

## 用于高分子物理教学的虚拟仿真平台开发及其教学实践初探

钱虎军<sup>1,\*</sup>, 施睿<sup>1,\*</sup>, 吴光鹭<sup>2</sup>, 朱轩伯<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 吉林大学化学学院, 理论化学研究所, 长春 130012

<sup>2</sup> 吉林大学化学学院, 长春 130012

**摘要:** 在针对化学学科本科生的教学中, 高分子物理因公式多而著称。如何提升学生对重要物理概念的理解并培养学生的理论解析能力是该课程的一项重要任务。笔者结合实际教学经验, 设计开发了高分子物理虚拟仿真教学软件, 充分发挥了虚拟仿真技术在交互性和可视化方面的优势。本文将介绍该软件的基本功能及笔者的教学实践经验。

**关键词:** 高分子物理; 虚拟仿真; 教学实践

**中图分类号:** G64; O6

## A Preliminary Study on the Development of a Virtual Simulation Platform for Polymer Physics Teaching and Its Teaching Practice

Hujun Qian<sup>1,\*</sup>, Rui Shi<sup>1,\*</sup>, Guanglu Wu<sup>2</sup>, Xuanbo Zhu<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Theoretical Chemistry, College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China.

<sup>2</sup> College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China.

**Abstract:** "Polymer Physics", as taught to chemistry undergraduates, is known for its extensive use of theoretical formulas. A key challenge in this course is enhancing students' comprehension of fundamental physical concepts while cultivating theoretical analysis skills. Drawing from practical teaching experience, we developed a virtual simulation teaching software for teaching polymer physics that leverages the interactive and visualization capabilities of virtual simulation technology. This paper presents the platform's core functionalities and discusses our teaching implementation experiences.

**Key Words:** Polymer Physics; Virtual Simulation Platform; Teaching Practice

### 1 前言

#### 1.1 研究背景

近年来, 虚拟仿真技术在各学科教学中的应用已得到了蓬勃发展<sup>[1-10]</sup>。目前国内诸多高校均开展了虚拟仿真课程的建设, 如清华大学材料快速成型技术方面的虚拟仿真实验室、北京化工大学化工安全与装备虚拟仿真实验教学中心等。但上述工作均集中于化学实验类教学, 而面向理论化学类教学方面的工作相对缺乏。高分子物理是研究高分子材料构效关系的学科, 它涉及化学、物理、数学、及材料等多门基础学科的交叉<sup>[11,12]</sup>。也正是因为高分子物理的多学科交叉及理论属性, 学生在学习高分子物理时通常感到困难, 主要因为以下几个方面: 1. 跨学科的理论知识要求: 高分子物理结合了化学、物理、统计、数学等多个领域的理论知识, 会使学生感到挑战。2. 抽象的概念: 高分子物理涉及很多抽象的概念和理论, 例如高分子链的构象、随机动力学、熵弹性、自组装理论等,

收稿: 2024-09-03; 录用: 2024-10-28; 网络发表: 2025-03-19

\*通讯作者, Emails: hjqian@jlu.edu.cn (钱虎军); shirui816@jlu.edu.cn (施睿)

基金资助: 国家自然科学基金(22473049); 科技部国家重点研发计划项目(2023YFB3812801)

这些概念没有直观的物理图像,使得理解和记忆变得更加困难。3. 复杂的数学模型:高分子物理中使用到的数学模型和计算方法非常复杂,包括随机数学、统计力学、复杂的微分方程等,一味强调相对枯燥的数学内容很容易让学生失去学习动力。4. 实验技术的复杂性:高分子物理的实验通常涉及复杂的仪器和精细的操作,如散射、黏度测量、流变分析等,实验周期长、成本高昂的同时,操作的复杂性和实验条件的控制难度会使学生感到困惑。5. 广泛的应用与理论连接:高分子物理不仅仅是理论研究,其如何应用于实际也同样重要。因此,在有限的课时内,如何有机地结合各方面知识点,将高分子物理背后的机制讲解得深入浅出,将复杂的高分子物理问题简单化,调动学生积极学习、研究的兴趣,提高学生的思维能力,使学生掌握相应的分析方法,是每位任课教师需要深入思考的课题。

