej osiąga się przez :

- odrzucenie elementów skrajnych ze zbiorów wartości kątów zwilżania danymi cieczami
- wybranie rodzaju metody obliczeniowej
- wybranie typów cieczy używanych przez daną metodę pomiarową
- drobne skorygowanie wartości kątów zwilżania przy braku rozwiązania układu równań danej metody

Wyniki obliczeń są zapisywane w pliku dyskowym i drukowane.

Porządek czynności

Przeprowadzenie typowych obliczeń SEP składa się z następujących etapów :

1. wczytanie ciągu wartości kątów z plików wejściowych
2. odrzucenie wartości skrajnie odstających dla poszczególnych cieczy pomiarowych
3. wybranie metody pomiarowej
4. wybranie zestawu cieczy dla danej metody

5. ewentualne dopasowanie wartości kątów, by uzyskać rozwiązanie układu równań metody
6. zaakceptowanie i dołączenie rezultatów obliczeń SEP do zbioru wyników
7. zapisanie zbioru wyników obliczeń do pliku dyskowego
8. wydrukowanie tabeli z wynikami obliczeń

Punkty od 3 do 6 wykonuje się dla każdej metody i każdego zestawu cieczy oddzielnie.

Cechy użytkowe programu

- maks. ilość wczytanych wartości kątów zwilżania: limitowana pamięcią operacyjną komputera
- używane do obliczeń SEP metody :
 - Owensa – Wendta
 - Van Ossa – Gooda
- wartości SEP i poszczególnych ich składowych dla cieczy pomiarowych stosowanych w metodzie Owensa - Wendta

Ciecz pomiarowa	γ_L [mJ/m ²]	γ_L^d [mJ/m ²]	γ_L^p [mJ/m ²]
Woda	72,8	21,8	51,0
Gliceryna	64,0	37,0	19,0
Formamid	58,0	39,0	19,0
Dijodometan	50,8	48,5	2,3
α -Bromonaftalen	44,6	43,7	0,9

- Wartości SEP i poszczególnych ich składowych dla cieczy pomiarowych stosowanych w metodzie Van Ossa - Gooda

$$\gamma_L^+ / \gamma_L^- = 1$$

Ciecz pomiarowa	γ_L [mJ/m ²]	γ_L^{LW} [mJ/m ²]	γ_L^{AB} [mJ/m ²]	γ_L^+ [mJ/m ²]	γ_L^- [mJ/m ²]
Woda	72,8	21,8	51,0	25,5	25,5
Gliceryna	64,0	34,0	30,0	3,92	57,4
Formamid	58,0	39,0	19,0	2,28	39,6
Dijodometan	50,8	50,8	0	0	0
α -Bromonaftalen	44,4	43,5	0	0	0

- graficzne przedstawienie na osi liczbowej rozkładu danych wejściowych każdej cieczy
- graficzne przedstawienie na osi liczbowej wartości średniej i zakresu odchylenia standardowego
- łatwa ocena wzrokowa danych i ruchome markery do szybkiego odrzucania wartości skrajnych
- bieżące obliczanie i wyświetlanie dla danej metody wartości SEP wraz z jej składowymi
- bieżące obliczanie i wyświetlanie odchyleń standardowych dla SEP i jej składowych

- ruchome suwaki do zmiany wartości kątów zwilżania w granicach ich odchyłeń standardowych celem uzyskania rozwiązania układu równań danej metody pomiarowej
- możliwość dopisywania dowolnych komentarzy do zbioru wyników
- zapis rezultatów obliczeń SEP w jawnej postaci ASCII, otwieranej dowolnym edytorem tekstowym
- wygodny wydruk tabel analizy na każdej drukarce zainstalowanej w systemie Windows
- możliwość zainstalowania i pracy programu na dowolnej ilości komputerów użytkownika bez żadnych ograniczeń licencyjnych

Instalacja programu

Program w postaci pliku `ENERGIA.EXE` kopiuje do dowolnego katalogu na dysku komputera. Do tego samego katalogu należy skopiować też plik `Energia.PDF` zawierający niniejszą instrukcję obsługi.

Następnie należy utworzyć na pulpicie skrót do `ENERGIA.EXE` i ustawić we “Właściwościach” domyślny katalog roboczy, w którym będą przechowywane pliki danych wejściowych i wyjściowych.

Obsługa programu

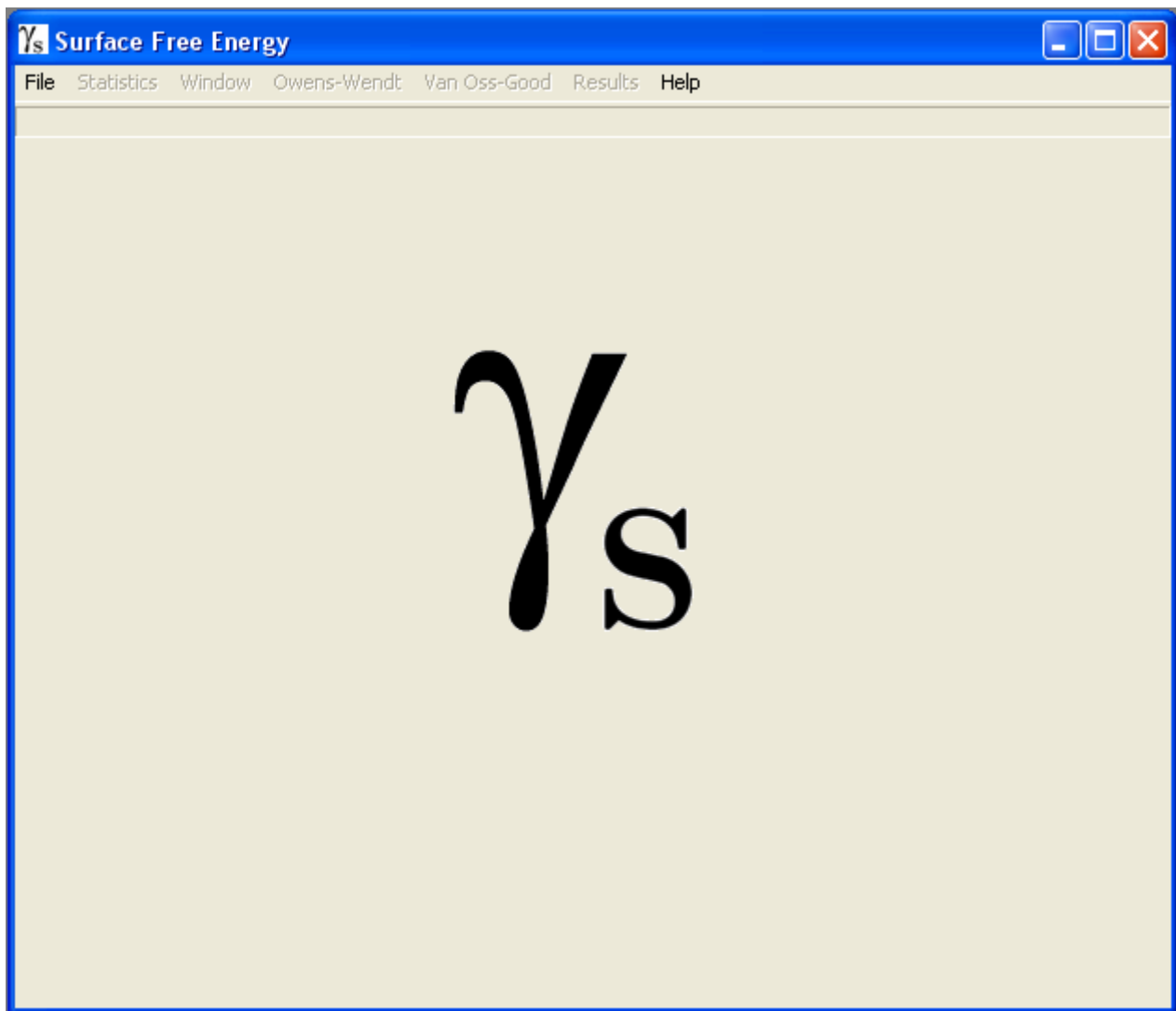
Program obsługuje się wybierając potrzebne opcje z menu myszką lub klawiaturą. Każda opcja ma tzw. “gorący klawisz”, który w połączeniu z klawiszem *ALT* szybko uruchamia żadaną akcję.

Niektóre opcje w podmenu są zaznaczone **pogrubioną czcionką**. Są to tzw. “opcje domyślne”. Po szybkim, dwukrotnym kliknięciu w opcję z menu głównego zostanie z podmenu wybrana opcja domyślna.

Prócz tego istnieją tzw. skróty klawiszowe, najczęściej klawisz *Ctrl* i jakaś litera. Przyspiesza to znacznie dostęp do najczęściej używanych funkcji programu.

Zapamiętanie i używanie tych skrótów zwiększa wydajność pracy i przyczynia się do nabrania biegłości w obsłudze programu. Zapobiega także zmęczeniu ręki użytkownika, a co za tym idzie przyspiesza uzyskiwanie wyników.

