



HANSEN

Program pro formulaci rozpouštědlových směsí

Manuál

Autor: Ing. Dušan SEDLÁČEK

Email: dussed@seznam.cz

1. Určení programu

Tento software představuje specializovaný termodynamický výpočetní nástroj určený pro technologický screening, formulaci a optimalizaci směsí rozpouštědel a pro experimentální stanovení Hansenových parametrů rozpustnosti (HSP) neznámých polymerů či pryskyřic.

Program je primárně navržen pro chemické technology, formulátory nátěrových hmot, vývojáře aditiv a restaurátory. Zajišťuje predikci fázové stability systému, a to nejen v jeho počátečním kapalném stavu, ale i prostřednictvím kinetické simulace odpařování během tvorby suchého filmu. Cílem softwaru je nahradit empirickou metodu pokus-omyl exaktním matematickým modelem, který zohledňuje termodynamickou afinitu, limity rychlosti schnutí a legislativní omezení (CLP profil) jednotlivých složek.

1.1 Teoretická východiska

Základem programu je teorie Hansenových parametrů rozpustnosti (Hansen Solubility Parameters, HSP), poprvé publikovaná Charlesem M. Hansenem v roce 1967. Tato teorie rozšiřuje původní koncept Hildebrandova parametru rozpustnosti, který vycházel z celkové hustoty kohezní energie (Cohesive Energy Density, CED).

Hansen postuloval, že celková kohezní energie udržující molekuly látky pohromadě není jednorozměrná veličina, ale je součtem tří specifických mezimolekulárních interakcí:

- **Disperzní síly (δD):** Zohledňují nepolární, van der Waalsovy interakce (Londonovy síly) přítomné ve všech molekulách, závislé na velikosti elektronového oblaku.
- **Polární síly (δP):** Charakterizují interakce permanentních dipólů vznikajících asymetrickým rozložením náboje v molekule.
- **Vodíkové vazby (δH):** Zahrnují vysoce specifické interakce, kde atom vodíku vázaný na elektronegativní prvek sdílí elektronový pár jiného elektronegativního atomu.

Tyto tři parametry definují trojrozměrný termodynamický prostor. Podle pravidla „*similia similibus solvuntur*“ (podobné se rozpouští v podobném) platí, že dvě látky jsou vzájemně mísitelné, pokud leží v tomto 3D prostoru blízko sebe. Pro každý polymer existuje v tomto prostoru tzv. **interakční sféra** s poloměrem R_0 , jejíž střed je definován vlastními parametry polymeru. Rozpouštědla ležící uvnitř této sféry polymer rozpouštějí, rozpouštědla vně jej srážejí nebo s ním neinteragují.

1.2 Použité vztahy

Matematický aparát programu využívá následující základní termodynamické rovnice:

Celková hustota kohezní energie (E) je dána součtem dílčích energií:

$$E = E_D + E_P + E_H$$

Z toho odvozená rovnice pro **celkový parametr rozpustnosti (δ_t)**:

$$\delta_t^2 = \delta_D^2 + \delta_P^2 + \delta_H^2$$

Pro výpočet **termodynamické vzdálenosti (Ra)** mezi rozpouštědlem (2) a rozpuštěnou látkou (1) v Hansenově prostoru program používá standardní euklidovskou metriku s empiricky odvozeným koeficientem 4 pro disperzní osu (zohledňujícím odlišnou povahu disperzních sil v porovnání se specifickými interakcemi):

$$Ra^2 = 4(\delta_{D2} - \delta_{D1})^2 + (\delta_{P2} - \delta_{P1})^2 + (\delta_{H2} - \delta_{H1})^2$$

Klíčovým prediktivním nástrojem softwaru je **Relativní energetická diference (RED)**, definovaná jako poměr vzdálenosti rozpouštědla a poloměru interakční sféry polymeru (R0):

$$RED = \frac{Ra}{R0}$$

- RED < 1: Systém tvoří stabilní roztok (rozpuštědlo je uvnitř sféry).
- RED = 1: Hraniční stav (systém vykazuje částečné rozpouštění nebo bobtnání).
- RED > 1: Látky jsou termodynamicky nemísitelné (fázová separace).

Pro výpočet parametrů **vícesložkové směsi rozpouštědel** program aplikuje lineární směšovací pravidlo na základě hmotnostních (resp. objemových) zlomků (Φ_i) jednotlivých složek (n):

$$\delta_{směs} = \sum_{i=1}^n \Phi_i \delta_i$$

1.3 Algoritmy

Výpočetní jádro programu (modul HSPEngine) operuje na základě tří stěžejních algoritmů:

1.3.1 Optimalizační algoritmus pro stanovení R0 (Fitování dat):

Na základě experimentálních dat (binárního hodnocení 1 = rozpouští, 0 = nerozpouští) algoritmus iterativně prohledává Hansenův prostor a hledá souřadnice těžiště ($\delta_D, \delta_P, \delta_H$) a optimální poloměr sféry (R0) tak, aby maximalizoval počet funkčních rozpouštědel uvnitř sféry a minimalizoval přítomnost „nerozpouštědel“ v jejím nitru. Získané výsledky

jsou pro zachování exaktnosti vizualizovány ve 2D projekcích (typicky δP vs. δH), čímž je zamezeno matematické deformaci, ke které dochází u starších frakčních Teasových grafů.

1.3.2 Kombinatorický screening (Hrubá síla / Brute-force solver):

Modul paralelního prohledávání analyzuje tisíce kombinací vybraných bází databáze (2 až 4 složky). Podle uživatelem definovaného krokování (např. po 5 %, 10 % nebo 20 %) prochází celý koncentrační prostor a pro každou iteraci vypočítá startovní parametr RED. Vyhovující kandidáty ukládá do vláknově bezpečné kolekce k dalšímu zpracování.

1.3.3 Kinetická simulace odpařování (Fázová stabilita):

Směs s ideálním počátečním $RED < 1$ může selhat během schnutí, pokud se "dobré" rozpouštědlo (s vysokou tenzí par) odpaří rychleji než "špatné" rozpouštědlo. Algoritmus proto v diskrétních časových krocích (s) simuluje odpar z definované plochy při zadané teplotě a průběžně přepočítává hmotnostní zlomky zbývajících kapalin v systému. Trajektorie bodu směsi v Hansenově prostoru je sledována, přičemž program vyhodnocuje parametr max_RED . Pokud během celého procesu odpařování nedojde k překročení hraniční hodnoty $RED > 1$, je směs označena jako „Kineticky stabilní“. V opačném případě program indikuje hrozbu „Fázového rozpadu“ zasychajícího filmu.

1.3.4 Modul selektivního rozpouštění (Ochrana podkladu)

V pokročilé technologické praxi – typicky v oboru restaurování památek, odstraňování starých nátěrů nebo při separaci vícevrstvých polymerních systémů – často vyvstává nutnost tzv. selektivní solvatace. Cílem je formulovat směs rozpouštědel, která efektivně rozpustí cílovou vrstvu, ale zanechá původní podkladovou nedotčenou a nenarušenou.

Tento modul rozšiřuje standardní vyhledávací algoritmus o dodatečnou restrikcí fázového prostoru, která exaktně garantuje termodynamickou netečnost výsledné směsi vůči uživatelem definovanému referenčnímu materiálu.

Geometrická a matematická podstata výpočtu

V rámci Hansenova 3D prostoru představuje selektivní rozpouštění úlohu prostorového průniku a exkluze. Algoritmus nehledá pouze bod uvnitř jedné sféry, nýbrž hledá takové těžiště směsi, které leží striktně **uvnitř interakční sféry odstraňovaného polymeru**, ale současně se nachází prokazatelně **vně interakční sféry chráněného polymeru**.

Výpočetní jádro v tomto režimu aplikuje dvoustupňový termodynamický filtr ještě před zahájením kinetické simulace schnutí. Pro každou kombinaci v koncentrační mřížce program počítá dvě nezávislé hodnoty Relativní energetické difference (RED).

A. Podmínka afinity k cíli (RED_{cit})

Program nejprve standardním způsobem vypočítá termodynamickou vzdálenost směsi od středu odstraňovaného polymeru a porovná ji s jeho poloměrem.

Aby byla směs vyhodnocena jako účinná pro odstranění laku, musí bezpodmínečně platit:
RED_{Cit} ≤ 1,0

B. Podmínka selektivní ochrany podkladu (RED_{Chr})

Následně program vypočítá vzdálenost těže směsi od středu chráněného polymeru a vydělí ji jeho příslušným poloměrem. Z čistě teoretického hlediska by pro nerozpuštění chráněné vrstvy postačovalo, aby hodnota přesáhla 1,0.