### 1.2 虚拟仿真技术在高分子物理教学实践中的应用

在理论方面的教学实践中,虚拟仿真教学技术可以充分发挥分子模拟技术的优势,利用计算机可视化技术和模拟计算实现抽象物理概念的直接可视化理解,学生可在电脑端或移动客户端登陆系统,直接“看”到微观世界的样貌以及通过交互操作,直观地理解物理模型,以及通过对比计算与推导的结果,直观地对所学理论产生更加深刻的理解与认识,使艰涩的理论知识变得“深入浅出”,同时能够帮助学生实现物理建模、理论推导能力的自我提升。同时,虚拟仿真教学对采用线上授课方式的学生具有很大时间、场地的优势,以及方便教师实时了解课堂难点、重点。因此,虚拟仿真教学通过为学生提供沉浸式的环境,依托人机交互和计算机可视化技术,提升学生对抽象概念的理解和具象化认识,提升学生的抽象思维和物理建模能力,为解决传统理论教学课堂的枯燥、难以理解和数学内容烦杂等弊端、完善理论教学体系、专业教学改革提供了新的方法和思路。但纯粹的线上虚拟仿真教学存在学生获得感不足等问题<sup>[13,14]</sup>,因此,本教学团队针对高分子物理教学,具体针对高分子物理知识体系中链构象等重要的知识点<sup>[15,16]</sup>,设计了高分子物理虚拟仿真教学软件,并采用“线上+线下”相结合的教学模式<sup>[17]</sup>,应用到了教学实践中。

## 2 高分子物理教学虚拟仿真软件的开发

虚拟仿真软件的开发,一方面需要利用计算机模拟等新型信息技术,克服实际教学过程中的困难;另一方面是依托全面可视化、可人机互动的技术加深学生对抽象理论的具体认识,提高学习效率,使理论教学摆脱传统课堂上“枯燥乏味”的“全数学”教学模式。本论文在介绍该虚拟仿真平台设计思路及基本功能的前提下,也将向读者介绍我们在实际教学中利用该虚拟仿真平台的经验及产生的成效。

### 2.1 教学目的

高分子物理教学属于理论教学,其主要目的是让学生掌握高分子物理中的基础理论,掌握物理建模和抽象问题的基本方法,培养学生利用理论工具解决在实验、工作等过程中遇到问题的能力。在本课程建设过程中,具体课程内容如下:

1. 理解和掌握链构象的物理模型和统计力学方法基础;
2. 掌握链的末端距、均方回转半径等基本概念;
3. 理解高分子链的动力学行为,掌握Rouse模型;
4. 应用高分子链模型理解和预测高分子在溶液中的行为,包括黏度、散射实验结果等;
5. 理解嵌段共聚物的基本概念和分类;
6. 理解并掌握嵌段共聚物的自组装行为;
7. 掌握用于研究嵌段共聚物组装的自治场理论方法、了解平均场的概念。

### 2.2 虚拟仿真软件的设计与开发

针对上述目标,吉林大学高分子物理教学团队结合团队在科研工作的特色,通过结合分子动力学模拟等前沿科研方法,开发了具有自主知识产权,适合本科高分子物理教学的虚拟仿真教学软件《高分子物理教学虚拟仿真平台》(软著登字第13788562号)。本软件通过应用分子动力学模拟和场论计算方法,充分发挥了计算机可交互、可视化的特性,针对高分子物理中“理想链结构”“理

想链动力学”和“嵌段共聚物自组装”三个领域，开发了可视化可互动的建模与模拟过程，可以在短时间内让学生对“抽象数学概念”展开全面且具体的认识，加深学生对理论推导过程的直观理解，并适当引入前沿科学成果和理论推导与计算方法，拓展学生视野，深化理论推导的具象化认识，极大地提高了学生对高分子物理的兴趣。

本软件具体设计思路如下：

1. 软件设计拟解决的问题：(1) 高分子理想链模型的构建、求解及分析，学生缺乏对统计中“涨落”概念的理解；(2) 针对高分子运动的Rouse模型，学生缺乏对Rouse方程组本质的具象化理解；(3) 学生缺乏对高分子物理应用于前沿的理论研究的直观认识。

