

高分子化学解题软件的设计与开发

郭霖^{1*}, 王婧², 姜安宝³, 丛海林¹, 隋坤艳^{1*}, 王逸凡¹, 张小艳¹, 王久兴¹, 黄林军¹,
胡浩¹, 彭乔虹¹, 随欣¹

(1. 青岛大学材料科学与工程学院, 青岛 266071; 2. 化学工业出版社有限公司, 北京 100011;
3. 青岛大学现代教育技术中心, 青岛 266071)

摘要:根据教学需要, 基于计算思维, 运用工具化、程序化解决问题的方法, 设计、开发了高分子化学解题软件, 并将其用于高分子化学教学实践, 取得显著效果。该软件将逐步聚合、自由基聚合、共聚合及绪论相关的常见计算问题抽象为 63 个典型题型, 解决了高分子化学教学中重要的计算问题及计算结果的可视化问题, 化解了教学难点; 并把计算思维, 以及工具化、程序化解决专业相关问题的方法示范给学生, 使其相关意识得到培养。该软件用于辅助教师进行高分子化学教学, 能显著提高工作效率, 并能支撑开展“以学为中心”的创新模式教学。进一步开发的手机网页版等在线版, 则使所有学生都能非常便捷地随时随地通过手机上网使用该软件, 进行云计算, 并在其支撑下, 自主进行问题探究及知识构建, 实现高效、便捷的深度学习。

关键词:高分子化学; 解题软件; 设计; 开发; 计算; 可视化; 云计算

1 问题提出

高分子化学中的一些计算问题以及计算结果的可视化问题, 如自由基聚合、缩合聚合、共聚合以及绪论中的计算问题、共聚合中达到任意转化率时所得共聚物组成直方图的绘制问题等, 是高分子化学教学, 以及进行相关聚合实验或配方的设计与优化、实验结果的预测过程中, 必然会遇到、必须要解决的问题。这些问题不仅常见, 而且重要。

为了得到这些计算问题的正确答案, 通常需要学习、掌握特定的方法, 而且需要进行很多繁琐的计算, 如果人工完成, 会出现做不出、做不对和效率低的问题, 解题过程枯燥耗时, 效率低, 可靠性差, 易出错, 且缺少检验计算结果对错的有效手段。

为了解决这些问题, 人们从多方面的进行了努力, 包括改进相关内容的讲授方法^[1~5]、建设高分子化学题库^[6,7], 及采用多媒体手段或开发多媒体课件等^[8,9], 并都取得了良好效果。

改进讲授方法, 可以使学生更好地学会, 可以给思路、给方法, 但却无法给结果, “授之以渔”, 而未“授之以鱼”, 即, 只解决了“渔”的问题, 而未解决“鱼”的问题, 因而未能从根本上解决问题。

而建设高分子化学题库的方法, 则只能给出具体某一道计算题的答案, 无法给出这一类计算题的答案, 即, 只能解决“一道题”的问题, 无法解决“一类题”的问题, 也没能从根本上解决问题。

采用多媒体手段及开发多媒体课件等, 则主要解决了高分子化学教学中, 部分特定问题计算结果的可视化问题, 虽然给相关问题的教学带来了很大帮助, 但并未解决高分子化学教学中其他常见计算问题。

10. 14028/j. cnki. 1003-3726. 2021. 01. 013

收稿: 2019-09-21; 修回: 2020-10-22;

基金项目:山东省普通高等学校教学改革试点课程“高分子化学”项目(鲁教高字[1999]27号), 山东省省级精品课程“高分子化学”项目(150410030), 山东省一流课程“高分子化学”暨青岛大学“以学为中心”课程“高分子化学”项目(RC1900004947), 青岛大学研究生教育质量提升计划“计算机在化学中的应用”项目(RC19000016633), 全国高等院校化工类及相关专业数字化教学项目(高分子化学在线解题软件);

作者简介:郭霖和王婧为共同一作;

* **共同通讯联系人:**郭霖, 教授, 主要研究方向为高分子化学以及计算机在化学中的应用。E-mail: guolin@qdu. edu. cn; 隋坤艳, 教授, 主要从事高分子材料相关科研及教学工作。E-mail: sky@qdu. edu. cn.