V reálné fyzikální chemii polymerů se však těsně za hranicí rozpustnosti (v intervalu RED cca 1,00 až 1,05) nachází zóna částečné penetrace. Molekuly rozpouštědla v této oblasti sice nedokážou polymerní řetězce zcela oddělit a převést do roztoku, ale difuzí pronikají do jejich sítě, čímž způsobují **změknutí a objemové bobtnání (swelling)** chráněné vrstvy, což by při restaurování vedlo k nevratnému poškození díla.

Z tohoto důvodu je výpočetní modul z inženýrského hlediska nastaven s **bezpečnostní rezervou 10 %**. Aby byla směs akceptována jako bezpečná a propuštěna k další analýze, musí platit přísnější podmínka: **RED_{Chr} ≥ 1,1**

Kinetická validace selektivity

Pokud kandidátní směs těmito dvěma statickým podmínkám vyhoví, postupuje do modulu simulace odpařování. Kinetický algoritmus zde průběžně ověřuje obě hodnoty (RED_{Cit} i RED_{Chr}) v čase. Garantuje tak, že směs neztratí schopnost rozpouštět odstraňovaný lak předčasným zaschnutím, a zároveň že se vlivem odparu těkavějších složek její těžiště nestočí směrem k chráněnému polymeru a nezačne jej poškozovat v pozdní fázi odpařování.

1.4 Omezení modelu a metody HSP

Ačkoliv je Hansenův 3D model vysoce efektivním a v průmyslu široce uznávaným prediktivním nástrojem, vychází z určitých termodynamických zjednodušení. Pro správnou interpretaci výsledků zprostředkovaných programem je nutné brát v úvahu následující fyzikálně-chemická omezení:

1.4.1 Vliv molárního objemu (V_m) a entropie míšení

Základní rovnice pro výpočet vzdálenosti Ra vyjadřuje primárně entalpický příspěvek k volné energii míšení (ΔH_m). Model však implicitně zanedbává vliv velikosti molekul. Dle Flory-Hugginsovy teorie roztoků polymerů hraje zásadní roli entropie míšení, která klesá s rostoucí velikostí (molárním objemem) molekul rozpouštědla. V praxi to znamená, že příliš objemná molekula rozpouštědla (s vysokým V_m) nedokáže z důvodu sterického bránění efektivně penetrovat do prostorové sítě polymeru, a to ani v případech, kdy její Hansenovy parametry leží přesně ve středu interakční sféry (RED << 1).

1.4.2. Zjednodušení vodíkových vazeb a acidobazické interakce

Parametr vodíkových vazeb (δH) agreguje schopnost molekuly působit jako donor protonu (kyselina) i jako akceptor protonu (báze) do jediné číselné hodnoty. Toto zjednodušení může vést k falešně pozitivním výsledkům: pokud mají dvě látky vysokou hodnotu δH , program predikuje vzájemnou afinitu, přestože mohou obě fungovat výhradně jako donory (nebo obě jako akceptory), a k tvorbě vodíkového můstku mezi nimi fyzicky nedojde.

1.4.3. Teplotní závislost parametrů

Hansenovy parametry v interní databázi programu jsou standardizovány pro teplotu 25 °C. S rostoucí teplotou látky expandují, klesá jejich hustota kohezní energie, a tedy i hodnoty δD , δP , δH . Zatímco pro běžná organická rozpouštědla lze tyto posuny matematicky aproximovat pomocí koeficientů teplotní roztažnosti, u amorfních polymerů se interakční sféra R_0 s teplotou mění nelineárně, a to zejména v oblastech blízcích se teplotě skelného přechodu (T_g).

1.4.4. Omezení lineárního směšovacího pravidla

Výpočet výsledného HSP pro vícesložkovou směs předpokládá ideální chování kapalin. Lineární vážení pomocí hmotnostních (či objemových) zlomků nepočítá s objemovou kontrakcí, změnou hustoty ani s exotermními či endotermními reakcemi, které mohou při smísení dvou odlišných rozpouštědel nastat. Vznik silných intermolekulárních komplexů může reálné těžiště směsi v Hansenově prostoru vychýlit od lineárního matematického průměru.

1.4.5. Kinetika vs. Termodynamika

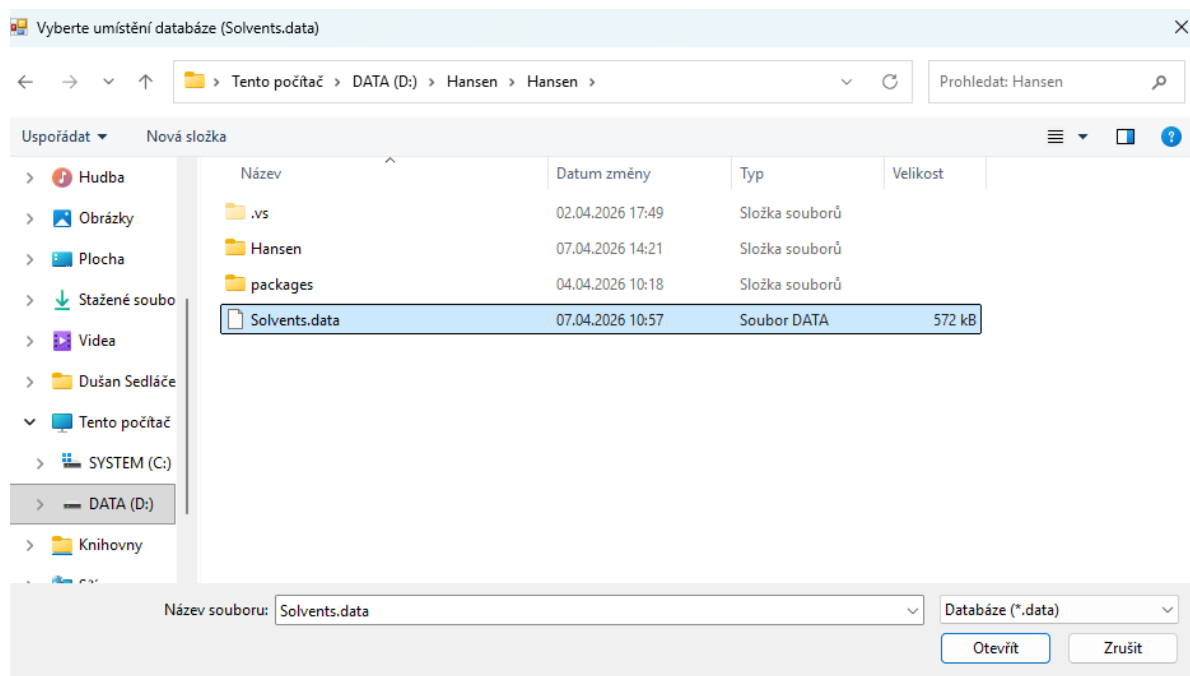
Hodnota parametru RED poskytuje informaci výhradně o termodynamické rovnováze – tedy o tom, zda k rozpuštění *může* dojít. Neříká však nic o tom, *jak dlouho* to bude trvat. U vysokomolekulárních polymerů, pryskyřic s vysokým stupněm zesíťování nebo u látek s podílem krystalické fáze může překonání počátečních kinetických bariér (bobtnání) trvat extrémně dlouho, což může být v technologické praxi mylně interpretováno jako nerozpustnost navzdory výbornému skóre RED.

1.4.6. Anomálie malých a vysoce asociativních molekul (Voda)

Systém HSP vykazuje prokazatelně nejnižší spolehlivost při modelování systémů s obsahem vody. Voda se díky svému extrémně malému molárnímu objemu a tendenci tvořit vysoce uspořádané klastry chová termodynamicky anomálně a nelze ji snadno umístit do standardního Hansenova prostoru bez použití speciálních korekcí nebo rozdělení jejího parametru δH na dílčí sub-vektory.

2 Základní orientace v programu

Po kliknutí na ikonu programu (Hansen.exe) se otevře hlavní okno programu, resp. při úplně prvním spuštění je nejprve nutné zadat cestu k databázi, která se pak nahraje. Při dalším spuštění se již cesta k databázi nezadá.



Databázi je možné sdílet s dalšími instancemi programu, např. ji lze umístit na síť nebo jiném úložišti. Databáze je ve formátu Access, viz příloha.