2. 软件主要内容：针对上述在教学过程中遇到的问题，笔者团队进行了如下设计，(1) 通过学生交互地操作“移动步数”和“链长”，直观观察实时生成的高分子链结构，加深学生对高分子链的微观结构和“理想链”模型及其数学物理方法即“随机行走”模型的直观认识；(2) 通过学生在交互操作过程中生成足够多的不同高分子构象(采样样本数)，加深学生对统计物理中“涨落”概念的直观认识，直观理解数学理论方法中的“大数定理”，以及通过对结果的观察，理解如何利用理论解释实验现象的具体流程；(3) 通过使学生交互地调整时间轴，直观地观察高分子链在空间中的运动轨迹，理解高分子物理中Rouse模型的物理意义和物理图像，加深对研究高分子动力学的理论方法的认识，理解随机动力学模型的知识图谱；(4) 通过对高分子动力学轨迹进行直观地采样，加深学生对“系综”等统计力学概念的认识，理解高分子动力学的数学处理方式，验证理论推导的结果；(5) 通过交互地调整Flory-Huggins参数，让学生直观地理解高分子混合物、嵌段高分子的相分离过程，直观理解高分子自洽场理论(self-consistent field theory, SCFT)计算方法<sup>[18]</sup>，紧跟学科前沿；(6) 学生在完成基础知识学习过程后，设计5分钟左右的随堂小测，实现实时统计、回馈教师应巩固的内容；(7) 学生通过提交计算报告，教师在课后批改、统计报告完成情况，及时调整下堂课的内容。

3. 软件架构：本虚拟仿真软件通过构建管理后台，实现了学生、教师、管理员三种不同身份用户的区分，以实现学生完成实验—>教师检查结果并评分，并支持最终将数据通过接口与第三方管理平台进行交互。同时，教师用户带有课程权限，方便教师仅批改所教授课程的作业。本虚拟仿真实验平台基于HTML5+Django技术，WEB端方面兼容任何远程用户端，包括电脑、平板和手机的操作；基于Django的后台端可以部署在Windows/macOS/Linux等全平台服务器。本项目教学平台的架构共分为以下4层，架构图如图1所示：

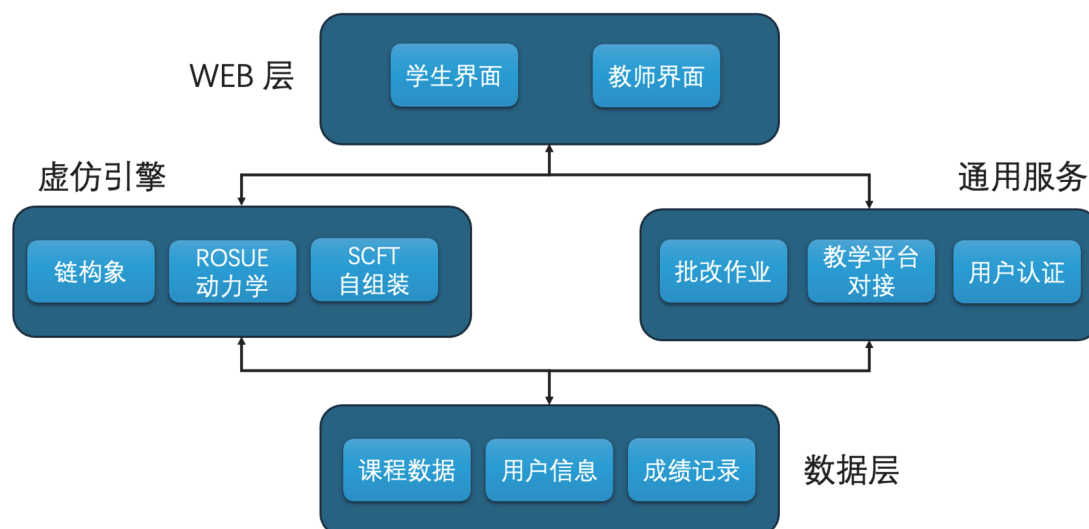


图1 虚仿平台架构图示

(1) 应用层：主要包括WEB交互界面，分为学生应用、教师应用两个部分，其中学生应用部分主要功能为用户学习知识内容、完成交互实验、生成并提交研究报告和完成测验功能及查看成绩功能，教师应用层主要功能为批改报告与查看学生成绩统计功能；