Po uruchomieniu programu `ENERGIA` na ekranie pojawia się formularz główny. Jego menu główne uruchamia proces wczytywania danych wejściowych, przeprowadzania obliczeń i zapisywania ich rezultatów :



1. File --> Load Data *Ctrl+O* - wczytywanie z plików wartości kątów zwilżania

Otwiera się standardowe okienko windowsowe do wyboru plików. Domyślnym rozszerzeniem nazwy pliku jest .CAN

Pliki tekstowe z tym rozszerzeniem tworzone są przez program *Kropla*. Oto przykładowy plik :

```

Contact Angles Mensuration

Comment : Test demonstracyjny
Operator : Waclaw Musial
Date :    23.11.2009    11:53:30
=====
Nr    LIQUID          LEFT    AVERAGE    RIGHT
-----
 1  H2O              117.06   117.06    -----
 2  H2O              109.22   106.63    104.05
 3  H2O              106.01   107.94    109.86
-----
                Contact Angle Average = 110.54    Standard Deviation = 4.639
=====
 4  Formamide       79.36    80.33     81.29
 5  Formamide       84.88    86.44     88.01
 6  Formamide       86.80    86.80     86.81
-----
                Contact Angle Average = 84.52    Standard Deviation = 2.972
=====
 7  Diiodimethane   95.74    93.17     90.60

```

8	Diiodimethane	91.60	93.38	95.15
9	Diiodimethane	96.93	97.07	97.22

Contact Angle Average = 94.54 Standard Deviation = 1.792

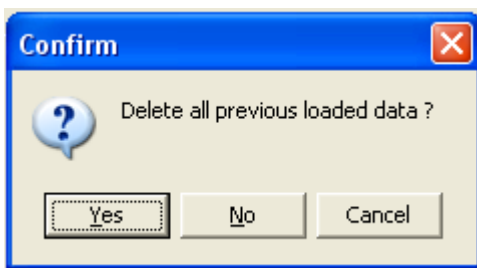
Możliwe jest też wczytywanie plików pochodzących z obcych źródeł, byle je odpowiednio sformatować. Poniżej znajdują się te same dane, tylko skompresowane do minimalnych rozmiarów. Jak widać informacje o wartości średniej kąta θ dla każdej kropli i dla każdej cieczy są przy wczytywaniu ignorowane i można ich nie podawać :

Contact Angles Mensuration

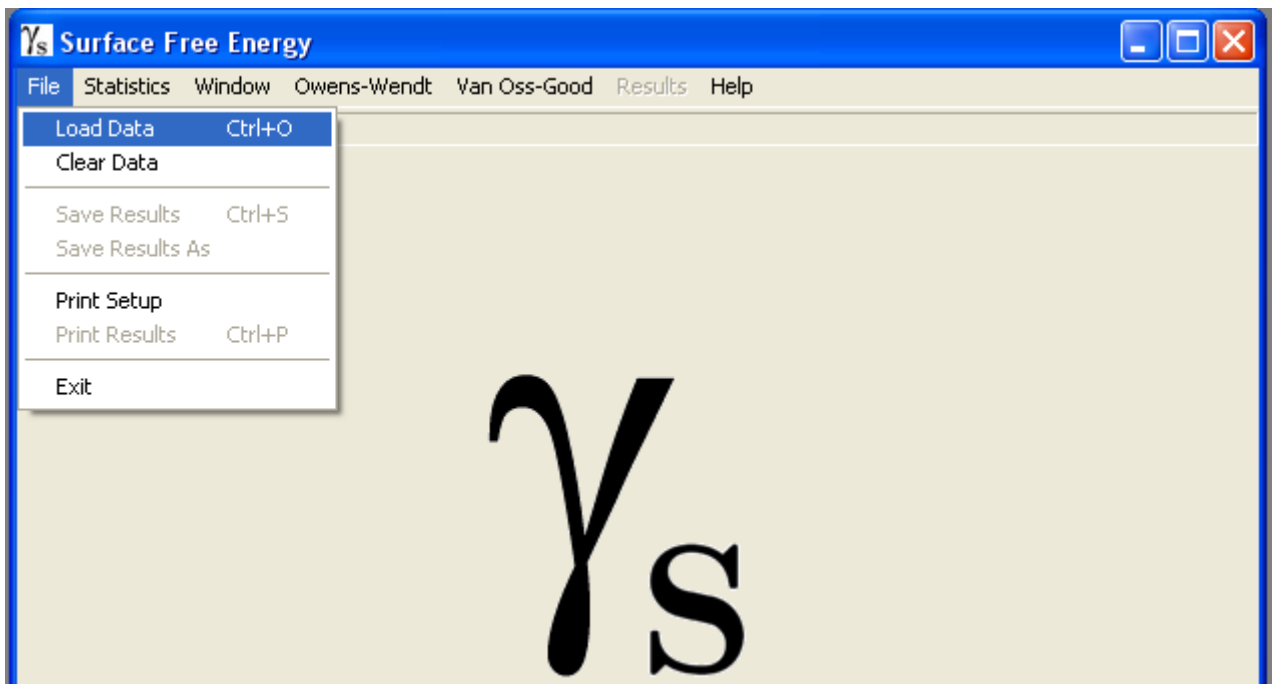
Comment : Test demonstracyjny
 Operator : Waclaw Musial
 Date : 23.11.2009 11:53:30
 te 4 linie
 mogą zawierać cokolwiek,
 bo są ignorowane
 przy wczytywaniu

H2O	117.06
H2O	109.22
H2O	106.01
H2O	104.05
H2O	109.86
Formamide	79.36
Formamide	84.88
Formamide	86.80
Formamide	81.29
Formamide	88.01
Formamide	86.81
Diiodimethane	95.74
Diiodimethane	91.60
Diiodimethane	96.93
Diiodimethane	90.60
Diiodimethane	95.15
Diiodimethane	97.22

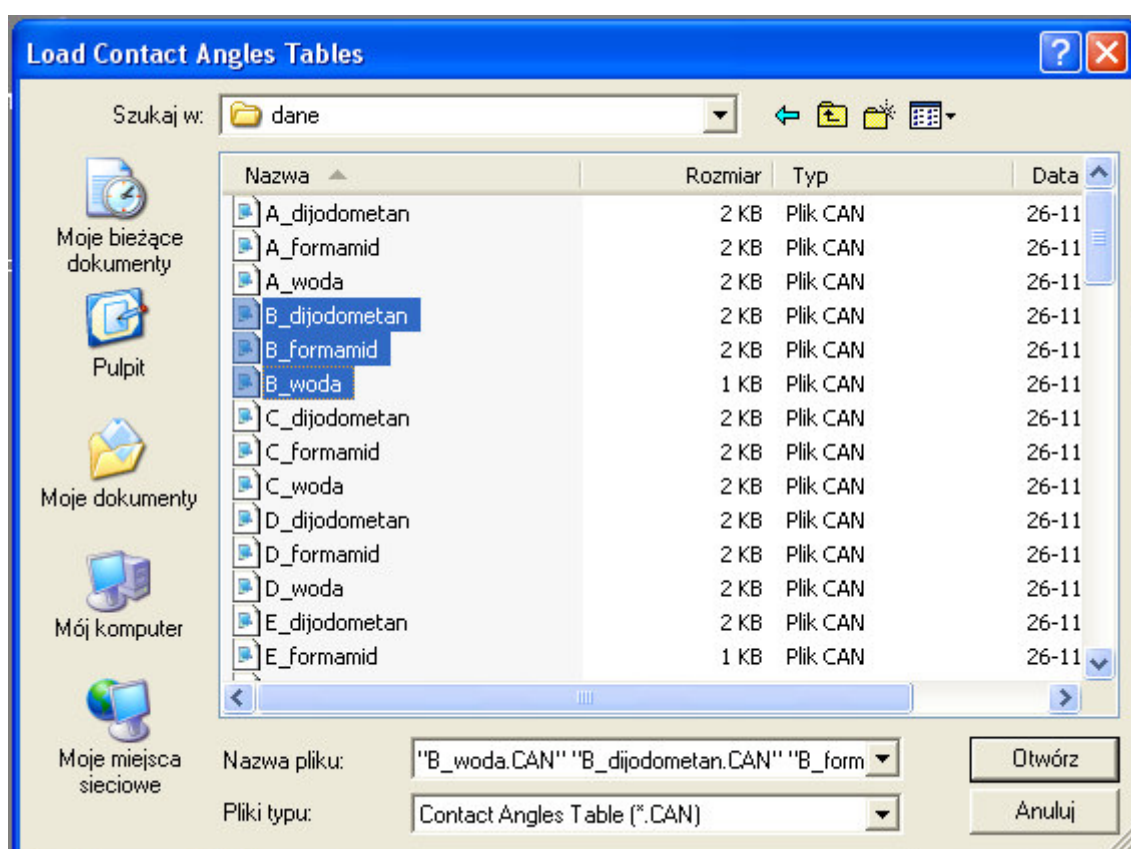
Program NIE sprawdza, czy plik przeznaczony do wczytania był już przedtem wczytany. Natomiast zawsze, gdy jakieś dane już tkwią w programie to pojawia się propozycja ich usunięcia.



Użytkownik musi zachować czujność i pamiętać, co i kiedy wczytywał.



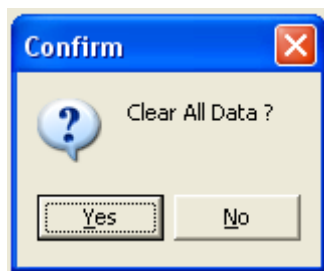
Dla sprawniejszego ładowania danych można od razu zaznaczyć ciąg nazw plików do wczytania (tzw. multiselect) :



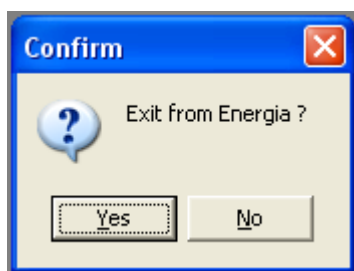
Z wczytanych plików *.CAN wyluskiwane są symbole cieczy pomiarowych i wartości ich kątów zwilżania. Wartości te są dodawane do zbiorów dla poszczególnych cieczy i tworzą *Statystykę*. Wczytanych wartości nie da się pojedynczo usunąć z programu, można tylko usunąć wszystkie naraz (*File* --> *Clear Data*).

