



武汉工程大学  
Wuhan Institute of Technology

# 计算机在高分子材料中的应用

## 第〇章 课程概论

段献宝 博士、副教授

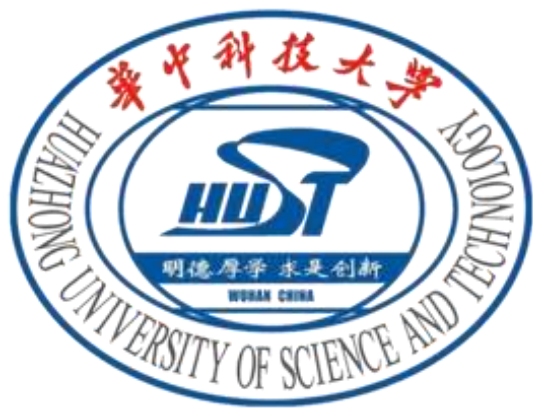
材料科学与工程学院





# 个人简介

## ■ 个人经历



2006年-2015年



2015年-至今



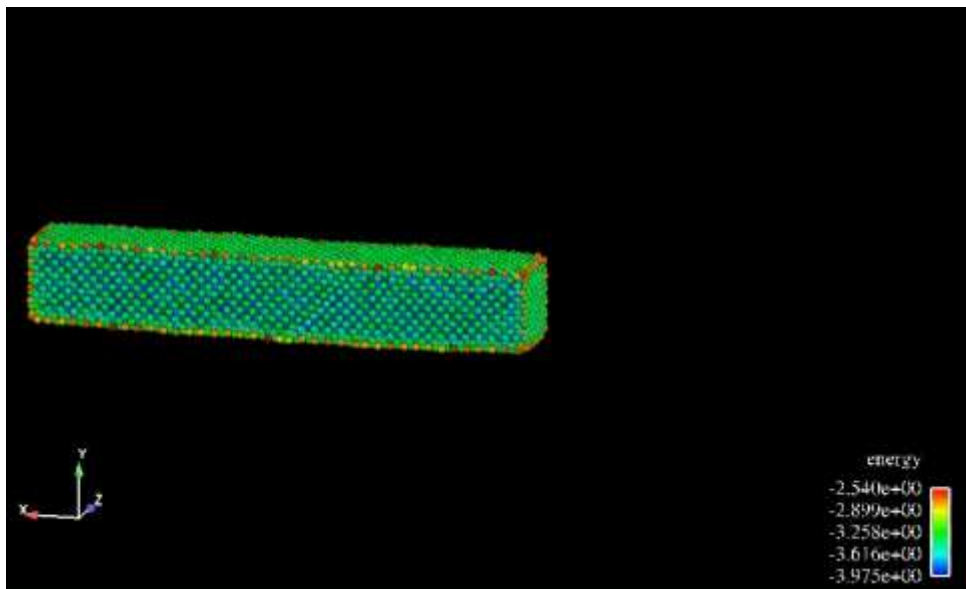
# 讲授课程

课程名称	年级	授课对象
计算机在高分子材料中的应用	大二（下）	合成3班、模具班、创新班
金属材料及热处理	大三（上）	模具班
计算材料学	大三（下）	模具班、创新班