(2) 仿真层：仿真层提供处理分子模拟、记录结果和生成的计算引擎；

(3) 通用服务层：通用服务层主要功能为提供与各教学管理平台的数据交互接口，包括用户通过平台链接跳转认证和成绩数据回传等功能；

(4) 数据层：包括用户信息数据库和数据库管理功能及课程库和素材库。

4. 软件功能示意：图2(a)–(g)分别展示了登陆界面、教学过程中的互动演示、通过云计算生成模拟结果并生成、提交计算报告以及查看成绩功能。我们在软件中加入了“模拟”和“数值实验”两部分，如图2(e)所示，以Rouse模型为例，学生可以通过调整链长和温度，并通过拖动时间轴，实时地看到Rouse运动受到温度和链长的影响。结合课堂上对Rouse方程的描述，取得了很好的教学结果；同时，图2(f)中软件对Rouse模型进行了模拟和采样，随着采样量逐渐上升，渐渐得到了与理论推导一致的结果，对课堂上Rouse模型推导的讲解进行了很好的补充。图3展示了各专题教师可以实时地查看并统计学生的随堂小测成绩与批阅报告功能。

### 2.3 教学流程与学习过程

理论教学的核心要素是从具象化的概念出发，经过抽象总结，进一步借助数学推导，形成物理模型，并最终达到预测实验结果的目的。和传统的理论教学方法不同，本团队结合课程特点，深度结合虚拟仿真软件，通过软件随堂小测的实时统计与报告审阅系统，设计了全新的教学和学习流程：为了加深学生对相关知识的理解，我们将教学内容的每个部分，分解为三个模块：基础知识模块、随堂小测模块和数值实验模块。其中基础知识模块旨在借由可交互组件，让学生对物理概念产生直观的理解，在随堂小测模块中，我们通过设计各类题目，进一步测试和加深学生对相关知识的理解和掌握程度，方便教师实时地巩固重点、难点；最后进入数值模拟阶段，学生通过输入相应的参数，直接观察模拟结果，并自动地生成并提交数值实验报告，由教师进行批阅，并根据批阅内容，制定调整后续课程内容。整体教学和学习流程图4所示。

## 3 虚拟仿真教学实施成效

本团队将虚拟仿真软件应用于2023–2024学年的高分子物理教学实践中，其中需要虚拟仿真软件的课程共计3个学时。具体学时及实施方案如下：

1. 高分子理想链模型的教学实践：

a) 引导学生登入虚拟仿真平台，可直观地构建并观察高分子链构象，并对比不同长度的真实高分子链构型，帮助学生建立对持续长度、库恩长度、无规行走等基本概念的理解；

b) 通过设置提问，结合虚仿软件观察讲解高分子的认识历史、高分子链的发现和为什么要研究高分子链结构，以及用到的数学模型。

c) 介绍数学基础：介绍分形的概念，帮助学生理解高分子为什么具有分形性质。

d) 开展随堂小测，教师在服务端及时统计、总结并深度讲解课堂重点及难点。

e) 通过仿真软件，令学生设置不同的分子链长，构象采样数计算高分子链的均方末端距、均方回转半径，并对比计算结果和理论推导结果，理解理论计算和真实现象之间的对应关系。

f) 讨论反馈：学生提交计算报告，教师在服务端进行批改，制定下次课堂重点回顾内容和新内容。

2. 高分子Rouse动力学模型的教学实践：

a) 引导学生登入虚仿软件，观看关于高分子流变学现象的视频，讲解高分子微观运动和高分子体系特殊流变学现象之间的关系；

b) 讲解Rouse模型的建立过程和历史，推导Rouse模型的动力学方程；

c) 通过交互插件，拖动时间轴，直观观察高分子链的运动，加深动力学方程到运动轨迹的理解；

- d) 开展随堂小测，统计总结并深度讲解课堂重点难点；  
 e) 通过仿真软件，令学生设置不同的链长、采样数计算链的均方位移和扩散系数，对比计算结果和理论推导结果，理解理论模型对实验现象的预测过程，并提交报告，教师通过批阅报告制定后续课堂内容。