Hlavní obrazovka je rozdělena na 4 logické části:

- Menu
- Parametry procesu – směs, polymer, proces
- Přehled dostupných rozpouštědel s parametry
- Zobrazení grafů

2.1 Struktura Menu

Soubor

- Export do Excel
- Konec

Rozpouštědlo

- Načíst směs
- Uložit směs

Výpočty

- Průběh odpařování
- Hledání směsí rozpouštědel
- Stanovení param. polymeru

Report

Nápověda

- Manuál
- Úprava databáze (Rozpouštědla, Polymery)
- O Programu

A

B

C

D

HSP praktické použití

Soubor Rozpouštědlo Výpočty Report Nápv

Počet složek: 2 Název směsi: HSP směsi

Acetát butyrlí (CAS): 1720, 13,80, 2,80, 12,60

Teplota (°C): 20

Rychlost větru (m/s): 0,01

Strana (m): 1

Průcha (m²): 1,000

Název složky	CAS	dD	dP	dH	Mh	Vm	Hustota	Antoine A	Antoine B	Antoine C	T _{od}	T _{do}	Klasifikace	Hmotnost (g)
1_methoxypropan_2_ol	107-98-2	15,6	5,3	11,6	90,12	57,8	0,92	7,6994	1576,1	263,2	20	150	Flam. Liq. 3; STOT SE 3 (H226, H336)	0,00
1_methoxypropan_2_ol	108-65-6	15,6	5,6	9,8	132,16	136	0,97	7,3	1490	200	20	160	Flam. Liq. 3; STOT SE 3 (H226, H336)	0,00
1-methoxypropan_2_ol	108-65-2	15,6	12,3	5,5	89,09	89,5	1,003	7,1146	1311,4	215,1	50	131	Flam. Liq. 3; Acute Tox. 4 (H302, H312, H...	0,00
1-methoxypropan_2_ol	122-99-6	17,8	5,7	14,3	138,16	124,7	1,102	7,4589	1365,8	172,8	85	245	Acute Tox. 4; Eye Irr. 2 (H302, H319)	0,00
Aceton	67-64-1	15,5	10,4	7	58,08	74	0,785	7,0245	1161	224	-10	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319)	0,00
Acetonitril	75-05-8	15,3	18	6,1	41,05	53,6	0,78	7,113	1314	230	-10	90	Flam. Liq. 2; Acute Tox. 4; Eye Irr. 2 (H302, H30...	0,00
Afa_Pinen	80-56-8	16,5	1,4	0	136,24	158	0,862	6,96	1500	220	20	160	Flam. Liq. 3; Skin Irr. 2; Skin Sens. 1; Asp. Tox. ...	0,00
Amylacetát	628-63-7	15,8	3,3	6,1	130,19	148	0,88	7,042	1438	200	40	150	Flam. Liq. 3; EUH066 (H226, EUH066)	0,00
Benzen	71-43-2	18,4	0	2	78,11	89,4	0,874	6,9096	1211	220,8	-10	80	Flam. Liq. 2; Carc. 1A; Mutag. 1B; STOT RE 1 (H2...	0,00
Benzylalkohol	100-51-6	18,4	6,3	13,7	108,14	104	1,04	7,324	1800	200	60	210	Acute Tox. 4 (H302, H332)	0,00
Benzylbenzotriazol	1201-14	20	5,1	5,2	212,24	190,3	1,118	7,5429	2455,4	185,1	100	323	Acute Tox. 4; Aquatic Chronic 2 (H302, H411)	0,00
Butanol	71-36-3	16	5,7	15,8	74,12	91,5	0,81	7,3637	1305,2	173,4	20	120	Flam. Liq. 3; Acute Tox. 4; STOT SE 3; Skin Irr. ...	0,00
Butylalkohol	138-23-7	16	5	11,2	146,19	149	0,88	7,4	1800	195	50	200	Skin Irr. 2; Eye Irr. 2 (H315, H319)	0,00
Butylacetát	123-86-4	15,8	3,7	6,3	116,16	132,5	0,88	7,0121	1374,9	203,2	20	125	Flam. Liq. 3; STOT SE 3; EUH066 (H226, H336, ...	0,00
Butylol	2568-90-3	15,5	2	4	160,25	191	0,84	7,1	1400	200	40	190	Skin Irr. 2 (H315)	0,00
Butylbenzotriazol	136-60-7	18,3	5,6	5,5	178,23	178,1	1	7,3416	2101,2	183,4	90	250	Acute Tox. 4 (H302)	0,00
Cyklohexan	110-82-7	16,8	0	0,2	84,16	108,7	0,779	6,8449	1203,5	222,8	30	105	Flam. Liq. 2; Asp. Tox. 1; Skin Irr. 2; STOT SE 3	0,00
Cyklohexanol	108-93-0	17,4	4,1	13,5	100,16	106	0,94	7,196	1463	185	20	170	Acute Tox. 4; Skin Irr. 2; STOT SE 3 (H302, H3...	0,00
Cyklohexanen	108-94-1	15,8	4,7	8	182,23	180	0,91	7,1	1600	200	80	200	Bez klasifikace	0,00
Cyklopentanon	120-92-3	17,8	11,9	5,2	84,12	89	0,95	6,9	1390	215	10	140	Flam. Liq. 3; Eye Irr. 2 (H315, H319)	0,00
D_Limonen	9899-27-5	17,2	1,8	4,3	136,24	162	0,84	6,95	1950	210	30	180	Flam. Liq. 3; Skin Irr. 2; Skin Sens. 1; Aquatic A...	0,00
Dioxan	124-18-5	15,8	0	0	142,29	195,9	0,73	6,945	1494	193,8	40	180	Flam. Liq. 3; Asp. Tox. 1 (H226, H304)	0,00
Dioxetanolochol	123-42-2	15,8	8,2	10,8	116,16	124	0,94	7,319	1690	215	20	170	Eye Irr. 2; Flam. Liq. 3 (H319, H226)	0,00
Diethylenglykol	111-46-6	16,2	14,7	20,5	106,12	94,9	1,12	8,05	2100	200	80	250	Acute Tox. 4; STOT RE 2 (H302, H373)	0,00
Diethylenglykol_2monobutyl	112-34-5	16	7	10,6	162,23	170,4	0,953	7,3519	1786,3	171,9	40	230	Eye Irr. 2 (H319)	0,00
Diethylenglykol_2diethyl	112-96-7	15,8	4,7	8	182,23	180	0,91	7,1	1600	200	80	200	Bez klasifikace	0,00
Diethylol	60-20-7	14,5	2,9	5,1	74,12	104,8	0,71	6,986	1064	228	30	40	Flam. Liq. 1; Acute Tox. 4; STOT SE 3; EUH019	0,00
Dichlometan	75-09-2	18,2	6,3	6,1	84,93	63,9	1,33	7,0803	1138,9	231,5	-20	40	Carc. 2 (H351)	0,00
Diobutylketon_DIBK	108-83-8	14,9	3,7	4,1	142,24	176	0,81	6,95	1450	205	40	170	Flam. Liq. 3; STOT SE 3 (H226, H335)	0,00
Dioxan	123-91-1	17,5	1,8	9	88,11	85,7	1,03	7,151	1355	224	10	110	Flam. Liq. 2; Carc. 1B; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H...	0,00
Dioxolan	646-66-0	17,5	5,3	7,2	74,08	69,8	1,06	7,03	1200	220	0	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2 (H225, H319)	0,00
Dipropylenglykol	2569-71-8	16	10	21,5	154,17	131	1,02	8,1	2200	200	100	240	Bez klasifikace	0,00
Dipropylenglykol_2diethyl	1490-94-8	15,9	5,7	11,2	142,24	180,3	0,95	7,4111	1823,2	185,2	20	160	Bez klasifikace	0,00
Dipropylenglykol_2nonyl	29511-28-2	15,7	6,5	10	190,28	211,2	0,91	7,215	1650	170	50	230	Eye Irr. 2 (H319)	0,00
DMP	68-12-2	17,4	13,7	11,3	73,09	77	0,95	7,124	1485	214	20	160	Repr. 1B; Acute Tox. 4; Eye Irr. 2 (H302, H31...	0,00
DMSO	67-68-5	18,4	16,4	10,2	78,13	71,3	1,1	7,22	1936	212	20	190	Bez klasifikace	0,00
Epton_kaprolaktan	502-44-3	18	15	7,4	114,14	110,8	1,03	7,3815	1875,1	185	50	235	Eye Irr. 2 (H319)	0,00
Etanol	64-17-5	15,8	8,8	19,4	46,07	58,5	0,79	6,2042	1642,9	230,3	20	93	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319)	0,00
Ethylacetát	141-78-6	15,8	5,3	7,2	88,11	96,5	0,89	7,1018	1245	211	-10	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319)	0,00
Ethylol	141-78-6	15,8	5,3	7,2	88,11	96,5	0,89	7,1018	1245	211	-10	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319)	0,00

2.2 Parametry rozpouštědlové směsi

Složení směsi se zadává v hmotnostních jednotkách (implicitně v gramech) do žlutého sloupce tabulky rozpouštědel (sekce C).