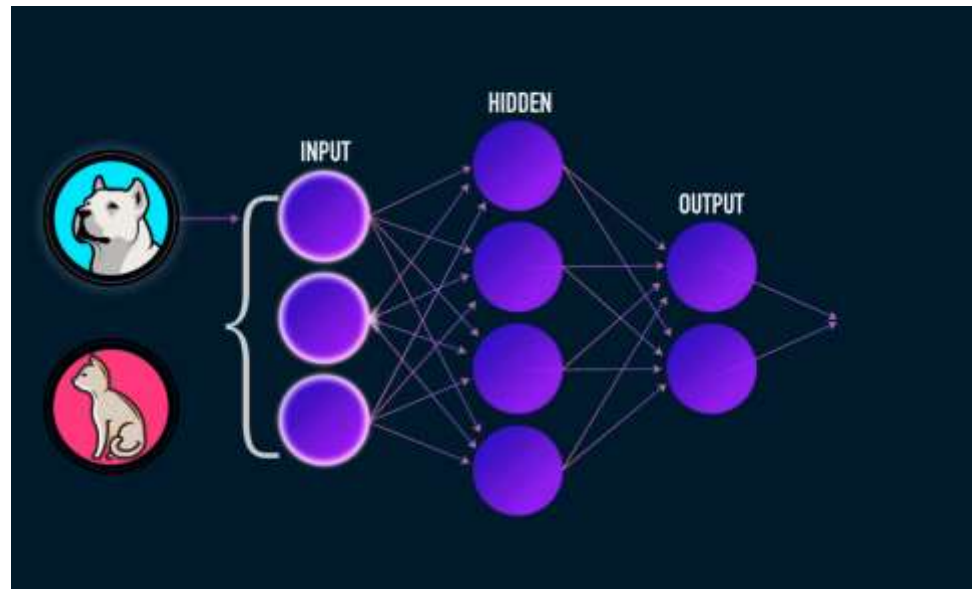
# 研究方向

## ① 计算材料学、跨尺度材料模拟



金纳米线的拉伸和形变

## ② 人工智能与机器学习的应用



神经网络对猫和狗的识别



# 联系方式

- 邮箱：[witxbduan@qq.com](mailto:witxbduan@qq.com)
- 网站：<http://www.xbduan.net/>

欢迎本科生跟我做创新创业！

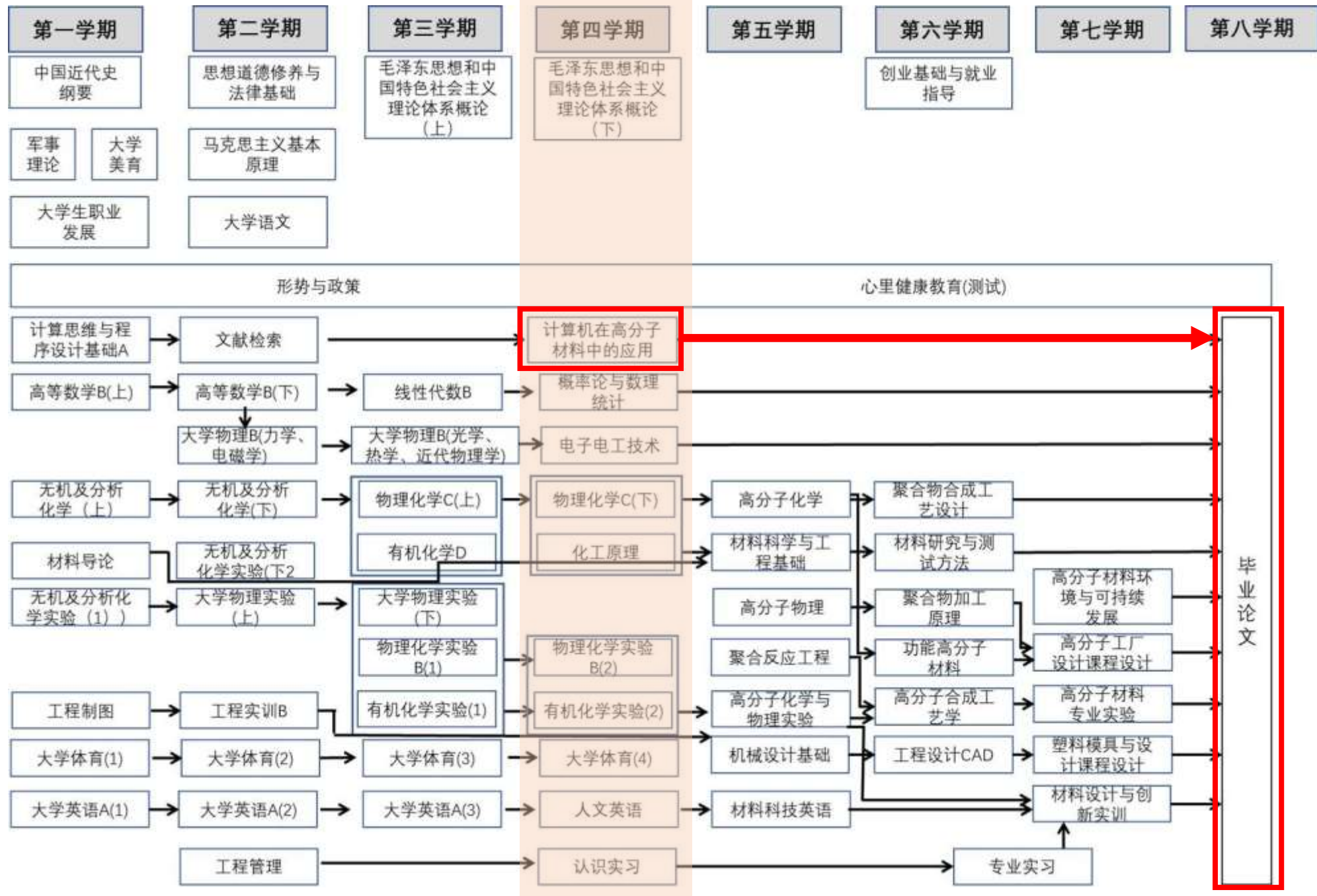
欢迎本科生报考我的研究生！



# 课程简介

- **课程名称：** 计算机在高分子材料中的应用
- **课程类型：** 学科基础课，必修
- **学时学分：** 24学时，1.5学分
- **适用专业：** 高分子材料与工程专业
- **后续课程：** 高分子化学、高分子物理……

