



**PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Jakub Krieger

Molekulová simulace Lennard-Jonesovské tekutiny jako úloha do praktika z fyzikální chemie

Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Peter Košovan PhD.

Studijní program: Chemie se zaměřením na vzdělávání
sdružený s Fyzika se zaměřením
na vzdělávání

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Chtěl bych mnohokrát poděkovat svému vedoucímu práce, Peteru Košovanovi, za zasvěcení do světa molekulových simulací a za pravidelné konzultace, na kterých mi dlouhodobě poskytoval věcnou zpětnou vazbu a usměrňoval mé snažení. Zároveň mu děkuji za volnost a svěřenou důvěru v mé vlastní nápady. Za diskuse a věcné připomínky nejen k didaktické části práce děkuji mému konzultantovi Petru Šmejkalovi. Václavu Martínkovi děkuji za podnětnou diskusi ohledně vizualizace simulace.

Mnohokrát děkuji všem zúčastněným testování za zájem a věnonaný čas. Petrovi Košovanovi a katedře didaktiky fyziky děkuji za poskytnutí prostor pro testování.

Lee Mackové patří vřelé poděkování za zevrubnou korekturu a podporu v závěrečné fázi tvorby práce. V neposlední řadě pak děkuji mé rodině, především mé matce, za schovívavost a prostor pro tvorbu práce.

Název práce: Molekulová simulace Lennard-Jonesovské tekutiny jako úloha do praktika z fyzikální chemie

Autor: Jakub Krieger

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Peter Košovan PhD., Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Abstrakt: Molekulové simulace umožňují reprodukovat a předvídat chování reálných systémů pomocí zjednodušených modelů. Za posledních 70 let se díky rapidnímu rozvoji počítačů tato metoda stala důležitou součástí různých vědeckých oborů. Díky své rychlosti a nízké cenové náročnosti mohou molekulové simulace pracovat ruku v ruce s reálným experimentem a v některých případech ho i nahradit. Didaktika této progresivní metody je zatím na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy v plenkách a její výuka je omezena na magisterské a vyšší studium. V rámci této práce jsme se zaměřili na tvorbu a testování úlohy do praktika z fyzikální chemie, která může sloužit jako první seznámení s molekulovými simulací pro studenty chemických bakalářských oborů. Úloha psaná v interaktivním prostředí Jupyter Notebook byla navržena na základě aktuálních pedagogických přístupů badatelské výuky, doplněných vzhledem ke komplexitě výukového obsahu vysokou mírou scaffoldingu. Volba simulace modelu superkritického argonu popsaného Lennard-Jonesovým potenciálem vycházela z požadavku na koncepční jednoduchost a možnost propojení s již známými poznatky. Testování úlohy na 12 studentech umožnilo vytvořit časový plán úlohy, opravit chyby, identifikovat nejčastější problémy a sestavit návrhy na zlepšení úlohy. Byli bychom rádi, kdyby tato úloha byla v budoucnu zařazena do běžné výuky v praktiku z fyzikální chemie, případně do kurzu fyzikální chemie na Přírodovědecké fakultě.

Klíčová slova: molekulová dynamika, badatelsky orientovaná výuka, scaffolding, testování, interaktivní

Title: Molecular simulation of Lennard-Jones fluid as a task for physical chemistry laboratory

Author: Jakub Krieger

Department: Department of physical and macromolecular chemistry

Supervisor: doc. RNDr. Peter Kořovan PhD., Department of physical and macromolecular chemistry

Abstract: Molecular simulations are capable of reproducing and predicting the behavior of real systems using a simplified model. Over the past 70 years, thanks to the rapid development of computers, this method has become an important part of various scientific fields. Thanks to their speed and low cost, molecular simulations can work hand in hand with a real experiment and in some cases even replace it. The didactics of this progressive method are in its beginnings at the Faculty of Science of Charles University, and its teaching is limited to master's and higher studies. In this work, we created and tested a task for physical chemistry laboratory, which can serve as a first introduction to molecular simulations for undergraduate chemistry students. The task, written in the interactive Jupyter Notebook environment, was designed based on modern pedagogical approaches of inquiry based learning, supplemented by a high level of scaffolding due to the complexity of the teaching content. The choice of simulating the model of supercritical argon described by the Lennard-Jones potential was based on the requirement for conceptual simplicity and the possibility of connection with already known concepts. Testing of the task on 12 students made it possible to create a time schedule, correct errors, identify the most common problems, and propose suggestions for improvement. We would be glad, to have the task included as a regular part of the physical chemistry laboratory or in the course of physical chemistry on the Faculty of Sciences at the Charles University.

Keywords: molecular dynamics, inquiry-based learning, scaffolding, testing, interactive

Obsah

1	Úvod do problematiky	8
2	Teoretická část	9
2.1	Popis plynů klasickou termodynamikou	9
2.1.1	Stavové rovnice	9
2.1.2	Kompresibilitní diagram	10
2.2	Popis plynů statistickou termodynamikou	10
2.2.1	Problém N těles	11
2.2.2	Základní pojmy statistické termodynamiky	11
2.2.3	Ergodická hypotéza	11
2.2.4	Liouvilleův teorém	12
2.2.5	Hustota pravděpodobnosti v kanonickém souboru	12
2.2.6	Cesta od statistického integrálu k tlaku	13
2.3	Molekulové simulace	14
2.3.1	Klasická molekulová dynamika	14
2.3.2	Interakční potenciály	14
2.3.3	Integrační metody	16
2.3.4	Periodické okrajové podmínky	17
2.3.5	Termostaty	17
2.3.6	Tlak v simulaci	18
2.4	Statistická analýza	19
2.4.1	Nekorelované vzorky	19
2.4.2	Korelované vzorky	19
2.5	Pedagogika a didaktika molekulových simulací	20
2.5.1	Specifika vysokoškolské pedagogiky	20
2.5.2	Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny	20
2.5.3	Příklady zařazení simulací v konkrétních vzdělávacích kontextech	20
2.5.4	Badatelsky orientovaná výuka	23
2.5.5	Scaffolding	23
2.5.6	Badatelsky orientovaná výuka v kontextu laboratoří	26
3	Metodická část	28
3.1	Tvorba úlohy	28
3.1.1	Volba simulovaného systému	28
3.1.2	Volba pedagogického přístupu	29
3.1.3	Parametry simulace	29
3.1.4	Stanovení didaktických cílů	35
3.2	Struktura úlohy	36
3.2.a	Počítačová simulace izoterem plynů	36
3.2.b	Reálné plyny	37
3.2.c	Molekulové simulace a tlak	37
3.2.d	Úkol 1	38
3.2.e	Periodické okrajové podmínky	40
3.2.f	Úkol 2	40

3.2.g	Úkol 3	41
3.2.h	Popis mezimolekulových interakcí	42
3.2.i	Dosah potenciálu a periodické okrajové podmínky	42
3.2.j	Úkol 4	43
3.2.k	Fluktuace tlaku	43
3.2.l	Úkol 5	44
3.2.m	Statistická analýza	44
3.2.n	Úkol 6	45
3.2.o	Úkol 7	46
3.2.p	Vykreslení izoterem	47
3.2.q	Úkol 8	48
3.3	Testování úlohy	48
3.3.1	Pilotní testování	49
3.3.2	Účastníci a podmínky testování	49
3.3.3	Úvodní instrukce	50
3.3.4	Vypracování úlohy	50
3.3.5	Rozhovor	50
3.4	Vyhodnocení testování	51
4	Výstupní část	52
4.1	Doba trvání	52
4.2	Kategorizace událostí	54
4.2.1	Problémy, otázky a miskoncepce	55
4.2.2	Chyby	60
4.3	Nabyté poznatky	60
4.4	Náměty na vylepšení úlohy	61
4.5	Limitace metody testování	62
4.6	Verze úlohy po opravě chyb	63
	Závěr	64
	Literatura	66
	Seznam obrázků	69
	Seznam tabulek	71
	Seznam použitých zkratk	72
A	Přílohy	73
A.1	Časy započetí sekce	73
A.2	Přehled událostí	73
A.3	Kategorizace událostí	73
A.4	Přepis rozhovorů	73
A.5	Úloha - simuluj-pv-praktikum-badatelsky	73
A.6	Úloha - analyzuj-vystupy-badatelsky	73
A.7	Úloha - vykresli-izotermy-badatelsky	73
A.8	simulace_pro_praktikum	73

1 Úvod do problematiky

Kolafa (2023, s. 6) definuje simulaci jako „imitaci (napodobení) nějakého procesu či systému.“ Dobrá simulace dokáže na základě jednoduchého modelu reprezentovat vlastnosti a funkce složitějšího procesu či systému.

20. století s rapidním rozvojem technologií otevřelo prostor pro využití na počítačů k simulacím a vznikl tak obor počítačových simulací. Rostoucí výpočetní síla počítačů umožnila simulovat různé jevy v rámci rozličných vědních oborů. Studium hmoty na atomární úrovni se v 50. letech 20. století začaly zabývat molekulové simulace. Předmětem zájmu byla mimo jiné struktura kapalin. Molekulovou simulaci kapalného argonu popsaného modelem Lennard-Jonesova potenciálu poprvé simuloval Rahman (1964). Další simulace navazující na tuto práci důkladně prověřili vlastnosti tohoto modelu a především díky své jednoduchosti se stal Lennard-Jonesův model velmi populárním. Rozvoj v oboru vedl ke složitějším modelům pro popis složitějších systémů a molekulové simulace tak postupně začaly přispívat k vědeckému poznání v oblastech, kde teorie ani experiment nestačily.

Jak uvádí Allen; Tildesley (1987, s. 5), simulace mají ve vědě dvojí roli. Porovnáním simulací s teorií mohou odlišit dobré a ne tak dobré teorie. Následná porovnání s experimentem pak mohou poskytnout interpretaci experimentálních výsledků. Simulace z tohoto hlediska představují jakýsi most mezi experimentem a teorií. Díky způsobu, kterým jsou simulace prováděny a analyzovány, se často nazývají počítačovými experimenty.

V současné době se molekulovým simulacím věnují celé výzkumné skupiny mimo jiné i na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy. Výuka této metody je zde ovšem upozaděna a omezena na magisterské a vyšší studium. Na úrovni bakalářského studia chybí didaktické materiály, protože se výukou zabývají především odborníci. Existující výukové materiály pak z hlediska forem a metod výuky nepojímají simulace jako experimentální vědu, ačkoliv simulace experimentálním vědám svou metodologií do značné míry odpovídají.

Cílem této práce bylo napomoci k odstranění tohoto nesouladu a na základě moderních pedagogických přístupů vytvořit úlohu do fyzikálně-chemického praktika, která může sloužit jako první seznámení s molekulovými simulacemi pro studenty chemických bakalářských oborů, a následně tuto úlohu otestovat na studentech.

2 Teoretická část

Teoretická část představuje molekulové simulace jakožto vědní obor, který čerpá z teoretických poznátků statistické fyziky a aplikuje je v kontextu numerických výpočtů na počítačích. Následně zde ukezuujeme přístupy k výuce molekulových simulací v různých vzdělávacích kontextech a zaměřujeme se na badatelskou výuku a scaffolding, které jsme vyhodnotili jako vhodné přístupy pro výuku molekulových simulací. Základní cíle této kapitoly jsou:

- představit základní koncepty molekulových simulací,
- ukázat soudobé přístupy k výuce molekulových simulací,
- podat dostatečný kontext k praktické části.

Vzhledem k omezenému rozsahu tohoto textu jsou zařazena jen témata, která nějakým způsobem přispívají alespoň ke dvěma z výše uvedených cílů. Tato kapitola by měla sloužit především vysokoškolským (případně středoškolským) pedagogům se zájmem o výuku molekulových simulací, čemuž je uzpůsoben nejen obsah, ale i jazyk a míra detailu.

2.1 Popis plynů klasickou termodynamikou

2.1.1 Stavové rovnice

Nejjednodušší model pro popis plynů byl odvozen na základě empirických pozorování Boyla, Gay-Lussaca, Charlese a Avogadra. Kombinací zákonů pojmenovaných po těchto vědcích byla odvozena stavová rovnice ve tvaru

$$pV = nRT, \quad (2.1)$$

kde p je tlak, V je objem, n je látkové množství, R je univerzální plynová konstanta a T je termodynamická teplota (Atkins et al., 2022, s. 8; Malijevský, 2009 s. 43). Hypotetický plyn, který by zcela a za všech podmínek splňoval rovnici 2.1, nazýváme ideálním plynem. Reálné plyny se chování ideálních plynů blíží za nízkých tlaků a za vysokých teplot. Naopak při nízkých teplotách a vysokých tlacích se jejich chování od ideálního plynu odchyluje. Tyto odchylky se snaží postihnout složitější rovnice, z nichž didakticky nejvděčnější je díky své přímočaré fyzikální interpretaci rovnice 2.2, jíž na základě empirických dat formuloval v roce 1873 Van der Waals

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT, \quad (2.2)$$

kde a a b jsou empirické Van der Waalsovy parametry (Atkins et al., 2022, s. 17; Malijevský, 2009 s. 99).

2.1.2 Kompresibilitní diagram

Pro porovnání daného modelu s experimentálními hodnotami dobře slouží tzv. generalizovaný kompresibilitní diagram. Jde o závislost kompresibilitního faktoru na redukovaném tlaku, kde kompresibilitní faktor Z je definován jako poměr reálného tlaku plynu a odpovídajícího tlaku ideálního plynu:

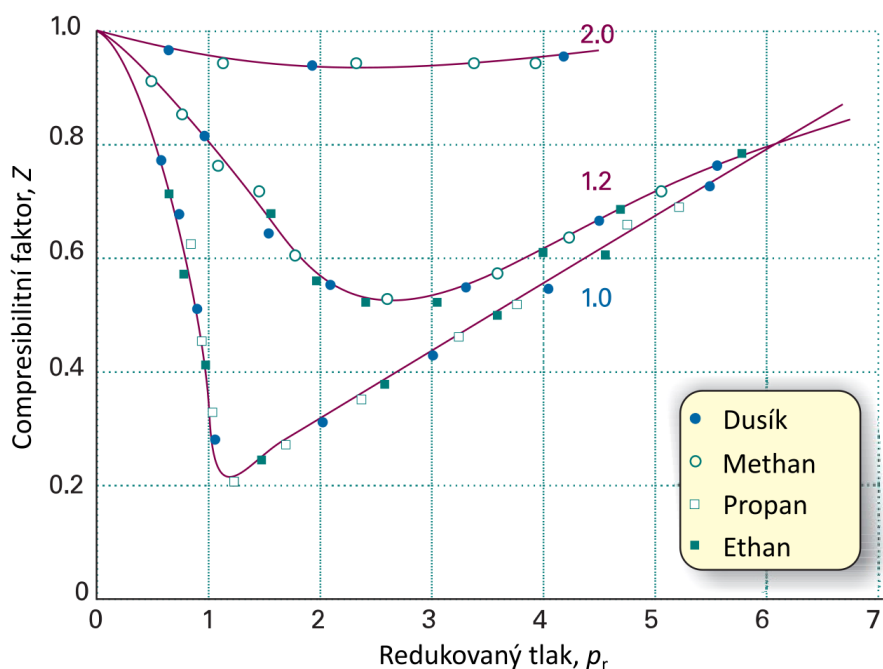
$$z \equiv \frac{p_{\text{real}}}{p_{\text{ideal}}} = \frac{p_{\text{real}} V_{\text{m}}}{RT}, \quad (2.3)$$

a redukovaný tlak p_r je podíl tlaku a kritického tlaku podle rovnice

$$p_r = \frac{p}{p_c}, \quad (2.4)$$

kde p_c je kritický tlak. Zcela analogicky lze definovat také kritickou teplotu T_c a kritický molární objem $V_{\text{m},c}$ (Atkins et al., 2022, s. 22).

Důsledkem principu korespondujících stavů je, že závislost kompresibilitního faktoru na redukovaném tlaku je stejná pro mnoho různých molekul, jak ukazuje obrázek 1. Nejlépe se zobrazenému trendu blíží sférické nepolární molekuly (Atkins et al., 2022, s. 21).



Obrázek 1 Generalizovaný kompresibilitní diagram pro vybrané plyny. Upraveno z (Atkins et al., 2022, s. 22).

2.2 Popis plynů statistickou termodynamikou

Zatímco popis plynů v klasické termodynamice je fenomenologický - popisuje, jak se plyny „jeví“ bez vysvětlení příčiny tohoto chování na molekulární úrovni, statistická termodynamika se snaží o „popis termodynamických vlastností

makroskopických systémů na základě znalosti vzájemného silového působení částic tvořících systém“ (Malijevský, 2009, s. 25).

V této kapitole nastíníme některé pojmy a koncepty statistické termodynamiky, které tvoří teoretický základ pro molekulové simulace.

2.2.1 Problém N těles

Pokud bychom považovali atomy plynu za hmotné body, mohli bychom jejich pohyb zcela popsat pomocí Newtonových pohybových rovnic

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d\vec{r}_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.5)$$

kde \vec{F}_i je vektor celkové síly působící na i -tou částici, m_i je hmotnost i -té částice, $\frac{d\vec{r}_i}{dt}$ je zrychlení i -té částice a N je počet částic. Tato soustava diferenciálních rovnic představuje tzv. *problém N těles*, který nemá pro $N > 2$ analytické řešení, je tedy nutno jej řešit numericky. Řešení pro makroskopické systémy čítající řádově 10^{23} částic je nejen technicky nedosažitelné vzhledem k současným možnostem počítačů, nýbrž dokonce principiálně nemožné. Jde totiž o chaotický systém, kde i malé změny v počátečních podmínkách vedou k nepředvídatelným odlišnostem v chování systémů.

Statistická termodynamika volí jiný přístup: nesnaží se popsat vývoj systému v čase, nýbrž popisuje pravděpodobnostní rozdělení mikroskopických stavů systému a z něj odvozuje makroskopické veličiny. V následujících odstavcích tímto způsobem dojdeme ke vzorci pro výpočet tlaku plynu.

2.2.2 Základní pojmy statistické termodynamiky

Každá částice v trojrozměrném prostoru má 3 složky polohy \vec{r} a tři složky hybnosti \vec{p} . Stav částice je tímto zcela určen, proto je užitečné zavést abstraktní prostor, v němž bude stav systému určen jedním bodem. Takový prostor má $6N$ rozměrů, kde N je počet částic, a nazývá se *fázový prostor* (Malijevský, 2009, s. 26).

Mikrostav je stav systému popsáný právě jedním bodem ve fázovém prostoru.

Makrostav je stav systému popsáný makroskopickými veličinami jako tlak, teplota, vnitřní energie, atd.

Soubor je množina všech mikrostavů, které jsou slučitelné s daným termodynamickým stavem systému.

2.2.3 Ergodická hypotéza

Makroskopické systémy v čase přecházejí mezi různými mikrostavy, které odpovídají různým okamžitým hodnotám makroskopických veličin. Časové aritmetické průměry okamžitých hodnot jsou dané vztahem

$$\bar{X} = \frac{1}{t_{\max}} \int_{t=0}^{t=t_{\max}} X(t) dt, \quad (2.6)$$

kde \bar{X} značí časový aritmetický průměr časově závislé veličiny $X(t)$, t je čas a t_{\max} je celková doba, přes kterou průměrujeme (Malijevský, 2009, s. 27).

Statistická termodynamika pracuje s tzv. souborovými průměry, kdy jsou všechny možné mikrostavy váženy svými pravděpodobnostmi. To lze v diskrétním případě popsat vztahem

$$\langle X \rangle = \sum_i P_i X_i, \quad (2.7)$$

kde $\langle X \rangle$ souborový průměr veličiny X , P_i je pravděpodobnost i -tého stavu a X_i je hodnota veličiny X v i -tém stavu (Malijevský, 2009, s. 27). Ve spojitém případě lze souborový průměr popsat vztahem

$$\langle X \rangle = \int_{f.p.} X_i \rho_i d\Phi, \quad (2.8)$$

kde $f.p.$ značí fázový prostor, ρ_i je hustota pravděpodobnosti i -tého stavu a $d\Phi$ je diferenciální element fázového prostoru (Kácovský, 2023).