Příklad: C6000 – toluen 60 %, aceton 10 %, ethylacetát 20 %, butanol 10 %.

Nalezeme/odrolujeme kolečkem myši příslušná rozpouštědla a postupně zapíšeme uvedené hodnoty hmotnosti (koncentrace). Automaticky se budou zobrazovat a přepočítávat grafy a parametry směsi, podle toho, jak budeme jednotlivé položky přidávat.



Kliknutím na záhlaví sloupce Hmotnost (g) se data seřadí vzestupně, opakovaným kliknutím pak sestupně. Takže po dvojném kliknutí na záhlaví sloupce vidíme v horních řádcích zvolenou směs.

Název složky	CAS	dD	dP	dH	Mh	Vm	Hustota	Antoine A	Antoine B	Antoine C	T _{od}	T _{do}	Klasifikace	Hmotnost (g)
Toluen	108-88-3	18	1,4	2	92,14	106,8	0,867	6,9533	1343,9	219,4	-20	137	Flam. Liq. 2; Repr. 2; Asp. Tox. 1; STOT RE 2; S...	60,00
Ethylacetát	141-78-6	15,8	5,3	7,2	88,11	98,5	0,89	7,1018	1245	211	-10	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319...	20,00
Aceton	67-64-1	15,5	10,4	7	58,08	74	0,785	7,0245	1161	224	-10	80	Flam. Liq. 2; Eye Irr. 2; STOT SE 3 (H225, H319...	10,00
Butanol	71-36-3	16	5,7	15,8	74,12	91,5	0,81	7,3637	1305,2	173,4	20	120	Flam. Liq. 3; Acute Tox. 4; STOT SE 3; Skin Irr. ...	10,00

V sekci B vidíme počáteční parametry směsi:

HSP praktické použití

Soubor Rozpouštědlo Výpočty Report Nápv

Počet složek: 4 Název směsi: HSP směsi

17,09 3,59 5,01

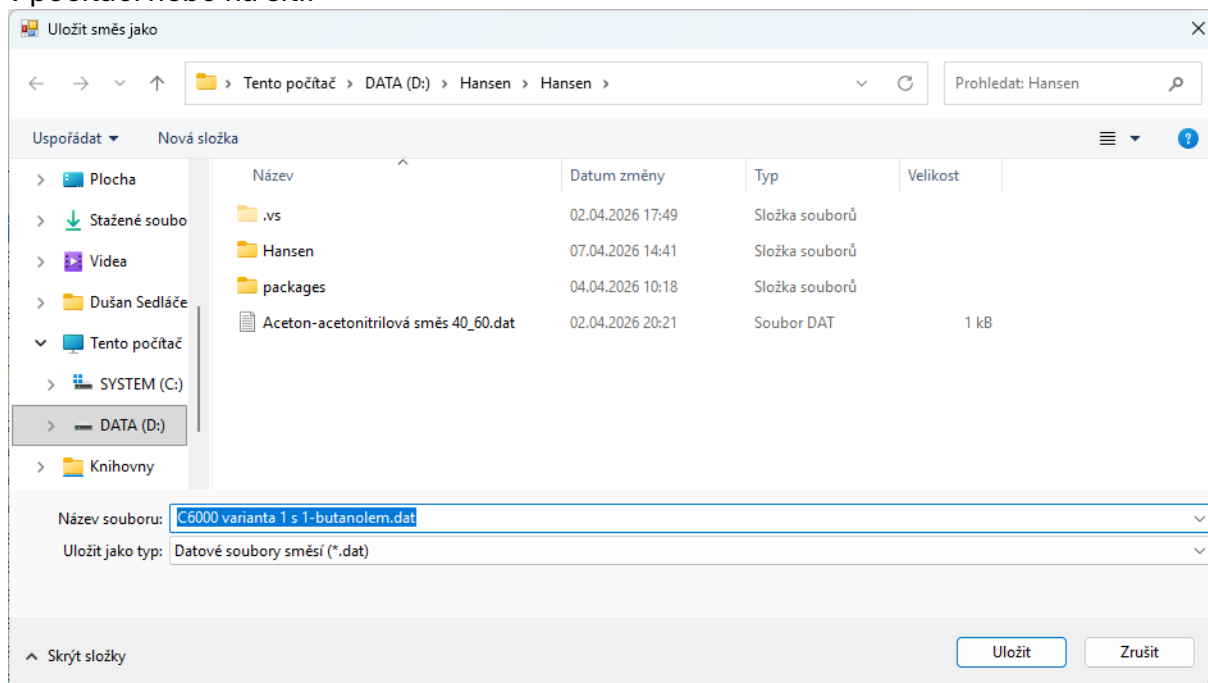
Počáteční RED: 0,83

Název složky	CAS	dD	dP	dH	Mh	Vm
Toluen	108-88-3	18	1,4	2	92,14	106,8
Ethylacetát	141-78-6	15,8	5,3	7,2	88,11	98,5
Aceton	67-64-1	15,5	10,4	7	58,08	74
Butanol	71-36-3	16	5,7	15,8	74,12	91,5

2.2.1 Uložení směsi

Do textového pole Název směsi můžeme zapsat název směsi s dalšími poznámkami a takto vytvořenou rozpouštědlovou směs můžeme uložit k dalšímu použití.

Menu: Rozpouštědlo – Uložit směs (nebo CTRL+S) směs uloží do zvoleného místa v počítači nebo na síti.



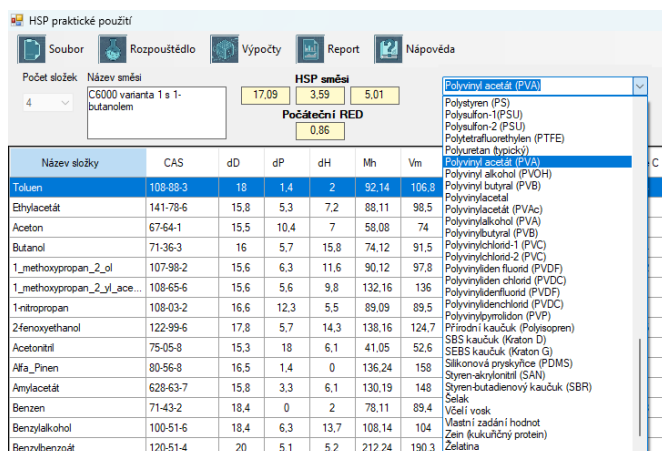
2.2.2 Načtení směsi

Menu: Rozpouštědlo – Načíst směs (CTRL+L) vybereme požadovanou směs a ta se načte do programu. Automaticky se vypočítají všechny sledované parametry.

Struktura souboru .dat je uvedena v příloze.

2.3 Parametry polymeru

Polymer zvolíme z rozbalovacího menu v sekci B.