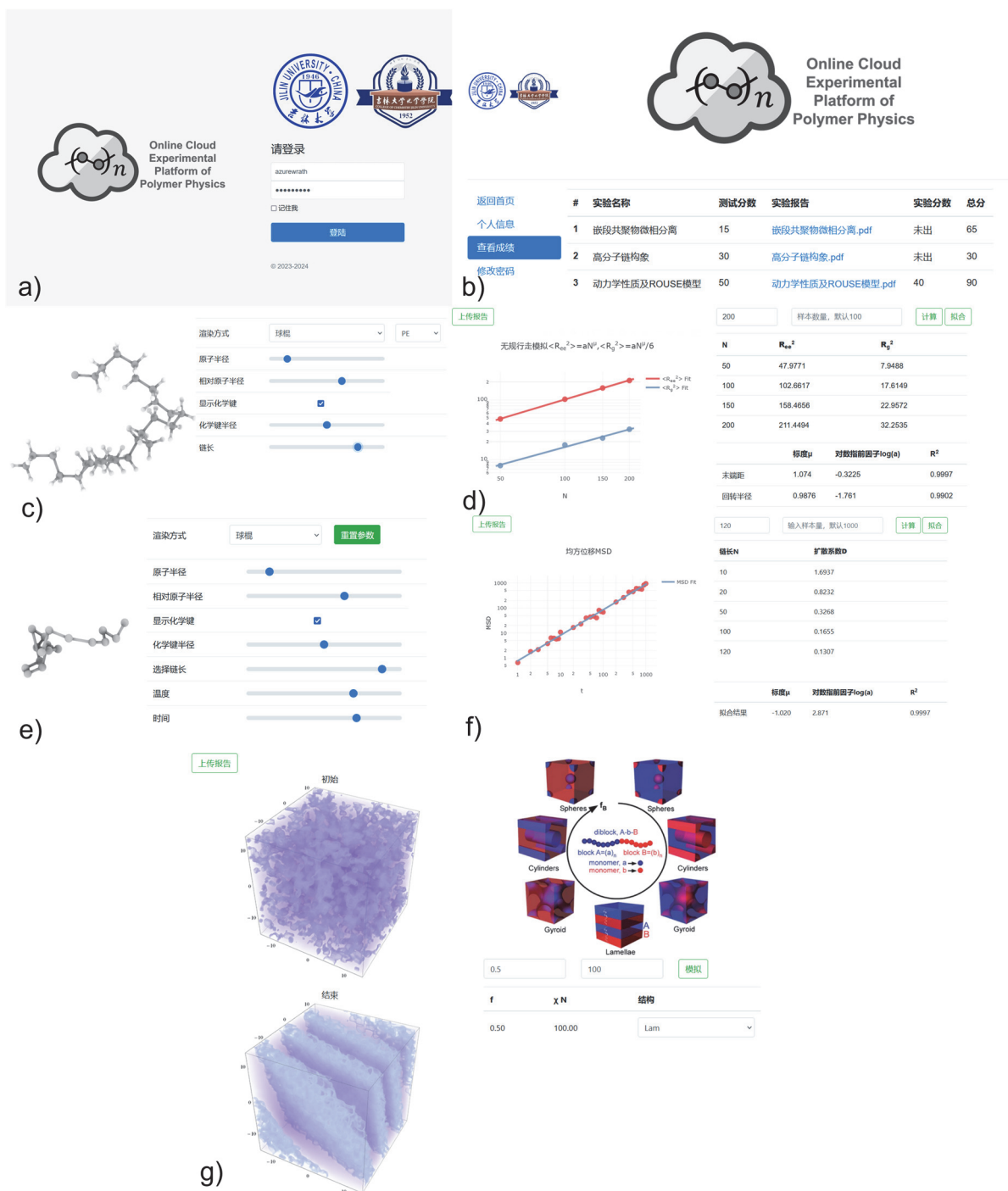


图2 高分子微观构型的交互演示，(a) 登陆界面；(b) 学生用户界面，主要功能为成绩查看；(c) 高分子链结构互动展示；(d) 无规行走模型的模拟计算与报告提交；(e) 互动展示高分子链的Rouse运动；(f) Rouse模型的模拟统计分析；(g) 高分子SCFT计算流程的展示