Obsahem ergodické hypotézy je tvrzení, že časový aritmetický průměr je v limitě nekonečně dlouhého času shodný se souborovým průměrem:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{X} = \langle X \rangle. \quad (2.9)$$

Toto tvrzení je stěžejní nejen pro statistickou fyziku, ale v jiném světle také pro molekulové simulace.

2.2.4 Liouvilleův teorém

Jak již bylo řečeno, systém N hmotných bodů je principálně zcela popsáno N Newtonovými rovnicemi 2.5. Jedním z výsledků teoretické mechaniky je, že tento systém ekvivalentně popisuje $2N$ Hamiltonových rovnic (Dvořák, 2022). Řešením Hamiltonových rovnic je trajektorie ve fázovém prostoru. Pokud má být klasická mechanika deterministická, nesmí se tyto trajektorie křížit a objem ve fázovém prostoru se tedy musí chovat jako nestlačitelná kapalina (Kolafa, 2023, s. 17). Hustota ve fázovém prostoru, tedy hustota pravděpodobnosti, je konstantní, tedy závisí jen na konstantách (tzv. integrálech pohybu). Vhodným nastavením souřadnic lze zařídit, že jedinou konstantou, na které hustota pravděpodobnosti závisí, je energie příslušného mikrostavu E , což shrnuje tvrzení 2.10 (Kácovský, 2023):

$$\rho = \rho(E). \quad (2.10)$$

Toto tvrzení je extrémně silné, jak v zápětí uvidíme.

2.2.5 Hustota pravděpodobnosti v kanonickém souboru

Systém, který se snažíme popsat, je uzavřená nádoba o konstantním objemu a počtu částic, mající tepelně prostupné stěny, takže její teplota se ustálí na teplotě okolí. Takovému systému ve statistické fyzice odpovídá tzv. NVT soubor, neboli kanonický soubor (Malijevský, 2009, s. 30). Pro potřeby následujícího odvození uvažujme dva systémy A a B, které jsou ve vzájemném styku a obklopené termostatem, který udržuje stálou teplotu. Pokud jsou tyto systémy navzájem nezávislé, platí o hustotě pravděpodobnosti popisující systém A+B vztah 2.11 (Kolafa, 2023, s. 19; Kácovský, 2023 s. 3), kde využíváme vztahu 2.10 a zákonu zachování energie:

$$\rho(E_A) \cdot \rho(E_B) = \rho(E_A + E_B). \quad (2.11)$$

Hustota pravděpodobnosti je tedy funkce, které ze součtu dělá součin, což naznačuje, že jde o exponenciálu. Z rigoróznějšího odvození vyplyne tvar

$$\rho(E) = e^{\alpha - \beta E}, \quad (2.12)$$

kde α a β jsou konstanty (Kolafa, 2023, s. 19; Káčovský, 2023 s. 3). Vztah 2.12 pro hustotu pravděpodobnosti platí i pro systémy, navzájem interagujících částic, kde neplatí výše vyslovený požadavek na nezávislost systémů A a B. Pomocí normovací podmínky lze určit hodnotu konstanty α a přepsat rovnici 2.12 do známějšího tvaru 2.13 (Kolafa, 2023, s. 28; Malijevský, 2009 s. 30):

$$\rho(E) = \frac{e^{-\beta E}}{Z}, \quad (2.13)$$

kde Z je statistická suma resp. statistický integrál (též partiční suma či integrál) daný vztahy 2.14, resp. 2.15

$$Z = \int_{f.p.} e^{-\beta E} d\Phi, \quad (2.14)$$

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad (2.15)$$

kde E_i je energie i -tého mikrostavu. Poznamenejme, že v některých textech se tato veličina značí též Q .

Z korespondence mezi statistickou a klasickou termodynamikou lze ukázat, že pro β platí

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (2.16)$$

kde $k_B \doteq 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ je Boltzmannova konstanta (Káčovský, 2021, s. 6).

2.2.6 Cesta od statistického integrálu k tlaku

Pro výpočet tlaku v NVT souboru si z klasické termodynamiky vypůjčíme vztah 2.17 pro diferenciál Helmholtzovy energie F :

$$dF = -SdT - pdV, \quad (2.17)$$

kde S je entropie (Atkins et al., 2022, s. 96). Z 2.17 lze odvodit vztah mezi tlakem a Helmholtzovou energií:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T. \quad (2.18)$$

Za použití definice Helmholtzovy energie z klasické termodynamiky a rovnice 2.8 pro energii lze odvodit vztah 2.19 (Malijevský, 2009, s. 40):

$$F = -k_B T \ln Z. \quad (2.19)$$

Ze znalosti energie E ve vztahu 2.15, lze získat vztah pro statistický integrál Z . Z něj lze pak pomocí vztahů 2.19 a 2.18 odvodit vztah pro okamžitý tlak

$$p = k_B T \cdot \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial V} \right)_T. \quad (2.20)$$

Konkrétní vzorec pro výpočet tlaku bude uveden v kontextu molekulových simulací v kapitole 2.3.6.

2.3 Molekulové simulace

Molekulové simulace zahrnují škálu rozličných přístupů, od kombinace kvantové mechaniky a molekulové mechaniky, přes molekulovou dynamiku, Monte Carlo metody po hrubozrnné modely (Kolafa, 2023, s. 6). V této práci se zaměříme na klasickou molekulovou dynamiku, kterou jsme využili i v úloze představené v praktické části.

2.3.1 Klasická molekulová dynamika

Klasická molekulová dynamika představuje numerický přístup k řešení Newtonových rovnic 2.5. Sílu působící mezi částicemi přitom vypočteme z potenciálu podle rovnice

$$\vec{F}_i = -\nabla_i U(\vec{r}^N), \quad (2.21)$$

kde potenciál $U(\vec{r}^N)$ je obecně funkcí poloh \vec{r}_i všech N částic v systému a ∇_i je gradient v bodě, kde se nachází i -tá částice (Kolafa, 2023, s. 60). O konkrétních tvarech potenciálů používaných v simulacích bude pojednáno v kapitole 2.3.2. Zde jen zmiňme, že potenciály, o kterých je zde řeč, jsou v striktně fyzikálním pojetí potenciální energie, jelikož mají rozměr energie.

Řešení diferenciálních rovnic 2.5, tedy časový vývoj poloh a rychlostí částic v systému, lze získat numerickým integrováním těchto rovnic. Konkrétní algoritmy pro numerickou integraci budou představeny v kapitole 2.3.3.

2.3.2 Interakční potenciály

Potenciál $U(\vec{r}^N)$ může být rozdělen na členy závislé na polohách jednotlivých atomů, na polohách dvojic, trojic, atd., jak naznačuje vztah:

$$U = \sum_i U_1(\vec{r}_i) + \sum_i \sum_j U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_i \sum_j \sum_k U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) \dots, \quad (2.22)$$

kde $U_1(\vec{r}_i)$ jde potenciál jednotlivých atomů v závislosti na poloze, přičemž $i = 1, \dots, N$, a analogicky pro další členy. Pokud se systém nenachází ve vnějším poli, je první člen nulový (Allen; Tildesley, 1987, s. 7). Nejdůležitějším členem je tedy člen druhý, a v jednoduchých simulacích se všechny ostatní členy zanedbávají. Potenciály $U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ se nazývají párové potenciály a ve zbytku této sekce bude řeč o nich.

Jaký tvar může mít takový párový potenciál? Pokud dva atomy budeme přibližovat k sobě, v jistém okamžiku se začnou odpuzovat. Podle kvantové mechaniky je tento repulzivní potenciál úměrný e^{-r} , kde r je vzdálenost jader dvou atomů. Naopak na větší vzdálenosti se budou projevovat především přitažlivé Van der Waalsovy síly, jejichž potenciál je úměrný $\frac{1}{r^6}$ (Kolafa, 2023, s. 43). Kombinací těchto členů dostáváme tzv. exp-6 potenciál, který má tvar

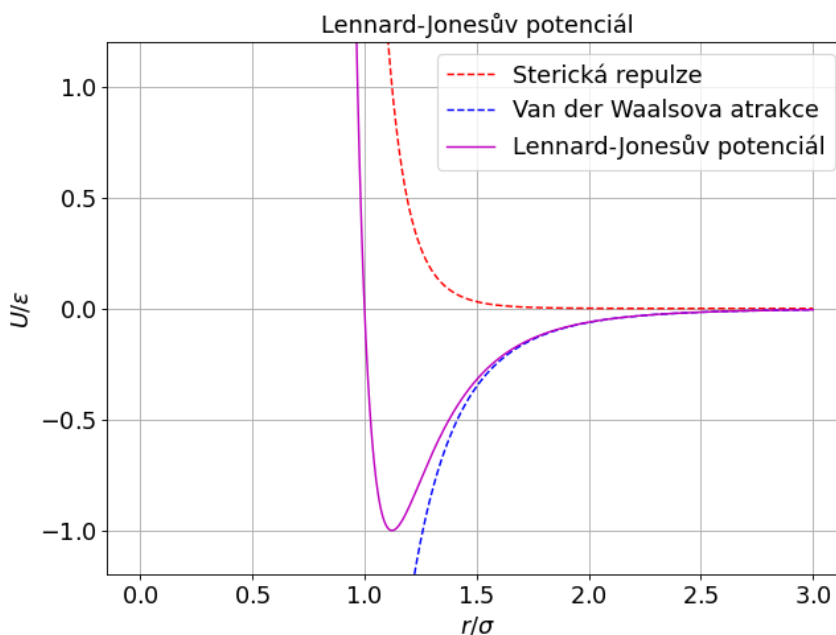
$$U_{\text{exp-6}}(r) = a e^{-Br} - \frac{C}{r^6}, \quad (2.23)$$

kde A , B a C jsou konstanty. Tento potenciál je ovšem velice nepraktický pro počítačové výpočty, jelikož exponenciální funkci je při výpočtech nutno aproximovat

pomocí Taylorova rozvoje. Proto se v molekulových simulacích člen s exponenciálou často nahrazuje nějakým polynomem. Nejpoužívanější takový potenciál je tzv. Lennard-Jonesův potenciál U_{LJ} daný vztahem

$$U_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2.24)$$

kde ϵ a σ jsou konstanty, jejichž hodnoty závisí na simulovaném systému (Kolafa, 2023, s. 44). Použití členu $(\sigma/r)^{12}$ je výpočetně velmi efektivní, protože ho lze získat pouhým umocněním členu $(\sigma/r)^6$ na druhou. Graficky je Lennard-Jonesův potenciál znázorněn na obrázku 2.



Obrázek 2 Lennard-Jonesův potenciál a jeho části odpovídající Van der Waalově atrakci a sterické repulzi.

V grafu na obrázku 2 jsme konstanty ϵ a σ vzali jako vnitřní jednotky simulace. Díky tomu má minimum potenciálu hodnotu $U_{\min} = -1\epsilon$ a potenciál protíná nulu v bodě $r = \sigma$. Derivací LJ potenciálu lze odvodit, že minimum se nachází ve vzdálenosti $r = 2^{1/6}\sigma$.

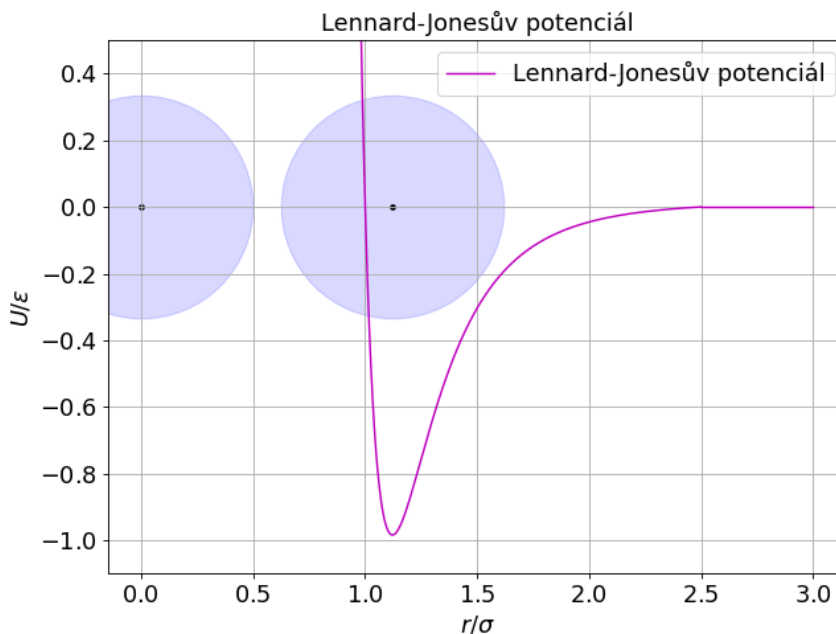
Výše uvedené potenciály patří mezi tzv. měkké potenciály. Pro kontext zmiňme, že existují také tzv. tvrdé potenciály, které mají tvrdé jádro, což znamená, že od určitého přiblížení dvou částic je potenciál nekonečný. Příkladem tvrdého potenciálu je potenciál tvrdých koulí nebo potenciál pravoúhlé jámy. Oba tyto potenciály jsou matematicky popsány pomocí nespojitých stupňovitých funkcí. Tyto potenciály jsou vysoce idealizované a nerealistické, jejich výhodou je ovšem jednoduchost (Allen; Tildesley, 1987, s. 9).

LJ potenciál 2.24 má nekonečný dosah, což je v praxi nepoužitelné, jak bude ukázáno v sekci 2.3.4. Jedním z možných řešení je utnout LJ potenciál v bodě $r = 2^{1/6}\sigma$ a přičíst k němu ϵ , aby byla zachována spojitost v tomto bodě. Tímto vzniká potenciál měkkých koulí, který má pouze repulzivní část. V případech, kdy chceme v potenciálu ponechat i atraktivní část, se položí roven nule nad jistou mezní hodnotu r_c zvanou cutoff potenciálu. Pokud chceme eliminovat nespojitost

v bodě r_c , lze odečíst od potenciálu hodnotu U_c , což je hodnota U_{LJ} ve vzdálenosti r_c . LJ potenciál pak nabývá tvaru

$$U_{LJ} = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] & \text{pro } r \in \langle 0, r_c \rangle, \\ 0 & \text{pro } r \in (r_c, \infty). \end{cases} \quad (2.25)$$

Typická hodnota r_c je 2.5σ (Rapaport, 1995, s. 46). LJ potenciál s cutoffem 2.5σ je znázorněn na obrázku 3.



Obrázek 3 Lennard-Jonesův potenciál s cutoffem 2.5σ . V grafu jsou též pro názornou představu zobrazeny atomy jako koule o průměru 1σ ve vzdálenosti odpovídající minimu potenciálu.

2.3.3 Integrační metody

Z interakčních potenciálů zavedených v sekci 2.3.2 lze vypočítat sílu pomocí rovnice 2.21. Při znalosti síly pak lze řešit Newtonovy rovnice 2.5. Z důvodů, které byly nastíněny v sekci 2.2.1 o problému N těles, se v simulacích používá k řešení Newtonových rovnic numerická integrace. Metody numerické integrace vycházejí z Taylorova rozvoje polohy jako funkce času, který má při rozvedení do druhého řádu tvar

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot \dot{x}(t) + \frac{1}{2}\Delta t^2 \cdot \ddot{x}(t) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (2.26)$$

kde t je současný čas, Δt je změna času a $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ znamená chybu třetího řádu v proměnné Δt (Rapaport, 1995, s. 57). Vyjádřením rovnice 2.26 pro $x(t - \Delta t)$ a sečtením získané rovnice a rovnice 2.26 lze odvodit vztah

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \Delta t^2 \cdot \ddot{x}(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4), \quad (2.27)$$

tedy tzv. Verletovu integrační metodu (Rapaport, 1995, s. 58). Při zanedbání chyby $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ lze pomocí této rovnice stanovit polohu v následujícím kroku

simulace $x(t + \Delta t)$ na základě znalosti poloh ve dvou předchozích krocích simulace. Rychlosti $\dot{x}(t)$ nejsou ve Verletově metodě explicitně zahrnuty, ale lze je dopočítat z Taylorova rozvoje 2.26.

Integrační metoda leapfrog (též leap-frog) je algebraicky ekvivalentní s Verletovou metodou, zahrnuje nicméně explicitní výpočet rychlosti. Integrační algoritmus metody leapfrog lze zapsat ve tvaru (Rapaport, 1995, s. 58)

$$\dot{x}(t + \Delta t/2) = \dot{x}(t - \Delta t/2) + \Delta t \cdot \ddot{x}(t), \quad (2.28)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot \dot{x}(t + \Delta t/2). \quad (2.29)$$

Rychlosti jsou tedy počítány v polovičních časech oproti polohám. Rychlost v čase t lze odhadnout např. jako aritmetický průměr rychlostí v čase $t - \Delta t/2$ a $t + \Delta t/2$ (Kolafa, 2023, s. 64). Kromě Verletovy a leapfrog integrační metody existují další, jako metody typu prediktor–korektor nebo typu Runge–Kutta (Rapaport, 1995, s. 57). Otázkou pak je, kterou z metod v dané simulaci použít. Vždy jde o balancování mezi přesností a výpočetním časem. Z hlediska přesnosti je důležitým faktorem např. zda je metoda časově reverzibilní, a jak dobře zachovává energii (Kolafa, 2023, s. 64).

2.3.4 Periodické okrajové podmínky

Problémem simulací malých systémů je, že velký poměr částic je na okraji simulačního boxu, což způsobuje, že okrajové efekty se projevují nadměrně. Abychom v simulaci eliminovali vliv okrajových efektů, zavádíme tzv. periodické okrajové podmínky. To znamená, že za okraji námi simulovaného boxu jsou periodicky se opakující obrazy boxu, se kterými mohou částice ze simulačního boxu interagovat. Je ovšem potřeba zamezit nefyzikálnímu případu, kdy zkoumaná částice reagovala s nějakou jinou částicí dvakrát. To zajišťuje podmínka 2.30 :

$$r_c > \frac{L}{2}, \quad (2.30)$$

kde L je délka hrany simulačního boxu a r_c je cutoff LJ potenciálu. Tuto podmínku ilustruje obrázek 4.