2. File --> Clear Data - usunięcie z pamięci programu wszelkich wczytanych wartości

Ta czynność musi być wykonana, jeśli chcemy rozpocząć obliczenia od początku dla innej próbki. Nie ma możliwości selektywnego usuwania danych. Usunięcie nastąpi po pozytywnej odpowiedzi na pytanie :



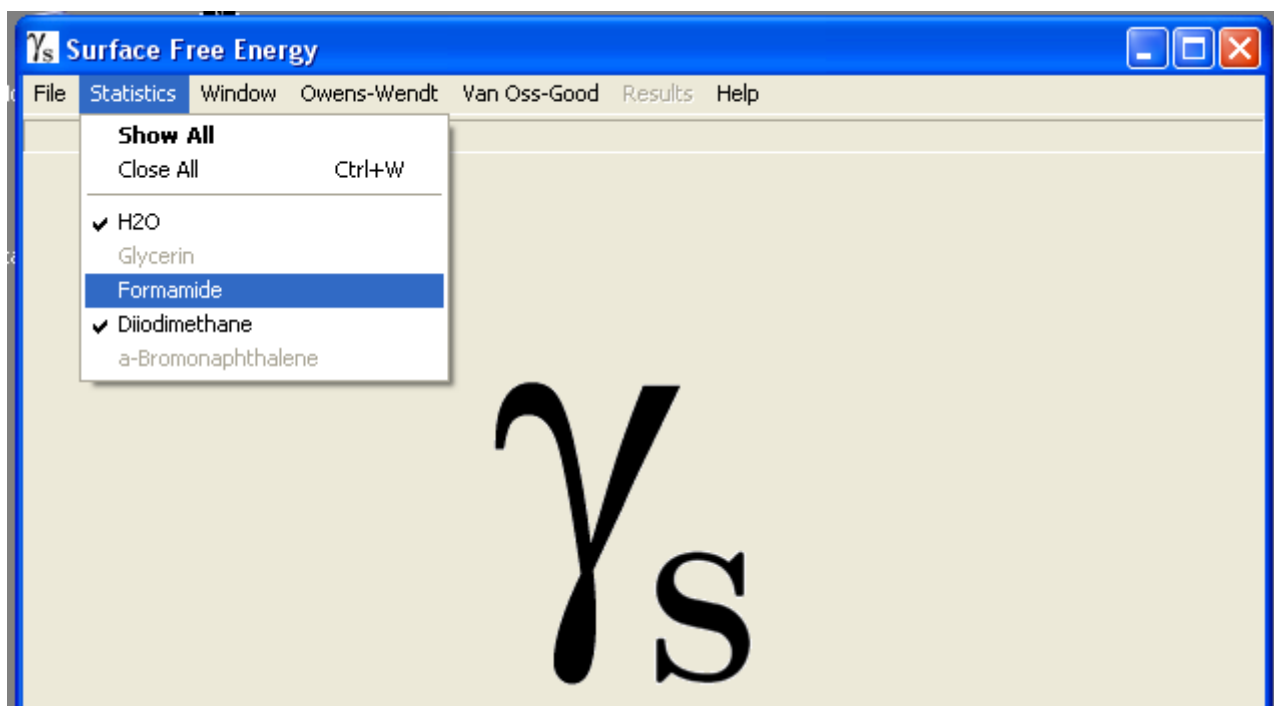
3. File --> Exit - zakończenie pracy programu



Zakończenie pracy następuje dopiero, gdy operator potwierdzi swą wolę. Daje to ostatnią szansę na zapisanie rezultatów pracy do pliku.

4. Statistics - zarządzanie okienkami z rozkładami statystycznymi danych (otwieranie i zamykanie).

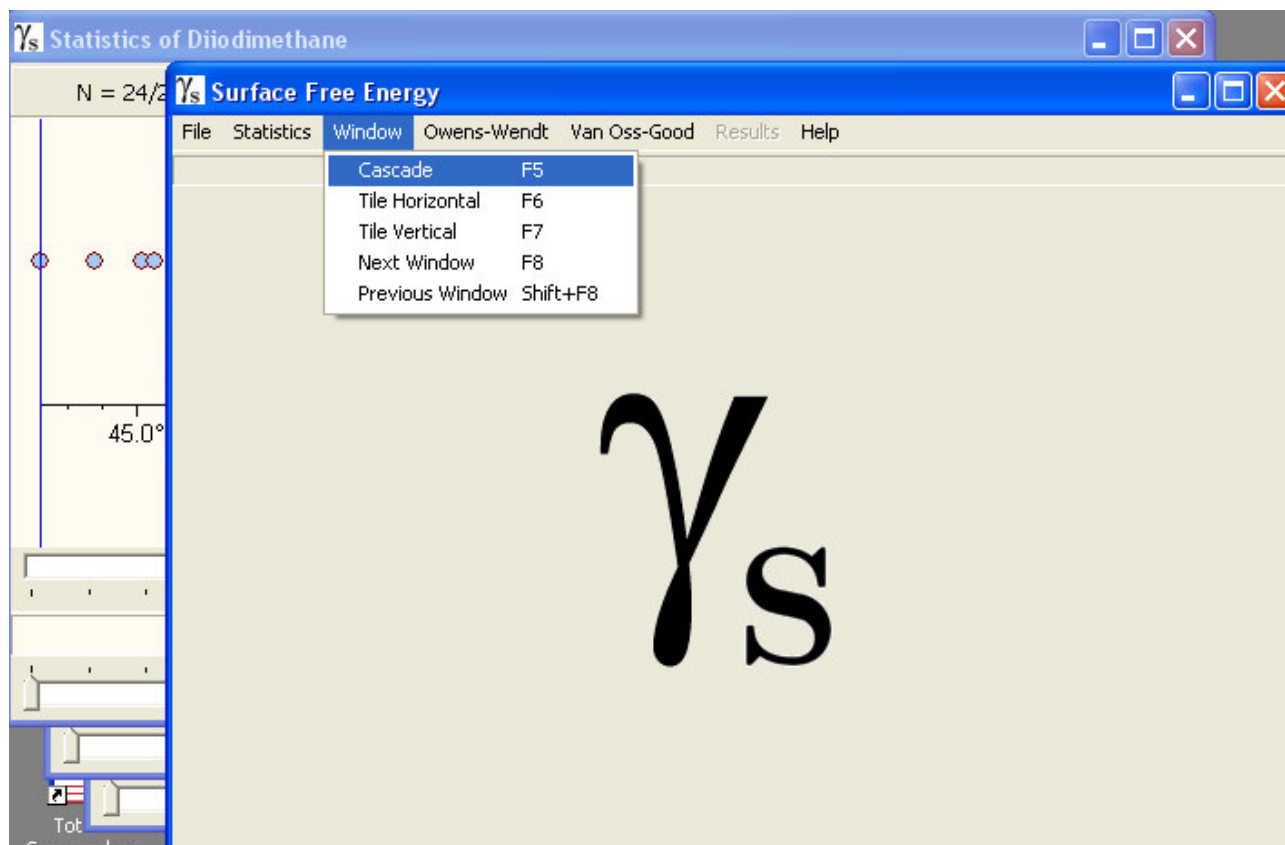
Każde wczytane dane są segregowane pod względem przynależności do poszczególnych cieczy pomiarowych. Ich rozkłady statystyczne pojawiają się w oddzielnych okienkach. Okienka te można pojedynczo i grupowo dowolnie zamykać i otwierać. Dla łatwiejszego nimi manipulowania służy grupa poleceń Statistics.



Okienka aktualnie otwarte mają znaczek ptaszka przy swym symbolu.

5. Window - zarządzanie okienkami z rozkładami (ustawianie na ekranie).

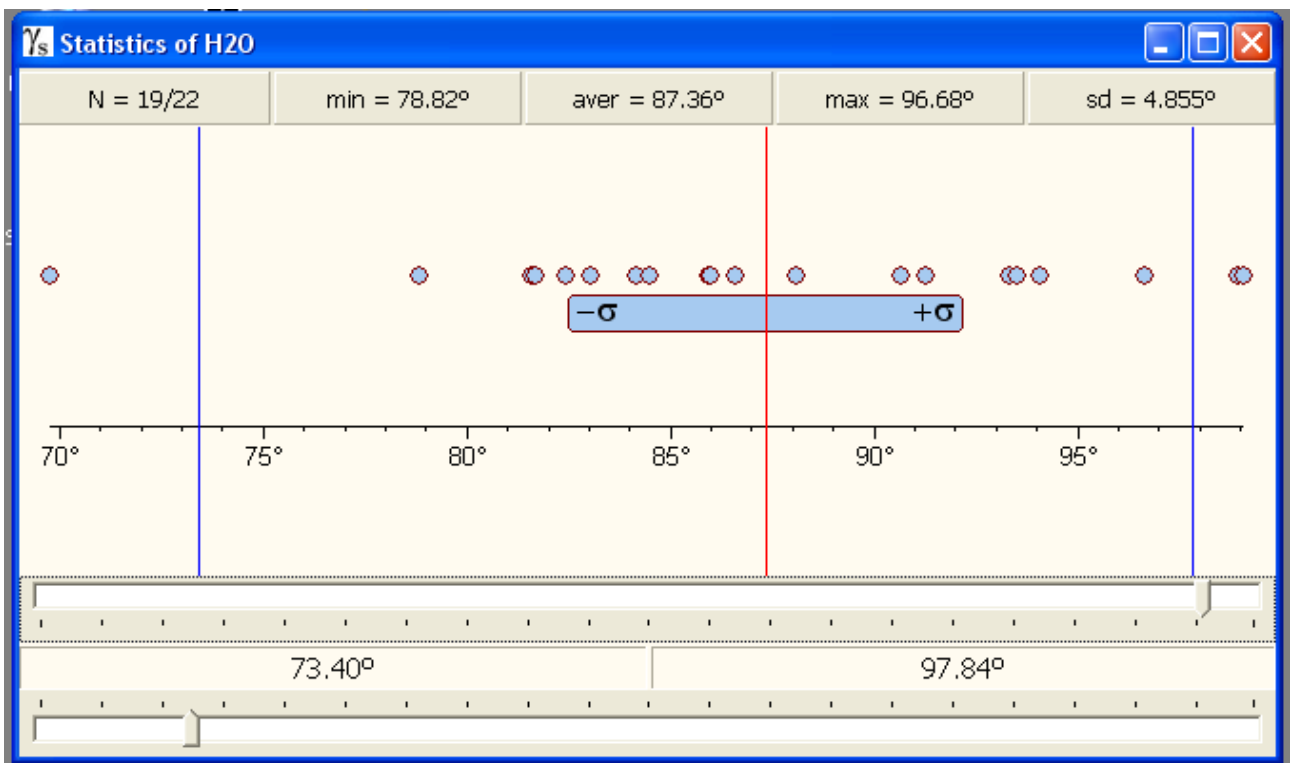
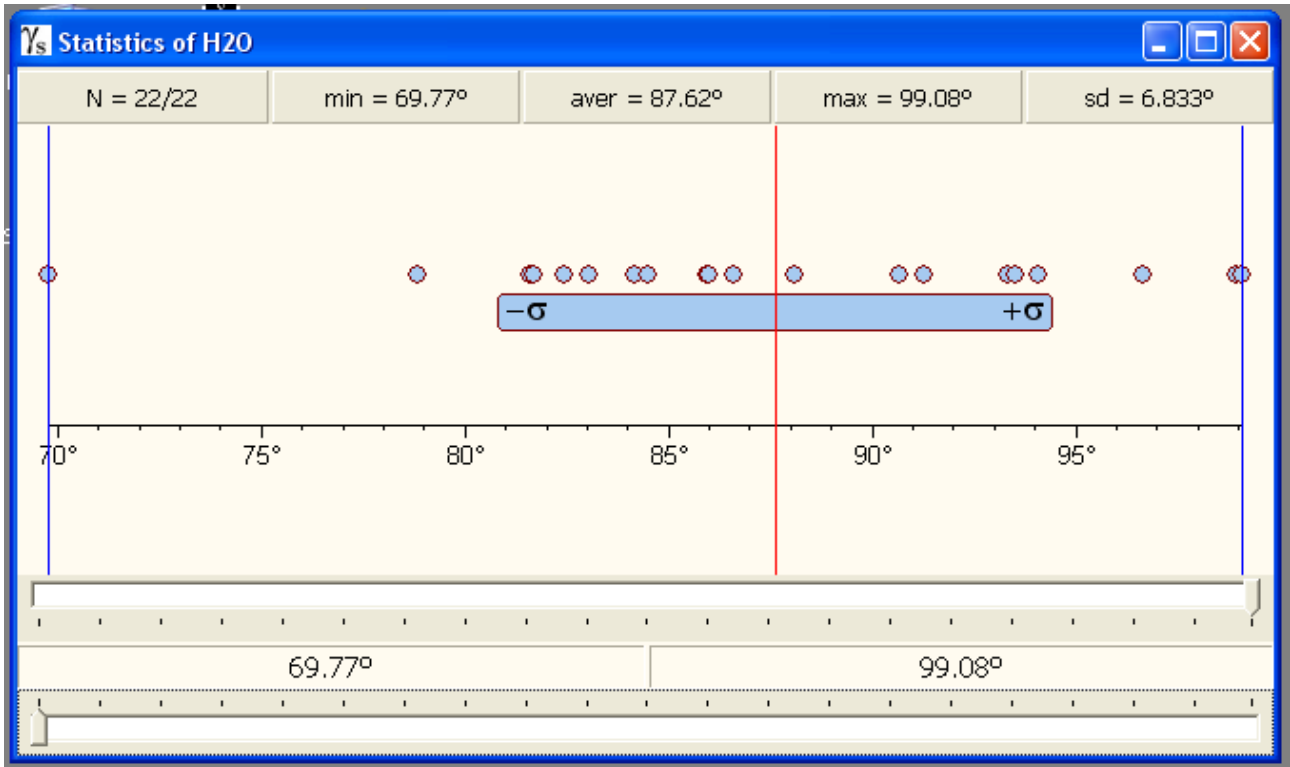
Dane dla każdej cieczy pomiarowej otwierają się w oddzielnym okienku. Okienka te można dowolnie powiększać, zmniejszać i przesuwać na ekranie. Dla łatwiejszego nimi manipulowania służy grupa poleceń Window