专业性由此课开启……








# 毕业论文组成

**武汉工程大学**

2020 届毕业（设计）论文



题 目：基于人工神经网络的金相图识别系统的开发及应用

专业班级： 2016 塑料成型与模具设计 01 班

学 号： \_\_\_\_\_

学生姓名： \_\_\_\_\_

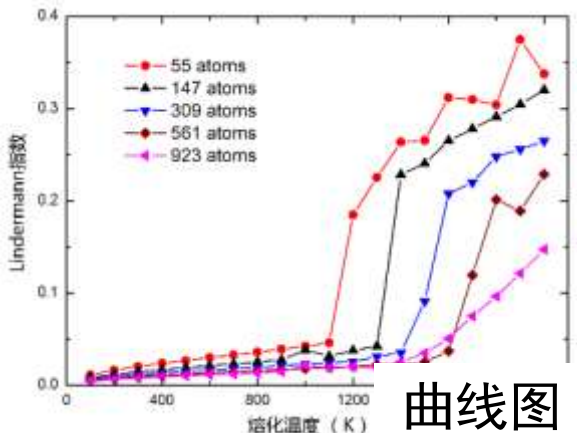
指导教师： \_\_\_\_\_

指导老师职称： 副教授

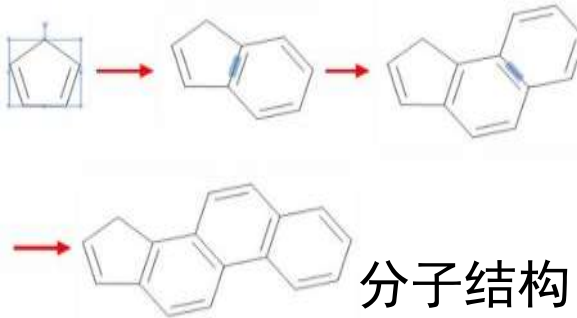
学院名称： 材料科学与工程学院

完成日期：2020 年 05 月 29 日

**学位论文**



曲线图



分子结构

**论文内容**



**毕业论文答辩**  
答辩学生：\* \* \* 指导老师：\* \* \*



**论文答辩**






# 毕业论文所需技能

**武汉工程大学**

2020 届毕业（设计）论文



题 目：基于人工神经网络的金相图识别系统的开发及应用

专业班级： 2016 塑料成型与模具设计 01 班

学 号： \_\_\_\_\_

学生姓名： \_\_\_\_\_

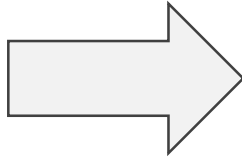
指导教师： \_\_\_\_\_

指导老师职称： 副教授

学院名称： 材料科学与工程学院

完成日期：2020 年 05 月 29 日

**学位论文**



# WORD





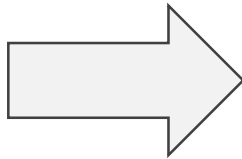