Pro molární objem platí vztah 2.31

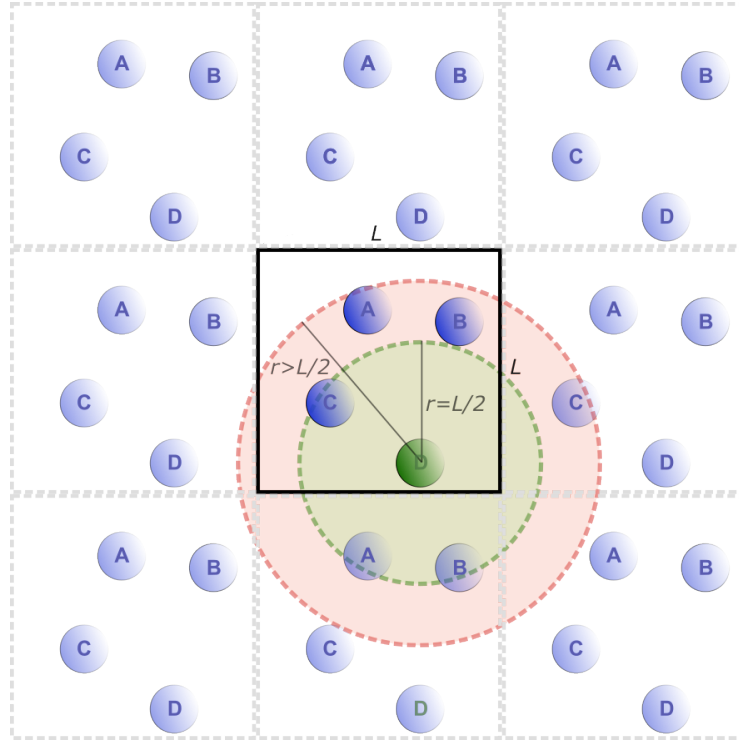
$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{V}{N} N_A = \frac{L^3}{N} N_A. \quad (2.31)$$

Spojením vztahů 2.30 a 2.31 dostáváme vztah 2.32, který udává podmínku na nejnižší možný počet částic v simulaci za daného molárního objemu.

$$N > \frac{8 \cdot r_c^3}{V_m} N_A. \quad (2.32)$$

2.3.5 Termostaty

Pokud simulujeme v kanonickém, neboli NVT souboru, musíme nějakým způsobem udržovat konstantní teplotu. V experimentální praxi se konstantní



Obrázek 4 Ilustrace podmínky pro cutoff potenciálu v periodických okrajových podmínkách. Zvolení cutoffu částice D většího než polovina délky hrany boxu by vedlo k interakci s částicemi A, B a C dvakrát

teploty dosahuje umístěním systému do termostatu o kýžené teplotě. Když systém dojde do stavu termodynamické rovnováhy s termostatem, bude mít i stejnou teplotu. Stejný účel mají i termostaty v molekulových simulacích. Jejich podstata spočívá v ovlivnění rychlostí molekul tak, aby tzv. kinetická teplota systému T_{kin} daná vztahem

$$T_{\text{kin}} = \frac{E_{\text{kin}}}{\frac{1}{2}k_{\text{B}}f}, \quad (2.33)$$

kde E_{kin} je celková kinetická energie částic a f je počet stupňů volnosti systému (Kolafa, 2023, s. 68).

Z mnoha možných termostatů zde zmíníme jen jediný, Langevinův, který využíváme v simulaci v praktické části práce. Přidáme-li do Newtonových pohybových rovnic 2.5 tření a náhodné síly, dostaneme vztah

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\xi\vec{p}(t) + \nabla U(t) + \vec{F}_{\text{rnd}}(t), \quad (2.34)$$

kde ξ je frikční koeficient, $U(t)$ je potenciál a $\vec{F}_{\text{rnd}}(t)$ je náhodná síla (Allen; Tildesley, 1987, s. 260). Pokud bude náhodná kinetická teplota systému menší, než teplota termostatu, náhodná síla bude mít větší vliv než frikční tření a teplota poroste. V opačném případě bude dominantní frikční člen a teplota klesne. Tím je zajištěno, že teplota systému bude konvergovat k teplotě termostatu.

2.3.6 Tlak v simulaci

Odvození vztahu pro okamžitý tlak v simulaci ze vztahu 2.20 ukazuje např. Kolafa (2023, s. 104). V periodických okrajových podmínkách při splněné podmínce

2.30 lze pro párové potenciály psát rovnici

$$p = \frac{RT}{V_m} + \frac{1}{3V_m} \sum_{i<j} F_{ij} r_{ij}, \quad (2.35)$$

kde $\sum_{i<j}$ znamená součet přes všechny páry částic s indexy i a j tak, že platí podmínka $i < j$, F_{ij} je párová síla mezi částicemi, kterou lze vypočítat z potenciálu pomocí vztahu 2.21 a r_{ij} je vzdálenost i -té a j -té částice.

2.4 Statistická analýza

Výsledky experimentů prováděných v reálném světě nikdy nejsou zcela přesné, nýbrž vždy zahrnují nějakou nejistotu. Směrodatná odchylka, která je kvantitativním vyjádřením této nejistoty, je ve vědecké literatuře nedílnou součástí každého číselného výsledku. Nejinak je tomu v případě molekulových simulací. Pojmy a veličiny zavedené v této kapitole využijeme jednak v rámci výpočtu kvantitativních výsledků ve výstupní části 4, jednak v rámci statistické analýzy dat získaných z molekulových simulací.

2.4.1 Nekorelované vzorky

Rozptyl σ_O^2 pozorované veličiny O je definován vztahem

$$\sigma_O^2 = \frac{\sum_{i=1}^m (O_i - \bar{O})^2}{m - 1}, \quad (2.36)$$

kde \bar{O} je střední hodnota této veličiny a m je počet naměřených vzorků této veličiny. Veličina σ_O představuje směrodatnou odchylku (v kontextu experimentu zvanou též chyba měření). Směrodatnou odchylku průměru $\sigma_{\bar{O}}$ lze získat pomocí vztahu

$$\sigma_{\bar{O}} = \sqrt{\frac{\sigma_O^2}{m}}. \quad (2.37)$$

2.4.2 Korelované vzorky

Pozorované veličiny v molekulových simulacích představují časovou řadu navzájem souvisejících (korelovaných) vzorků. Takovouto řadu korelovaných veličin nelze popsat pomocí jednoduchých vztahů 2.36 a 2.37. Pro odhad směrodatné odchylky průměru se proto používají robustnější metody jako bloková metoda, analýza korelací, nebo jejich kombinace (Kolafa, 2024, s. 10).

Princip blokové metody spočívá v rozdělení časové řady na b stejných bloků a výpočtu střední hodnoty \bar{O}_j pro každý z nich. Následně je vypočten rozptyl těchto středních hodnot $\sigma_{\bar{O}_B}^2$:

$$\sigma_{\bar{O}_B}^2 = \frac{\sum_{j=1}^b (\bar{O}_j - \bar{O})^2}{b - 1}. \quad (2.38)$$

Směrodatnou odchylku průměru lze pak určit pomocí vztahu

$$\sigma_{\bar{O}} = \sqrt{\frac{\sigma_{\bar{O}_B}^2}{b}} = \sqrt{\frac{\sigma_O^2}{n_{\text{ef}}}}, \quad (2.39)$$

kde druhá rovnost slouží jako definice tzv. efektivního počtu nekorelovaných vzorků n_{ef} (Janke, 2002, s. 14). Dále lze zavést tzv. autokorelační čas τ_{cor} , což je čas, po jehož uplynutí lze považovat dva vzorky časové řady za nezávislé. Pro autokorelační čas platí

$$\tau_{\text{cor}} = \frac{t_{\text{max}}}{2n_{\text{ef}}}, \quad (2.40)$$

kde t_{max} je celková doba trvání simulace. Použití toho vztahů 2.38 a 2.39 představuje aproximaci, která je validní pouze v případě, že efektivní autokorelační čas je dostatečně krátký, aby korelace mezi jednotlivými bloky byla zanedbatelná. Pokud tomu tak není, vede tato procedura k nadhodnocení efektivního počtu vzorků a tedy k podhodnocení směrodatné odchylky průměru.

2.5 Pedagogika a didaktika molekulových simulací

V této sekci nastíníme problematiku výuky molekulových simulací v kontextu chemických bakalářských oborů, zmíníme některé moderní pedagogické metody a pokusíme si vzít ponaučení z předchozích dokumentovaných implementací simulací do výuky.

2.5.1 Specifika vysokoškolské pedagogiky

2.5.2 Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny

Jaké vstupní znalosti a dovednosti lze očekávat u studentů, kteří budou plnit úlohu na molekulové simulace prezentovanou ve výstupní části (dále jen cílová skupina)? Zde se omezíme na kontext PřF UK, kde úloha nejpravděpodobněji najde své využití. Lze nicméně očekávat, že mnohé aspekty budou společné i na jiných chemicky zaměřených vysokých školách v širším kontextu České republiky.

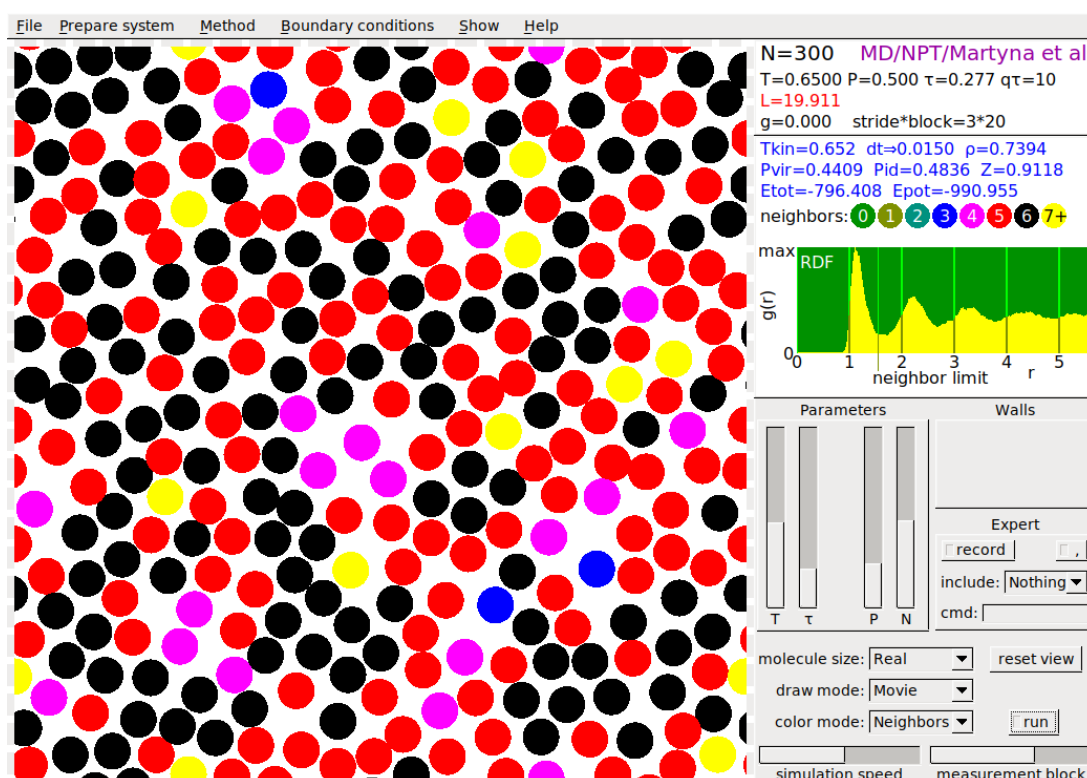
V kontextu PřF UK předpokládáme, že studenti spadající do cílové skupiny podstoupili přednášku Fyzikální chemie I (a) - (MC260P112) (Košovan, 2023). Ze sylabu této přednášky lze usuzovat na znalost následujících pojmů a konceptů: Avogadrova konstanta; veličiny molární objem, tlak, teplota a jejich jednotky; stavová rovnice ideálního plynu; Van der Waalsova rovnice; kritické veličiny plynu.

Korekvizitou k předmětu Fyzikální chemie I (a) je alespoň jeden matematický předmět. Z toho usuzujeme, že cílová skupina má následující dovednosti: algebraické úpravy rovnic a nerovnic; vyjádření neznámé z rovnice.

2.5.3 Příklady zařazení simulací v konkrétních vzdělávacích kontextech

Následujících několik příkladů jsme pojali jako stručná shrnutí, kdy diskutujeme jak obsah daného výukového celku, tak jeho formu a metody výuky. Zejména u příkladů pokročilejších kurzů se vyskytují pojmy, které nebyly zavedeny v sekci 2.3. Pro úplnost jsme se rozhodli tyto pojmy v textu ponechat, pro pochopení částí následujících ovšem není jejich znalost nutná.

Kolafa (2024) při výuce kurzů Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace a Molekulární modelování a simulace (Kolafa, 2024) používá program Simolant (viz obrázek 5). Jde o program pro 2D simulace s vizualizací. Lze v něm provádět simulace molekulovou dynamikou i Monte Carlo simulace na několika různých souborech, za použití různých termostatů, a v různých okrajových podmínkách. Parametry simulace lze buďto manuálně nastavovat v okně v pravé části programu, nebo lze vybrat předpřipravené podmínky pro ilustraci nějakého jevu. V pravé části lze také sledovat časový vývoj veličin. Kolafa tento program používá v rámci výuky tak, že na tabuli promítá návod s instrukcemi a studenti pak mají volnost „hrát si“ s programem zkusit věci buďto na základě instrukcí, nebo na základě svého vlastního zájmu.



Obrázek 5 Ukázka grafického rozhraní programu Simolant (Kolafa, 2024).

Allen (2007) ve své studii zmiňuje tři vzdělávací programy pro magisterské a doktorandské studenty, kde jsou vyučovány molekulové simulace. Společným jmenovatelem je předpoklad znalosti nějakého programovacího jazyka. Za relevantní považujeme přístup vzdělávacím programem „High performance computing course“, který je určen pro magisterské studenty různých zaměření. Program začíná minimalizací energie klastru Lennard-Jonesovských atomů, což je pro ne-fyziky prezentováno jako úloha na optimalizaci. Výběrový algoritmus v Metropolisově Monte Carlo metodě je zde prezentován jako „kuchařka“ a není nijak odůvodněn pomocí konceptu mikroskopické reverzibility. Jeden z úkolů je z existujícího Monte Carlo skriptu vytvořit program pro simulované žhání a ten použít optimalizaci geometrie jednoduché molekuly.

Prigozhin et al. (2014) začíná svou práci diskuzí o balancování mezi srozumitelností a přesností vědeckých modelů. Na úrovni úvodu do problematiky je většina modelů ve srozumitelné ale nepřesné části spektra. Studenti potřebují aplikovat

více různých modelů o různé komplexitě, aby pochopili, že modely nejsou obrazy reality, ale pouze nástroje, které nám pomáhají realitu studovat a pochopit. Ve své didaktické aktivitě toho Prigozhin dosahuje porovnáním mechanického a počítačového modelu. Jako nejhrubší model peptidu α -Synucleinu používá kancelářské sponky buďto spojené zcela volně, nebo z části zafixované v klikaté konformaci představující α -helix. Úkolem studentů je házet tyto modely a měřit vzdálenost konců pomocí pravítka. Následně studenti pracují s jednoduchým počítačovým programem, který pracuje analogicky k mechanickému případu, ale mnohem rychleji, takže lze vytvořit histogram z většího počtu dat. Následuje diskuse týkající se limitací této simulace, jelikož folding proteinů nelze vysvětlit pouze na základě náhodně generovaných konformací.

Schwedler; Kaldewey (2020) ve své studii zkoumají vliv předpřipravených molekulových simulací ve formě dobrovolných studijních materiálů BIRC (Bridging Imagination and Representation in Chemistry) na koncepční pochopení a na zábavnost učení se. V úvodu zmiňují myšlenku, že je potřeba propojit tři úrovně pochopení problému: makroskopickou (experiment), symbolickou (matematický popis) a submikroskopickou (náhled na úroveň molekul). BIRC má propojovat submikroskopickou a symbolickou úroveň. Autoři považují pochopení problému na submikroskopické úrovni u bakalářských studentů chemie a fyziky za nedostatečné. Struktura učebních materiálů je následovná: Nejprve donutí studenty zamyslet se a vytvořit „mentální simulaci“ daného problému. Následně studenti porovnají toho očekávání s provedenou počítačovou simulací. Na závěr je úkolem propojit zjištění ze simulace se symbolickou úrovní. Pro simulace používají Next-Generation Molecular Workbench (Consortium, 2017). Studenti dostávají uzavřené instrukce, tak aby byla práce efektivní a rychlá (20 - 30 min). 70 % účastníků studie považuje práci s BIRC za užitečnou. Míra koncepčního pochopení byla korelována s počtem vypracovaných BIRC modulů, přičemž každý modul vedl k průměrnému zvýšení úspěšnosti v post-testu oproti pre-testu o 7,4 %, přičemž průměrná úspěšnost v pretestu byla 34 %.

Hati; Bhattacharyya (2016) ve své studii popisují implementaci bakalářského laboratorního kurzu z biofyzikální chemie. Kurz vede studenty k pochopení dynamiky proteinů a její funkce na molekulární úrovni. Místo klasické molekulové dynamiky používají NMA (normal mode analysis - analýzy normálních módů). Tato metoda umožňuje na základě vibrací proteinu charakterizovat ohebné a méně ohebné části a odhalit oblasti zodpovědné za specifickou funkci proteinu. NMA používá hrubozrný model, kde každý uhlík v aminokyselině je reprezentován "korálkem". Vazba mezi korálky je modelována harmonickým potenciálem a všechny korálky zároveň vytváří pole, kterým působí na ostatní. Společně s dalšími moduly v kurzu, které se zaměřují na strukturu proteinů, studenti získají přehled o vztahu mezi dynamikou a strukturou a funkcí proteinů.

Jeanmairat et al. (2014) navrhuje výpočetní experiment jako úvod do teorie klasické funkcionální hustoty (cFDT). Podle této teorie lze klasické systémy popsat pomocí funkcionálu hustoty. V případě klasické tekutiny je tímto funkcionálem Helmholtzova energie. Stěžejní myšlenkou je, že rovnovážný stav je stav s nejnižší Helmholtzovou energií. Úlohou je tedy najít takové rozložení hustoty, které minimalizuje Helmholtzovu energii. Navržená aktivita by měla za cca 2 hodiny ilustrovat cFDT na jednoduchém jednodimenzionálním případě, který lze vypočítat analyticky i numericky. Pro numerický výpočet se používá LJ potenciál.

Výsledek se vizualizuje pomocí radiální distribuční funkce, a porovnává se s výsledky neutronového rozptylového experimentu. Úkolem studentů je napsat kód v programu Mathematica, přičemž se očekává znalost cDFT. Autoři navrhují, že ideální je psát program v reálném čase společně se studenty.

2.5.4 Badatelsky orientovaná výuka

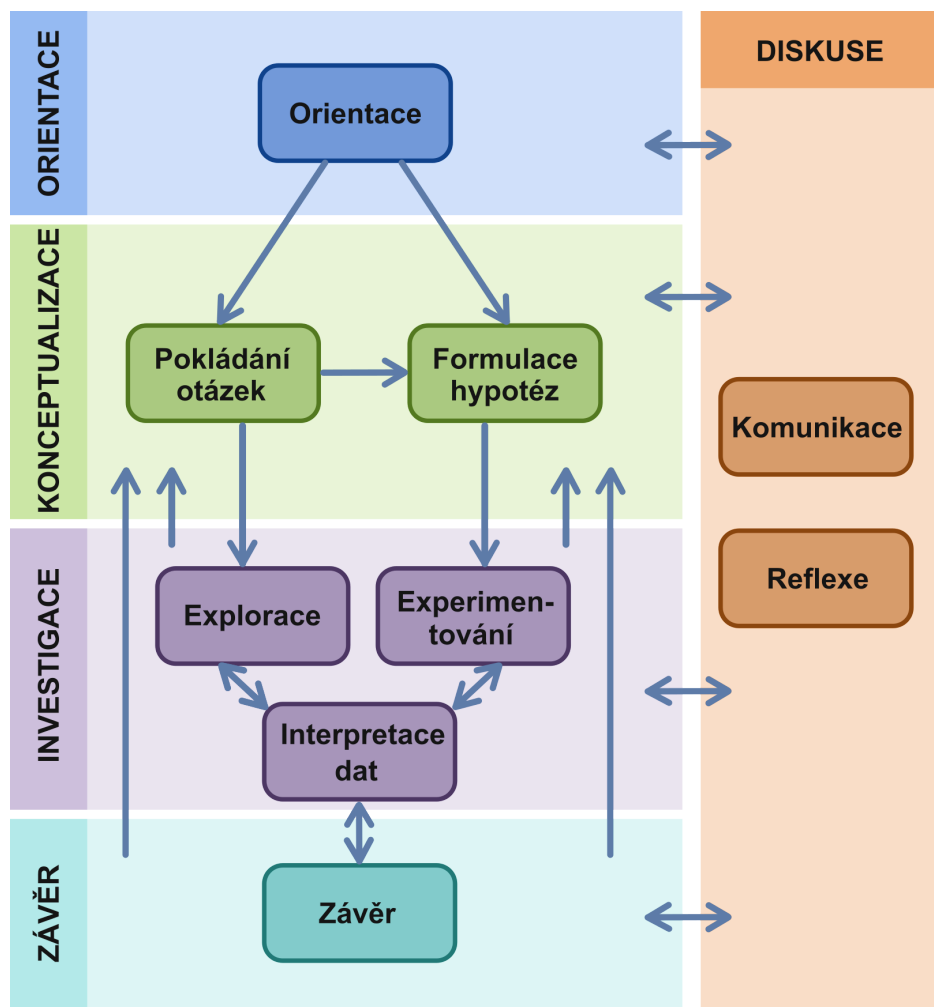
Badatelsky orientovaná výuka (Inquiry-Based Learning) je metoda, kdy studenti následují postupy podobné vědeckým postupům a vytvářejí si tak porozumění. Tyto postupy zahrnují objevování nových vztahů, formulování hypotéz, jejich testování pomocí experimentů a pozorování, a interpretaci dat. (Pedaste et al., 2015; Sun et al., 2022). Badatelsky orientovaná výuka patří mezi přístupy zaměřené na studenta, kdy je student v centru dění a učitel hraje pouze roli mentora. Ukazuje se, že tento typ výuky je nejefektivnější, pokud je studentovi poskytnuta určitá míra vedení, přičemž žádné nebo naopak nadměrné vedení vede k horším výsledkům z hlediska porozumění i aplikace získaných poznatků (Pedaste et al., 2015). V této kapitole se dále pokusíme popsat badatelsky orientovanou výuku z hlediska procesů, kterými studenti prochází. V kapitole Scaffolding pak budou popsány způsoby, jak studentům poskytnout vedení, aby tyto procesy byly co nejefektivnější.

