

教 学

共聚物平均组成曲线软件的开发

谷亚新¹, 徐自文², 刘运学¹, 范兆荣¹

(沈阳建筑大学 1. 材料科学与工程学院, 2. 外国语学院, 沈阳 110168)

摘要:利用高级编程语言 VC++6.0 为工具, 制作了高分子化学课程中的共聚物平均组成曲线的动态曲线图。曲线显示窗口主要有以下功能, 即重画坐标系功能、清除当前曲线功能、清除全部曲线功能、绘制曲线功能、输入参数功能、返回登陆窗口功能。采用控件编程技术, 实现了参数的随机录入、曲线的动态形成、坐标系和曲线的变色绘制、线体和线宽的重新设置以及序列显示曲线相关参数等诸多功能。它不仅可以作为高分子化学课程课堂教学使用, 又可作为本专业学生有效地进行课后复习。该教学系统针对性强, 操作简单, 使用方便, 是一种较实用的计算机辅助教学工具。

关键词:高分子化学; 共聚物; 平均组成曲线

共聚反应是高分子化学课程中的重要内容。共聚可以改变大分子的结构和性能, 增加聚合物品种, 扩大聚合物应用范围^[1,2]。两种单体共聚时, 由于其化学结构不同, 两者活性也有差异, 因此共聚物的组成与单体配比往往不同。要控制共聚物的组成, 不仅要知道所生成共聚物的瞬时组成, 还要了解共聚物组成随转化率的变化情况。由于瞬时组成、共聚物平均组成与转化率的关系式非常复杂, 课堂上很难快速准确地画出给定共聚体系的共聚物瞬时组成~转化率、平均组成~转化率的关系曲线, 只能定性地分析共聚物组成随转化率的变化趋势, 缺乏直观性, 学生理解起来相当困难。

作者用计算机处理, 在 Windows 操作系统下, 用 VC++6.0 编制了该应用软件^[3], 可动态、准确地画出单体瞬时配比~转化率曲线($f_1 \sim C$)、共聚物瞬时组成~转化率曲线($F_1 \sim C$)及共聚物平均组成~转化率曲线($F_1 \sim C$), 动态地展示单体瞬时组成、共聚物瞬时组成以及共聚物平均组成随着聚合反应进行发生的变化, 模拟共聚过程, 把抽象的问题直观地展示出来, 提高了教学效果, 又培养了学生的思维能力, 提高了学生的综合素质^[4,5]。

1 制作工具及开发环境

本系统所有的曲线构成均采用参数的动态输入, 在 VC++6.0 中用 Edit Box 控件和 Combo Box 控件的变量来得到曲线相关的参数值, 利用其可输入数据属性或预先设置数据属性, 可以随时设定参数数据, 绘制不同线宽、线型、线体颜色及变化的曲线。利用相关参数也可重新绘制坐标系, 使曲线和坐标系显示特殊效果。通过加入 List 控件并设置其相关属性值, 以列表条的形式显示数据信息, 如曲线形成的序列号、构成的颜色、绘制的参数数据显示, 使学生可以更好地参照对比, 增加了学生的认知感。

为了保证多媒体教学系统的播放效果, 需如下所示的开发环境:

(1) 软件环境: Windows95/98、WindowsMe、Windows2000、WindowsXP;

(2) 硬件环境: CPU: Pentium266MHz 处理器; 内存: 64MB; 硬盘: 500MB 空间; 声卡: DirectX Sound 兼容; 显卡: DirectX 3D(16MB 以上)。

基金项目:辽宁省“十一五”教育科学规划立项课题(2005-10-18);

作者简介:谷亚新(1969-), 女, 博士研究生, 副教授, 主要从事高分子化学的教学及功能高分子材料的研究; E-mail: guyaxin

@sizu.edu.cn

2 系统结构及功能模块

2.1 系统结构

该共聚物平均组成曲线软件,可视性、操作性、灵活性强,使学生通过本软件的运行,全面理解和掌握学习的内容。图 1 是本软件系统的结构示意图,登陆窗口模块由三个模块组成,其中共聚物平均组成曲线对比模块又分为单体瞬时组成与转化率关系模块、共聚物瞬时组成与转化率关系模块、平均组成与转化率关系模块三部分。