# 毕业论文所需技能

曲线图

原子数	熔点 (K)	Lindermann 指数
55 atoms	1000	0.18
55 atoms	1200	0.28
55 atoms	1400	0.38
147 atoms	1000	0.02
147 atoms	1200	0.25
147 atoms	1400	0.32
309 atoms	1000	0.01
309 atoms	1200	0.18
309 atoms	1400	0.25
561 atoms	1000	0.01
561 atoms	1200	0.05
561 atoms	1400	0.20
923 atoms	1000	0.01
923 atoms	1200	0.02
923 atoms	1400	0.15

分子结构

论文内容



Origin

Excel

ChemOffice

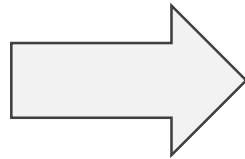


# 毕业论文



论文答辩

# PowerPoint





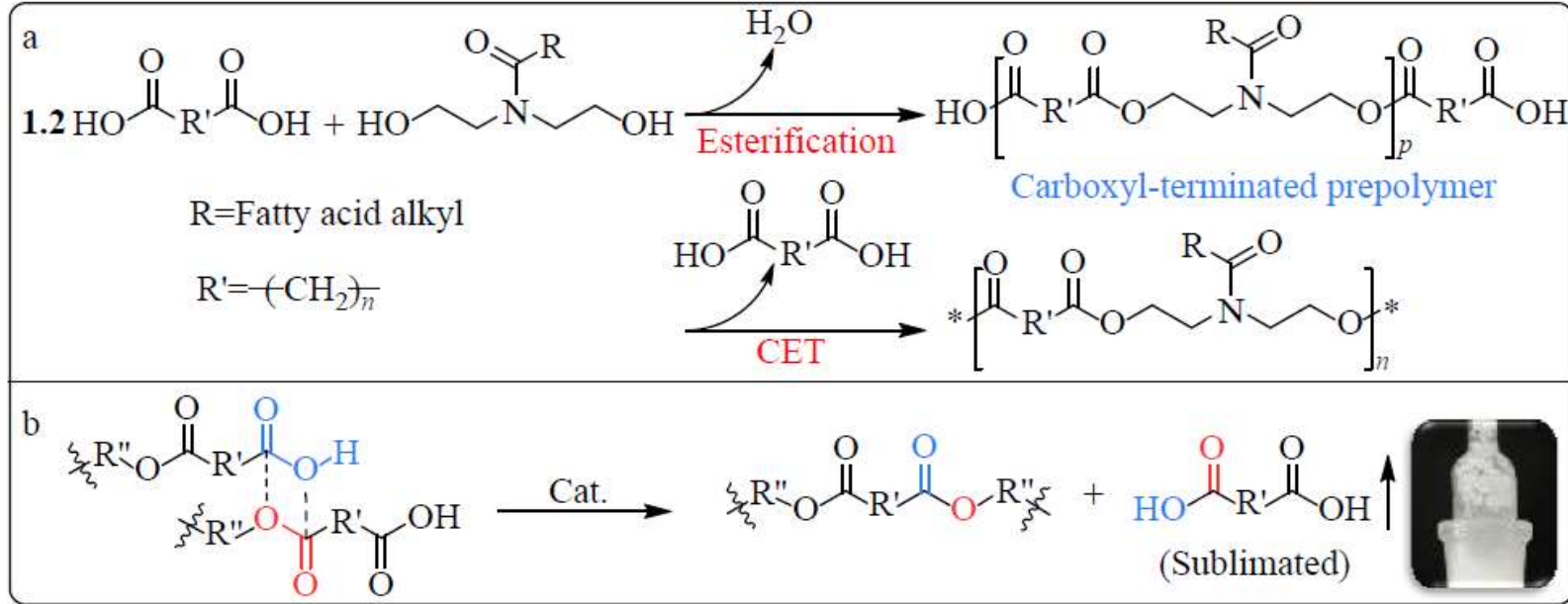
# 研究生



论文发了吗？



# 论文中的反应式



**Scheme 1** (a) Synthesis of soybean oil-based polyesters *via* carboxyl-ester transesterification (CET); (b) Reaction mechanism of CET.