若能设计一种高分子化学解题软件,使上述计算问题及计算结果的可视化问题可以借助计算机完成,则上述问题皆可完美解决,既可使问题变得容易,从而令使用者得以学会,并解决自己不会做的问题,又可节省时间、提高效率、避免出错,在实现计算过程便利性的同时,保证计算结果及答案的准确性及可靠性,甚至可以检验和校对人工计算结果或已有答案的对错。

为此,我们设计、开发了高分子化学(在线)解题软件,并将其用于教学。

2 问题分析与解决

2.1 问题分析

要能将问题交给计算机来完成,需要问题是可计算的,并能被正确理解和抽象为纯粹的数学问题。高分子化学中的上述计算问题及计算结果的可视化问题,就具备这些特点。因此,可在深入理解、全面考虑、科学抽象、合理归类、准确描述的基础上,通过编写程序,将其交给计算机来完成。

2.2 解决方法

为了将上述计算问题交给计算机来完成,我们采取了“分析+抽象+归纳+概括”的方法,大致分为五个步骤:

第一步:找到或设计出足够多的应用例,并对问题进行正确的理解、分析与定义。这需要足够的高分子化学专业知识。

第二步:找出纷繁变化背后的共同规律,将问题抽象成纯粹的数学问题。这不仅需要足够的高分子化学专业知识,从而可以对问题有透彻的理解,并能把握和抽象、概括出问题的本质与共性,而且需要足够的数学知识及抽象、概括能力。

第三步:设计程序解决问题。这不仅需要足够的计算机知识及编程能力,还需要对高分子化学教学需求及所涉及的高分子化学专业问题的透彻理解和整体把握。

第四步:调试、测试程序。这同样不仅需要足够的计算机知识及编程能力,也需要对高分子化学教学需求及所涉及的高分子化学专业问题的透彻理解和准确把握。

第五步:在教学实践中运用程序。在教学或/及科研实践中找到需要以及可以用本软件解决的实际问题,并运用本软件解决这些教学或/及科研实践中的具体问题。要求有足够的高分子化学教学实践经验或高分子化学相关科研经历,对软件所涉及的、可以解决的高分子化学计算问题及软件可能的实际应用场景有足够的了解,并有足够的高分子化学专业知识,从而能够知道问题是什么。

比如,在自由基聚合相关的众多问题中,有相当一部分是可计算的计算问题。这些计算问题虽然看似很多,且千变万化^[10~30],但本质上,其实基本就是一道计算题——即有关聚合速率、聚合时间、单体转化率、聚合物聚合度或分子量、分子量分布、双基终止方式、链转移次数、大分子主要生成方式,以及单体、引发剂、溶剂、分子量调节剂浓度等的计算问题,分子量分布曲线的绘制问题。只不过根据实际问题不同,已知条件和需要计算的量会有所不同而已。

这些变化虽多,却相对有限,所以可以通过枚举,将其一一列举出来,并给出解决方法^[4],分别交给计算机来完成。

经过分析,我们将其归纳为约20种典型情况,其中部分比较重要的常见变化为:

题型1:

已知配方(引发剂浓度 $[I]$ 及单体浓度 $[M]$,如果是溶液聚合的话还已知或能计算得到溶剂浓度 $[S]$)及相关动力学参数(引发剂分解速率常数 k_d 、引发效率 f 、链增长速率常数 k_p 及链终止速率常数 k_t),计算聚合初期的聚合速率 R_p 、链引发速率 R_i 、自由基浓度 $[M^*]$ 、自由基(平均)寿命 τ 、动力学链长 ν 、在给定聚合时间(通常是聚合初期或在做必要近似前提下的一定长,甚至比较长时间内)所能达到的转化率或达到给定转化率(不能太高,一般以不发生自动加速现象为限)所需的聚合时间等;在此基础上,可由

已知的双基终止方式(偶合终止所占比例 C 及歧化终止所占比例 D)及向单体链转移常数 C_M 、向引发剂链转移常数 C_I 、向溶剂(或分子量调节剂)链转移常数 C_S 等,进而求出聚合初期所得聚合物的数均聚合度 \bar{X}_n 或数均分子量 \bar{M}_n (乃至重均聚合度 \bar{X}_w 或重均分子量 \bar{M}_w 、分子量分布宽度 d)、聚合物的主要生成方式(即双基终止、向单体链转移、向引发剂链转移及向溶剂或分子量调节剂链转移在数均聚合度倒数中所占的比例,或对聚合物生成的贡献)、平均每个活性中心的转移次数、平均每个聚合物分子中含有的引发剂残基数、平均每个聚合物分子生成所需时间等;如果需要调低所得聚合物的分子量,还可在此基础上进一步计算需要加入的分子量调节剂的量(或对配方进行的其他改变,如改变引发剂浓度,或加入溶剂改变单体浓度等)。

题型 2:

与题型 1 基本相同,只不过已知的是聚合物的数均聚合度 \bar{X}_n 而非双基终止方式,相应地,要求的量中的数均聚合度 \bar{X}_n 相应地变为双基终止方式(偶合终止所占比例 C 及歧化终止所占比例 D)。

题型 3:

与题型 1 基本相同,变化是,已知的是聚合物的数均聚合度 \bar{X}_n ,而非引发剂浓度,相应地,要求的量中的数均聚合度变为引发剂浓度。

题型 4:

类似题型 1,不同之处在于,已知条件中直接给出聚合初期的聚合速率 R_p 及链引发速率 R_i 。

题型 5:

类似题型 1,差异是,已知条件中直接给出聚合初期的聚合速率 R_p 、聚合初期所得聚合物的数均聚合度 \bar{X}_n 及自由基(平均)寿命 τ 。

题型 6:

也可视作题型 1 的一种变化,变化在于,已知的是达到尚未发生自动加速现象的某给定聚合时间时,所得到的聚合物的质量(或转化率),以及所得聚合物的数均聚合度,相应地,要求的量也变为双基终止方式,即求偶合终止所占比例 C 及歧化终止所占比例 D 。

以上这些题型都有实际的应用场景与之对应。

3 软件开发

3.1 功能设计

相关问题的解决,采取使用者与计算机合作的方式共同完成。

使用者通过菜单实现问题的选择,通过电脑键盘或手机触屏操作实现已知条件的数据输入。

使用者只需知道所要解决的“问题是什么”(使用者通过本软件解决问题所需具备的专业知识也仅限于此),并能做出正确选择和将其告知计算机即可,无需知道具体“该怎么做”,甚至,某些情况下,无需知道具体“该做什么”。而计算机则要能根据从使用者处获取的有关“问题是什么”的信息,判断使用者应该“想做什么”,以及自己“能做什么”、“该做什么”、“该怎么做”及“该给出哪些计算结果”,给出必要提示及思路(公式),并执行任务,和将正确的计算结果及数据图按要求给出;在此基础上,还要能根据需要,告诉使用者,软件“是怎么做到的”,或者解决此类问题“该怎么做”。也就是说,要求软件不仅要“能做到”、“能做对”,还要“能教”、“能教会”,不仅可以帮助使用者解决相关计算问题、完成相关计算及绘图任务,还要能教使用者学会如何解决这些计算问题,以及如何完成这些计算任务,即,既解决“鱼”的问题,又解决“渔”的问题;不仅能解决“一道题”,而且能解决“一类题”。

3.2 功能实现

3.2.1 开发平台及语言 单机版基于 Authorware 开发,作品可打包成 exe 文件,在 Windows 平台脱离开发工具独立运行。

手机网页版等在线版则是基于 JavaScript 和 Python 开发,可通过手机在线访问,实时运行,进行云计算。

3.2.2 功能实现 我们设计了两级菜单或任务层供使用者选择,其中的一级菜单或第一层,供使用者确定问题所属聚合反应类型(或章,如,是属于缩聚、自由基聚合还是共聚合等),二级菜单或第二层,则供使用者进一步选择所遇到的具体问题,判断是属于哪一类计算问题,或其中的哪一个题型或变化。要求使用者具有一定的高分子化学知识(主要是缩聚、自由基聚合、共聚合及绪论等章相关的知识),并能据此对所遇到的问题做出正确判断和选择。

使用者做出选择后,软件要能根据该题目类型的计算需要,分步、依次、逐项地提示使用者输入所需数据。输入界面中要能对拟输入的数据给出全面、准确且必要的说明、提示、要求、检验和限制等,包括提示拟输入数据的正确单位、合理的数值范围及输入方式等,并能拒绝超出合理范围的数据;在每一步计算所需的最后一个已知条件(已知量)被正确输入并提交计算申请后,软件会按预置方法自动进行计算,并将计算结果按要求给出,还能根据需要,进一步给出解题思路及所用公式(手机网页版等在线版本采取的是提前给出公式的方式),以告诉使用者问题是如何解决的,或提示、教会使用者该如何解决此类问题。

软件还要能允许使用者在需要时,随时通过菜单或相应按钮,清空已经输入的全部或部分已知条件,并按提示要求输入新的数据,进行新的计算,得到新的结果;或者,允许随时跳转或返回到同类聚合反应的其他计算问题,或其他类型聚合反应相关的任意计算问题,或关闭、退出。

总的流程图如图 1 所示:

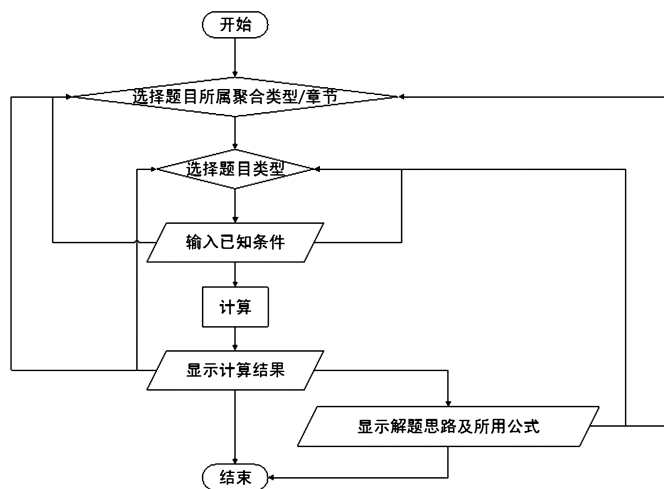


图 1 高分子化学解题软件流程图

Figure 1 Flow chart of the problem-solving software for polymer chemistry

软件功能实现则如图 2~7 所示。

3.2.3 结果验证 我们对软件进行了反复调试,选取了通行的多种国内外教科书及习题集^[10~30]中的习题进行了反复验算,验算结果表明,本软件的计算结果与这些书中所给的正确答案,或者我们人工计算的正确结果完全一致。