Badatelsky orientovaná výuka zahrnuje různé fáze, které jsou obvykle součástí tzv. učebního cyklu. Pedaste et al. (2015) na základě analýzy 60 článků zabývajících se badatelsky orientovanou výukou sestavil obecný rámec badatelsky orientované výuky (Obrázek 6). Tento rámec obsahuje pět hlavních fází. Cílem **Orientace** je proniknout do problematiky a získat o ní zájem. Toho lze docílit nejčastěji skrze pozorování nebo seznámení se s teorií. V rámci **Konceptualizace** dochází k pokládání vědeckých otázek a formulaci hypotéz. **Pátrání** zahrnuje hledání odpovědi na výzkumné otázky (Explorace) a snahu o falzifikaci nebo verifikaci hypotéz (Experimentování) takto získaná data je potřeba analyzovat v rámci Interpretace dat. Na základě výsledků pátrání lze formulovat **Závěr**, jehož součástí by měly být odpovědi na položené otázky a informace, zda byly položené hypotézy potvrzeny nebo vyvráceny. Jak na konci bádání, tak v rámci každé fáze může docházet k **Diskusi**, která zahrnuje komunikaci mezi studenty o výsledcích a vnitřní reflexi studentů, která se často týká spíše badatelského procesu jako takového.

Šipky v Obrázku 6. reprezentují možnosti pohybu mezi fázemi. Je zjevné, že obecný rámec umožňuje několik různých učebních cyklů, např. na základě toho, jestli už máme představu o možných výsledcích, nebo jestli pouze klademe otázku bez jakéhokoliv očekávání.

2.5.5 Scaffolding

Lin et al. (2012) definuje scaffolding jako podporu, kterou dostává student ve vzdělávacím kontextu od učitelů nebo zkušenějších spolužáků, aby zvládl plnit úkoly nad jeho aktuální úroveň. Scaffolding vychází z Vygotského konceptu „zone of proximal development,“ (ZPD) neboli zóna nejbližšího vývoje. ZPD označuje právě mezeru mezi tím, co dokáže student sám, a tím, co dokáže s podporou. Vygotskij tento koncept definoval na základě pozorování, že dvě děti, které



Obrázek 6 Obecný rámec badatelsky orientované výuky. Přeloženo podle (Pedaste et al., 2015)

bez pomoci dosahují stejné úrovně, mohou s pomocí dosáhnout různých úrovní (Rosůlková, 2014).

Obrázek 7 zobrazuje různé aspekty scaffoldingu, které Lin et al. (2012) identifikovali analýzou 43 studií z let 1995 - 2009.

ZPD se dynamicky mění v průběhu učebních cyklů, z čehož vyplývá také potřeba dynamicky měnit míru scaffoldingu. S tím, jak si žák postupně osvojuje danou dovednost, by se měla míra scaffoldingu snižovat, výsledkem čehož by mělo být úplně osamostatnění žáka. Tento koncept nazýváme **fading** (Lin et al., 2012).

Kromě učitele a vrstevníků zmíněných v definici mohou být **zdrojem** scaffoldingu i psané instrukce, např. ve formě pracovních listů a studijních textů. Všechny tyto tři prostředky využívá koncept „laboratorials“, který prezentují Braca; Kalman (2021) ve své studii. Laboratorials se od tradičních laboratoří odlišují svým důrazem na badatelské učení. Stěžejní je pracovní list, který studenti průběžně vyplňují a dostávají průběžnou zpětnou vazbu od instruktorů už v laboratoři. Studenti pracují ve dvojici, což dává prostor pro uplatnění vrstevnického scaffoldingu, kdy si studenti mohou vzájemně doplňovat svými znalostmi a interpretacemi experimentu. Z rozhovorů s celkem 12 studenty a z vyhodnocení závěrečných testů vyplynulo, že laboratorials jsou pro studenty méně stresující, zábavnější a zároveň



Obrázek 7 Myšlenková mapa zobrazující aspekty scaffoldingu. Upraveno podle Lin et al. (2012).

vede studenty k hlubšímu koncepčnímu pochopení prováděných experimentů.

Z hlediska této práce je zajímavý scaffolding v interaktivních simulacích, které mohou využívat různou míru **explicitnosti**. Paul et al. (2013) explicitní scaffolding definuje jako psané nebo mluvené instrukce, zatímco implicitní scaffolding je vnořený do učební pomůcky. Tyto učební pomůcky podle autorů mají affordances (možnosti) a constraints (omezení). Na to, aby byly pomůcky užitečné, musí být affordances dostatečně viditelné a studenti musí chápat, jak je mají používat. Z hlediska implicitního scaffoldingu dále dávají důraz na pečlivě zvolené počáteční podmínky simulace a rozložení stránky.

Naproti tomu Minshall; Yeziarski (2021) dospěli ve své studii k závěru, že samotná interaktivní simulace je neefektivní, pokud není doplněna explicitním scaffoldingem. Jelikož po absolvování aktivity PhET apletu ‘Atomic interactions’ pouhých 40 % studentů správně identifikovalo vznik vazby jako exotermní proces, doplnili autoři tuto aktivitu detailním pracovním listem. Konkrétní použitá forma

scaffoldingu byla např.:

- velmi detailní popis práce s apletem,
- upozornění, na co se má student zaměřit,
- kurzíva a tučný text pro upozornění na klíčová slova,
- otázky typu: “Jak se na základě tohoto pozorování změnila odpověď na otázku x?”
- kombinace uzavřených otázek a otevřených otázek typu “pozoruj a zapiš si.”

Díky tomuto pracovnímu listu autoři dosáhli zlepšení výsledků studentů na 82,4 % správných odpovědí po absolvování aktivity.

Koncept **representace** je příbuzný konceptu explicitnosti, ale nikoliv totožný. Zatímco vizuální scaffolding je z definice implicitní, psaný scaffolding může být jak implicitní, tak explicitní. Ilustrujme to například na situaci, kdy studentům buďto zadáme rozsah hodnot, ve kterém mají měřit (explicitní scaffolding), nebo jim dáme k dispozici vztahy, ze kterých lze tento rozsah odhadnout (implicitní scaffolding). Podobné možnosti jsou vidět i v metodách scaffoldingu použitých ve výše zmíněné studii, kdy lze studenty buďto explicitně upozornit, na co se mají zaměřit, nebo to jen naznačit zvýrazněním klíčového slova.

Zmíňme ještě, že kromě prohloubení koncepčního pochopení může být **cílem** scaffoldingu také rozvíjení procedurálních a strategických dovedností, jako je komunikace, argumentace, plánování a time management, nebo rozvíjení metakognice a epistemologie, tedy přemýšlení o tom, jak efektivně bádát a jak ze získaných dat vyvozovat správné závěry.

2.5.6 Badatelsky orientovaná výuka v kontextu laboratoří

Níže představujeme na několika příkladech implementaci badatelského přístupu do bakalářských laboratorních kurzů.

Goodson et al. (2023) ve své případové studii reflektuje přínos modulárního laboratorního kurzu z fyzikální chemie obsahujícího dva moduly: badatelský modul zaměřený na protein-folding a projektový modul zaměřený na malé organické molekuly. Cílem je laboratorního kurzu je rozvíjet kritické myšlení, umožnit studentům aplikovat jejich znalosti na reálné problémy, osvojovat si vědecký přístup a chování a motivovat je k následování vědecké kariéry. V modulu zaměřeném na protein-folding je používám kocept otevřeného a vedeného bádání. Po studentech je požadováno, aby si sami nastudovali literaturu k dané problematice a na jejím základě si zvolili metodu a pracovní postup. Prerekvizitou je, že studenti už znají používané přístroje z předchozích laboratorních cvičení a umí s nimi pracovat. Instruktóři poskytují studentům různé typy vedení na základě jejich schopností. Nejčastější typ vedení je pomoc v plánování práce a omezení a nasměrování práce na základě odborných zkušeností instruktorů. V ostatních případech se očekává, že si studenti dohledají potřebné informace, případně si pomůžou ve dvojicích, ve kterých pracují. Pokud ani jeden z dvojice např. není schopen operovat s používanou laboratorní technikou, instruktoři poskytnou dodatečné zaškolení.

Hunnicut et al. (2015) v úvodu své studie rozdělují experimenty na ověřovací a badatelské. Při ověřovacích experimentech bývá primárním cílem studentů

reprodukovat očekávaný výsledek. Naopak úkoly v badatelsky orientovaných laboratořích jsou založené na cyklu: položení výzkumné otázky, sběr dat, analýza dat. Z analýzy dat vyplyne nějaká další otázka a cyklus se opakuje. Hunnicutt a kol. navrhuje takový formát experimentů, kde jsou potřeba minimálně dva cykly, přičemž první většinou představuje kvalitativní analýzu, v následujících jsou pak již sbírána kvantitativní data. Aby tento cyklus mohl probíhat, studenti vyhodnocují svá data již v laboratoři, hned po jejich sesbírání. Dalším specifickým jejich přístupem je, že studenti nedostávají konkrétní navážky a koncentrace, ale vede se o tom diskuze mezi třídou a lektorem. Stejně tak další kroky, kterými se třída vydá, jsou výsledkem diskuze. Obecně je zde mnohem větší důraz na hledání optimálních podmínek pro provedení reakce, což je v kontrastu oproti tradičním laboratořím, kde studenti dostanou tyto optimální podmínky zadané již na začátku. Menší čas na samotné získávání dat je v badatelsky orientované laboratoři kompenzován sdílením dat mezi studenty v celé třídě. I přesto jedna lekce zabere 6 - 8 h času v laboratoři.

3 Metodická část

V této části předkládáme metody, které jsme použili ve snaze naplnit cíle vytvoření a otestování úlohy na molekulové simulace do praktika z fyzikální chemie (dále jen úloha).

O plnění cíle zaměřeného na vytvoření úlohy pojednávají kapitoly Tvorba úlohy a Struktura úlohy. Metod testování úlohy se týkají kapitoly Testování úlohy a Vyhodnocení testování. Zvolené metody byly zkonstruovány za účelem zodpovězení následujících výzkumných otázek:

1. Jakou dobu stráví studenti plněním jednotlivých sekcí úlohy?
2. Jaké nejčastější problémové události se vyskytují při plnění úlohy studenty?
3. Jak přispívá vypracování úlohy studenty k nabytí poznatků o molekulových simulacích?
4. Jak je možné úlohu vylepšit, aby byla časově efektivnější, předcházela častým problémovým událostem a lépe vedla k plnění didaktických cílů?

3.1 Tvorba úlohy

3.1.1 Volba simulovaného systému

Jádro úlohy, simulační program simplemd (z anglického simple molecular dynamics – jednoduchá molekulová dynamika) a skript pro statistickou analýzu byl převzat z didaktických materiálů mého vedoucího práce, Petera Košovana, který je používal v rámci kurzu statistické termodynamiky pro magisterské studenty PřF UK. Původní jádro simulačního kódu bylo laskavě poskytnuto doktorem Ondřejem Maršálkem z jeho kurzu Základy molekulové dynamiky vyučovaného v roce 2019 na MFF UK. Do stavu, ve kterém byl poskytnut mě, kód modifikovali Roman Staňo, Lucie Nová a Peter Košovan z PřF UK. Další příspěvky a užitečnou zpětnou vazbou poskytli Pablo Blanco, Sebastian Pineda, Rita Dias, Magdaléna Nejedlá, Vojtěch Kepřta a studenti, kteří používali tento kód při cvičeních ze statistické termodynamiky.

Jako simulační metodu pro úlohu jsme zvolili klasickou molekulovou dynamiku, jelikož jde o metodu základní, která je v učebnicích autorů jako Rapaport (1995) nebo Kolafa (2023) probírána jako první. Jde o metodu základní a konceptuálně jednodušší než např. Monte Carlo.

Jako simulovaný model byl zvolen superkritický argon popsáný pomocí Lennard-Jonesova potenciálu. Argon je sférická monoatomická molekula, která je navíc inertní, tedy se u ní neprojevují jiné interakce než sterické repulze a Van der Waalovy atrakce. Proto je velmi dobře popsána Lennard–Jonesovým potenciálem 2.24. Vzhledem k těmto vlastnostem byl argon jeden z prvních modelů, který byl v rámci molekulové dynamiky prostudován (Allen; Tildesley, 1987, s. 8), a proto jsou pro něj také známé a snadno dostupné parametry LJ potenciálu ε a σ (Atkins et al., 2022, s. 637).

3.1.2 Volba pedagogického přístupu

Zadáním této práce bylo vytvořit úlohu do praktika z fyzikální chemie. Tím se přirozeně zúžil výběr vhodných pedagogických přístupů na ty, které jsou aplikovatelné v kontextu laboratoří. Práce v laboratoři představuje specifickou formu výuky, při níž student aktivně provádí experiment. Takovýto experiment může být ověřovací nebo badatelský, jak zmiňuje Hunnicutt et al. (2015). Vzhledem k tomu, že předpokládání cílové skupina se v rámci úlohy bude seznamovat se zcela novou metodou, zvolili jsme typ experimentu ověřovací, kdy výsledky nebudou překvapivé. Jak ale ukážeme v následujících sekcích, při detailnějším pohledu výsledky umožní dozvědět se i něco o metodě samotné, což dodává úloze badatelský aspekt.

Laboratorní úlohy v tradičních laboratořích v kontextu UK mívají typicky několik málo výstupních úkolů a předpokládá se, že studenti mají dostatečně znalosti a dovednosti, aby sami prošli fázemi orientace, konceptualizace, investice a dospěli k závěru (viz kapitola 2.5.4). Nicméně v našem případě, kdy se studenti budou seznamovat se zcela novou metodou, tento přístup považujeme za riskantní. Provedení celého učebního cyklu vyžaduje zvládnutí mnoha konceptuálních a technických detailů a je velká šance, že student v nějakém bodě tohoto procesu „ztroskotá“. Proto jsme se rozhodli do úlohy zařadit vysokou míru scaffoldingu (viz kapitola 2.5.5) ve formě jednoduchých dílčích úkolů a krátkých textů s teorií.

Stejně jako Kolafa (2024) jsme zejména zpočátku úlohy dali důraz na vizuální aspekt simulace, který má poskytnout názornou mikroskopickou představu o tom, co se v simulaci děje. Po vzoru Schwedler; Kaldewey (2020) také klademe důraz na propojení symbolické, makroskopické a mikroskopické úrovně poznání zkoumaného jevu.

Vzhledem k tomu, že u cílové skupiny nelze předpokládat znalosti programování, rozhodli jsme se narozdíl od magisterských a doktorských kurzů zmíněných v kapitole 2.5.3 redukovat programátorské nároky v úloze na interakci s jednoduchým uživatelským rozhraním, zatímco většina simulačního kódu je pro uživatele schovaná. V souvislosti se snahou snížit uživatelskou bariéru jsme se rozhodli pro realizaci úlohy v prostředí Jupyter Notebook. Jde o prostředí, které umožňuje kombinovat bloky textu a interaktivní bloky kódu v programovacím jazyce python. Bloky textu v úloze slouží pro zadání úloh a vysvětlení některých konceptů, bloky kódu pak umožňují spustit simulaci.

Struktura úlohy je do jisté míry ovlivněna úlohami chemického korespondenčního semináře KSICHT (2024), který autor v minulosti řešil, a kam mezi lety 2022 – 2024 přispíval jako autor. Tento seminář je určen pro samostatné domácí řešení bez pomoci instruktora nebo učitele, proto struktura úloh v něm vykazuje vysokou míru scaffoldingu v podobě dílčích návodných otázek a doprovodného textu.

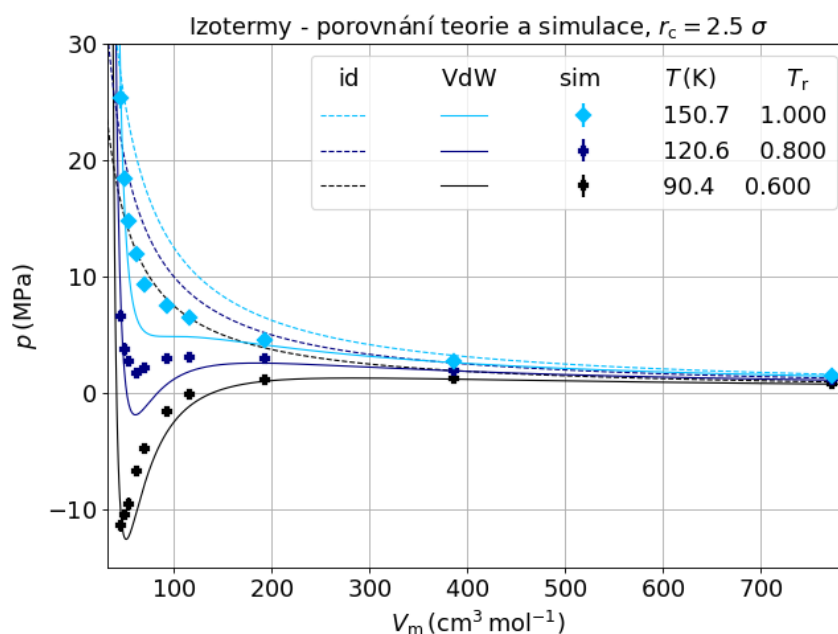
3.1.3 Parametry simulace

Parametry LJ potenciálu pro argon jsou $\sigma = 0,3632 \text{ nm}$ a $\epsilon = 111,8 \cdot k_B \text{ K}$ (Atkins et al., 2022, s. 637).