# 论文中的图

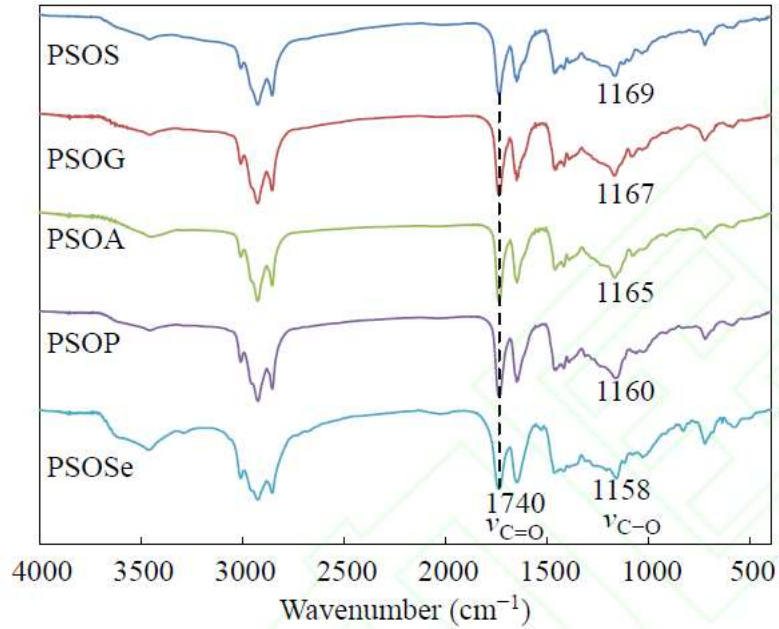


Fig. 4 FTIR spectra of various soybean oil-based polyesters.