Název složky	CAS	dD	dP	dH	Mh	Vm
Toluen	108-88-3	18	1.4	2	92.14	106.8
Ethylacetát	141-78-6	15.8	5.3	7.2	88.11	98.5
Aceton	67-64-1	15.5	10.4	7	58.08	74
Butanol	71-36-3	16	5.7	15.8	74.12	91.5
1_methoxypropan_2_ol	107-98-2	15.6	6.3	11.6	90.12	97.8
1_methoxypropan_2_yl_ace...	108-65-6	15.6	5.6	9.8	132.16	136
1-nitropropan	108-03-2	16.6	12.3	5.5	89.09	89.5
2-fenoxylethanol	122-99-6	17.8	5.7	14.3	138.16	124.7
Acetonitril	75-05-8	15.3	18	6.1	41.05	52.5
Alfa_Pinen	80-56-8	16.5	1.4	0	136.24	158
Amylacetát	628-63-7	15.8	3.3	6.1	130.19	148
Benzen	71-43-2	18.4	0	2	78.11	89.4
Benzylalkohol	100-51-6	18.4	6.3	13.7	108.14	104
Benzylbenzoát	120-51-4	20	5.1	5.2	212.24	190.3

Polymery v rozbalovacím menu:

- Polyvinyl acetát (PVA)
- Polystyren (PS)
- Polysulfon-1 (PSU)
- Polysulfon-2 (PSU)
- Polytetrafluorethylen (PTFE)
- Polyesteran (typický)
- Polyvinyl acetát (PVA)
- Polyvinyl alkohol (PVOH)
- Polyvinyl butyral (PVB)
- Polyvinylacetát
- Polyvinylacetát (PVAc)
- Polyvinylalkohol (PVA)
- Polyvinylbutyral (PVB)
- Polyvinylchlorid-1 (PVC)
- Polyvinylchlorid-2 (PVC)
- Polyvinylidenfluorid (PVDF)
- Polyvinylidenchlorid (PVDC)
- Polyvinylidenfluorid (PVDF)
- Polyvinylidenchlorid (PVDC)
- Polyvinylpyrrolidon (PVP)
- Polyvinylmoldon (PVM)
- Styren-akrylnitril (SAN)
- SBS kaučuk (Kraton D)
- SEBS kaučuk (Kraton G)
- Silikonová pryskyňice (PDMS)
- Styren-butadienový kaučuk (SBR)
- Selak
- Věci v roak
- Vlastní zadání hodnot
- Želatin

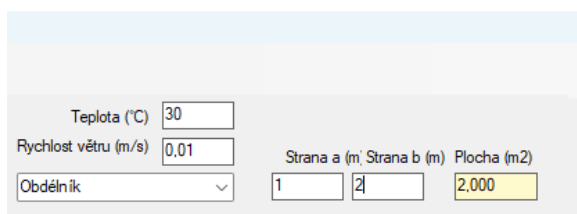
Po zvolení polymeru se automaticky přenesou do příslušných textboxů jeho parametry a přepočítají se grafy.

Je možné zadat i vlastní hodnoty dD, dP, dH a R0 volbou „Vlastní zadání hodnot.“

2.4 Parametry výpočtu

Jelikož je pro výpočty důležitá plocha odparu, ale i delší osa proudění vzduchu, uvažuje program plochy: čtverec, obdélník, kruh, ovál. Podle tvaru se doplňují hodnoty stran a,b, poloosy, poloměr kružnice a z nich se vypočítá plocha odparu.

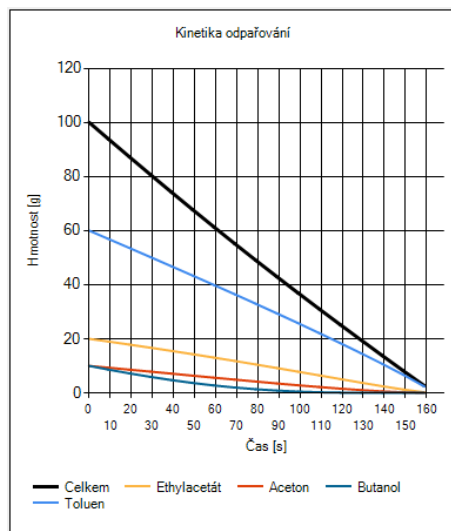
Další zadávané parametry jsou teplota děje a rychlost větru. Pro relativně statické odpařování lze nastavit rychlost proudění $0,01 \text{ ms}^{-1}$. Hodnota nesmí být nulová.



Teplota (°C)	30			
Rychlost větru (m/s)	0,01	Strana a (m)	Strana b (m)	Plocha (m ²)
Obdélník		1	2	2,000

Poznámka: Program automaticky zvolí pro výpočet osy proudění tu delší stranu bez ohledu, ve kterém textboxu je zapsaná.

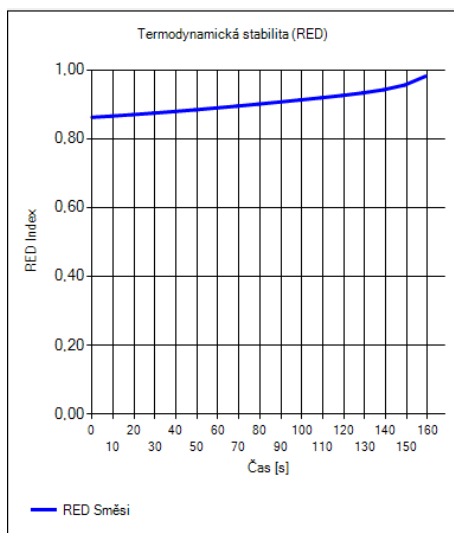
2.4.1 Kinetika odpařování



Tento graf vizualizuje úbytek hmotnosti (potažmo objemu) jednotlivých složek směsi rozpouštědel v čase během procesu schnutí. Jeho hlavním významem je poskytnout technologovi jasnou představu o celkové době odparu a o tom, jak se vlivem rozdílných těkavostí mění proporce kapalin v zasychajícím filmu. Křivky se počítají na základě relativních rychlostí odpařování jednotlivých čistých látek, které jsou v každém časovém kroku algoritmicky korigovány podle jejich aktuálního hmotnostního zastoupení ve směsi, okolní teploty a velikosti odpařovací plochy.

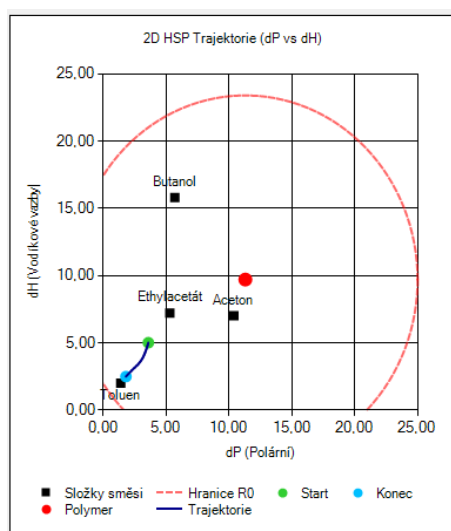
2.4.2 Termodynamická stabilita

Graf termodynamické stability znázorňuje vývoj parametru RED (Relativní energetická diference) v průběhu celého procesu odpařování. Zásadní význam tohoto grafu spočívá v predikci fázového rozpadu zasychajícího filmu. Pokud křivka kdykoliv během schnutí překročí kritickou hranici ($RED > 1$), indikuje to, že se z nátěru předčasně odpařila vhodná



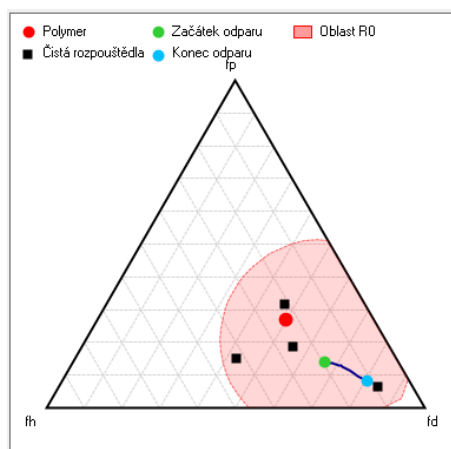
rozpuštědla a zbylá kapalina ztratila schopnost udržet polymer v roztoku. Graf je generován kontinuálním výpočtem posunu těžiště zbývající směsi v Hansenově prostoru a průběžným vyhodnocováním její termodynamické vzdálenosti od středu interakční sféry polymeru.

2.4.3 2d HSP trajektorie



Tento graf představuje dvourozměrný průmět Hansenova prostoru (zpravidla zachycující osu polárních sil a osu vodíkových vazeb), do kterého je zanesena interakční sféra polymeru a dráha, kterou urazí těžiště rozpouštědlové směsi během schnutí. Formulátorovi graf vizuálně odhaluje nejen to, zda směs ze sféry unikne, ale především kterým směrem se vychyluje (např. zda se zbytek v plechovce stává příliš polárním). Trajektorie se vykresluje programovým propojováním bodů, které reprezentují okamžité složení a termodynamické vlastnosti zbývající kapaliny v časových krocích simulace.

2.4.4 Teasův graf



Teasův graf je tradiční ternární (trojúhelníkový) diagram, který mapuje relativní příspěvky disperzních, polárních a vodíkových interakcí do jediné roviny. Ačkoliv postrádá absolutní prostorovou přesnost moderního 3D modelu, jeho význam spočívá v rychlé, intuitivní a historicky zavedené klasifikaci rozpouštědel (využívané hojně např. v oboru restaurování). Souřadnice pro tento graf se nepočítají na základě absolutních hodnot termodynamické energie, ale pomocí normalizace – každá ze tří složek

Hansenova parametru se vydělí jejich celkovým součtem. Tím vznikají zlomkové podíly, které vždy tvoří 100 % a lze je tak zanést na tři osy trojúhelníku.