Jako výstup úlohy jsme zvolili porovnání izoterem získaných z molekulové simulace a z teoretických modelů, u kterých předpokládáme, že je studenti již

znají (viz kapitola 2.5.2) – model ideálního plynu 2.1 a Van der Waalsův model 2.2. Znatelné odchylky simulace a těchto dvou modelů se projevují při nízkých molárních objemech, proto jsme se v počátku sestavování úlohy zaměřili na výběr vhodného rozsahu molárních objemů. Zjistili jsme, že prvotní záměr ponechat v grafu a hodnoty odpovídající běžným laboratorním podmínkám, tedy $V_m \approx 22000 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$, vede ke grafům, které sice zachycují parabolický tvar izoterm, ale nezachycují detaily v oblastech, kdy se simulace odchyluje od ideálního chování. Proto byl maximální objem snižen na řádově desetinásobek kritického molárního objemu $V_{m,c} = 75,3 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ (Atkins et al., 2022, s. 16). Minimální hodnotu molárního objemu jsme určili podle parametru b Van der Waalsovy rovnice 2.2, jelikož pro molární objem $V_{m,c} = b$ hodnota tlaku diverguje, a pro $V_{m,c} < b$ vychází z Van der Waalsovy rovnice tlak záporný. V těchto hodnotách tedy Van der Waalsova rovnice přestává odpovídat fyzikální realitě. Pro argon byl parametr b stanoven na $b = 32,0 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ (Atkins et al., 2022, s. 18).

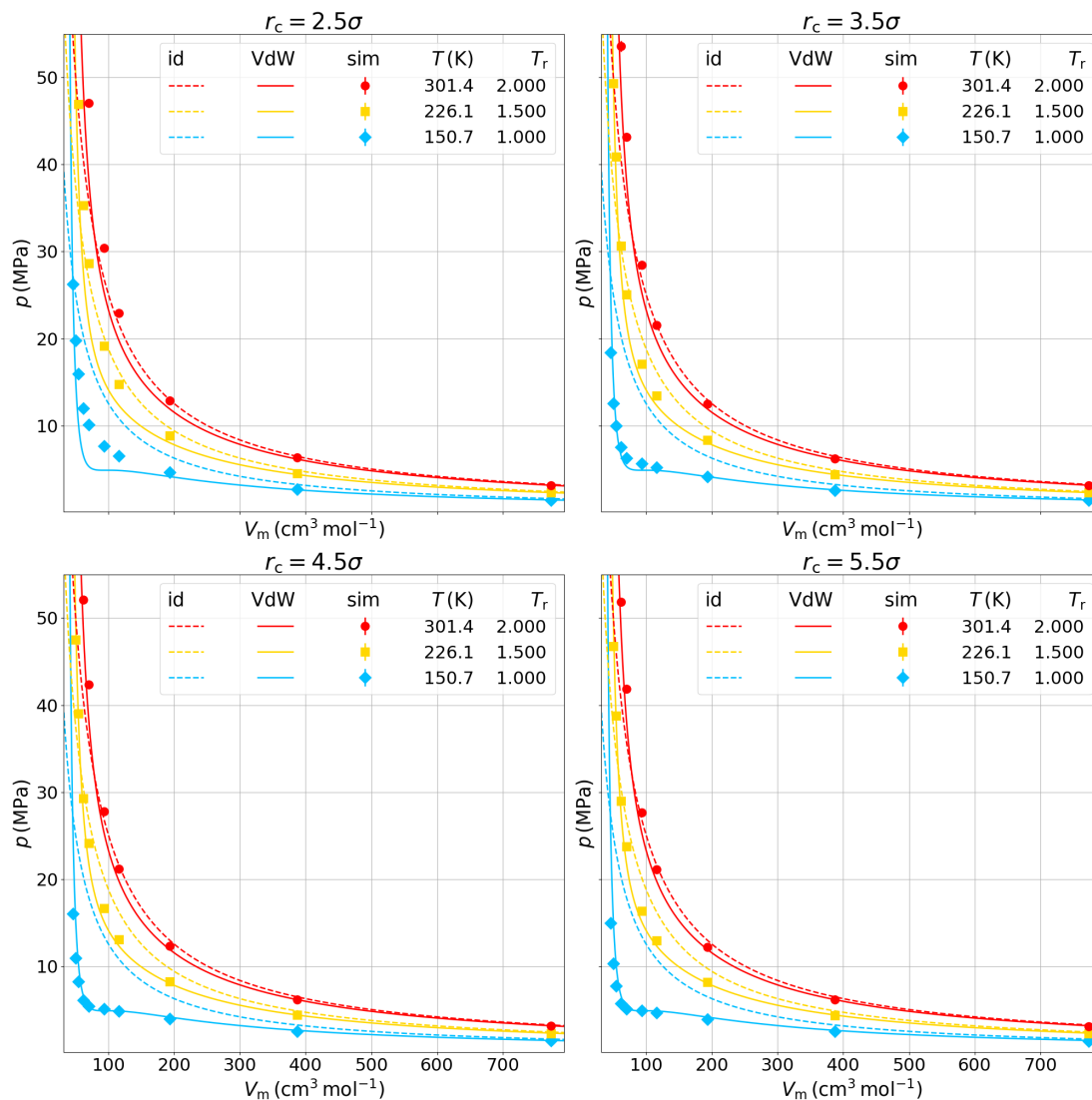
Po výběru molárních objemů jsme přistoupili k výběru teplot. Odchylky simulace a Van der Waalsovy stavové rovnice od stavové rovnice ideálního plynu se projevují výrazněji při nižších teplotách. Proto jsme vyzkoušeli simulace při teplotách nižších než je kritická teplota argonu $T_C = 150,7 \text{ K}$ (Atkins et al., 2022, s. 18). Výsledky jsou na obrázku 8.



Obrázek 8 Porovnání nasimulovaných izoterm při podkritických a kritických teplotách, při hodnotě cutoffu potenciálu $r_c = 2,5 \sigma$. Význam zkratk: id = stavová rovnice ideálního plynu, VdW = Van der Waalsova stavová rovnice, sim = simulace.

V grafu 8 je u podkritických teplot jak u simulace, tak u Van der Waalsova modelu patrný pokles tlaku při snižujícím se molárním objemu. V obou případech jde o nefyzikální artefakt - v realitě dochází v těchto oblastech k fázové přeměně a tlak zůstává konstantní (Atkins et al., 2022, s. 20). Navíc při teplotě $0,6T_C$ dokonce a v simulaci hodnoty tlaku dosahují záporných hodnot. Rozhodli jsme se tedy provádět simulace za minimální teploty odpovídající kritické teplotě, kdy se výsledky simulace slučují s fyzikální realitou. Použitá maximální hodnota teploty odpovídá dvojnásobku kritické teploty a je přibližně rovna pokojové teplotě.

V hustých systémech jsou příspěvky interakcí částic vzdálených a několik σ nezanedbatelné, za takových podmínek se tedy negativně projevuje nízký cutoff potenciálu $r_c = 2,5\sigma$ popsany v sekci 2.3.2. Proto byly vyzkoušeny simulace s vyššími hodnotami r_c . Porovnání nasimulovaných izoterm ve vybraném rozsahu molárních objemů pro vybrané teploty je na obrázku 9.

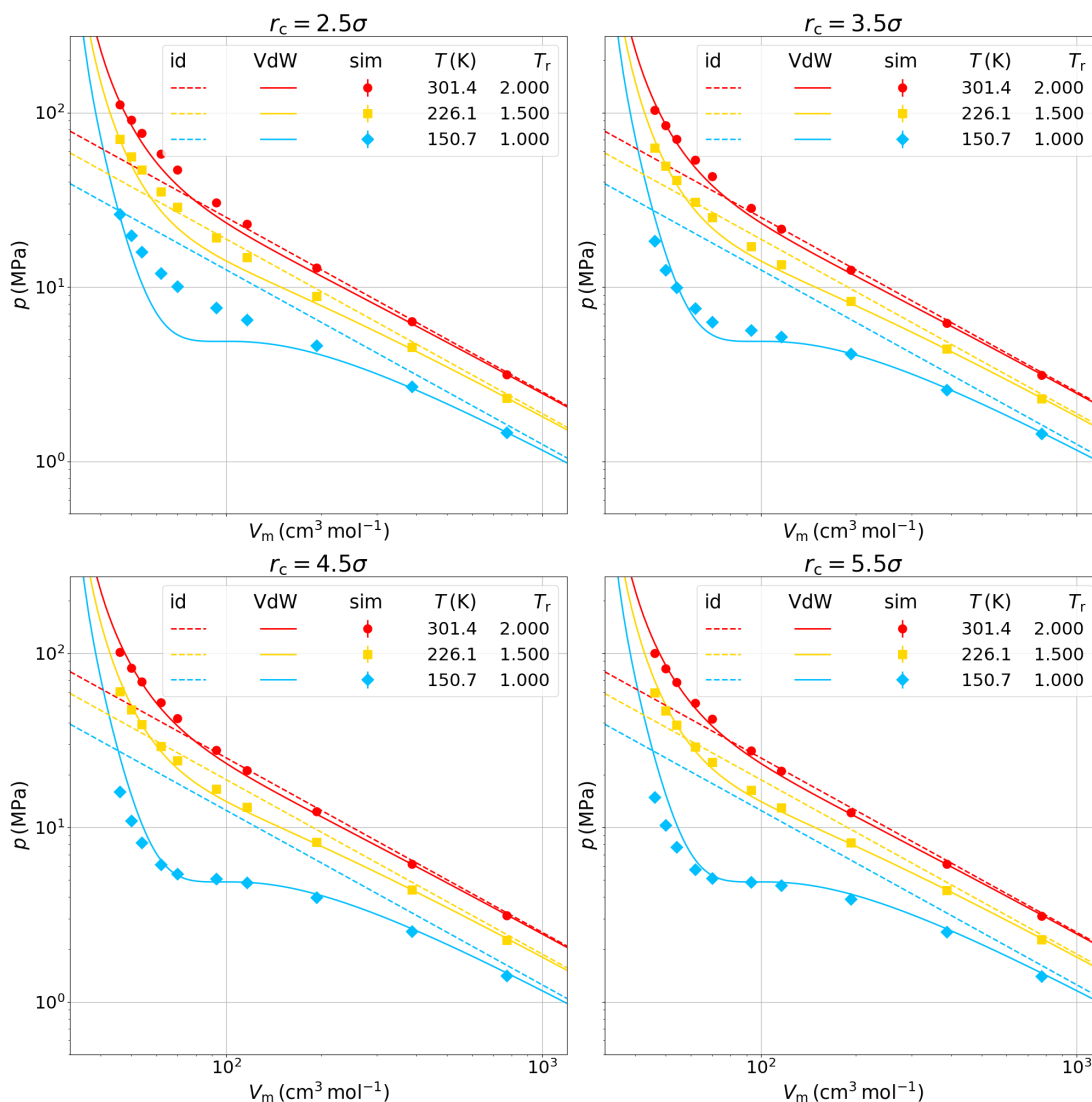


Obrázek 9 Porovnání nasimulovaných izoterm při různých teplotách pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c .

Pro lepší zachycení odchylek teoretických modelů a simulace byly na obrázku 10 vykresleny též dvojité logaritmické grafy.

Z grafů 9 a 10 vyplývá několik pozorování. Simulace se obecně spíše blíží Van der Waalovu modelu 2.2 než stavové rovnici ideálního plynu. Za kritické teploty T_c se ovšem od Van der Waalova modelu zdatelně odchyľuje, a to tím více, čím kratší je cutoff potenciálu. Pro zachování co největší přesnosti simulace a tedy možnosti věrně zachytit a chování argonu při kritické teplotě za nízkých molárních objemů bylo rozhodnuto pro použití cutoffu potenciálu $r_c = 5,5\sigma$.

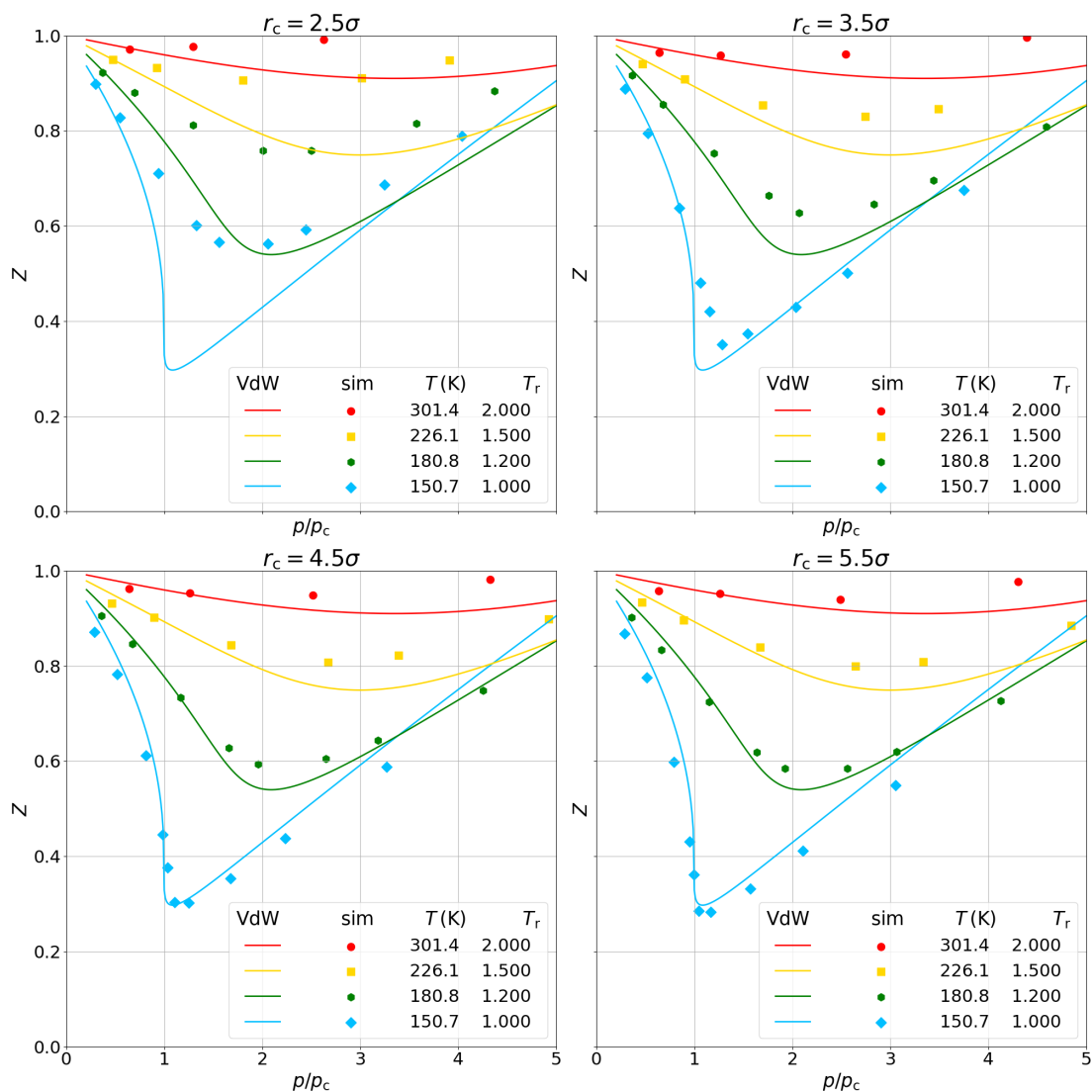
Pro porovnání simulovaných hodnot s experimentálními daty na obrázku 1 byly pro simulované hodnoty cutoffu potenciálu vykresleny generalizované



Obrázek 10 Porovnání nasimulovaných izoterem při různých teplotách pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c . Dvojitě logaritmický výnos.

kompresibilitní diagramy. Pro porovnání byly do grafů též vykresleny křivky pro Van der Waalsův model. Explicitní závislost $V_m = V_m(p)$ potřebná k vykreslení těchto křivek byla získána pomocí softwaru Wolfram Alpha, který poskytl analytické řešení rovnice 2.2 pomocí Cardanových vzorců. Stavová rovnice ideálního plynu nebyla do grafu vykreslena, jelikož pro všechny teploty jde o vodorovnou čáru v $Z = 1$. Získané generalizované kompresibilitní diagramy jsou na obrázku 11. Rozsahy os na obrázku 11 byly zvoleny v souladu s obrázkem 1.

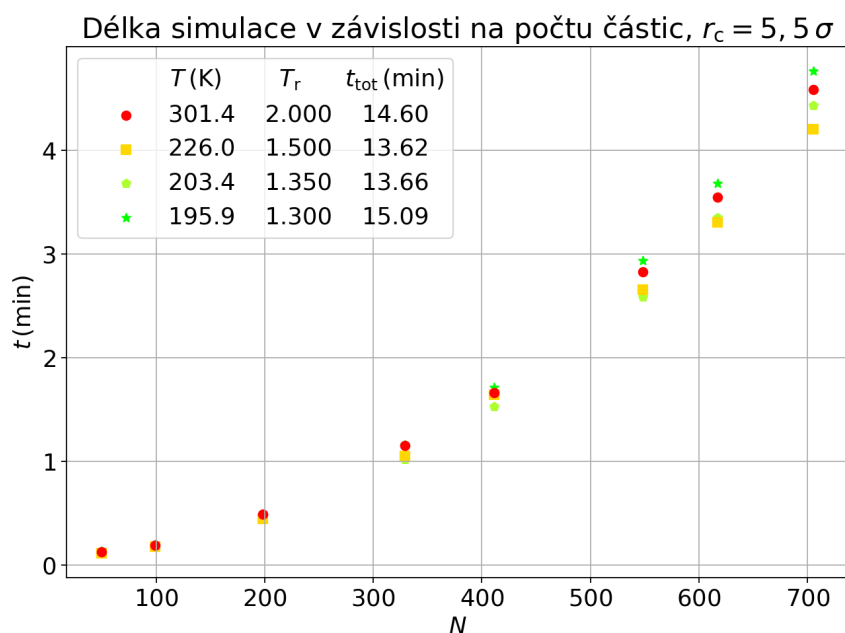
Z tohoto grafu je ještě lépe patrná odchylka simulace od Van der Waalsovy stavové rovnice. Zjišťujeme, že a při vyšších hodnotách r_c se simulace a Van der Waalsův model neshodují úplně. Zároveň se oba odchylují od experimentálních hodnot na obrázku 1.



Obrázek 11 Generalizovaný kompresibilitní diagram simulačních dat a Van der Waalsovy rovnice pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c

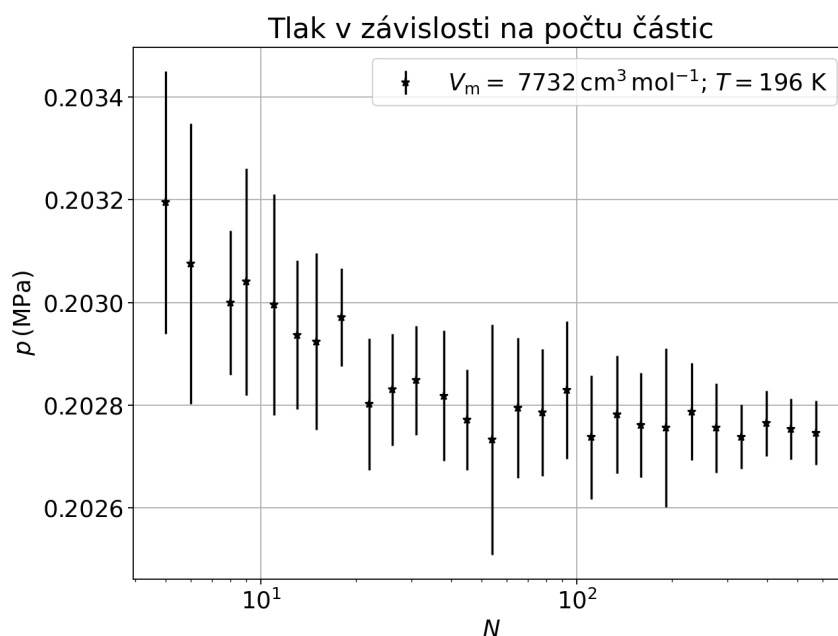
Bylo zjištěno, že při době trvání simulace $t_{\max} = 500$ se směrodatná odchylka průměru tlaků pohybuje daná vztahem 2.39 nepřekračuje 5 % a efektivní počet vzorků připadající na jeden blok při blokové analýze byl větší než 5. Jeden časový krok Δt ve smyslu vztahů 2.29 a 2.28 byl v simulaci $\Delta t = 0,1$, takže doba trvání simulace $t_{\max} = 500$ odpovídá 5000 vzorkům.