图3 教师可实时查看成绩以及各专题老师可以批阅学生提交的计算报告，并实时进行成绩统计

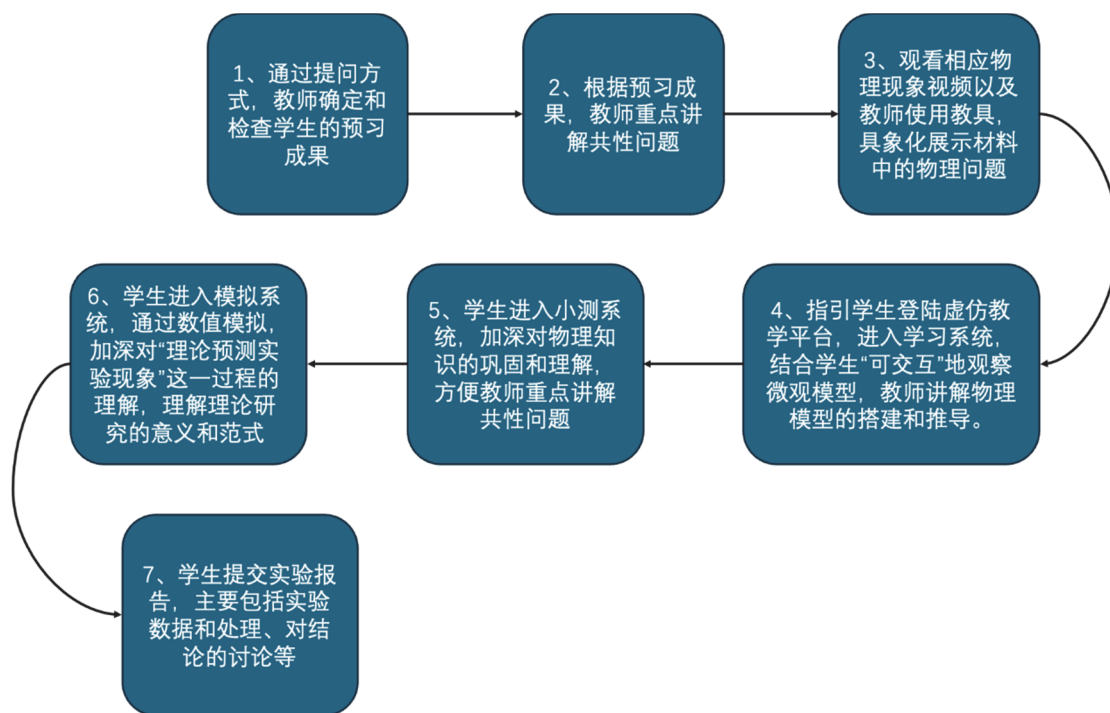


图4 结合虚拟仿真的教学、学习流程

### 3. 嵌段共聚物自组装的SCFT理论:

- 理论讲解: 介绍嵌段共聚物的基本概念和自组装行为;
- 结合虚拟仿真软件, 降解SCFT(自洽场理论)的基本原理以及描述嵌段共聚物的方式;
- 通过设置Flory参数 $\chi$ 和链长 $N$ 以及组分 $f$ 等参数, 观察SCFT计算结果, 加深对Flory理论参数物理意义的认识;
- 提交报告, 教师通过批阅报告制定后续课堂内容。

本团队通过对比2023–2024年度和自2020–2021学年以来, 学生对理论、实验知识点的掌握情况的掌握程度, 统计结果如表1所示。在引入虚拟仿真软件教学以来, 学生在高分子物理课程中的平均成绩有了显著的提高, 特别是在设计复杂模型和理论题目上, 学生答题的准确率有显著提升, 在问答题中学生的回答具有更强的逻辑性, 对物理图像的理解更加准确。与此同时, 学生对实验技术