多条曲线叠加的红外图

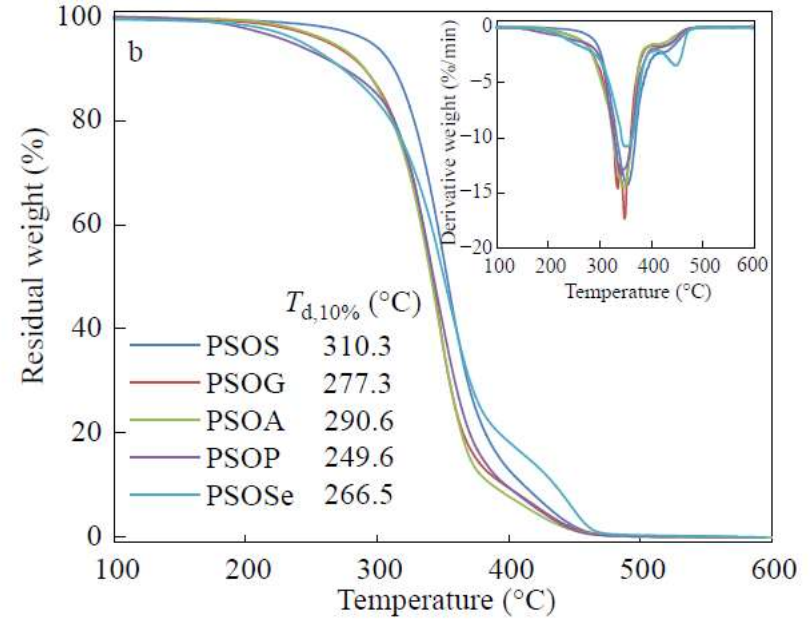


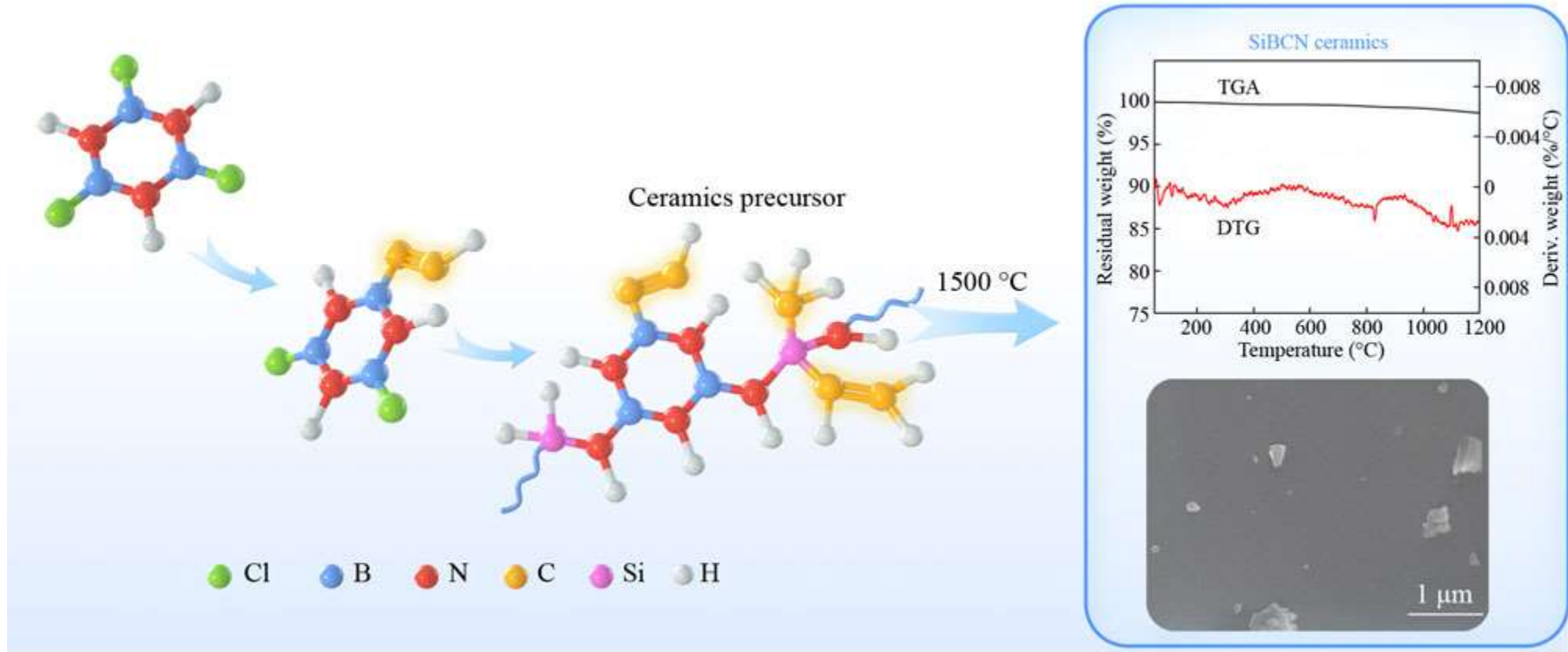
Fig. 5 (a) DSC, (b) TGA and DTG (inserted) curves of various soybean oil-based polyesters.