4 应用举例

我们已将该软件用于教学,进行了七年七轮次的教学实践,包括帮助教师快速、准确地得到或验证教材及参考书中相关计算题的答案,帮助教师在编写相关作业题、出考卷时快速、准确地拟定答案,以及帮助教师批改作业等等,并在此实际应用过程中,将其不断丰富、完善。

七年多的实际应用表明,该软件能大大提高相关问题教学过程中教师的工作效率,把教师从涉及和相

关问题的繁琐计算中解放出来,并避免答案出现错误。

考虑到日益广泛的手机应用,我们还设计、开发了包括手机网页版在内的在线版,实现了所有学生对该软件的手机在线使用,帮助学生高效学习、自主学习。

4.1 应用例 1^[10,4]

今使 1.00mol 己二胺与 0.99mol 己二酸及 0.01mol 己酸进行缩聚^[10,4],求反应程度为 0.990 时所得尼龙 66 的数均聚合度 \bar{X}_n , 并分析其端基情况。

计算结果如图 2 所示:

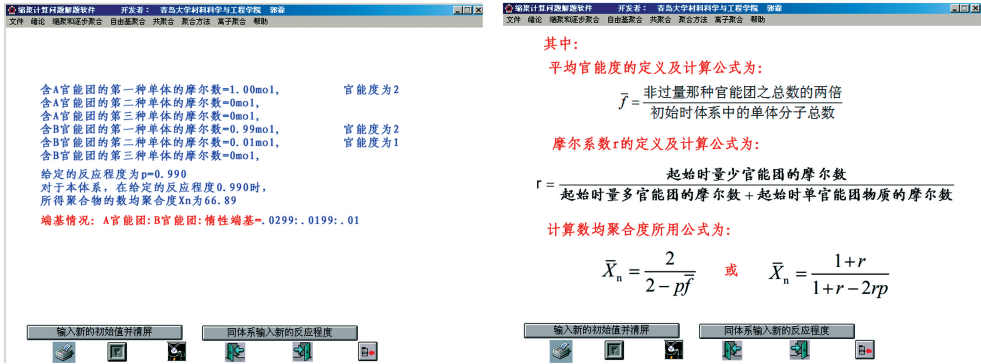


图 2 应用例 1 的计算结果截屏

Figure 2 Screenshot of calculation results of application example 1

4.2 应用例 2^[10,4,12,16,21~23]

邻苯二甲酸酐、甘油、乙二醇按摩尔比 1.50 : 0.99 : 0.002 进行缩聚^[10,4,12,16,21~23],分别按 Carothers 法和 Flory 统计法计算其凝胶点。

计算结果如图 3 所示:

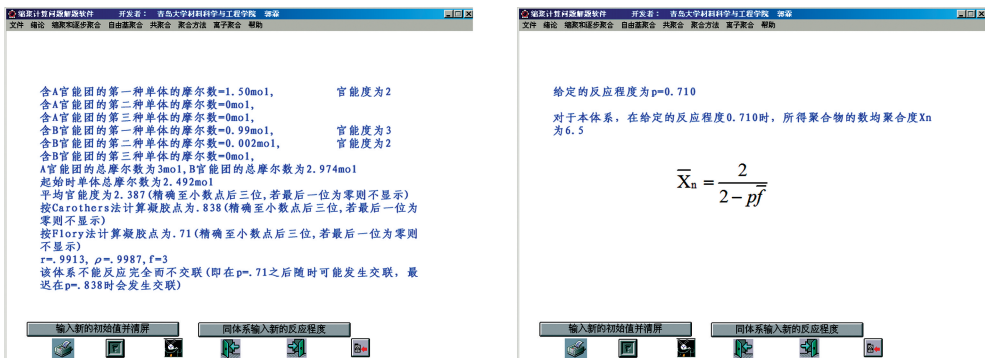


图 3 应用例 2 的计算结果截屏

Figure 3 Screenshot of calculation results of application example 2

4.3 应用例 3^[12,21,31]