Počet částic ve všech výše zmíněných simulacích jsme vypočetli podle vztahu 2.32, aby byl minimální nutný. Abychom zhodnotili časovou náročnost simulací, proměřili jsme závislost doby trvání simulace na počtu částic při vybraných teplotách. Výsledku jsou v grafu 12.



Obrázek 12 Závislost doby trvání simulace na počtu částic pro vybrané teploty, za použití dosahu potenciálu $r_c = 5,5\sigma$ a doby trvání simulace $t_{\text{max}} = 500$. t_{tot} součet dob trvání všech zobrazených simulací provedených za dané teploty.

Obrázek 12 ukazuje, že reálná doba trvání simulace polynomiálně roste s množstvím částic. Hodnoty nad $N = 1000$ již trvají příliš dlouho na to, aby byly zařaditelné do úvodní úlohy, což vzhledem ke vztahu 2.32 klade při daném r_c omezení na nejmenší dosažitelný molární objem.



Obrázek 13 Závislost tlaku na počtu částic při teplotě 196 K a molárním objemu $7732 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$.

Vzhledem k tomu, že při různých molárních objemech používáme různý počet částic, zbývá ověřit, zda opravdu tlak v simulaci při zachování všech ostatních veličin konstantních nezávisí na počtu částic. Toto ověření jsme provedli pouze na

jedné teplotě a jednom molárním objemu spíše pro kvalitativní náhled. Výsledky ukazuje graf 13.

Je zjevné, že při počtu částic menším než cca 30 tlak vykazuje systematický nárůst, pro $N > 30$ hodnoty tlaku již oscilují kolem průměru, a tedy lze předpokládat, že nejsou zatíženy systematickou chybou. Nicméně a při nejmenších měřených počtech částic ($N = 5$) rozdíl od hodnot za vysokých počtů částic nepřesahuje 1 %.

3.1.4 Stanovení didaktických cílů

Na začátku tvorby úlohy byly zvoleny okruhy sdružující didaktické cíle, které jsou shrnuty v následujících bodech:

- Simulace má nějaké výhody, ale a nějaké omezení.
- Rámcově pochopit princip molekulové simulace
- Pochopit, že vyhodnocení molekulové simulace vyžaduje použití statistických metod.
- Naučit se vykreslit graf s chybovými úsečkami a pochopit, co vyjadřují.
- Naučit se linearizovat data pomocí dvojité logaritmického výnosu.
- Nahlédnout na submikroskopické úrovni rozdíly mezi Van der Waalsovou stavovou rovnicí a stavovou rovnicí ideálního plynu,

Na základě zvoleného pedagogického přístupu, simulovaného systému, parametrů simulace a teoretické řešerše byly původní široce definované okruhy specifikovány a přepracovány do podoby didaktických cílů uvedených v tabulce 1.

typ cíle	popis cíle	očekávaná odpověď
kognitivní	student kvalitativně a kvantitativně interpreтуje výsledky simulace	data kvalitativně odpovídají Van der Waalsově stavové rovnici ¹ , ale kvantitativně se od ní liší ² ; tato odchylka roste s klesajícím molárním objemem ³ a teplotou ⁴
kognitivní	student popíše princip molekulových simulací	zvolíme potenciál, který přibližně popisuje síly mezi částicemi ¹ , pomocí počítačového programu ² necháme tento systém vyvíjet v čase ³ , zaznamenáváme pozorovatelné veličiny ⁴
kognitivní	student vyjmenuje výhody simulací	simulace je levnější ¹ a rychlejší ² než experiment, jediným potřebným přístrojem je počítač ³
kognitivní	student vyjmenuje omezení simulací	simulace velkých systémů trvá dlouho ¹ , při simulaci malých systémů může docházet k nežádoucím efektům ² , má omezené meze platnosti ³
kognitivní	vysvětlí potřebu statistické analýzy	statistická analýza je potřeba, protože pozorovatelné veličiny v čase fluktuují ¹
psychomotorický	seznámí se s prostředím Jupyter Lab	je schopen ovládat předpřipravený Jupyter Notebook a upravovat ho pro svou potřebu

Tabulka 1 Didaktické cíle úlohy. Horní indexy odpovídají konceptům bodovaným v rámci vyhodnocení (kapitola Nabyté poznatky).

3.2 Struktura úlohy

Následující kapitoly obsahují zadání úlohy rozčleněné na jednotlivé sekce a – q. V každé sekci popíšeme, jak by s ní měl student interagovat a jaké dílčí vzdělávací cíle by tím měly být dosaženy. Vzhledem k multimediální povaze zadání úlohy a vzhledem ke snaze zachovat vzhled prostředí Jupyter Notebook byly jednotlivé sekce vloženy jako obrázky. Úpravy oproti originálu zahrnují odstranění nadpisů, které by byly duplicitní s nadpisy kapitol této práce, a ve zkrácení textu kódu na symbol ... v případě, že je shodný s předchozím kódem.

3.2.a Počítačová simulace izoterem plynů

Úvodní sekce má studenty seznámit s cílem úlohy a podat jim základní instrukce k ovládní prostředí Jupyter Notebook, ve kterém budou úlohu provádět. Zároveň studentům poskytuje explicitní informaci o psané formě scaffoldingu, kterou jsme do úlohy implementovali podobně jako Minshall; Yeziarski (2021).

Cílem této úlohy je na jednoduchém modelu představit princip molekulových simulací. Vaším úkolem bude pomocí simulace změřit závislost tlaku na molárním objemu argonu při různých teplotách a porovnat získanou závislost s teoretickými modely.

Prostředím Jupyter Notebook, ve kterém budete pracovat, obsahuje dva typy bloků: bloky textu (v jazyce Markdown) a bloky počítačového kódu (v programovacím jazyce Python). Všechny bloky lze upravovat. Pro vyvolání kódu nebo zobrazení textu pro čtení klikněte na příslušný blok a stiskněte `Ctrl + Enter` (můžete vyzkoušet dvakrát kliknout na tento blok a pak dát `Ctrl + Enter`). Pokud Jupyter Notebook z nějakého důvodu přestane reagovat nebo se začne chovat divně, můžete ho restartovat pomocí `Kernel -> Restart Kernel ...`.

Tučně jsou v textu zvýrazněny stěžejní informace, které budete dále potřebovat, *kurzívou* jsou pak označeny poznámky a nápovědy, které by Vám mohly pomoci, když si nevíte rady.

Obrázek 14 Obsah části a.

3.2.b Reálné plyny

Tato sekce má za cíl uvést studenty do kontextu, zavést veličiny molární objem, teplota a tlak a zopakovat informace, které již znají z kurzů fyzikální chemie. Tučně zvýrazněná informace má být užitečná v sekci 3.2.o. Otázka na interpretaci parametrů a a b Van der Waalovy rovnice má posloužit při interpretaci získaných grafů v sekci 3.2.q

Chování reálných plynů lze za normálních podmínek poměrně přesně popsat stavovou rovnicí ideálního plynu

$$pV_m = RT,$$

kde p je tlak, kde $V_m = V/n$ je molární objem látky, přičemž V je objem, n je látkové množství, R je plynová konstanta a T je termodynamická teplota. **Při nižších teplotách a molárních objemech se reálné plyny od modelu ideálního plynu odchyľují.** Za těchto podmínek lze použít o něco přesnější Van der Waalovu stavovou rovnici

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT.$$

Rozmyslete si, který z parametrů a a b souvisí s objemem částic plynu a který zohledňuje přitažlivé interakce mezi částicemi. Parametry a a b se stanovují pomocí experimentů, které jsou ovšem s rostoucí hustotou stále náročnější na provedení.

Obrázek 15 Obsah části b.

3.2.c Molekulové simulace a tlak

Zde se studenti seznámí se základním principem molekulových simulací, o kterém jsme pojednali v kapitole Klasická molekulová dynamika. Vztah pro tlak 2.35 byl uveden ze dvou důvodů: jednak pro kvalitativní pochopení souvislosti mezi mikroskopickým chováním částic a pozorovaným tlakem, jednak pro předcházení miskonceptu pozorované v pilotním testování (viz kapitola Pilotní testování), kdy si student v absenci rovnice 2.35 myslel, že tlak v simulaci se počítá z Van der Waalovy rovnice.

Molekulové simulace představují zcela odlišný přístup. Studovaný plyn popíšeme jako soubor „atomů“, kdy každý atom má svoji pozici a rychlost. Částice spolu budou navzájem interagovat a ovlivňovat se, což povede k tomu, že se jejich pozice i rychlost bude v čase měnit. Jak konkrétně, to za nás z Newtonových zákonů vypočte počítačový program. Tento program nám na základě pozic a rychlostí částic také umožní vypočítat okamžitý tlak, a to podle vztahu

$$p = \frac{RT}{V_m} + \frac{1}{6V_m} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij} \cdot r_{ij},$$

kde člen $\frac{RT}{V_m}$ odpovídá příspěvku ideálního plynu a člen $\frac{1}{6V_m} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij} \cdot r_{ij}$ započítává vliv interakcí mezi všemi dvojicemi částic.

Obrázek 16 Obsah části c.

3.2.d Úkol 1

Tato sekce představuje první úkol a první seznámení studenta se simulací. Tento a všechny další úkoly jsme označili tučně a modrým písmem, aby byly snadno rozpoznatelné. Dílčí podúkoly jsme odělili formou bodů v seznamu. Před samotným simulačním blokem jsme zopakovali informaci o spuštění kódu.

Úkol studenty žádá, aby doplnili hodnoty veličin v kódu. Ačkoliv jsme jim nedali explicitní instrukci, jak to provést, mohou postupovat v analogii s již vyplněnými veličinami.

Pro simulaci jsme zvolili běžné podmínky, za kterých budou tlaky v simulaci očekávané. Vzhledem k tomu, že nám v tomto úkolu nejde o přesné hodnoty tlaku, necháváme na studentovi, aby zvolil správnou teplotu a molární objem. Mírné odchylky od požadovaných hodnot nebudou překážkou v provedení úkolu a k jeho pochopení.

Úkol 1: V buňce níže nastavte počet částic N na 5, a teplotu T a molární objem V_m tak, aby odpovídaly běžným laboratorním podmínkám. *Pozor, v python kódu pište desetinné tečky, nikoliv čárky.* Spusťte simulaci vyvoláním kódu v buňce níže a všimněte si následujícího:

- Jak se mění tlak v průběhu simulace?

Následně v kódu níže zapněte zobrazení periodických okrajových podmínek a spusťte simulaci znovu.

- Co se děje s atomy na okraji boxu?

Svá pozorování si poznamenejte.

Pro vyvolání kódu klikněte na příslušný blok a stiskněte **Ctrl + Enter**. Vizualizace simulace se zobrazí pod blokem s kódem.

```
# import modulu simple molecular dynamics
import simplemd as smd

# vytvoření python slovníku s nastavením, které bude posláno do simulačního programu
settings = dict(
    # chemické parametry
    gas = 'Ar', # vzorec simulovaného plynu
    N = , # (přirozené číslo) počet částic
    T = , # teplota v Kelvinech
    Vm = , # molární objem v cm**3/mol

    # propagace
    t_max = 50, # (desetinné číslo) maximální čas simulace

    # output
    stride_obs = 0.1, # (desetinné číslo) časový interval mezi mezi zapisováním pozorovaných veličin do složky pv-praktikum_outputs
    stride_xyz = 0.3, # (desetinné číslo) časový inter val mezi zapisováním pozic a rychlostí částic pro vizualizaci
    visualize = True, # (boolean) změň na False pro vypnutí živé vizualizace
    periodic_boundaries = False, # (boolean) změň na True pro zobrazení periodických okrajových podmínek

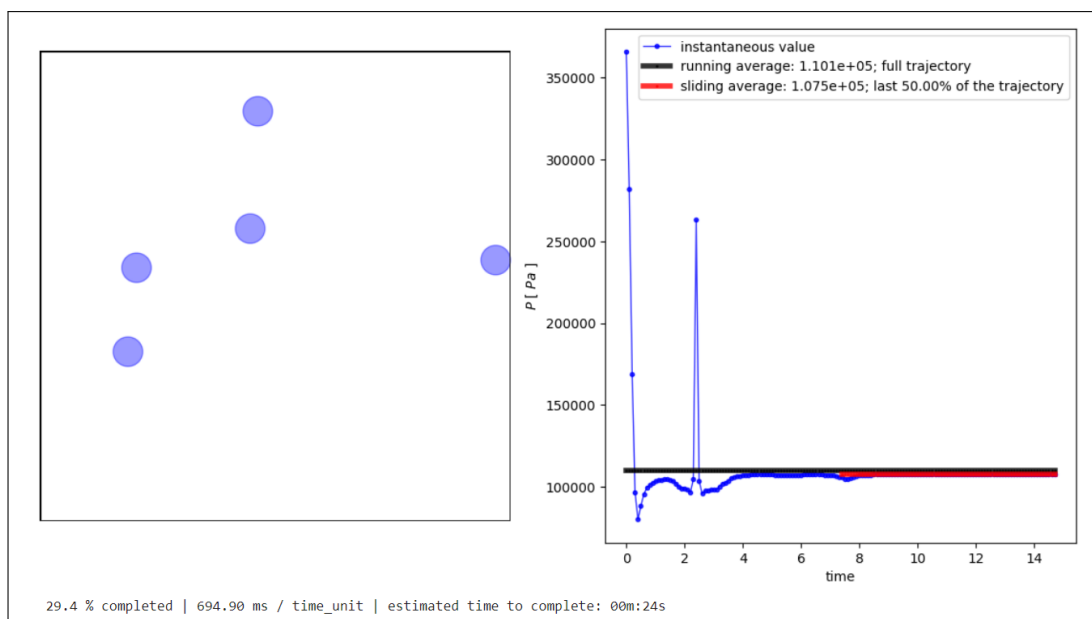
    system = 'pv-praktikum', # (string) neměň tuto hodnotu, pouze pv-praktikum je správná hodnota pro toto praktikum
)

# spuštění simulace se provádí zavoláním funkce simulate() z modulu simplemd
smd.simulate(settings)
```

Obrázek 17 Obsah části d.

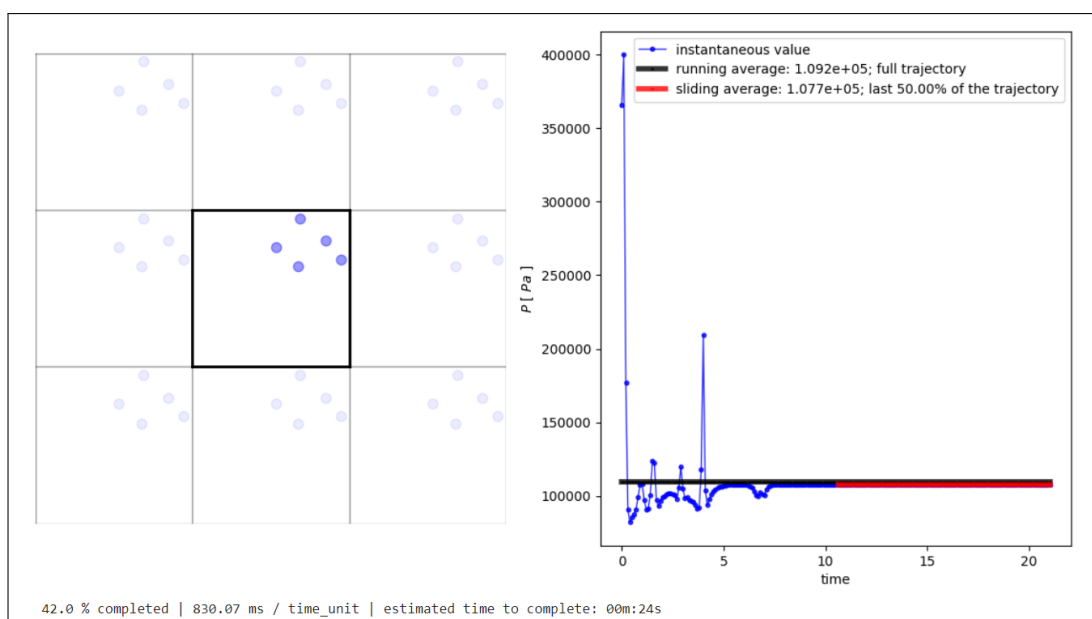
Po zadání správných hodnot vstupních veličin se zobrazí vizualizace simulace, jejíž snímek je na obrázku 18.

V levé části lze vidět simulační box s částicemi. Jde o 2D projekci 3D simulace implementovanou pomocí rozhraní matplotlib. Tuto simulaci jsme zařadili pro názornou představu o chování částic v simulaci. V pravé části se nachází graf závislosti okamžitého tlaku v simulaci na čase simulace. Na něm si má student všimnout především toho, že tlak není konstantní, ale fluktuuje. Pod simulačním boxem se nachází informace o postupu simulace a očekávané době do konce. Simulace se vyvíjí v čase.



Obrázek 18 Snímek vizualizace simulace v Úkolu 1.

Maximální čas simulace t_{\max} a časový interval mezi zapisováním pozic pro vizualizaci `stride_xyz` byly nastaveny tak, aby vizualizace byla přiměřeně rychlá a aby student mohl sledovat pohyb jednotlivých částic. Ze stejného důvodu byl záměrně zvolen nízký počet částic. Student tak může pozorovat, že při průchodu okrajem boxu se částice objeví na druhé straně boxu, jelikož simulace probíhá v periodických okrajových podmínkách (viz kapitola Periodické okrajové podmínky). Abychom představu periodických okrajových podmínek ujasnili, je dalším úkolem provést stejnou simulaci se zapnutou vizualizací periodických okrajových podmínek. Tato vizualizace je na obrázku 19.



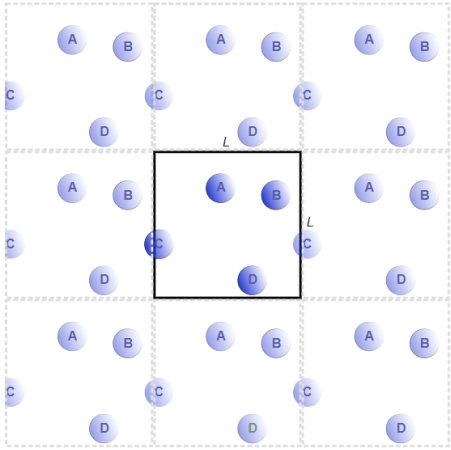
Obrázek 19 Snímek vizualizace simulace v Úkolu 1 se zapnutou vizualizací periodických okrajových podmínek.

3.2.e Periodické okrajové podmínky

Tato sekce má za cíl upevnit koncept periodických okrajových podmínek a dovysvětlit, proč je potřeba periodické okrajové podmínky používat (viz kapitola Periodické okrajové podmínky).

Pokud jste pozorně pozorovali atomy na okraji boxu, všimli jste si, že se neodráží od okrajů, nýbrž se po průchodu okrajem objeví na druhé straně boxu. V simulaci se chceme co nejlépe přiblížit makroskopické situaci, kde je počet částic „na okraji“ nádoby zcela zanedbatelný oproti počtu částic, které jsou ze všech stran obklopeny dalšími atomy plynu. Proto simulace provádíme v tzv. periodických okrajových podmínkách: kolem simulačního boxu vytvoříme jeho kopie s identickými částicemi (viz obrázek níže). Pokud nějaká částice vyletí ven ze simulačního boxu, nějaká její kopie naopak vletí zpět do boxu z opačné strany. Počet částic v boxu tak zůstane konstantní, aniž bychom částice omezovali stěnami.