2.5 Selektivní ochrana

Tato volba modifikuje výpočet tak, aby se po volbě Menu: **Výpočty – Hledání směsi rozpouštědel** (CTRL+Shift+S) hledaly takové směsi, které budou rozpouštět polymer zadaný v sekci volby polymeru, ale nebudou rozpouštět polymer zadaný v tomto okně.

Kliknutím na zaškrtnuté Aktivovat selektivní ochranu se zobrazí textová pole, kam se zadají parametry toho, co NECHCEME rozpouštět.

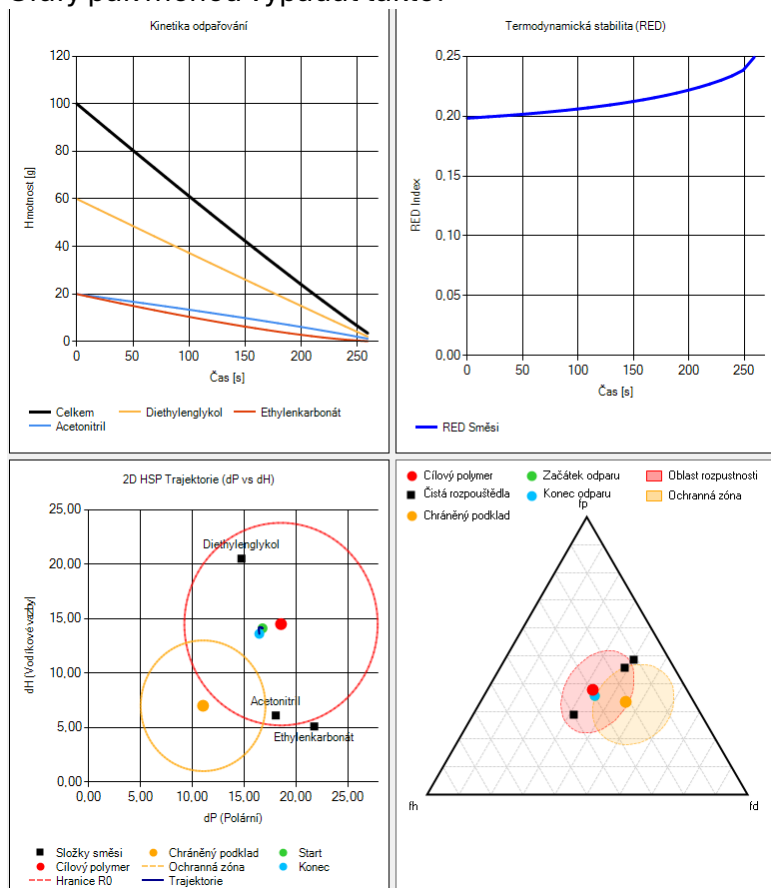
Cílový polymer (v hlavní sekci z databáze): To je ten, který vyberete z rozbalovacího seznamu. U něj program hledá směs, která ho spolehlivě **rozpustí**. Matematicky to znamená, že výsledná směs musí padnout *dovnitř* jeho interakční sféry ($RED \leq 1,0$).

Chráněný polymer (v sekci selektivní ochrany): To je podklad, jehož parametry ručně zadáte do těch nově zobrazených políček po zaškrtnutí ochrany. Zde program naopak hlídá, aby výsledná směs tento podklad **nerozpustila a ani nenarušila**. Směs musí zůstat bezpečně *vně* jeho interakční sféry s dodatečnou 10% bezpečnostní rezervou proti změknutí ($RED \geq 1,1$).

řada		Teplota (°C) <input type="text" value="30"/>		<input checked="" type="checkbox"/> Aktivovat selektivní ochranu	
Celofán		Rychlost větru (m/s) <input type="text" value="0,01"/>		Strana a (m) <input type="text" value="1"/>	
dD	dP	dH	R0	Plocha (m ²)	
16,10	18,50	14,50	9,30	1,000	
Čtverec				dD	dP
				15	11
				dH	R0
				7	6

Cílový polymer **Chráněný polymer**

Grafy pak mohou vypadat takto:



2.6 Report

Kliknutím na **Menu: Report** (CTRL+R) se vygeneruje pdf soubor obsahující parametry rozpouštědla, polymeru a vypočítané hodnoty. Soubor (report) lze uložit na disk pro další využití. Texty v reportu jsou upraveny podle toho, co aktuálně počítáme v závislosti na volbě „Aktivovat selektivní ochranu.“

Po vygenerování a uložení se soubor automaticky otevře.

3 HSP Optimalizátor

Po kliknutí na **Menu: Výpočty – Hledání směsí rozpouštědel** (CTRL+Shift+ S) se otevře nové okno.

HSP Optimalizátor je specializovaný výpočetní nástroj určený pro technologický screening a formulaci vícesložkových směsí rozpouštědel (2 – 4 složky). Program spojuje termodynamické principy Hansenových parametrů rozpustnosti (HSP) s modely kinetiky odpařování. Jeho hlavním cílem je predikovat optimální složení směsi, která zajistí nejen dokonalé rozpuštění cílového polymeru v kapalném stavu, ale udrží fázovou stabilitu systému i během celého procesu tvorby suchého filmu.

Podle volby „Aktivovat selektivní ochranu“ je výpočet modifikován, jak je uvedeno v předchozích kapitolách.

3.1 Podstata a metodika výpočtu

Program pro každou generovanou směs exaktně vypočítává dvě klíčové oblasti:

- A. **Termodynamická afinita (Startovní stav):** Pomocí lineárního směšovacího pravidla (váženého průměru hmotnostních zlomků) vypočítá program výsledný vektor směsi v trojrozměrném Hansenově prostoru. Následně určí vzdálenost tohoto bodu od těžiště cílového polymeru a vypočítá počáteční relativní energetickou diferenci (RED). Aby byla směs považována za rozpouštědlo, musí platit $RED \leq 1$.
- B. **Kinetická simulace (Fázová stabilita):** Termodynamická kompatibilita samotná pro nátěrové hmoty nepostačuje. Během schnutí se těkavější složky odpařují rychleji, což způsobuje dynamický posun těžiště zbylé směsi v Hansenově prostoru. Program v diskrétních časových krocích simuluje tento odpar (s ohledem na zadanou teplotu a odpařovací plochu) a vyhodnocuje parametr RED_{max} (nejvyšší dosaženou hodnotu RED během celého procesu). Pokud trajektorie směsi opustí interakční sféru polymeru ($RED_{max} > 1$), program ji označí za fázově nestabilní.

3.2 Kombinatorický prostor a výpočetní náročnost

Hledání ideální receptury probíhá metodou paralelního prohledávání stavového prostoru hrubou silou (brute-force algoritmizace). Počet posuzovaných kombinací roste exponenciálně a závisí na dvou faktorech: na počtu dostupných látek v databázi (N) a na zvoleném krokování koncentrační mřížky (tzv. Simplex Lattice Design).

Matematicky je celkový počet testovaných směsí dán součinem kombinačního čísla $\binom{N}{k}$ a počtu koncentračních iterací P pro daný počet složek k:

- **Dvousložkové směsi (k=2):** Při krokování po 5 % program testuje 19 různých koncentračních poměrů pro každý unikátní pár. Pro standardní databázi o 99 látkách to představuje přibližně **92 169** unikátních stavů.
- **Třísložkové směsi (k=3):** Při krokování po 10 % existuje 36 platných koncentračních variací pro každou trojici. Pro 99 látek objem výpočtů skokově narůstá na téměř **5 646 564** simulací.
- **Čtyř složkové směsi (k=4):** Z důvodu prevence tzv. kombinatorické exploze je krokování algoritmicky omezeno na 20 %. I přesto program pro 99 látek generuje a kineticky analyzuje více než **15 057 504** unikátních směsí.

Každá z těchto kombinací prochází kompletní matematickou simulací odpařování. Díky využití vícevláknového zpracování probíhá screening v řádu desítek sekund až minut v závislosti na počtu vláken procesoru a jeho taktování.

3.3 Logika a fungování omezujících filtrů

Protože výpočetní jádro produkuje obrovské množství dat, je klíčovou součástí programu inteligentní systém omezování výběru (filtrace). Filtrační modul operuje striktně na bázi **booleovské konjunkce (logické AND)**. To znamená, že aby byla konkrétní směs propuštěna do finální výsledkové tabulky, musí bez výjimky splnit naprosto všechna zadaná kritéria.