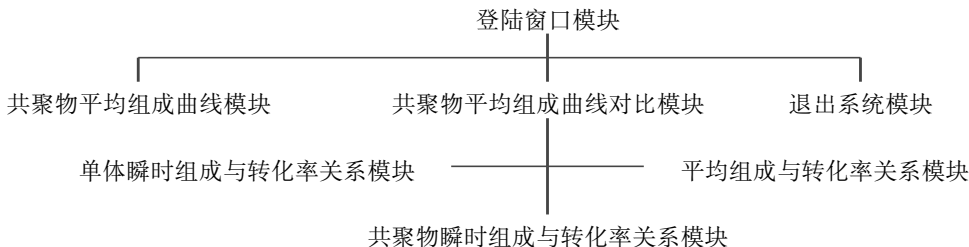


图 1 曲线显示窗口模块功能结构图

Figure 1 Constructions of module function in Curve showing window

本系统合理组织知识内容,登陆界面采用分页式结构建立导航系统,并伴有舒缓的背景音乐,如图 2 所示。其三个菜单按钮分别以曲线绘制状态及退出功能命名,当鼠标放在每个菜单按钮上时,背景音乐停止播放,并且鼠标所在的按钮将产生变化及语音提示。点击具体菜单按钮时,屏幕中间部位将显示出曲线绘制对话框窗口,同时程序将初始化绘制曲线的各种相关参数,如图 4 所示。登陆界面右下角的按钮为退出状态,点击后随着页面的展开,也随之变换为作者简介窗口,如图 3 所示,点击其中【退出】按钮即可关闭软件,本系统在页面设计上力求做到形象直观,各种窗口、按钮和对话框等在屏幕上力求做到布局合理。

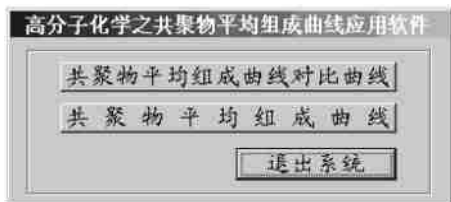


图 2 系统登陆界面

Figure 2 Landing interface of system



图 3 系统退出界面

Figure 3 Quitting interface of system

2.2 系统功能模块

本系统根据高分子化学中共聚物平均组成曲线的教学特点,每个曲线绘制模块又划分为以下几个主要功能,即重画坐标系功能、清除当前曲线功能、清除全部曲线功能、绘制曲线功能、输入参数功能、返回登陆窗口功能。

坐标重绘功能:指根据画笔参数重新绘制坐标;

清除当前曲线功能:指清除窗口中当前所绘制曲线,以达到重新绘制曲线的目的;

清除全部曲线功能:指清除窗口中全部曲线,以达到重新绘制曲线的目的;

绘制曲线功能:指输入参数 f_1^0 、 r_1 和 r_2 以及曲线的线型、线宽和颜色来绘制曲线;

参数输入功能:指在 f_1^0 、 r_1 和 r_2 的右侧文本框中输入相关有意义的参数;

返回登陆窗口功能:指点击【返回】按钮即可返回到登陆窗口界面。

3 系统技术特点

3.1 显示器分辨率设置

由于现在的计算机显示器分辨率主流设置为 800×600 像素和 1024×768 像素,这就导致系统在设计之初就要确定其分辨率,本系统分辨率设定为 800×600 像素。在 800×600 像素下运行软件,三个绘制窗口加在一起正好为全屏显示,如图 4 所示。为了达到最佳的显示效果,本系统的所有对话框窗口均采用 center 属性,然后再根据对话框窗口设计位置,重新计算其窗口坐标,进行运行设置,如图 4 所示。