Obróbka statystyczna danych wejściowych

Wartości kątów zwilżania mają pewien rozrzut wynikający z błędów pomiarowych. Aby ułatwić ocenę jakości tych danych rysowany jest ich rozkład na osi liczbowej, położenie wartości średniej (**czerwony marker**) i zakres odchylenia standardowego od $-\sigma$ do $+\sigma$ (**błękitny prostokąt**). Operator może zechcieć odrzucić część skrajnych wartości kątów i do obliczeń używać tylko tych leżących bliżej wartości średniej.

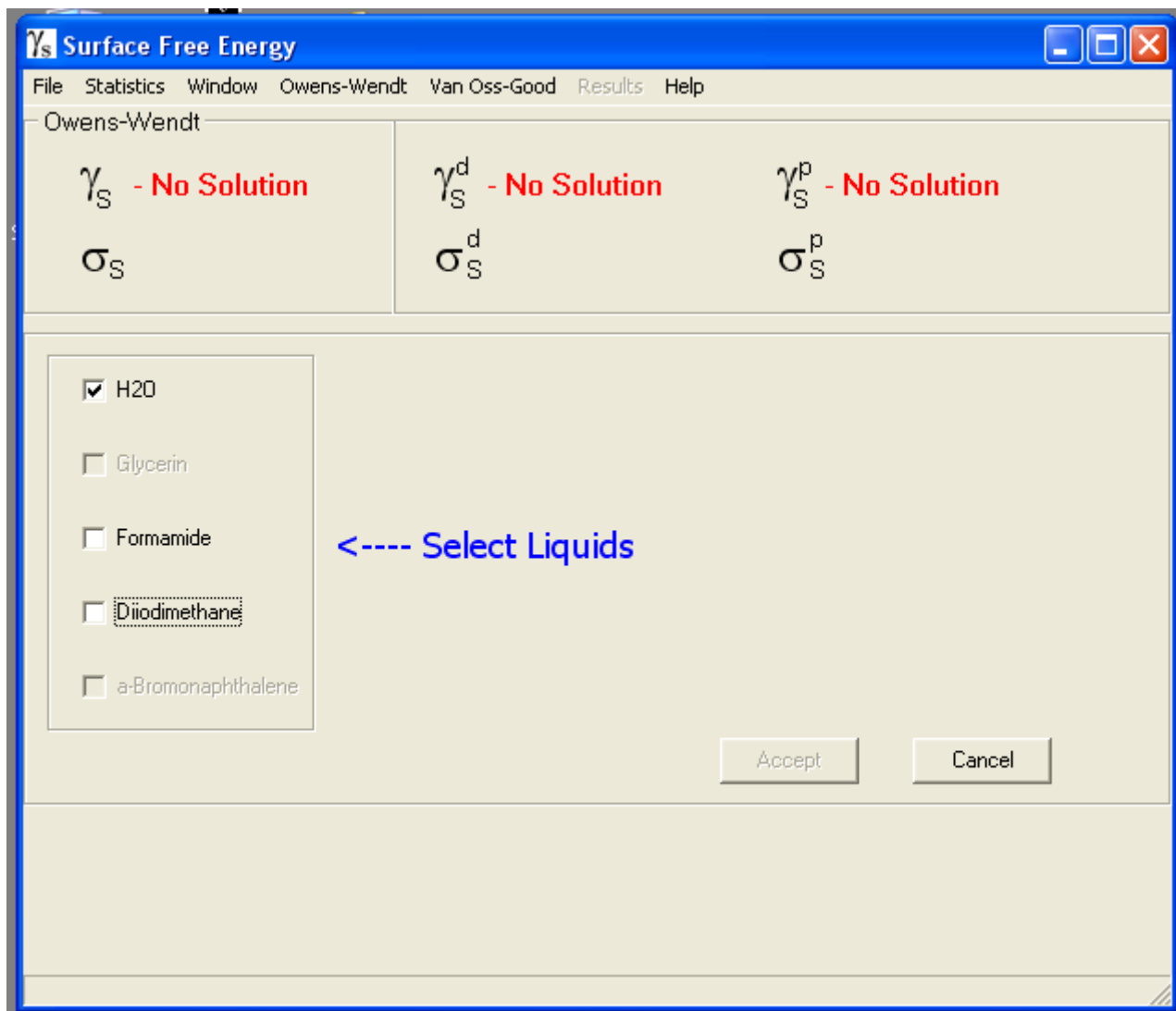
Do odrzucania służą dwa **niebieskie markery** przesuwane suwakami na dole okienka..



6. *Owens - Wendt* - obliczanie SEP metodą Owensa – Wendta

Wyświetlają się narzędzia do obliczeń SEP.

Najpierw użytkownik musi wybrać dwie ciecz pomiarowe spośród wczytanych przez *File --> Load Data*. Pola wyboru odpowiadające ciecziom niewczytanym są zablokowane.