醋酸乙烯酯在 60℃ 以偶氮二异丁腈 (AIBN) 为引发剂进行本体聚合^[12,21,31],其动力学数据如下:
 $[I] = 2.06 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$, $[M] = 10.86 \text{ mol/L}$, $f = 1$, $k_d = 1.16 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $k_p = 3.7 \times 10^3 \text{ L/mol} \cdot \text{s}$, $k_t = 7.4 \times 10^7 \text{ L/mol} \cdot \text{s}$, $C_M = 1.91 \times 10^{-4}$, 歧化终止占动力学终止的 90%^[12,21,31],求聚合初期的聚合速率 R_p 、自由基浓度 $[M^{\cdot}]$ 、自由基(平均)寿命 τ 、动力学链长 ν ,聚合初期得到的聚醋酸乙烯酯的 \bar{X}_n (忽略向引发剂的链转移),由 AIBN 分解产生的每个自由基在失去活性前的平均转移次数,达到 3% 转化率所需的聚合时间,聚合 1h 所达到的转化率。

计算结果如图 4 所示:

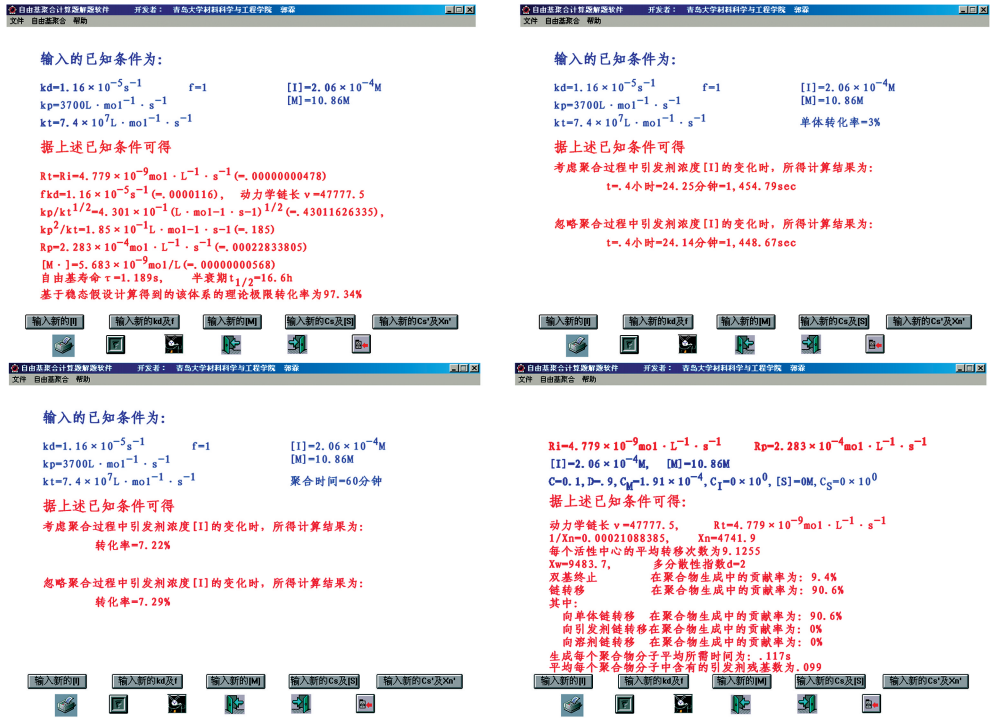


图 4 应用例 3 的计算结果截屏
Figure 4 Screenshot of calculation results of application example 3

4.4 应用例 4^[13,19,20]

100mL 甲基丙烯酸甲酯(MMA)中加入过氧化二苯甲酰(BPO)0.0242g,于 60°C 进行聚合^[13,19,20]。反应 1.5h 后得到 3.0g 聚合物,用渗透压法测定分子量为 831500。求 MMA 在 60°C 下的 k_p^2/k_t 以及该温度下的歧化终止和偶合终止比例。已知 60°C 时 BPO 的半衰期 $t_{1/2}=48h, f=0.81, C_1=0.02, C_M=0.1 \times 10^{-4}$, MMA 的密度 $\rho_{MMA}=0.930g/mL$ 。

计算结果如图 5 所示:

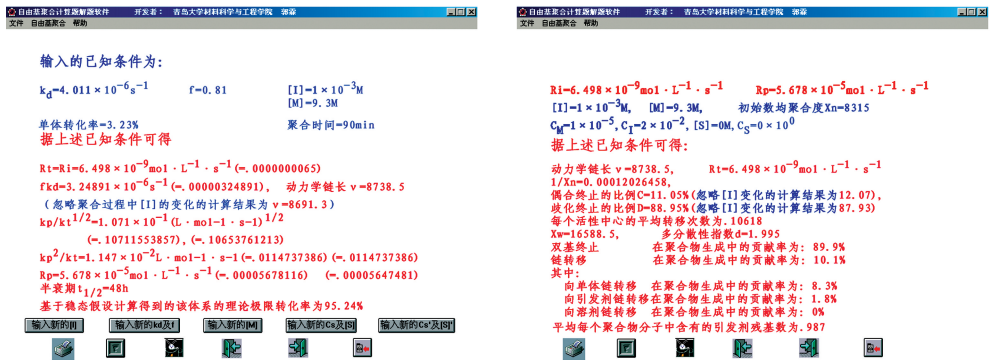


图 5 应用例 4 的计算结果截屏
Figure 5 Screenshot of calculation results of application example 4