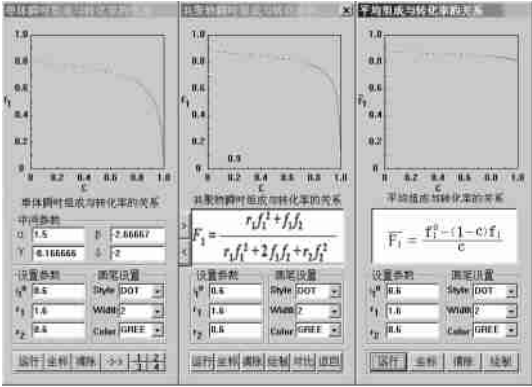


图 4 曲线显示窗口模块功能结构图

Figure 4 Constructions of module function in curve showing window



图 5 曲线参数初始化界面

Figure 5 Initial interface of curve parameters

3.2 非模态对话框与模态对话框的应用

在共聚物平均组成曲线对比曲线模块中,本软件采用了调用非模态对话框模式,这主要是为了同时调用图 4 的三个对话框窗口,程序可以在不关闭对话框的情况下继续执行,并可以实时对三个对话框进行一些设置,使其根据相关参数各自执行相应程序代码。共聚物平均组成曲线模块采用模态对话框模式,如图 6 所示。

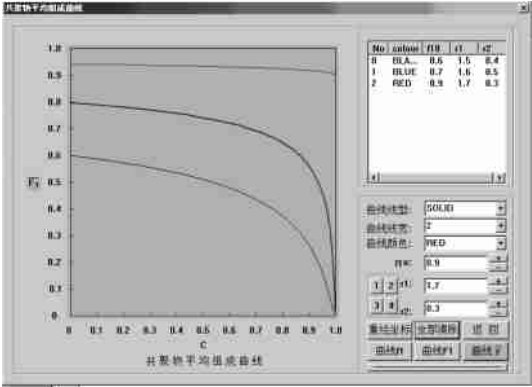


图 6 曲线显示窗口模块功能结构图

Figure 6 Constructions of module function in curve showing window

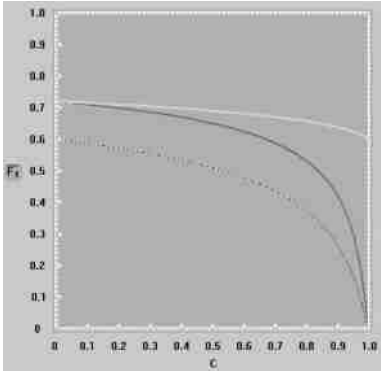


图 7 曲线绘制效果图

Figure 7 Effect picture of curve

3.3 参数的输入设置

每个对话框绘制窗口中,都可以在 f_1^0 、 r_1 和 r_2 的右侧文本框中输入相关有意义的参数,还可以通过预设按钮的使用,点击按钮【1】、【2】、【3】、【4】为 f_1^0 、 r_1 和 r_2 设置四组典型参数。为了更好的对曲线做出对比,故设置了 5 种线型、4 种线宽和 6 种线条颜色,如图 5 所示。点击画笔设置中 Combo Box 控件的向下箭头即可在下拉框中选取相关参数。

3.4 传递参数的应用

在图 4 中,包括三个对话框绘制窗口,要使用同一参数绘制曲线进行对比,要先点击图 5 中的【传递】按钮,其标题状态也随之变为→,如图 4 中第一个绘制窗口所示。然后点击图 5 中的【运行】按钮,参数就会通过全局变量传递到第二个对话框绘制窗口及第三个对话框绘制窗口。这样就可以很好地比较出在相同参数情况下,不同种曲线的不同状态。

3.5 绘制参数的采用

在图 4 的后两个对话框绘制窗口中,采取了两种绘图机制,点击【运行】按钮将会使用传递过来的相关参数来绘制曲线。点击【绘制】按钮,就可以脱离传递过来的相关参数,采用重新设置的参数绘制曲线,增强了曲线绘制的灵活性,曲线效果图如图 7 所示。