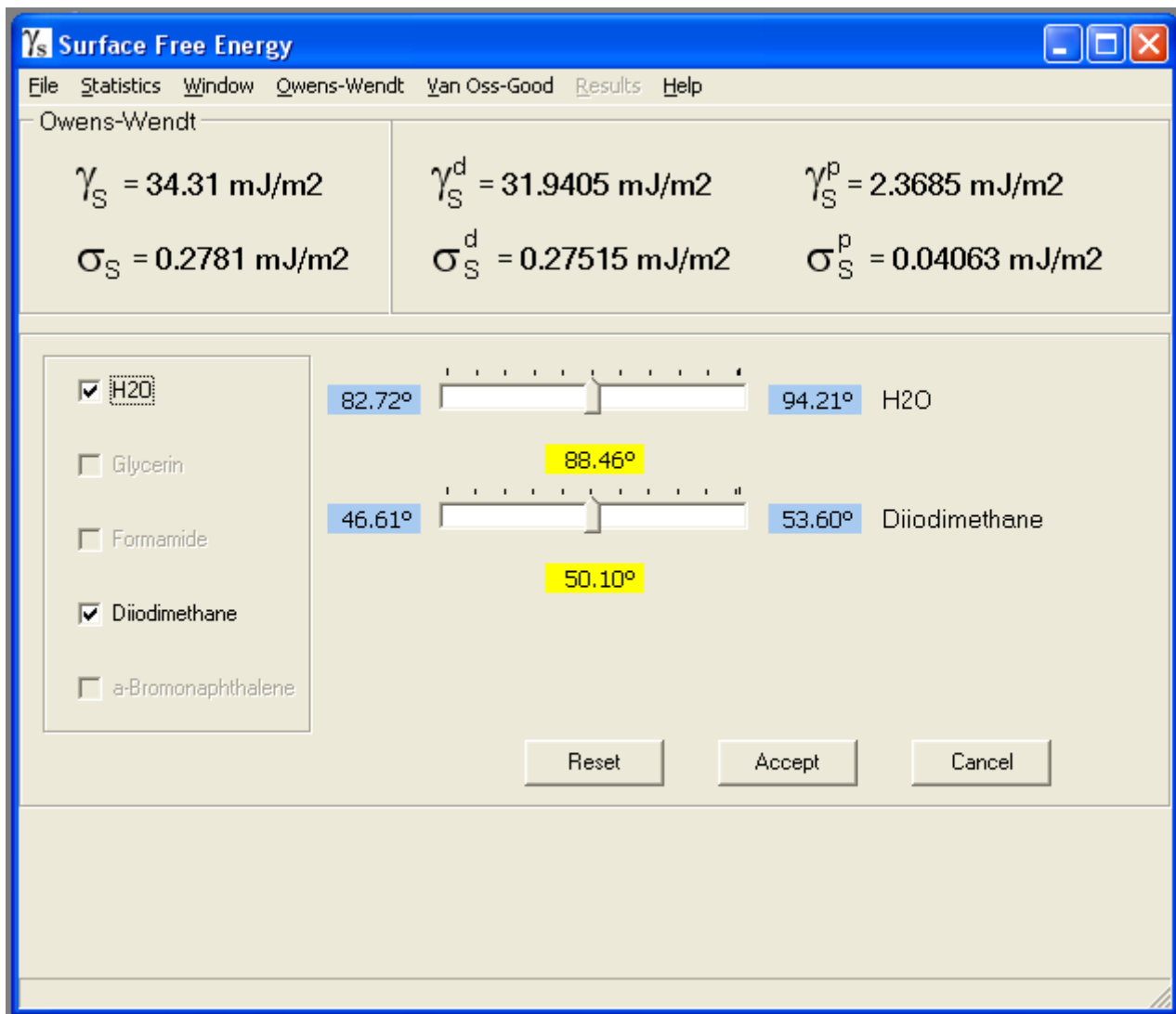


Teraz pojawia się formularz kalkulatora rozwiązującego układ równań metody Owensa – Wendta

$$(1 + \cos \theta_i) \gamma_{Li} = 2 \left(\sqrt{\gamma_S^D \times \gamma_{Li}^D} + \sqrt{\gamma_S^P \times \gamma_{Li}^P} \right), \text{ dla } i = 1, 2$$

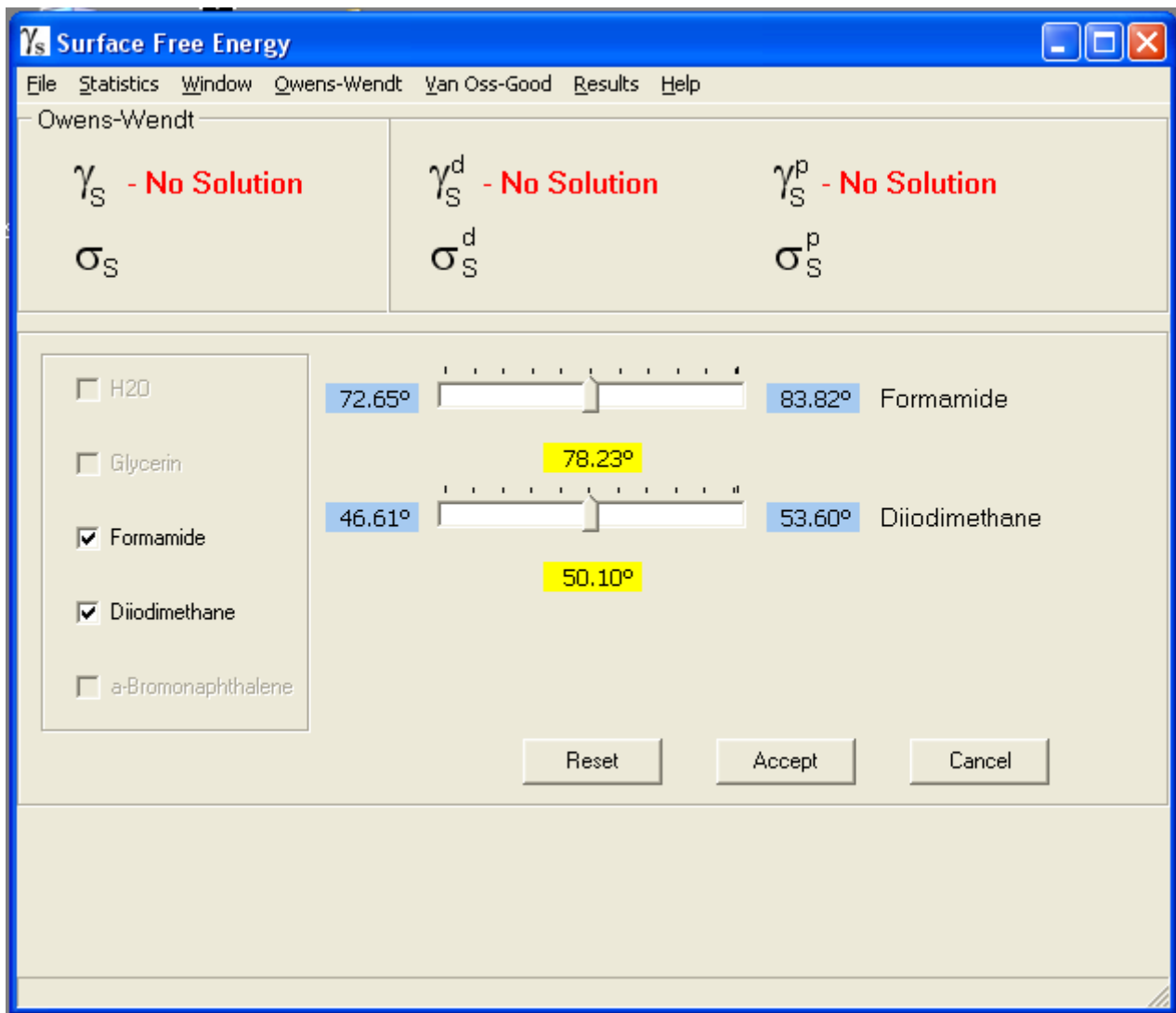
Wartości γ_{Li} , γ_{Li}^D , γ_{Li}^P odczytywane są z tabeli współczynników dla i-tej cieczy.

Jako początkowe wartości kątów zwilżania θ_i i-tej cieczy są przyjmowane wartości średnie z pomiarów.



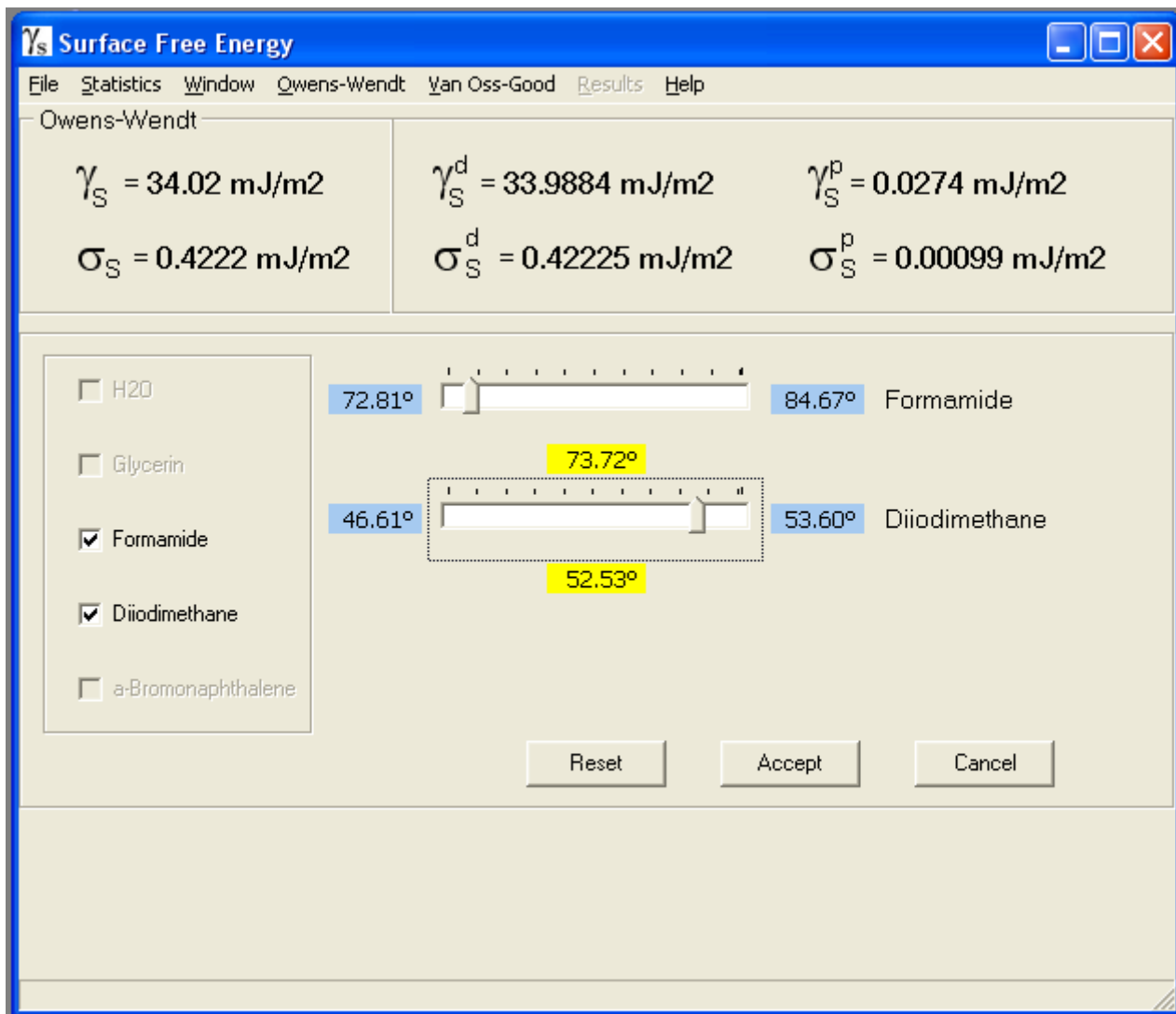
Gdy zdarzy się, że dla wartości średnich θ_i układ równań nie ma rozwiązania, wówczas użytkownik może pomanipulować tymi wartościami w ramach ich odchyłeń standardowych. Służą temu poziome suwaki.