Systém filtrace pracuje v následujících vrstvách:

- **Termodynamické ořezání (Pre-filtr):** Aplikuje se ještě před zahájením náročné kinetické simulace. Směsi, jejichž počáteční RED překračuje limit (typicky 0,9), jsou okamžitě zahozeny, protože nemají fyzikální předpoklad polymer rozpustit.
- **Omezení fázového rozpadu (RED_{max}):** Uživatel může explicitně definovat maximální povolenou toleranci RED během schnutí. Program odfiltruje všechny receptury, které tuto hodnotu na své odpařovací trajektorii, byť jen na jedinou sekundu překročí.

- **Kumulativní složkový filtr:** Paměťový filtr umožňující specifikovat povinnou přítomnost nebo striktní zákaz určitých bází. Uživatel může zadat více podmínek současně (např. systém *musí* obsahovat xylen a zároveň *nesmí* obsahovat aceton). Program podporuje částečnou textovou shodu.
- **Legislativní a CLP blacklist:** Filtr systematicky analyzuje bezpečnostní profil všech složek ve směsi. Zadá-li uživatel vyloučení konkrétních standardních vět o nebezpečnosti (např. H350 pro karcinogeny), program vyřadí jakoukoliv směs, v níž se vyskytuje alespoň jedna takto klasifikovaná báze, bez ohledu na její hmotnostní zastoupení.



Program přebírá k výpočtům parametry polymeru a podmínek odpařování ze sekce B z hlavního formuláře.

Postup:

- Zvolíme počet složek směsi (2 až 4) a spustíme výpočet kliknutím na tlačítko „Spustit hledání.“ V dolní části formuláře se ve stavovém řádku zobrazují aktuální informace o stavu výpočtu, ale i o použitých omezeních.
- Po dokončení výpočtu se zobrazí prvních 2000 nejlepších kombinací rozpouštědel. Směsi jsou seřazeny vzestupně podle RED_{max} .
- Nyní můžeme omezovat výběr zadáním podmínek. Program filtruje ze všech nalezených variant, viz informace ve stavovém řádku: „Zobrazeno: 2000 (z 3228498) >>> Aktivní filtry: RED_max: 1“, tedy NE jenom ze zobrazených 2000.

Složení směsi (hmot. %)	Start RED	Max RED	Čas odparu [s]	Rychlost	Temodynamika	CLP Profil
Aceton (10%) + MEK (30%) + Propylenkarbonát (60%)	0,24	0,20	299	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE 3 (H225, H319, H336); Eye Irrit. 2 (H319)
Ethylenkarbonát (10%) + MEK (40%) + Propylenkarbonát (50%)	0,23	0,21	289	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Alfa_Pinen (20%) + Ethylenkarbonát (50%) + MEK (30%)	0,10	0,21	229	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Skin Irrit. 2; Skin Sens. 1; Asp. Tox. 1 (H226, H315, H317, H...
Ethylenkarbonát (50%) + MEK (30%) + Mesitylen (20%)	0,12	0,21	229	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Aceton (20%) + MEK (20%) + Propylenkarbonát (60%)	0,25	0,21	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE 3 (H225, H319, H336); Eye Irrit. 2 (H319)
Ethylenkarbonát (50%) + MEK (30%) + Perchlorethylen (20%)	0,12	0,22	239	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Ethylenkarbonát (50%) + MEK (40%) + Propylenkarbonát (10%)	0,26	0,22	289	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Cyklopentanon (30%) + Ethylenkarbonát (50%) + MEK (20%)	0,27	0,22	319	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (20%) + MEK (30%) + Propylenkarbonát (50%)	0,24	0,22	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Cyklopentanon (40%) + Ethylenkarbonát (40%) + Methylal (20%)	0,18	0,22	279	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (40%) + Ethylenkarbonát (40%) + Trichlorethylen (20%)	0,22	0,22	279	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (30%) + Ethylenkarbonát (40%) + n-propylpropanát (30%)	0,20	0,22	249	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Butylal (20%) + Ethylenkarbonát (50%) + MEK (30%)	0,17	0,23	229	Rychlé	Kineticky stabilní	Skin Irrit. 2 (H315); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Ey...
Cyklopentanon (40%) + Ethylenkarbonát (40%) + n-propylpropanát (20%)	0,21	0,23	279	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (30%) + Ethylenkarbonát (40%) + Trichlorethylen (30%)	0,22	0,23	249	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (30%) + Ethylenkarbonát (40%) + n-butylpropanát (30%)	0,20	0,23	239	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (50%) + Ethylenkarbonát (40%) + Sírouhlik (10%)	0,22	0,23	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (40%) + Ethylenkarbonát (40%) + Sírouhlik (20%)	0,23	0,23	279	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Diethylenglykoldiether (20%) + MEK (30%) + Propylenkarbonát (50%)	0,21	0,23	229	Rychlé	Kineticky stabilní	Bez klasifikace; Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE 3 (H225, H319, H336)...
Cyklopentanon (50%) + Ethylenkarbonát (40%) + Trichlorethylen (10%)	0,23	0,23	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Cyklopentanon (50%) + Ethylenkarbonát (40%) + Methylal (10%)	0,21	0,23	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...
Ethylenkarbonát (60%) + MEK (30%) + Methylacetát (10%)	0,29	0,23	289	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Ethylenkarbonát (50%) + MEK (20%) + Toluén (30%)	0,14	0,23	209	Rychlé	Kineticky stabilní	Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H373); Flam. Liq. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE ...
Cyklopentanon (50%) + Ethylenkarbonát (40%) + n-propylpropanát (10%)	0,23	0,23	309	Rychlé	Kineticky stabilní	Flam. Liq. 3; Eye Irrit. 2 (H226, H319); Eye Irrit. 2; STOT RE 2 (H319, H37...

Zobrazeno: 2000 (z 3228498) >>> Aktivní filtry: RED_max: 1 | Bez CLP: H302 | Složky: [-NITROPROPAN]

Ukázka pro Acetát butyrát celulózy (CAB) při 30 °C, rychlosti proudění 0,01 m.s⁻¹, plocha 1 m², čtverec. Ve stavovém řádku je vidět použití filtrů.

D. Po dvojkliku myši na vybranou variantu v tabulce se hodnoty přenesou do tabulky na hlavním formuláři. S takto vytvořenou směsí lze dále pracovat, pojmenovat ji, popsat, uložit apod. jak je uvedeno v předchozích kapitolách.

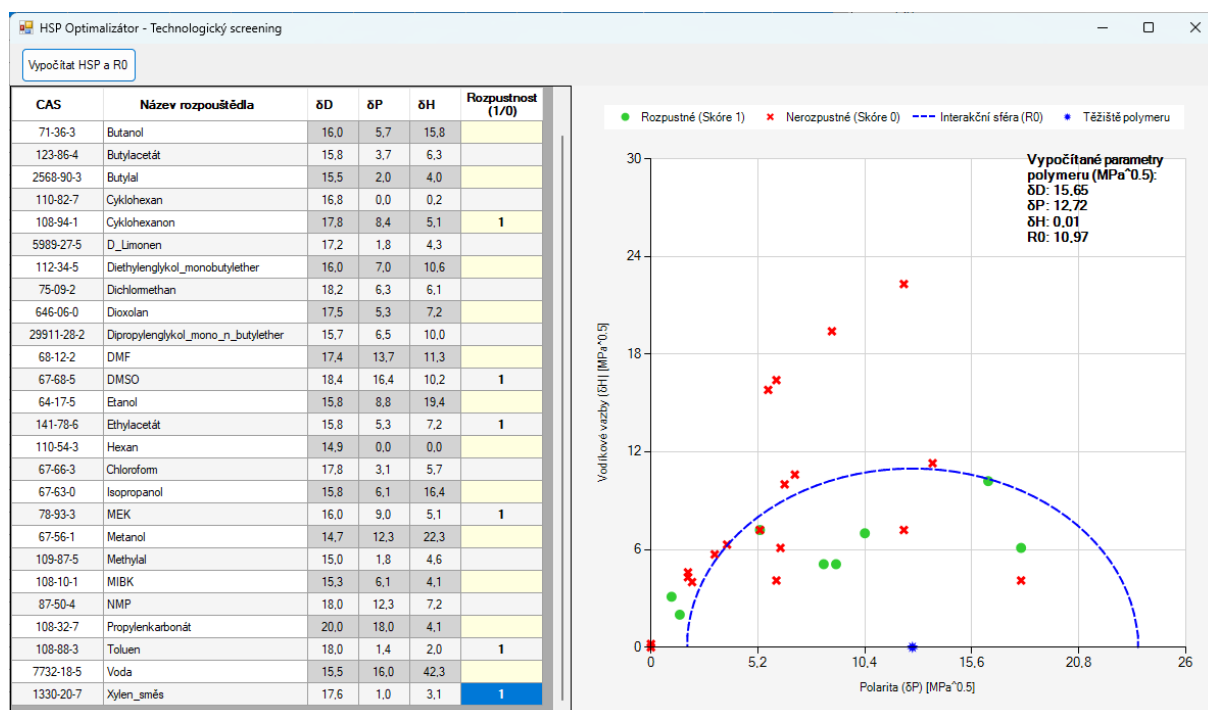
4. Stanovení parametrů polymeru

Po volbě Menu: **Výpočty – Stanovení parametrů polymeru** (STR+Shift+P) se zobrazí tabulka s vybranými rozpouštědly tvořícími seznam kalibrační sady. Tuto lze měnit a doplňovat, viz kapitola 5.2.1. Do tabulky se zadávají výsledky experimentálních prací stanovení rozpustnosti (neznámého) polymeru v testovací sadě rozpouštědel.