Poznámka: simulace probíhá ve 3D, ale vizualizace je pro větší přehlednost ve 2D.



Výše jste simulovali pět atomů argonu. Reálné plyny ale sestávají z daleko většího množství atomů. Pokud má naše simulace odpovídat realitě, měli bychom také počet atomů navýšit.

Obrázek 20 Obsah části e.

3.2.f Úkol 2

Úkol 2 má za cíl studentům v kontextu předchozího úkolu nastínit závislost reálné doby trvání simulace na čase, kterou jsme diskutovali v sekci Parametry simulace. Simulace by měla trvat přibližně 90 sekund, tedy dostatečně dlouho na to, aby je čekání začalo nudit. Výstupem, který pro jistotu explicitně zmiňujeme, je, že pro co nejrychlejší průběh simulace je vhodné zachovat počet částic co nejmenší.

Úkol 2: V buňce níže navyšte počet částic N na 500, ostatní parametry zadejte stejné jako v předchozím úkolu. Spustěte simulaci vyvoláním kódu a pozorujte:

- Jak se změnila doba trvání simulace?

```
# import modulu simple md
import simplemd as smd

# vytvoření python slovníku s nastavením, které bude posláno do simulačního programu
settings = dict(
    # chemické parametry
    gas = 'Ar', # vzorec simulovaného plynu
    N = , # (celé číslo) počet částic
    T = , # teplota v Kelvinech
    Vm = , # molární objem v cm**3/mol

    # propagace
    t_max = 50, # (desetinné číslo) maximální čas simulace

    # output
    stride_obs = 0.1, # (desetinné číslo) časový interval mezi mezi zapisováním pozorovaných veličin do složky pv-praktikum_outputs
    stride_xyz = 0.3, # (desetinné číslo) časový interval mezi zapisováním pozic a rychlostí částic pro vizualizaci
    visualize = True, # (boolean) změň na False pro vypnutí živé vizualizace

    system = 'pv-praktikum', # (string) neměň tuto hodnotu, pouze pv-praktikum je správná hodnota pro toto praktikum
)

# spuštění simulace se provádí zavoláním funkce simulate() z modulu simplemd
smd.simulate(settings)
```

Z úkolu 2 vyplývá, že pro co nejrychlejší průběh simulace je vhodné počet částic zachovat co nejmenší. Ovšem i to má svá omezení, jak ukazuje úkol 3.

Obrázek 21 Obsah části f..

3.2.g Úkol 3

V této sekci se studenti dozví, že počet částic je omezený a ze spoda, a to skrze chybovou hlášku pythonu, kterou dostanou po spuštění simulace se simulačními parametry, které vedou k porušení podmínky 2.32. Chybovou hlášku lze vznímat jako omezení (constraint) ve smyslu, který ve své studii definoval Paul et al. (2013). Interakce s chybovými hláškami je v programování zcela běžnou činností, pro cílovou skupinu úlohy by ovšem čtení chybových hlášek mohlo představovat problém. Proto jsme zde explicitně popsali, že se po spuštění kódu má objevit chybová hláška, a že na jejím konci lze najít informaci o minimálním počtu částic. Pokud toto studenti pochopí, budou schopni chybovou hlášku využívat v Úkolu 7 jako nástroj pro volbu optimálního počtu částic.

Z úkolu 2 vyplývá, že pro co nejrychlejší průběh simulace je vhodné počet částic zachovat co nejmenší. Ovšem i to má svá omezení, jak ukazuje úkol 3.

Úkol 3: V buňce níže snižte počet částic zpět N na 5, teplotu ponechte stejnou a molární objem snižte 30krát oproti úkolu 1. Spustěte simulaci. Měli byste dostat **červený rámeček s chybovou hláškou**.

- Přečtete si `ValueError` na konci chybové hlášky. Co Vám říká o počtu částic?
- Změňte počet částic podle toho, co Vám chybová hláška radí a spustěte simulaci. Proběhla nyní normálně?

```
# import modulu simple md
import simplemd as smd

settings = dict(
    ...
)

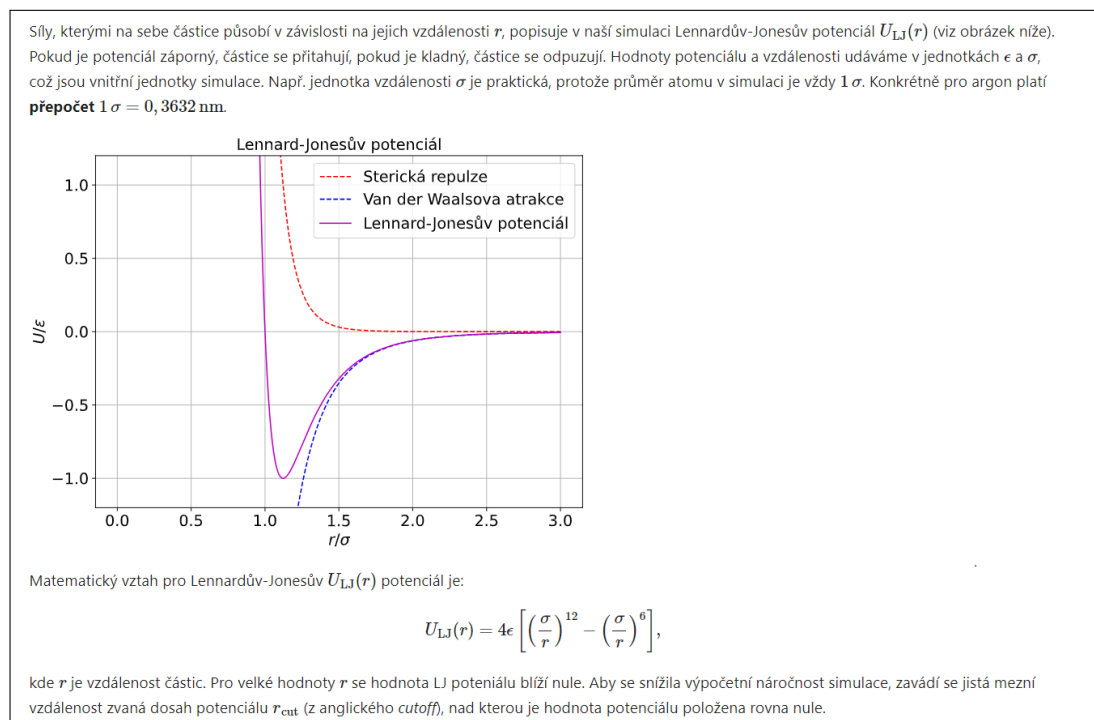
# spuštění simulace se provádí zavoláním funkce simulate() z modulu simplemd
smd.simulate(settings)
```

V následujících dvou kapitolách si vysvětlíme, proč jste v předchozí úloze dostali chybovou hlášku.

Obrázek 22 Obsah části g.

3.2.h Popis mezimolekulových interakcí

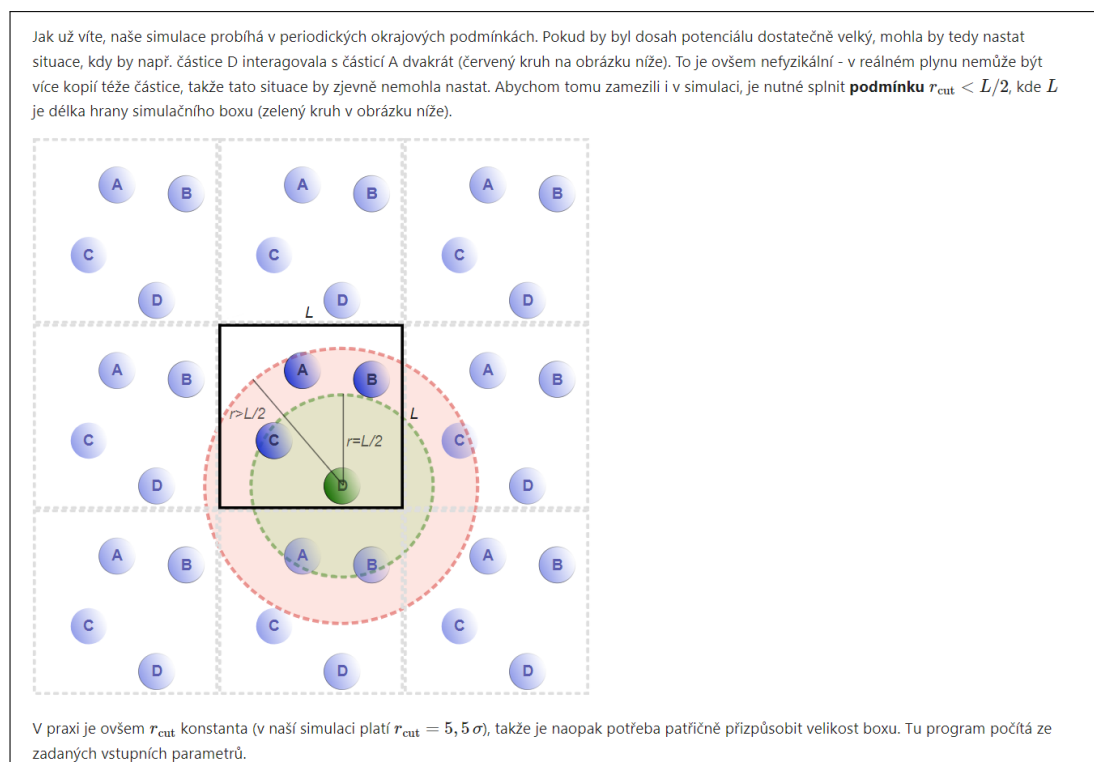
K vysvětlení podmínky 2.32 je potřeba zavést dosah potenciálu r_c . Lennard-Jonesův potenciál zde zavádíme nejprve kvalitativně pomocí grafu, následně pak matematickým vztahem v základním tvaru 2.24. Dosah potenciálu je definován jako vzdálenost atomů, nad kterou je hodnota potenciálu položena rovná nule.



Obrázek 23 Obsah části h.

3.2.i Dosah potenciálu a periodické okrajové podmínky

Tato sekce kvalitativně a pomocí náorného obrázku vysvětluje odůvodňuje podmínku 2.30 uvedenou v kapitole Periodické okrajové podmínky. Hodnota zvoleného dosahu potenciálu diskutovaná v sekci 3.1.3 je zde uvedena bez širšího kontextu, pouze pro účely výpočtu v následující sekci.



Obrázek 24 Obsah části i.

3.2.j Úkol 4

V této sekci by studenti měli odvodit podmínku pro minimální nutný počet částic v simulaci 2.32. Jelikož jde o odvození ne zcela triviální, rozhodli jsme uvést do zadání všechny potřebné definice a úlohu rozdělit na tři části. Úspěšné řešení této sekce vyžaduje schopnost úpravy algebraických vztahů a převodů jednotek. Dále je nutné využít informaci ze sekce 3.2.h o přepočtu cutoffu potenciálu na SI jednotky. V souladu s argumenty uvedenými v kapitole Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny očekáváme, že cílová skupina tyto schopnosti má.

Správný výsledek výpočtu v Úkolu 4 koresponduje s počtem částic, který udává chybová hláška v sekci 3.2.g.

Úkol 4: Vyděte z definice molárního objemu $V_m = \frac{V}{n}$, kde $V = L^3$ je objem simulačního boxu, a z definice látkového množství $n = \frac{N}{N_A}$, kde N_A je Avogadrova konstanta, a odvoďte následující:

- Vztah mezi délkou hrany boxu L , a molárním objemem V_m a počtem částic N . (V tomto vztahu by měly vystupovat jen veličiny L , V_m , N a konstanty.)
- Podmínku pro r_{cut} jako funkci parametrů V_m a N , pokud víte, že $r_{\text{cut}} < L/2$.
- Podmínku pro minimální nutný počet částic, pokud je $r_{\text{cut}} = 5,5\sigma$. Vypočítejte minimální nutný počet číselně a porovnejte svůj výsledek s chybovou hláškou.

Obrázek 25 Obsah části j.

3.2.k Fluktuace tlaku

V tomto bodě již studenti viděli několik simulací a měli by nahlédnout, že tlak v simulacích fluktuuje. Z toho plyne potřeba nasbírat dostatečné množství vzorků, tedy zvýšit simulační čas, aby byl výpočet průměru spolehlivý. V souvislosti s tím je potřeba snížit nároky na vizualizaci, která simulaci značně zpomaluje.

Pokud změříte tlak v nějakém makroskopickém systému (např. v laboratoři) několikrát za sebou, dostanete téměř totožné hodnoty. Naproti tomu tlak v simulaci kvůli malému počtu částic značně fluktuuje. Dlouhodobá hodnota tlaku v daném systému se proto počítá jako aritmetický průměr okamžitých hodnot. Aby takovýto výpočet průměru byl přesný, je potřeba nasbírat dostatečné množství vzorků - tedy simulovat dostatečně dlouho. Pokud ovšem nechceme, aby nám sběr dat zabral příliš mnoho času, je potřeba snížit nároky na vizualizaci.

Obrázek 26 Obsah části k.

3.2.1 Úkol 5

V této sekci jsme na několika úrovních zařadili descaffolding diskutovaný v kapitole Scaffolding. Formulace úkolu 5 je záměrně vágní - student, který zvládl předchozí části, pochopí, že může použít kteroukoliv z předchozích fungujících kombinací parametrů. Student, který nepochopil podmínku formulovanou v úkolu 4 nebo dospěl ke špatnému číselnému výsledku, se zde pravděpodobně zasekne a bude nucen vrátit se k úkolu 4.

Descaffolding se zde také projevuje ve snížení nároků na vizualizaci. Vizualizace se při průběhu simulací ve výzkumu nepoužívají, protože takové simulace většinou probíhají ve specializovaných výpočetních centrech a mohou trvat i mnoho dní. Zde postupně snižujeme časovou náročnost simulace za cenu názornosti: zvýšení parametru `stride_xyz` vede k tomu, že již nelze ve vizualizaci sledovat pohyb jednotlivých částic. Následné úplné vypnutí vizualizace vede k tomu, že studenti již nemohou sledovat průměrnou hodnotu tlaku. Z toho plyne potřeba seznámit studenty se složkou, do které se ukládají výstupy jejich simulace. S tímto souborem sice nebudou potřebovat pracovat, ale seznámení se s ním by mělo vést k lepší orientaci v pracovním procesu simulace.

Úkol 5: V buňce níže nastavte teplotu T , molární objem na V_m a počet částic N tak, aby jste splnili podmínku formulovanou v úkolu 4, a zároveň simulace netrvala příliš dlouho. Nastavte dobu trvání simulace t_{max} na 500 a postupně proveďte následující úkony:

- Nastavte časový interval mezi zapisováním pozic a rychlostí částic pro vizualizaci na 10 a spusťte simulaci. Jaká byl reálná doba trvání simulace?
- Následně nastavte `visualize` na `False` a spusťte simulaci. Jak se změnila doba trvání simulace?

```
# import modulu simple md
import simplemd as smd

settings = dict(
    ...
    t_max = , # (desetinné číslo) maximální čas simulace
    ...
    stride_xyz = , # (desetinné číslo) časový interval mezi zapisováním pozic a rychlostí částic pro vizualizaci
    ...
)

# spuštění simulace se provádí zavoláním funkce simulate() z modulu simplemd
smd.simulate(settings)
```

Kde je ale výstup Vaší simulace, pokud je vizualizace vypnutá? Data ze všech simulací, které jste provedli, se ukládají do složky `pv-praktikum_outputs`. Podívejte se do této složky (v adresáři vlevo) a identifikujte v něm csv soubor obsahující okamžité hodnoty tlaku.

Poznámka: do kmenové složky se navrátíte kliknutím na `python-md` v levém horním rohu.

Tento csv soubor byste mohli otevřít např. v excelu a statistickou analýzou získat průměrnou hodnotu tlaku. Protože by to ale bylo velmi zdlouhavé, připravili jsme pro Vás samostatný Jupyter Notebook `analyzuj-vystupy-badatelelsky.ipynb`, který statistickou analýzu získaných dat provede za Vás. Před tím, než budete pokračovat na závěrečný úkol, přejděte do tohoto Jupyter Notebooku a splňte úkoly tam.

Obrázek 27 Obsah části l.

3.2.m Statistická analýza

Cílem této úlohy není podat komplexní výklad o statistické analýze, nýbrž jen poukázat na potřebu statistické analýzy a poskytnout studentům potřebný nástroj pro provedení analýzy. Text v této sekci se tedy omezuje na kvalitativní

vysvětlení veličin, které jsou výstupem statistické analýzy. V definici korelačního času jsme se kvůli názornosti dopustili nepřesnosti oproti správné definici 2.40.

Pro blokovou analýzu korelované řady vzorků platí pravidlo, že efektivní počet korelovaných vzorků připadající na jeden blok by měl být větší než 5, jinak nelze statistickou analýzu považovat za spolehlivou (viz kapitola Statistická analýza). Z toho plyne podmínka $N_{\text{ef}} > 80$ zmíněná v textu.

V tomto Jupyter Notebooku Vás seznámíme se skriptem, který budete používat pro statistickou analýzu získaných dat.

Hlavním výstupem, který Vám tento skript poskytne, je průměrná hodnota tlaku v dané simulaci (značená `pressure_pascal`) a směrodatná odchylka tohoto průměru (`pressure_pascalErr`). Výpočet směrodatné odchylky je nicméně složitější, než použití příslušné funkce v excelu. Důvodem je, že tento vzorec lze použít jen na tzv. nekorelované vzorky. Vzorky, které jste nasbírali v simulaci korelované jsou - stav systému v nějakém okamžiku bude velmi podobný stavu systému v následujícím okamžiku. Po uplynutí jisté doby nicméně systém dojde do stavu, který již s počátečním stavem prakticky nesouvisí. Tomuto času říkáme korelační čas a bude označen `pressure_pascalTau`. Pokud vydělíme celkový čas simulace korelačním časem, dostaneme efektivní počet nekorelovaných vzorků `pressure_pascalNef`. Toto číslo bude typicky menší, než celkový počet vzorků v simulaci. V našem případě by pro efektivní počet vzorků mělo platit

$$N_{\text{ef}} > 80,$$

jinak nelze statistickou analýzu považovat za spolehlivou. Dobré vizuální vodítko pro spolehlivost statistické analýzy je, že při vyloučení počáteční části simulace (tzv. ekvilibrace) **vypadá časová závislost tlaku jako náhodný šum** bez jakéhokoliv trendu.

Obrázek 28 Obsah části m.

3.2.n Úkol 6

V této části se studenti seznámí s výstupy skriptu pro statistickou analýzu. Tento skript je součástí Soft Matter Computational Wiki, kterou využívají další studenti a vědci provádějící simulace polymerů na PřF UK i mimo ni. Bloková analýza je prováděna způsobem nastíněným v sekci Korelované vzorky. Skript pro statistickou analýzu byl umístěn do samostatného Jupyter Notebooku, což umožňuje snadnější orientaci v případě, že studenti budou paralelizovat svoji práci. Zároveň to odpovídá pracovnímu procesu provádění simulací ve vědě, kdy je produkční běh simulace oddělen od následné analýzy naměřených veličin.