Obliczenia są przeprowadzane, a wyniki uwidaczniane natychmiast po każdej zmianie położenia suwaków. Dzięki temu szybko można znaleźć rozwiązania układu równań.



Guzik *Reset* przywraca środkowe położenia suwaków.

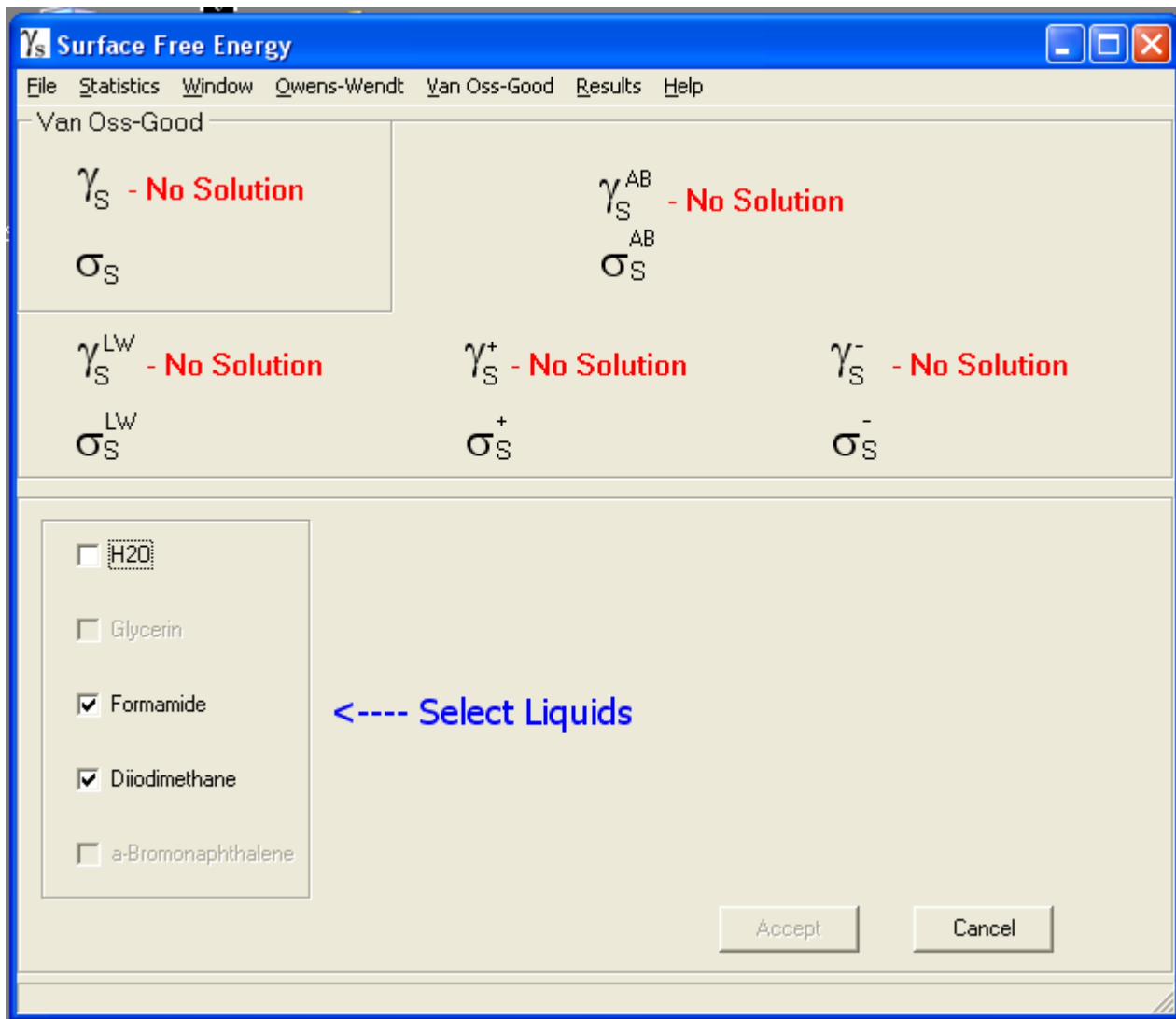
Naciśnięcie guzika *Accept* powoduje dopisanie wyliczonych wartości SEP i jej składowych do zbioru wyników oraz wyświetlenie okienka z rezultatami wszystkich dotychczasowych obliczeń. Jeśli użytkownik rozmyśli się i zechce skasować zaakceptowane obliczenia, to może uczynić to ręcznie odpowiednio edytując zawartość wspomnianego okienka *Results*.



7. *Van Oss - Good* - obliczanie SEP metodą Van Ossa – Gooda

Wyświetlają się narzędzia do obliczeń SEP.

Najpierw użytkownik musi wybrać trzy ciecze pomiarowe spośród wczytanych przez *File* --> *Load Data*. Pola wyboru odpowiadające cieczom niewczytanym są zablokowane.



Teraz pojawia się formularz kalkulatora rozwiązującego układ równań metody Van Ossa - Gooda

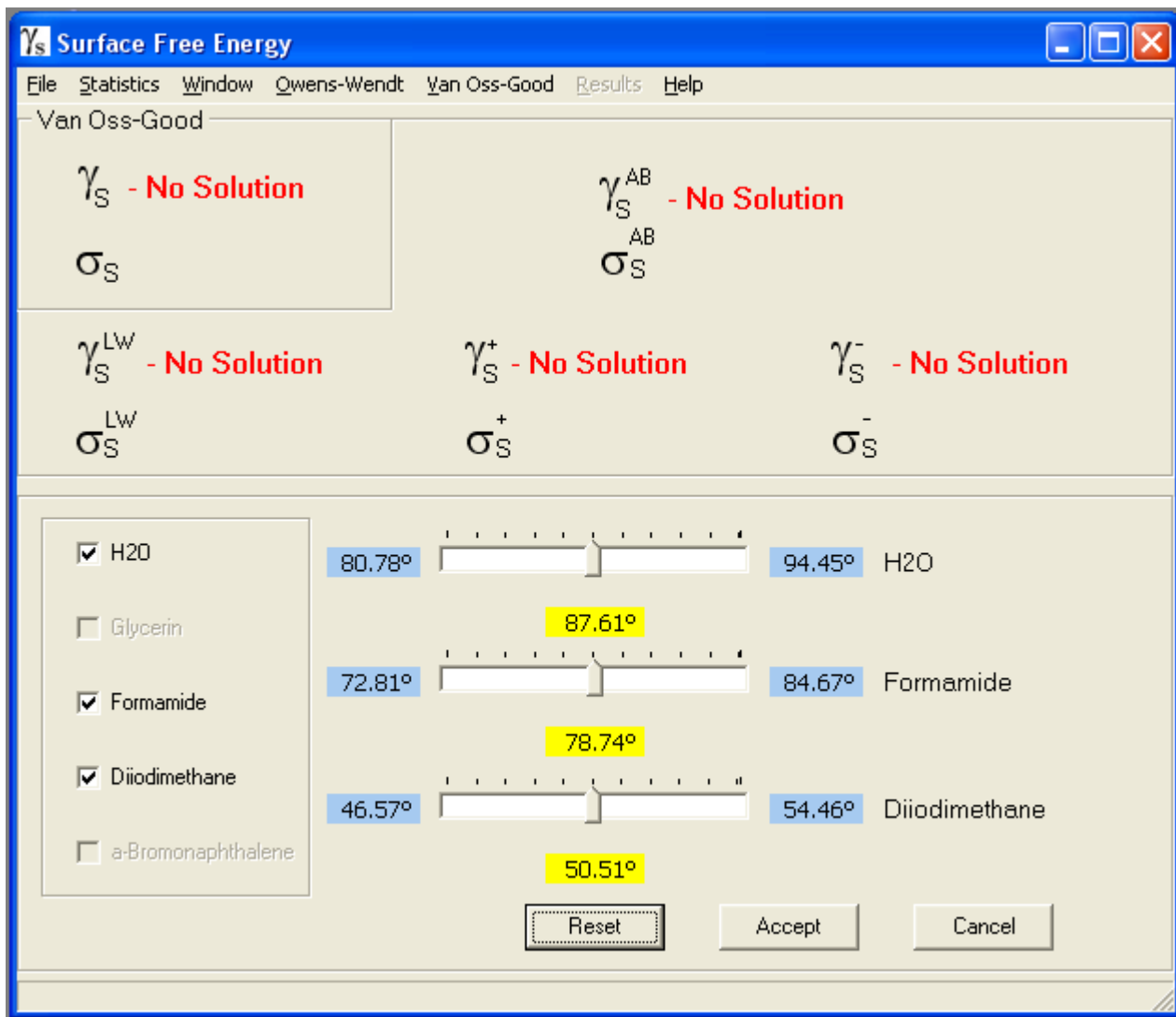
$$(1 + \cos \theta_i) \gamma_{Li} = 2 \left(\sqrt{(\gamma_S^{LW} \times \gamma_{Li}^{LW})} + \sqrt{(\gamma_S^+ \times \gamma_{Li}^-)} + \sqrt{(\gamma_S^- \times \gamma_{Li}^+)} \right)$$

dla $i = 1, 2, 3$

Wartości γ_{Li} , γ_{Li}^{LW} , γ_{Li}^+ , γ_{Li}^- odczytywane są z tabeli współczynników dla i-tej cieczy.