4.5 应用例 5^[10,22,5]

氯乙烯($M_1, r_1=1.67$)与醋酸乙烯酯($M_2, r_2=0.23$)共聚^[10,22,5],希望获得初始共聚物瞬时组成和 85% 转化率时共聚物平均组成为含 5% (摩尔分数) 醋酸乙烯酯单元的共聚物,分别求两种情况下单体的初始配比并给出所得共聚物的组成分布情况。

使用者只需能根据题目所给信息对题型做出正确判断及选择,并依次根据软件提示,输入竞聚率 r_1 及 r_2 , 并提交, 软件即可画出该共聚体系的共聚物组成曲线 ($F_1 \sim f_1$ 曲线), 并且可通过单击, 获得任意指定单体配比 f_1 时的(瞬时)共聚物组成 F_1 (手机在线版是通过更便捷的拖动的方式获得)。不再需要取点时, 单击“停止取点”按钮, 根据提示信息, 依次输入所需计算的共聚体系的初始单体配比 f_1^0 (即软件中的 f_{10}), 及所需达到的单体转化率 C , 并提交计算, 软件即可自动完成所有计算及绘图任务, 并给出如图 6 所示的正确结果。

计算和绘图结果及相关公式如图 6 所示:

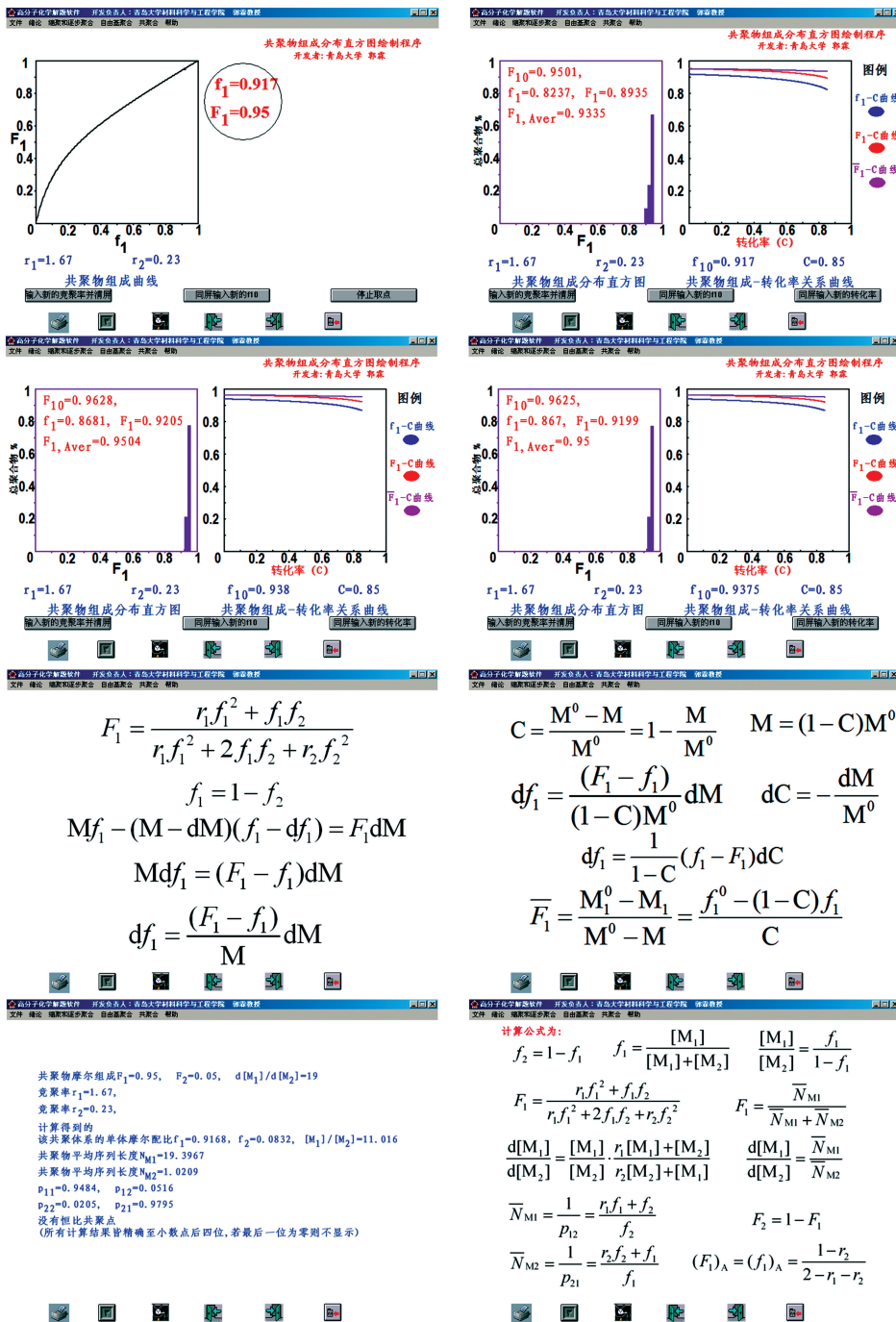


图 6 应用例 5 的计算及绘图结果截屏

Figure 6 Screenshot of calculation results of application example 5

4.6 应用例 6^[10]