Po zadání Hodnot 1 = rozpouští, 0 = nerozpouští ve sloupci Rozpustnost (1/0) se provede výpočet a spočítají se Hansenovy parametry polymeru dD , dP , dH , $R0$.



Hodnoty 0 se nemusí zadávat. Program bere v potaz jen řádky s hodnotami 1 a pokud není v daném řádku zadaná hodnota 1, bere ji automaticky jako 0.



5. Menu Nápověda

5.1 Návod

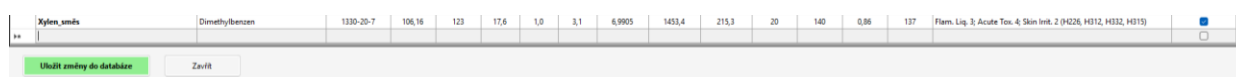
Po volbě Menu: **Nápověda – Manuál** (F1) se zobrazí pdf soubor nápovědy.

5.2 Úprava databáze

5.2.1 Rozpouštědla

Po této volbě se zobrazí kompletní databáze rozpouštědel, kterou lze libovolně editovat, přidávat další rozpouštědla a definovat kalibrační sadu.

Nová položka se přidává kliknutím na spodní řádek tabulky:



Xylen, smís	Dimethylbenzen	1330-20-7	106,16	123	17,6	1,0	3,1	6,9905	1453,4	215,3	20	140	0,86	137	Flam. Liq. 3; Acute Tox. 4; Skin Irrit. 2 (H226, H312, H332, H315)

Doplněnou/upravenou databázi uložíme kliknutím na tlačítko „Uložit změny do databáze.“ Program se automaticky restartuje a načtou se aktualizovaná data.

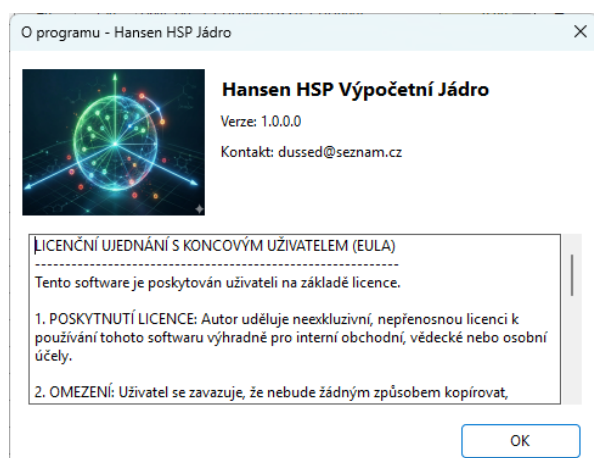
Upozornění: Je nutné zadat všechny položky, protože jednotlivé výpočetní moduly s daty pracují a pokud by nebyly zadány může dojít k chybnému výpočtu nebo pádu programu (např. dělení nulou).

5.2.2 Polymery

Postup je analogický jako v kapitole 4.2.1 jen s tím rozdílem, že se zobrazí databáze polymerů.

5.3 O Programu

Zobrazí se okno s licenčními podmínkami a informacemi o software:



6. Klávesové zkratky

CTRL+E	Export databáze do Excel
ALT+F4	Ukončení programu
CTRL+L	Načtení směsi (Load)
CTRL+S	Uložení směsi do souboru (Save)
CTRL+Shift+O	Výpočet průběhu odpařování směsi
CTRL+Shift+S	Výpočet směsí rozpouštědel
CTRL+Shift+P	Výpočet HSP a R0 polymeru na základě empirických dat
CTRL+R	Zobrazení reportu v pdf
F1	Zobrazení manuálu
CTRL+O	Zobrazení okna O Programu...

7. Systémové požadavky

Minimální konfigurace (pro plynulý výpočet 2 až 3složkových směsí)

- Procesor (CPU): 4jádrový procesor (např. Intel Core i3, AMD Ryzen 3)
- Operační paměť (RAM): 8 GB
- Pevný disk: Standardní SSD disk (program a databáze zabírají méně než 5 MB, nicméně SSD je klíčové pro chod operačního systému)
- Monitor: Rozlišení 1366 x 768 px

Doporučená konfigurace (pro okamžitou odezvu u 4složkových systémů)

- **Procesor (CPU):** Moderní 8 a vícejádrový procesor (např. Intel Core i7 / i9, AMD Ryzen 7 / 9).
Vysvětlení: Výpočetní jádro naplno využívá asynchronní paralelní programování. Čím více výpočetních vláken (threads) procesor nabízí, tím dříve je screening milionů kombinací dokončen.
- **Operační paměť (RAM):** 16 GB až 32 GB.
Vysvětlení: Výsledky tisíců vyhovujících receptur se ukládají do operační paměti RAM pro umožnění bleskové interaktivní filtrace v reálném čase.
- **Pevný disk:** NVMe SSD disk
- **Monitor:** Rozlišení 1920 x 1080 px (Full HD) a vyšší. Formuláře s datovými tabulkami a soustavou grafů jsou optimalizovány pro širokoúhlé zobrazení.

Jelikož je aplikace postavena na platformě .NET, ke svému bezchybnému spuštění vyžaduje instalaci následujících systémových součástí:

1. **Operační systém:** Windows 10 (**64-bit**) nebo Windows 11.
2. **Běhové prostředí:** Microsoft .NET Framework 4.7.1 (nebo novější). Ve Windows 10 a 11 je obvykle již předinstalován jako součást aktualizací systému.

3. **Databázový ovladač:** Program čerpá data ze souboru Solvents.data, který využívá strukturu databáze MS Access. Aby systém Windows dokázal s tímto souborem komunikovat, musí být v počítači nainstalován „**Microsoft Access Database Engine 2016 Redistributable**“.
- *Poznámka:* Pokud máte nainstalovanou plnou desktopovou verzi kancelářského balíku MS Office (s aplikací Access), je tento ovladač již přítomen. Pokud MS Office nemáte, nebo používáte pouze webovou verzi Office 365, je nutné tento ovladač (zdarma) stáhnout ze stránek společnosti Microsoft a nainstalovat. Bez něj program při startu ohlásí chybu spojení s databází.
 - <https://support.microsoft.com/cs-cz/office/sta%C5%BEen%C3%AD-a-instalace-microsoft-365-access-runtime-185c5a32-8ba9-491e-ac76-91cbe3ea09c9>
 - Instalace databázového ovladače:
 1. Program komunikuje s databází prostřednictvím technologie Microsoft Access. Pokud na svém počítači nemáte nainstalovaný plný desktopový kancelářský balík MS Office, nebo používáte pouze předplatné Office 365 (tzv. Click-to-Run instalaci), je nutné do Windows přidat bezplatný ovladač, aby program mohl databázi přečíst.
 2. Otevřete oficiální stránku podpory Microsoftu na odkazu výše.
 3. Na stránce sjedte mírně dolů do sekce „Stahování a instalace Microsoft 365 Access Runtime“.
 4. Z rozevíracího seznamu vyberte jazyk čeština a následně klikněte na tlačítko pro stažení 64bitové verze.
 5. Stažený soubor (instalátor) jednoduše spusťte a potvrďte instalaci.
 6. Po dokončení instalace bude váš systém připraven a software „Hansen.exe“ ihned s databází Solvents.data naváže spojení.