(例如散射和凝胶渗透色谱(GPC)方面的理解也更加深刻, 平均成绩也有大幅提高。

**表1 2020–2024学年(第一列)学生在不同题型(第一行)、总分中的表现**

	随机行走模型的 推导	高分子 持续长 度的推 导	高分子粘度 标度律的推 导	Maxwell/Voigt应 力-应变本构关系 的推导	GPC原理和 实验黏均分 子量的推导	散射实验原 理问答	总成绩
2020–2021	3.45/10	–	6.51/10	–	5.76/10	4.82/10	77.67/100
2021–2022	–	3.76/10	5.89/10	7.77/10	–	3.35/10	81.32/100
2022–2023	4.11/10	3.58/10	–	6.59/10	6.45/10	–	74.58/100
2023–2024	–	6.98/10	8.21/10	8.89/10	8.57/10	7.63/10	88.76/100

#### 4 总结与展望

虚拟仿真技术在高分子物理教学中的应用, 极大地改善了教学效果, 提升了学生的学习体验。随着虚拟仿真技术的不断发展和完善, 我们有理由相信其在高等教育中的应用将会越来越广泛和深入。通过不断探索和实践, 我们将能够更好地利用这一技术, 培养出更多高素质的高分子物理专业人才。总之, 虚拟仿真技术在高分子物理教学中的应用是一次成功的尝试, 它不仅提升了教学质量, 也为未来的教学改革提供了宝贵的经验和借鉴。

#### 参 考 文 献

- [1] Kolil, V. K.; Achuthan, K. *Educ. Inf. Technol.* **2022**, *28* (7), 1573.
- [2] Achuthan, K.; Kolil, V. K.; Diwakar, S. *Educ. Inf. Technol.* **2018**, *23* (6), 2499.
- [3] Ton, de J.; Marcia, C. L.; Zacharias, C. *Science* **2013**, *340*, 305.
- [4] Limniou, M.; Roberts, D.; Papadopoulos, N. *Comput. Educ.* **2008**, *51* (2), 584.
- [5] Schofield, D.; Lester, E. *Seminar. Net* **2010**, *6* (1), 76.
- [6] Cory, H.; Jack, B. *J. Chem. Educ.* **2019**, *96* (10), 2097.
- [7] Cory, H.; Gosia, G.; Jack, B. *J. Chem. Educ.* **2020**, *97* (3), 616.
- [8] Hou, Y. Q.; Wang, M.; He, W.; Ling, Y. X.; Zheng, J.; Hou, X. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100* (4), 1437.
- [9] Taraboletti, A. *J. Chem. Educ.* **2024**, *101* (3), 1180.
- [10] Williams, J. H.; Gbadomosi, M.; Greytak, A. B.; Myrick, M. L. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100* (12), 4838.
- [11] Rubinstein, M.; Colby, R. H. *Polymer Physics*; Oxford University Press: New York, NY, USA, 2003.
- [12] Strobl, G. R. *The Physics of Polymers*, 2nd ed.; Springer-Verlag: Berlin, Germany, 2007.
- [13] Ali, N.; Ullah, S. *J. Chem. Educ.* **2020**, *97* (10), 3563.
- [14] Chan, P.; Van Gerven, T.; Dubois, J. L.; Bernaerts, K. *CAEO* **2021**, *2*, 2666.
- [15] 刘凤歧, 汤心颐. 高分子物理. 北京: 高等教育出版社, 2004.
- [16] 何曼君, 张红东, 陈维孝. 高分子物理. 第3版. 上海: 复旦大学出版社, 2007.
- [17] Sadarangani, I. R.; Serafin, J.; Chabra, J. *J. Chem. Educ.* **2024**, *101* (4), 1480.
- [18] Gan, Z.; Xu, Z.; Tian, K.; Zhou, D.; Li, L.; Ma, Z.; Tian, R.; Li, W.; Dong, X.-H. *Nat Commun.* **2024**, *15*, 6581.