聚合物 A 与聚合物 B 按 60 : 40(w/w)的比例混合^[10],并假定混合过程中无反应发生,计算混合样品的数均分子量(数量平均相对分子质量) \overline{M}_n 、重均分子量(质量平均相对分子质量) \overline{M}_w 以及分子量分布指数 d 。

聚合物 A: $\overline{M}_n = 35000, \overline{M}_w = 70000$

聚合物 B: $\overline{M}_n = 60000, \overline{M}_w = 90000$

如果聚合物 B 为 $\overline{M}_n = 45000, \overline{M}_w = 90000$, 情况又会如何?

计算结果如图 7 所示:

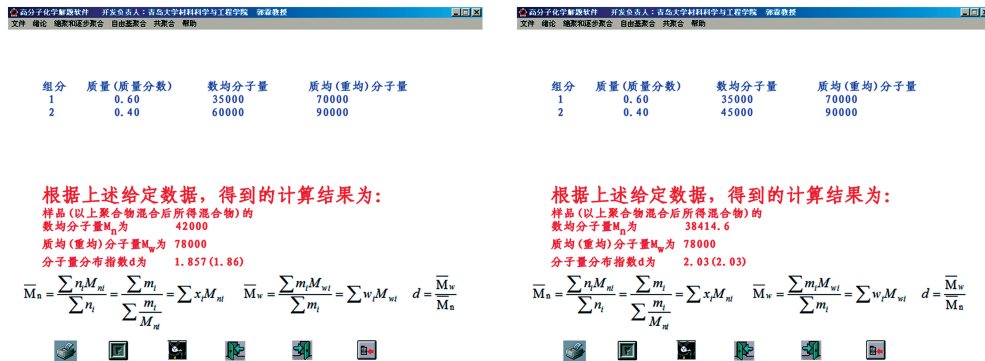


图 7 应用例 6 的计算结果截屏

Figure 7 Screenshot of calculation results of application example 6

5 前景与展望

本软件,将逐步聚合、自由基聚合、共聚及绪论相关的常见计算问题抽象为 63 个典型题型,解决了高分子化学教学中重要的计算问题及计算结果的可视化问题,既能方便、快捷、准确地给出计算结果,又能根据需要对计算结果进行可视化,很好地化解了教学难点;并能把计算思维,以及工具化、程序化解决专业相关问题的方法,以非常直观和有说服力的方式,示范给学生,使其相关意识得到培养。

本软件的单机版在任课教师的七年教学实践使用过程中,发挥了极大的作用,通过包括帮助教师批改作业,特别是快速验证学生答案中一些特别解法的中间步骤及其结果的对错、或学生作业中的一些延伸计算结果的对错等,极大地节省了任课教师的时间,显著地提高了其工作效率。

针对智能手机使用的日益广泛,特别是 5G 技术及云计算的日益普及,我们又在单机版的基础上,设计、开发了在线版,使所有学生都能非常便捷地随时随地通过手机上网使用,进行云计算。

目前,包括手机网页版在内的在线版的开发已基本完成,我们已经在进行在线测试的同时,将其提供给全体选课学生及复习考研学生试用,并在其支撑下,开展新一轮“以学为中心”的创新模式教学改革实践,帮助学生更好地自主进行问题探究及知识构建,实现高效、便捷的深度学习。

下一步,本软件将在完成测试后,部署到化学工业出版社网站,并作为电子出版物正式出版,面向全国应用推广,供包括其他院校相关专业师生在内的所有用户使用,产生更大的社会效益,并进一步寻求将其与该社已出版或拟出版的高分子化学教材、教辅配套、捆绑,形成独特优势。

随着本软件手机网页版、微信小程序等在高分子化学课堂的普遍应用,预期将会给高分子化学课堂及相关专业学生的高分子化学课程学习方式,带来极大的,甚至是颠覆性的改变。

除了用于教学,本软件还可以帮助解决高分子化学实验及配方设计中的一些计算问题,并有望给相关师生及研究者带来帮助。

本软件的创意及设计思路也可为其他化学相关课程,如物理化学等,提供参考和借鉴。

参考文献:

- [1] 黄美荣. 大学化学, 2001, 16(2): 35.
- [2] 冉蓉, 刘正英, 秦家强. 高分子通报, 2015, 2: 79.
- [3] 郭霖. 高分子通报, 1996, 4: 252.
- [4] 郭霖. 高分子通报, 1997, 3: 195.
- [5] 郭霖. 化学通报, 1998, 6: 58.
- [6] 黄美荣, 李新贵. 高分子通报, 2004, 2: 96.
- [7] 郭霖. 计算机与应用化学, 2002, 19(4): 508.
- [8] 张宏伟, 陈超荣, 左丹英. 高分子通报, 2014, 1: 82.
- [9] 郭霖. 化学通报, 2001, 64(8): 524.
- [10] 潘祖仁主编. 高分子化学(第五版). 北京: 化学工业出版社, 2011.
- [11] 潘才元主编. 高分子化学(第二版). 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2012.
- [12] 焦书科主编. 高分子化学习题及解答. 北京: 化学工业出版社, 2004.
- [13] 唐黎明, 虞新林编著. 高分子化学(第二版). 北京: 清华大学出版社, 2016.
- [14] 张兴英, 程珏, 赵京波, 鲁建民. 高分子化学(第二版). 北京: 化学工业出版社, 2013.
- [15] 张邦华, 朱常英, 郭天瑛主编. 近代高分子科学. 北京: 化学工业出版社, 2006.
- [16] 师奇松, 于建香编. 高分子化学试题精选与解答. 北京: 化学工业出版社, 2009.
- [17] 张小舟, 王宇威, 贾宏葛主编. 高分子化学. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2015.
- [18] Odian G. Principles of Polymerization. 4th ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2004.
- [19] 邓云祥, 刘振兴, 冯开才. 高分子化学、物理和应用基础. 北京: 高等教育出版社, 1997.
- [20] 董炎明, 何旭敏编著. 高分子化学与物理习题汇编. 北京: 科学出版社, 2013.
- [21] 喻湘华, 鄢国平, 李亮编. 高分子化学习题与解答. 北京: 化学工业出版社, 2012.
- [22] 贾红兵主编. 高分子化学(第五版)导读与题解. 北京: 化学工业出版社, 2013.
- [23] 王久芬主编. 高分子化学学习指导. 北京: 国防工业出版社, 2009.
- [24] 江波, 殷勤俭, 王亚宁, 王槐三主编. 高分子化学教程(第五版). 北京: 科学出版社, 2007.
- [25] 卢江, 梁晖主编. 高分子化学. 北京: 化学工业出版社, 2005.
- [26] 林权, 崔占臣主编. 高分子化学. 北京: 高等教育出版社, 2015.
- [27] 何旭敏, 董炎明. 高分子化学学习指导. 北京: 科学出版社, 2007.
- [28] 复旦大学高分子系高分子教研室编著. 高分子化学. 上海: 复旦大学出版社, 1995.
- [29] 林尚安主编. 高分子化学. 北京: 科学出版社, 1984.
- [30] 夏炎主编. 高分子科学简明教程. 北京: 科学出版社, 1987.
- [31] 冯新德著. 高分子合成化学(上). 北京: 科学出版社, 1981: 128.

Design and Development of a Problem-solving Software for Polymer Chemistry

GUO Lin^{1*}, WANG Jing², JIANG An-bao³, CONG Hai-lin¹, SUI Kun-yan^{1*}, WANG Yi-fan¹,
ZHANG Xiao-yan¹, WANG Jiu-xing¹, HUANG Lin-jun¹, HU Hao¹, PENG Qiao-hong¹, SUI Xin¹

(1. *Colledge of Materials Science and Engineering, Qingdao University, Qingdao 266071, China;*

2. *Chemical Industry Press Co., Ltd., Beijing 100011, Chian;*

3. *Modern Education Technology Center, Qingdao University, Qingdao 266071, China*)

Abstract: Based on computational thinking and tooling and programmatic problem-solving method, a problem-solving software for polymer chemistry was designed and developed for the purpose of teaching, and has been used in the teaching of polymer chemistry with a remarkable effect being achieved. It abstracts the common calculation problems on step polymerization, radical polymerization, copolymerization, etc. into 63 typical types of questions, and have the important calculation problems frequently encountered in teaching of polymer chemistry being solved and their result also being graphical displayed when needed, with the teaching difficulties being melted, and the tooling and programmatic problem-solving method being demonstrated to the students, which will have their related awareness being cultivated. It significantly improve the teacher's efficiency and can support the teacher to carry out innovative "earning centered" teaching. An online version of it is also design and developed. And this enables the students to use it conveniently anytime and anywhere through the mobile internet to do cloud computing, to conduct question inquiring and knowledge construction actively, and to learn deeply, easily and efficiently.

Key words: Polymer chemistry; Problem-solving software; Design; Development; Calculation; Visualization; Cloud computing