图中图，微分曲线





# 论文中的图

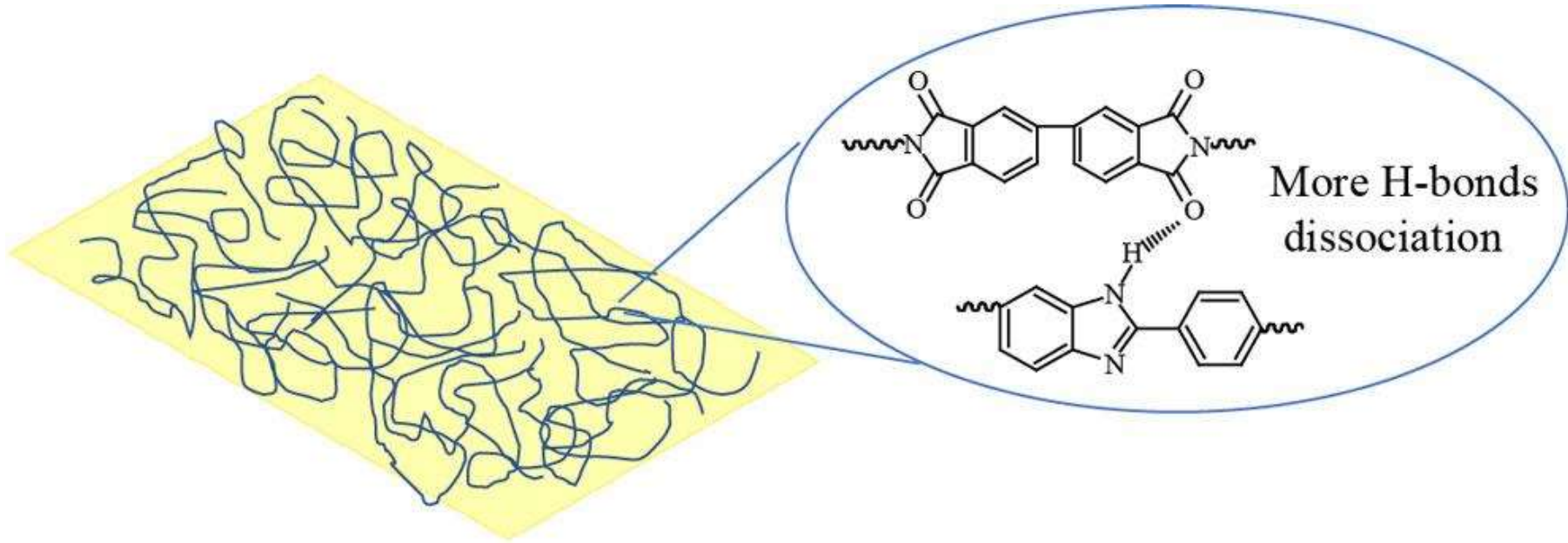


分子式与数据图结合





# 论文中的图



Temperature: 300–400 °C, CTE =  $33.8 \times 10^{-6}/\text{K}$ ,  $T_g = 436 \text{ °C}$

示意图与分子式结合

Acta Polymerica Sinica. 2021, 52(4) :363-370.



# 研究生



组会PPT做好了吗？

**学好**

**Word、PPT、Excel  
Origin、ChemOffice  
非常重要!!!**

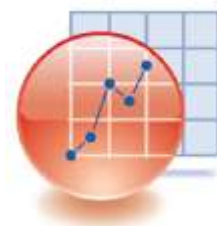


# 课程主要内容

## 1. Office办公软件



## 2. Origin科技绘图软件



## 3. ChemOffice软件





# 课程目标



**掌握与所学软件  
相关的基础知识**

**应用所学软件  
完成特定任务**

**培养在专业中  
使用计算机的素养**



# 课程教学团队

班级	教师	授课内容	授课学时
高材合成1班	曾小平	Office办公软件	8学时
高材合成2班	熊丽君	Origin科技绘图软件	8学时
高材包材班	孙义民	ChemOffice软件	8学时
高材合成3班	段献宝	Office办公软件	8学时
高材模具班	蔡璐	Origin科技绘图软件	8学时
高材创新班	李鹏程	ChemOffice软件	8学时



# 主要教学手段

课堂教学

课后自学



PPT讲解



软件演示



观看视频



作业练习





# 课程考核方式

成绩类别	考核方式	考核要求	权重
平时成绩	课堂表现	出勤、课堂互动	20 %
	课后作业	作业次数、质量	30 %
期末成绩	课程论文	使用所学软件 完成课程论文	50 %

**强调：** 缺勤或缺作业3次及以上，平时成绩按0分处理。



# 教材选用



书名：化学信息学

作者：林亚维

出版社：化学工业出版社

版次：第一版



Q&A