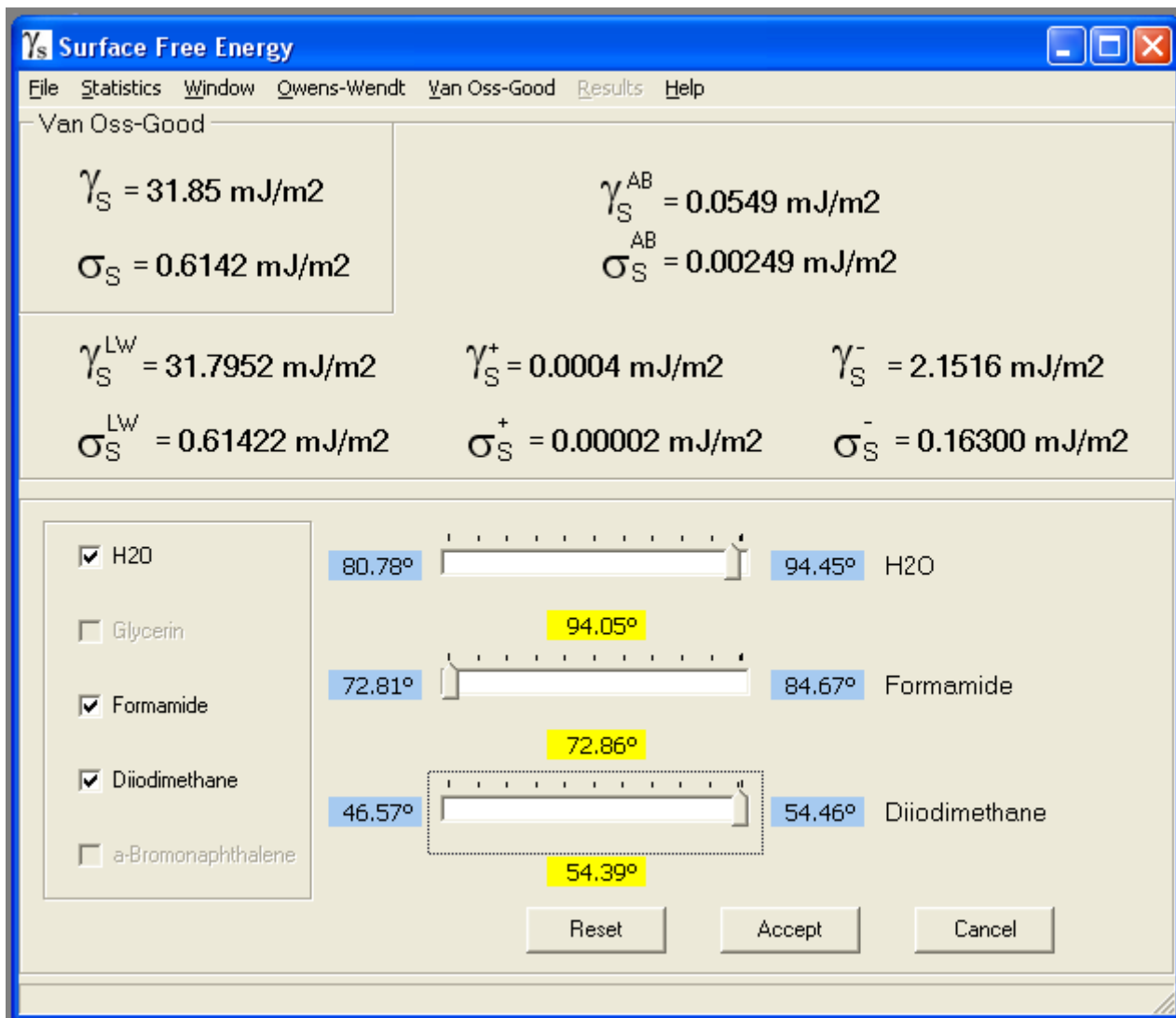
Jako początkowe wartości kątów zwilżania θ_i i-tej cieczy są przyjmowane wartości średnie z pomiarów.

W tej metodzie trudniej jest uzyskać rozwiązanie układu równań i rzadko się zdarza, by nie trzeba było manipulować wartościami kątów θ_i



Gdy dla wartości średnich θ_i układ równań nie ma rozwiązania, wówczas użytkownik może pomaniulować tymi wartościami w ramach ich odchyłeń standardowych. Służą temu poziome suwaki.

Obliczenia są przeprowadzane, a wyniki uwidaczniane natychmiast po każdej zmianie położenia suwaków. Dzięki temu szybko można znaleźć rozwiązanie układu równań.



Guzik *Reset* przywraca środkowe położenia suwaków.

Naciśnięcie guzika *Accept* powoduje dopisanie wyliczonych wartości SEP i jej składowych do zbioru wyników oraz wyświetlenie okienka z rezultatami wszystkich dotychczasowych obliczeń. Jeśli użytkownik rozmyśli się i zechce skasować zaakceptowane obliczenia, to może uczynić to ręcznie odpowiednio edytując zawartość wspomnianego okienka *Results*.

8. *Results* - wyświetlenie zbiorczych rezultatów obliczeń

W każdej chwili można obejrzeć podsumowanie dotychczas obliczonych swobodnych energii powierzchniowych, zapisać je do pliku dyskowego (*File* --> *Save Results*) oraz wydrukować (*File* --> *Print Results*).

Treść okienka można edytować kasując i dopisując jego zawartość. Ta zawartość jest zapisywana do pliku z rezultatami obliczeń * .SFE

The screenshot shows a software window titled "Surface Free Energy" with a menu bar containing "File", "Statistics", "Window", "Owens-Wendt", "Van Oss-Good", "Results", and "Help". The main text area displays the following information:

```

Surface Free Energy
Contact Angles Mensuration :
-----
Operator :
Comment  :
Date    :   24.11.2009   11:49:57
-----
Operator :
Comment  :
Date    :   24.11.2009   10:16:07
-----
Operator :
Comment  :
Date    :   24.11.2009   11:18:33
-----

Date of Calculation : 30-12-2009 14:09:31
=====
Owens-Wendt Method

Liquids      Contact Angle  Standard Deviation
Formamide    -->  74.40°  ± 5.931°
Diiodimethane -->  53.51°  ± 3.944°

gS  = 33.45163 ±0.45569 mJ/m2
gSd = 33.42636 ±0.45569 mJ/m2
gSp =  0.02527 ±0.00094 mJ/m2
=====
Owens-Wendt Method

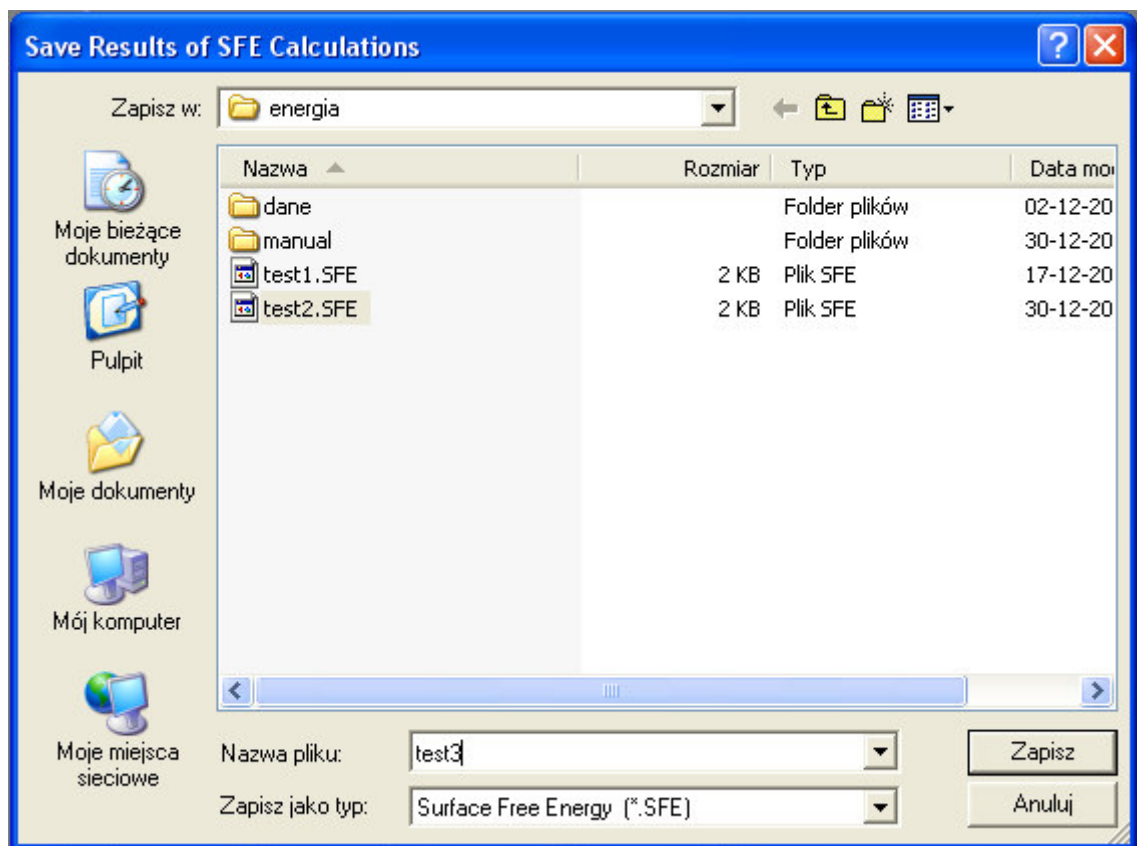
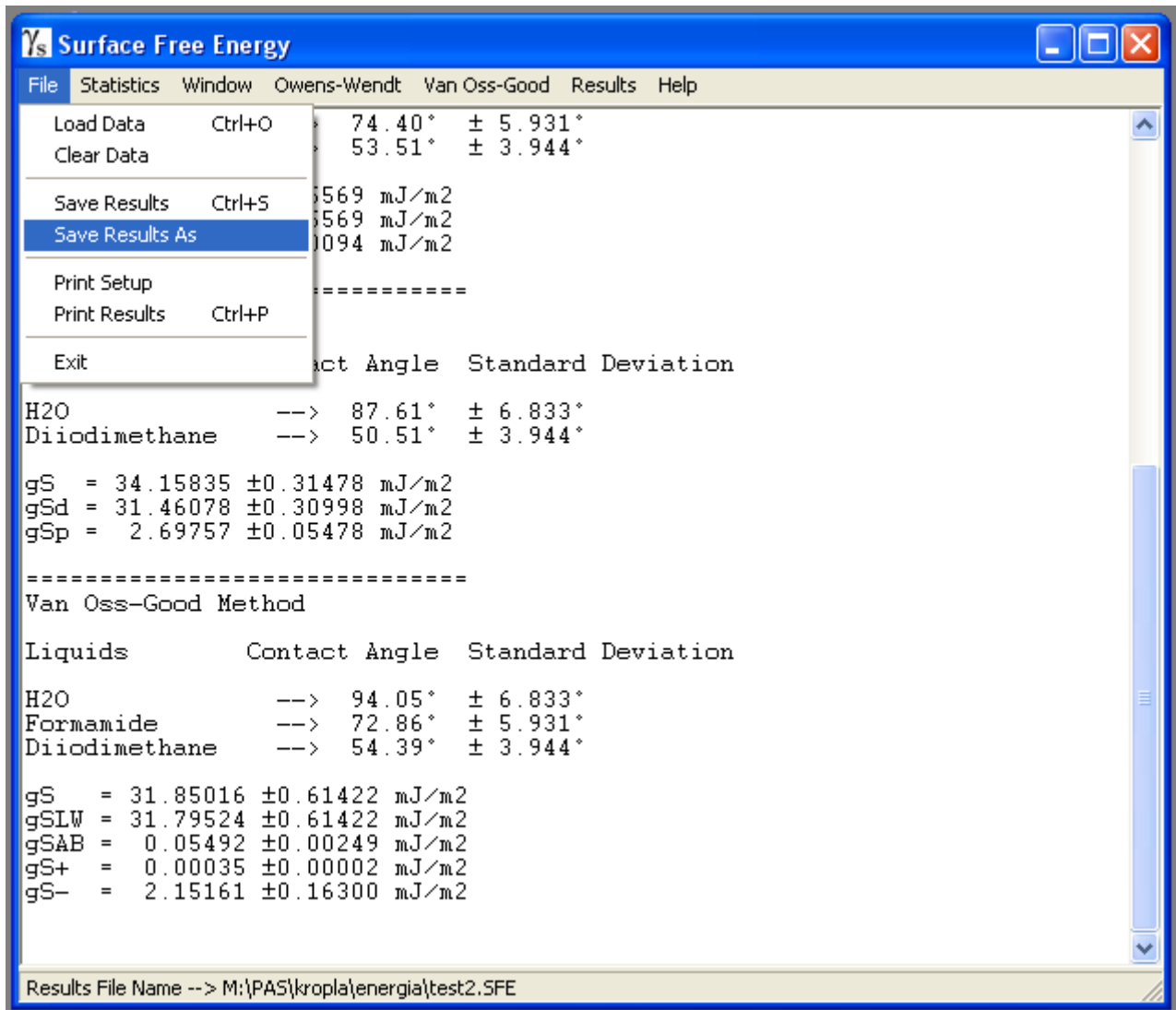
Liquids      Contact Angle  Standard Deviation
Results File Name --> M:\PAS\kropla\energia\test2.SFE