3.6 绘制参数的显示

为了清晰表达曲线的构成,在图 6 的共聚物平均组成曲线对话框中,通过 List 控件以列表条的形式完成了输入数据的编号显示、画线颜色显示、相关数据显示等。在 Edit Box 控件中输入 f_1^0 、 r_1 和 r_2 数值,由于精度的需要,故 f_1^0 、 r_1 和 r_2 为 float 型数据,而在提取 f_1^0 、 r_1 和 r_2 的整数和余数过程中,数据会被四舍五入,所以要根据情况对 f_1^0 、 r_1 和 r_2 进行加 0.000001 或减 0.000001。并通过 itoa() 函数进行数据类型转换,以便在 List 控件中显示参数数据,如图 6 所示。

3.7 公式的显示

通过 picture 控件在对话框中显示公式图片(如图 4 所示)。并通过点击按钮【>】和【<】来移动公式对话框,其移动位置是通过取得原始绘制对话框窗口坐标后,计算出新值然后移动,如图 8 所示。



图 8 公式显示窗口

Figure 8 Showing window of formular

3.8 曲线的绘制

曲线的动态绘制过程是通过如下三个公式实现的。

$$F_1 = (r_1 f_1^2 + f_1 f_2) / (r_1 f_1^2 + 2 f_1 f_2 + r_2 f_2^2) \quad (1)$$

$$C = 1 - (f_1 - f_1^0)^\alpha (f_2 / f_2^0)^\beta [(f_1^0 - \delta) / (f_1 - \delta)]^\gamma \quad (2)$$

式中:

$$\begin{aligned} \alpha &= r_2 / (1 - r_2); \beta = r_1 / (1 - r_1); \\ \gamma &= (1 - r_1 r_2) / [(1 - r_1)(1 - r_2)]; \\ \delta &= (1 - r_2) / (2 - r_1 - r_2) \\ F_1 &= [f_1^0 - (1 - C) f_1] / C \end{aligned} \quad (3)$$

上述三个公式中, $f_2 = 1 - f_1$, $f_2^0 = 1 - f_1^0$, 输入参数 f_1^0 、 r_1 和 r_2 , 即可做出单体瞬时配比与转化率关系曲线($f_1 \sim C$)、共聚物瞬时组成与转化率关系曲线($F_1 \sim C$)及共聚物平均组成与转化率关系曲线($F_1 \sim C$), 可动态地展示单体瞬时组成、共聚物瞬时组成以及共聚物平均组成随着聚合反应进行发生的变化, 并可作出鲜明的对比。

4 软件的应用效果

本软件在教学实践中动态鲜明地展示了单体瞬时组成、共聚物瞬时组成以及共聚物平均组成随着聚合反应进行发生的变化, 起到了很好的对比作用。模拟共聚合过程, 把抽象的问题直观地展示出来, 提高了教学效果, 又培养了学生的思维能力, 提高了学生的学习质量。

参考文献:

- [1] 潘祖仁. 高分子化学(第三版). 北京: 化学工业出版社, 2003.
- [2] Harry R Allcock, 等. 现代高分子化学. 北京: 科学出版社, 2004.
- [3] 李春葆. C++ 程序设计与实例. 北京: 清华大学出版社, 2002.
- [4] 刘宇艳. 高分子通报, 2002, (3), 75~79.
- [5] 林少凡, 等. 计算机与应用化学, 2001, 18(2), 187~189.

The Development of Copolymer Average Composition Curve Software

GU Ya-Xin¹, XU Zi-Wen², LIU Yun-Xue¹, FAN Zhao-Rong¹

(1. College of Material Science and Engineering,

2. College of Foreign Language, Shenyang Jianzhu University, Shenyang 110168, China)

Abstract: Copolymer average composition curve of Polymer chemistry is designed by use of the multimedia producer VC++6.0. Curve showing window is made up of such six functions as an re-drawing coordinate system, cancelling the current curve, cancelling all the curve, drawing new curve, input parameters, exit window. Control technologies make it come true to type in parameters, draw curve, draw color curve and coordinate system, re-establish the line and its thickness, show sequent curve, and many other related parameters and so on. It can serve as not only an efficient tool for polymer chemistry teachers to teach in class, but also a helpful approach for students to do exercises. It is a useful supplementary computer teaching software with advantages of convenience, simplicity and high efficiency.

Key words: Polymer chemistry; Copolymer; Average composition curve