```

9. File --> Save Results As - zapisanie danych do pliku dyskowego
File --> Save Results Ctrl+S

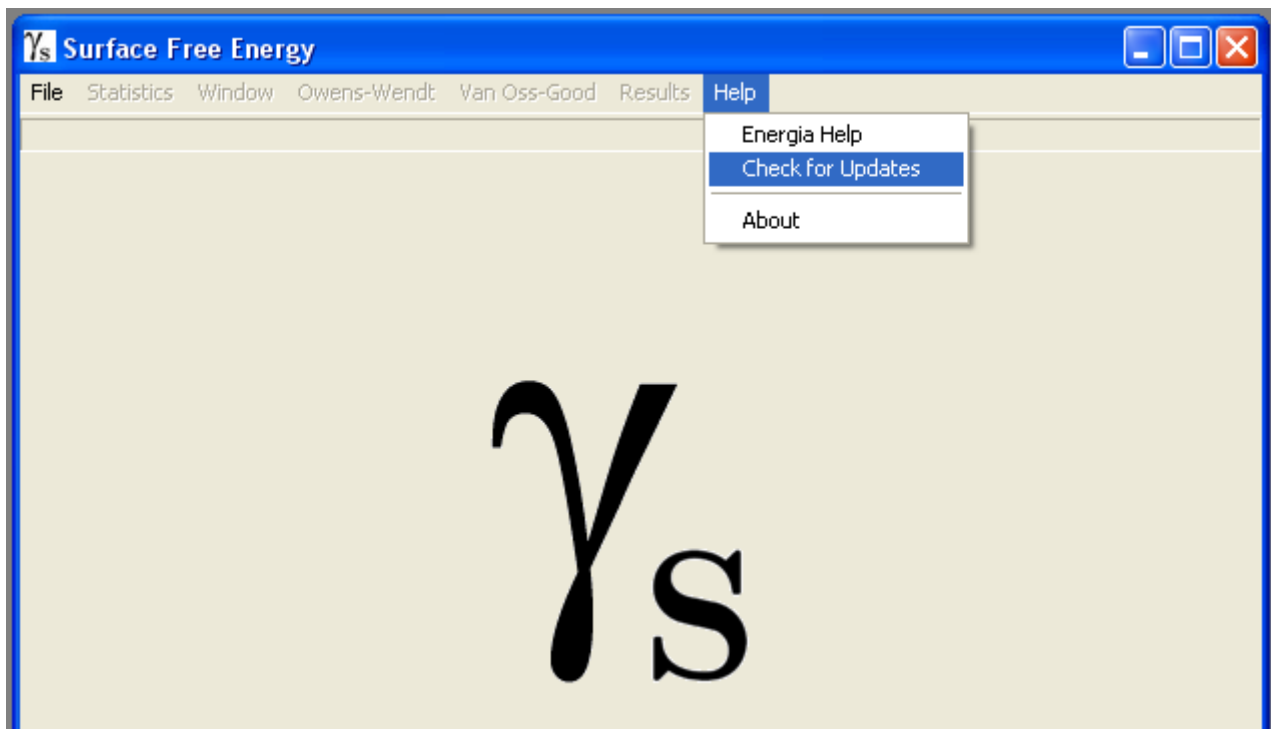
Otwiera się typowe okienko windowsowe do wyboru nazwy pliku, w którym będą zapisane rezultaty obliczeń. Standardowe rozszerzenie nazwy pliku to .SFE

Rezultaty są zapisywane w formacie ASCII, dokładnie w tej postaci, w jakiej widać je w okienku edycyjnym Results



10. Help - informacje pomocnicze i ułatwiające

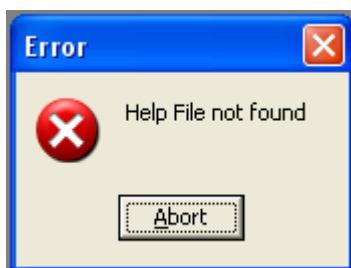
Zgrupowane są tu polecenia ułatwiające pracę i konserwację programu, a więc :



11. Help --> Energia Help - wyświetlenie pliku niniejszego Energia.PDF

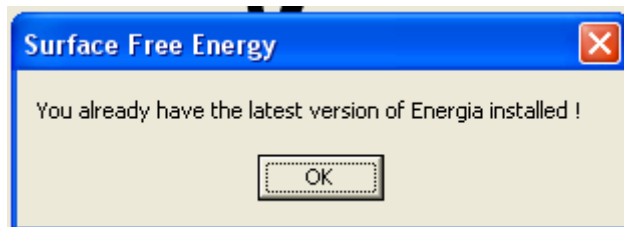
Po wybraniu polecenia *Energia Help* uruchomi się przeglądarka Acrobat Reader, która automatycznie wczyta i wyświetli na ekranie zawartość pliku Energia.PDF, czyli niniejszą instrukcję obsługi.

Plik Energia.PDF winien znajdować się w tym samym katalogu, co plik Energia.EXE. Jeśli go tam nie będzie, to zobaczymy komunikat :

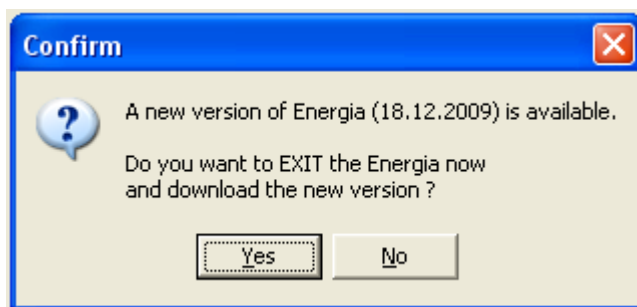


12. Help --> Check for Updates - sprawdzenie uaktualnień programu na serwerze

Program łączy się przez sieć internet z serwerem, na którym przechowywane są kolejne wersje programu Energia.EXE i sprawdza, czy dostępna jest nowsza wersja. Zależnie od wyniku sprawdzenia pojawiają się komunikaty :



albo

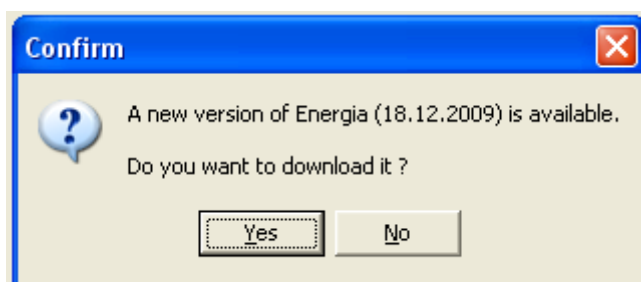


Jeśli odpowiemy *Yes*, to program *Energia* zakończy natychmiast działanie (**uwaga** : możemy stracić dane odpowiadając nierozważnie !) i rozpocznie się ściąganie nowego pliku *Energia.EXE*. Plik ten należy zapisać na miejsce starego pliku *Energia.EXE*.

W przypadku braku połączenia internetowego pojawi się okienko :



Prócz opisanego powyżej sprawdzania uaktualnień na żądanie program *Energia* sprawdza je automatycznie podczas średnio co 10-tego uruchomienia. Jeśli wykryje dostępność nowej wersji, to melduje o tym operatorowi :



Jeśli odpowiemy *Yes*, to program *Energia* zakończy natychmiast działanie i rozpocznie się ściąganie nowego pliku *Energia.EXE*. Plik ten należy zapisać na miejsce starego pliku *Energia.EXE*.

13. Help --> About

- informacje o programie i autorze

W typowym okienku znajdują się m.in. informacje o wersji programu, adres e-mailowy autora oraz łącze do strony internetowej z bliższymi informacjami o autorze i jego działalności zawodowej.



Wszelkie uwagi odnośnie działania programu oraz propozycje zmian i ulepszeń prosimy zgłaszać na adres e-mailowy :

`wjmusial@agh.edu.pl`