Na obrázku 30 se nachází příklad výstupu statistické analýzy. Jde o závislosti tlaku na čase pro všechny simulace, jejichž výstupy se nacházejí ve složce `pv-praktikum_outputs`. Na konci se nachází přehledová tabulka s výsledky, které se zároveň uložily do tabulky `pv-praktikum_analyzed_observables.csv`. S tímto souborem studenty seznamujeme, aby mohli průběžně sledovat, jaké parametry použili v úkolech 7 a 8 a mohli plánovat další simulace. Hlavním výstupem, který se do tabulky ukládá, je průměrný tlak v simulaci příslušící danému molárním objemu.

Vyvoláním skriptu níže lze spustit statistickou analýzu všech simulací, které jste provedli.

Úkol 6: Spustte analýzu získaných dat vyvoláním skriptu níže. Pak proveďte následující:

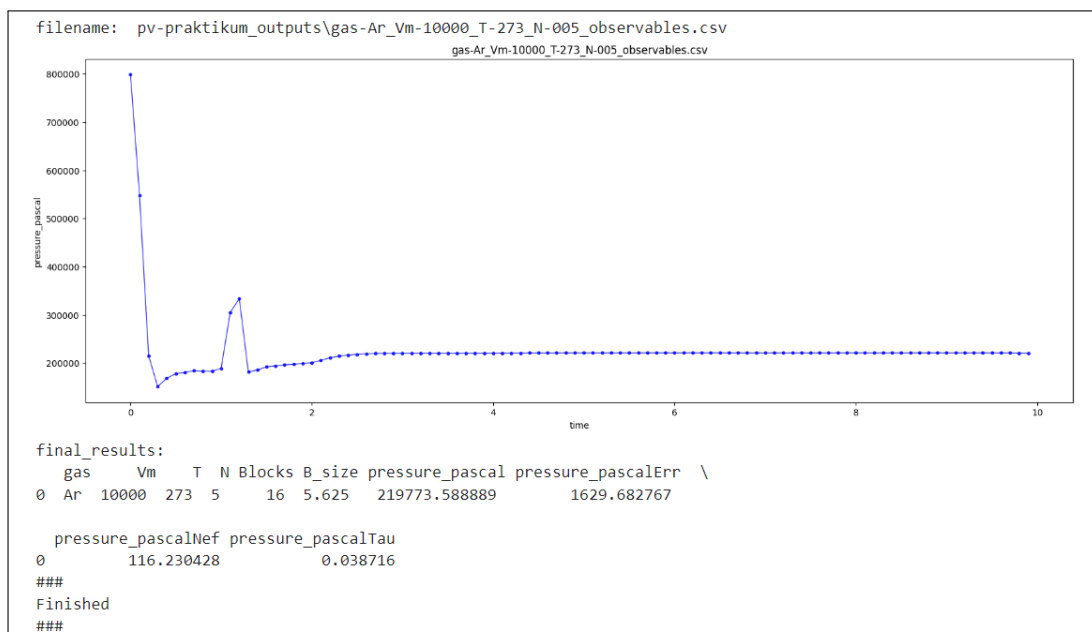
- Prohlédněte si výstupy. Měly by zahrnovat všechny simulace, které jste doposud provedli.
- Ve stávající složce nejděte v adresáři vlevo soubor `pv-praktikum_analyzed_observables.csv`. Otevřete ho a zkontrolujte, zda data v něm odpovídají simulacím, které jste provedli.
- Rozhodněte, zda by bylo nutné některý z výsledků vyřadit, protože nesplňuje podmínku $N_{ef} > 80$.
- Navraťte se do Jupyter Notebooku `simuluj-pv-praktikum-badatelicky.ipynb` a pokračujte k závěrečným úkolům.

```
# import modulu analysis_auxiliary_functions
import soft_matter_computational_wiki.data_analysis_scripts.analyze_obs_time_series as ana

# vytvoření pythom slovníku s nastavením, které bude posláno funkci pro analýzu
settings = dict(
    input_type = 'pv-praktikum', # (string) neměň tuto hodnotu, pouze pv-praktikum je správná hodnota pro toto praktikum
    output_name = 'analyzed_observables', # výstupní csv soubor je pojmenován jako 'input_type' + 'output_name'.csv
    equil = 0.1, # (desetinné číslo) podíl ze všech dat, který bude vyřazen jako ekvilibrace
    plot = True, # (boolean) vyber, jestli budou zobrazeny grafy nebo ne
    save_pdf = True, # (boolean) vyber, jestli má být uloženo pdf grafu
)

# spust analýzu zavoláním funkce analyze z modulu aaf
ana.run_analyses(settings)
```

Obrázek 29 Obsah části n.



Obrázek 30 Příklad výstupu statistické analýzy

3.2.o Úkol 7

Úkol 7 představuje první výstupní úkol. Zadání je komplexnější a vyžaduje zapojení poznatků získaných v předchozích kapitolách. Studenti by si sami měli zvolit hodnoty molárních objemů, a to na základě informace zmíněné v sekci 3.2.c, že pro zachycení odchylek od stavové rovnice ideálního plynu je třeba simulovat za nízkých molárních objemů.

V rámci tohoto úkolu studenti mají používat Jupyter Notebook pro statistickou analýzu, se kterým se již seznámili. Dále se mají seznámit s Jupyter Notebookem pro tvorbu grafů izoterem.

Pod zadáním úkolu jsme studentům poskytly několik informací, které by sice mohly být z předchozích úkolů a z kontextu zřejmé, ale nelze předpokládat, že je

všichni studenti budou znát.

Vášim závěrečným a výstupním úkolem bude naměřit dvě izotermy, tedy závislosti tlaku na molárním objemu při konstantní teplotě.

Úkol 7: Pomocí kódu níže proveďte při běžné pokojové teplotě sadu alespoň 8 simulací za různých molárních objemů. Splňte následující:

- Z rozehrvácích úkolů byste již měli mít simulace minimálně pro dva molární objemy hotové. Vyberte další hodnoty molárních objemů tak, abyste vyplnili prostor mezi těmito hodnotami. Následně pokračujte mimo tento rozsah tak, abyste **zachytili odchylky simulace od stavové rovnice ideálního plynu** (viz sekce Reálné plyny).
- Data z provedených simulací statisticky zpracujte pomocí Jupyter Notebooku `analyzuj-vystupy-badatelcky.ipynb`.
- Vykreslete izotermy do grafu pomocí Jupyter Notebooku `vykresli-izotermy-badatelcky.ipynb`.

Pokud si nejste jistí, jak provést některé z úkolů výše, mohly by Vám pomoci některé z těchto poznámek:

- Neprovádějte simulaci, která by měla trvat více než přibližně 5 minut. Zvolte takové nastavení, aby simulace běžela co nejrychleji.
- Pro nasbírání dostatečného počtu nekorelovaných vzorků je vhodné použít délku simulace $t_{\max} = 500$.
- V průběhu simulací již začnete statisticky zpracovávat data z předchozích provedených simulací a vykreslovat grafy.
- Molární objem ideálního plynu za standardních podmínek je $22,4 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$. I při desetinásobném stlačení jsou odchylky ideálního plynu od reálného zanedbatelné.

Obrázek 31 Obsah části o.

3.2.p Vykreslení izoterem

Vykreslení dat získaných v rámci praktik studenti neřídka provádějí až doma, což může být dáno i časovou náročností dané úlohy. My jsme dospěli k závěru, že studenti by měli vidět výstup své práce již v průběhu praktika a to dostatečně brzy na to, aby mohlo proběhnout více učebních cyklů ve smyslu, který jsme definovali v sekci 2.5.4. Studenti by zde měli interpretovat získané grafy, využít je k zodpovězení položených otázek a případně formulovat závěr. Pokud zjistí, že jim získaná data neposkytují všechny potřebné informace, měli by se vrátit do fáze explorační a provést další simulace.

Jak ukázalo Pilotní testování, tvorba přehledného grafu izoterem může být pro studenty relativně složitý proces, který by jim v praktiku zabral velké množství času. Proto jsme se rozhodli studentům poskytnout předpřipravený skript, ze kterého studenti po zadání teploty a rozsahů molárních objemů a tlaků a získají hotové grafy. Skript generuje kromě normálního grafu i dvojité logaritmické výnosy, ze kterého jsou patrné některé vlastnosti izoterem. Data k vykreslení skript bere přímo ze souboru `pv-praktikum_analyzed_observables`, kam se ukládají po statistické analýze.

Kromě simulačních dat skript vykresluje také křivky ideální stavové rovnice 2.1 a Van der Waalovy stavové rovnice 2.1. Díky tomu mohou studenti provést porovnání těchto dvou modelů a simulace. Příklady vytvořených grafů izoterem budou zobrazeny v sekci Výstupní část.

Data, která jste získali statistickou analýzou, byste nyní mohli otevřít v nějakém tabulkovém editoru a vykreslit z nich graf. Zde si ukážeme, že i to jde provést v pythonu. Níže jsme pro Vás připravili skript, který vykreslí izotermy pro Vámi zadané teploty. Jako vstupní data pro něj slouží soubor `pv-praktikum_analyzed_observables.csv`.

Ve skriptu níže představuje proměnná `temperatures` seznam teplot, které jste simulovali. Rozsahy os `Vm_range` a `p_range` vhodně nastavte na základě Vámi simulovaných hodnot. V grafech, které tento skript produkuje, představuje id stavovou rovnici ideálního plynu a VdW Van der Waalsovu stavovou rovnici.

```
# importuj funkci pro kreslení izoterem
import plot_isoterms_function as pif

# vytvoř slovník s nastavením, který bude poslán funkci pro kreslení grafů
settings = dict(
    source = 'pv-praktikum_analyzed_observables.csv', # (string) csv soubor s analyzovanými veličinami
    destination = 'plot-Izotermy-', # (string) jméno výstupního souboru, bez koncovky suffix
    temperatures = [], # (list of floats) seznam teplot v kelvinech k vykreslení, teploty oddělte čárkou
    Vm_range = [100, 2000], # (list of floats) minimální a maximální hodnota osy molárního objemu v cm^3/mol
    p_range = [1.0, 10.0], # (list of floats) minimální a maximální hodnota osy tlaku v MPa
    type = ['normal', 'log'], # (list of strings) typ grafu; možnosti: 'normal', 'Log'
    output = [], # (list of strings) formát výstupního souboru: 'png', 'svg'
)

# vykreslí grafy
pif.plot(settings)
```

Obrázek 32 Obsah části p.

3.2.q Úkol 8

V závěrečném úkolu mají studenti zopakovat sadu simulací při nižší teplotě. Zde studenti již nepotřebují další instrukce, protože celým procesem prošli. Naopak mají prostor pro přemýšlení nad výsledky jejich práce, které v tomto bodě jsou již z části patrné. Položené otázky cílí na interpretaci dat a vytvoření závěru.

Úkol 8: Zopakujte Úkol 7 při kritické teplotě $T_c = 150.7\text{K}$.

- Výsledky vynesete do společného grafu. Vykreslete též dvojité logaritmický graf.
- Porovnejte izotermy ideálního plynu, Van der Waalsova plynu a výsledky simulace. Popište, jak rozdíly mezi těmito třemi modely souvisí s teplotou a molárním objemem.
- Jsou výsledky očekávané? Pokuste se výše zmíněné odchylky vysvětlit.

```
# import modulu simple md
import simplemd as smd

# vytvoření python slovníku s nastavením, které bude posláno do simulačního programu
settings = dict(
    ...
)

# spuštění simulace se provádí zavoláním funkce simulate() z modulu simplemd
smd.simulate(settings)
```

Obrázek 33 Obsah části q.

3.3 Testování úlohy

Cílem testování úlohy bylo 1) získat podklad pro tvorbu metodického listu, 2) vytvořit časový plán realizace úlohy a 3) identifikovat a opravit chyby v úloze a její koncepci.

Metodou testování byl zvolen souběžný think-aloud s následným strukturovaným rozhovorem. Souběžný think-aloud je metoda, kdy respondent při provádění dané činnosti zároveň nahlas říká, nad čím přemýšlí a co se mu honí hlavou (Alhadreti; Mayhew, 2018). Metoda think-aloud byla zvolena, protože umožňuje vedle výsledku sledovat hlavně proces vypracování úlohy, a zachytit možné problémy vyvstanuvší v průběhu řešení, což je v souladu s našimi cíli. Forma souběžného

think-aloud byla zvolena kvůli nejmenší časové náročnosti oproti alternativnímu retrospektivnímu nebo hybridnímu think-aloud. Testování mělo tři fáze: úvodní instrukce, vypracování úlohy a rozhovor. Z celého rozhovoru byla pořizována audionahrávka do aplikace diktafon. Protokol testování byl navrhnout na základě pilotního testování, které vlastního testování předcházelo.

3.3.1 Pilotní testování

Draft úlohy byl pilotně testován na třech studentech. V různé míře byla využita metoda souběžného think-aloud (viz. kapitola 3.3), ale celkový protokol testování ještě nebyl zcela definovaný, jelikož i ten byl předmětem testování.

Na základě zpětné vazby získané z pilotního testování byly přidány, upraveny nebo odebrány některé prvky. Byl přidán separátní Jupyter Notebook pro tvorbu grafů, jelikož jeden z testujících strávil příliš mnoho času tvořením grafu v excellu. Tento Jupyter Notebook také automaticky generuje isotermy pro ideální plyn (rovnice 2.1) a pro Van der Waalsův model (rovnice 2.2), díky čemuž mohou studenti provést porovnání těchto dvou modelů a simulace. Původní záměr aplikovat myšlenku fadingu, jak byla diskutována v sekci 2.5.5, byl omezen, jelikož jeho zařazení ve formě nedefinování všech parametrů skriptu pro tvorbu grafů vedl k nesprávnému používání tohoto skriptu.

Byly dodefinovány některé veličiny a pojmy, jejichž význam nebyl bez kontextu jasný. Na adekvátních místech v textu byly vysvětleny některé funkce Jupyter Notebooku, aby je studenti vnímali jako možnosti (affordances) ve smyslu, který definoval Paul et al. (2013).

Podle příkladů pracovních listů, které testovali ve své studii Braca; Kalman (2021), byl přidán implicitní scaffolding ve formě tučně a kurzívou psaného textu. Tučně byly v textu zvýrazněny stěžejní informace, které budou studenti dále v průběhu vypracování úlohy potřebovat. Kurzívou byly označeny poznámky a nápovědy, které by jim mohly pomoci, pokud si nebudou vědět rady. Význam tohoto značení byl také studentům sdělen.

V neposlední řadě byly na základě pilotního testování odstraněny některé faktické chyby, a to jak v textu úlohy, tak v samotném simulačním programu.

3.3.2 Účastníci a podmínky testování

Vlastní testování úlohy bylo provedeno mezi dny 26.3. — 17.4. 2024 na vzorku $N = 12$, z toho bylo 7 mužů a 5 žen. Účastníci budou dále označováni Test4 – Test15 (čísla 1 – 3 byla použita v pilotním testování) a v rámci anonymizace dat budou pojmenováváni v mužském rodě nezávisle na pohlaví. Věk účastníků se pohyboval mezi 20–25 lety. Šlo o studenty převážně PřF UK (8), dále Pedagogické fakulty (1), Matematicko Fyzikální fakulty (1), Vysoké Školy Chemickotechnologické (1) a nestudující momentálně žádnou VŠ (1).

Testování bylo prováděno v uzavřené místnosti, kde se nacházel pouze účastník testování a instruktor, a to na počítači Acer Aspire Vero s procesorem 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-1195G7 @ 2.90GHz 2.92 GHz a 16.0 GB RAM.

3.3.3 Úvodní instrukce

Úvodní instrukce studentům trvaly cca 3 minuty a jejich obsah byl následující text, byl přečten testujícím:

V následující 105 minutách bude Vaším úkolem vypracovat předloženou úlohu podle Vašich nejlepších schopností a při tom slovně popisovat všechny svoje myšlenky a nápady, tak jak přicházejí, a to i včetně textu, který čtete. Z testování bude za účely výzkumu pořízena audionahrávka. Souhlasíte s nahráváním? Vaše mluvení je pro mě způsob získávání informací, ke kterým se budu moct vrátit. Pokud byste delší dobu nemluvil/a, tak Vás o to požádám. Pokud budete potřebovat testování přerušit a např. si odskočit, řeknete „pauza“. Pokud to bude potřeba, můžete při řešení úlohy kromě počítače využít psací potřeby a papír, kalkulačku a mobilní telefon. Já budu mít během testování dvě role. Jednak budu pozorovatel, jednak budu instruktor v praktiku. Pokud budete mít dotaz k instruktorovi, zvednete ruku a zeptejte se, přistupujte k tomu nicméně tak, jako bychom byli v reálném praktiku pro 16 studentů - jako instruktor určitě nebudu dostupný každému neustále. Pokud nezvednete ruku, zůstávám v roli pozorovatele a nebudu s Vámi nijak interagovat. Pokud budete mít pocit, že jste hotovi, případně po uplynutí 105 minut testování ukončíme a přejdeme k závěrečnému rozhovoru, který bude trvat cca 15 minut. Máte v tuto chvíli nějaké otázky? Pokud ne, můžeme začít.

3.3.4 Vypracování úlohy

Vypracování úlohy bylo započato bezprostředně po sdělení úvodních instrukcí a bylo ukončeno 105 minut po začátku testování, případně dříve, pokud student zhodnotil, že je hotov.

Během vypracování úlohy účastníky šetření byl pomocí aplikace diktafon zaznamenáván čas započetí nové sekce v úloze. Úloha byla formálně rozčleněna na sekce a–q tak, jak je tomu v kapitole Struktura úlohy.

V rámci pozorování studenta při řešení úlohy bylo zaznamenáváno šest typů událostí, které byly nějakým způsobem v rozporu s optimálním průběhem řešení úlohy (dále jen události nebo problémové události): **chyby** v textu a koncepci úlohy (C); **intervence** do průběhu testování (I); **miskoncepce** účastníků testování (M); **otázky** testovaných k instruktorovi, včetně odpovědi na otázku (O); **problémy** ať už z pohledu pozorujícího, tak z pohledu studenta, včetně postupu, který vedl k vyřešení problému (P); **reflexe** mezi účastníkem testování a instruktorem (R). Tyto události byly zaznamenávány do sešitu v reálném čase v průběhu testování.

3.3.5 Rozhovor

Po skončení vypracování úlohy bezprostředně navazoval strukturovaný rozhovor, který sestával z následujících bodů:

1. Za pomoci vytvořeného grafu stručně popiš výsledky, ke kterým jsi dospěl/a.
2. Pokus se svými slovy popsat princip molekulových simulací.
3. Vyjmenuj výhody molekulových simulací oproti experimentu.
4. Vyjmenuj nevýhody molekulových simulací oproti experimentu.

5. Vysvětli, proč bylo nutné použít statistickou analýzu.
6. Na stupnici od 1 do 7, kde 1 je velmi lehká a 7 je velmi těžká, jak hodnotíš náročnost této úlohy?
7. Jakou VŠ studuješ a jaký obor?
8. Absolvoval/a jsi na VŠ kurzy týkající se termodynamiky, statistické fyziky, simulací nebo programování? Které?
9. Jaký je tvůj věk a pohlaví?
10. Co bys na úloze ocenil/a?
11. Jaké doporučení na zlepšení úlohy bys nabídl/a?

Prvních pět otázek má za cíl zjistit, jak úloha přispívá k nabytí poznatků. Následující čtyři otázky zjišťují subjektivní obtížnost úlohy pro studenty a faktory, které by mohly s touto obtížností souviset. Poslední dvě otázky dávají prostor pro zpětnou vazbu na úlohu od studenta s cílem najít aspekty, které by mohly být vylepšeny a aspekty, které by naopak měly být zachovány.

Strukturovaný rozhovor probíhal cca 15 minut.

3.4 Vyhodnocení testování

V rámci vyhodnocení testování byly provedeny následující úkony:

- analýza časů započetí sekce,
- analýza a kategorizace událostí,
- vyhodnocení nabytých poznatků o molekulových simulacích.

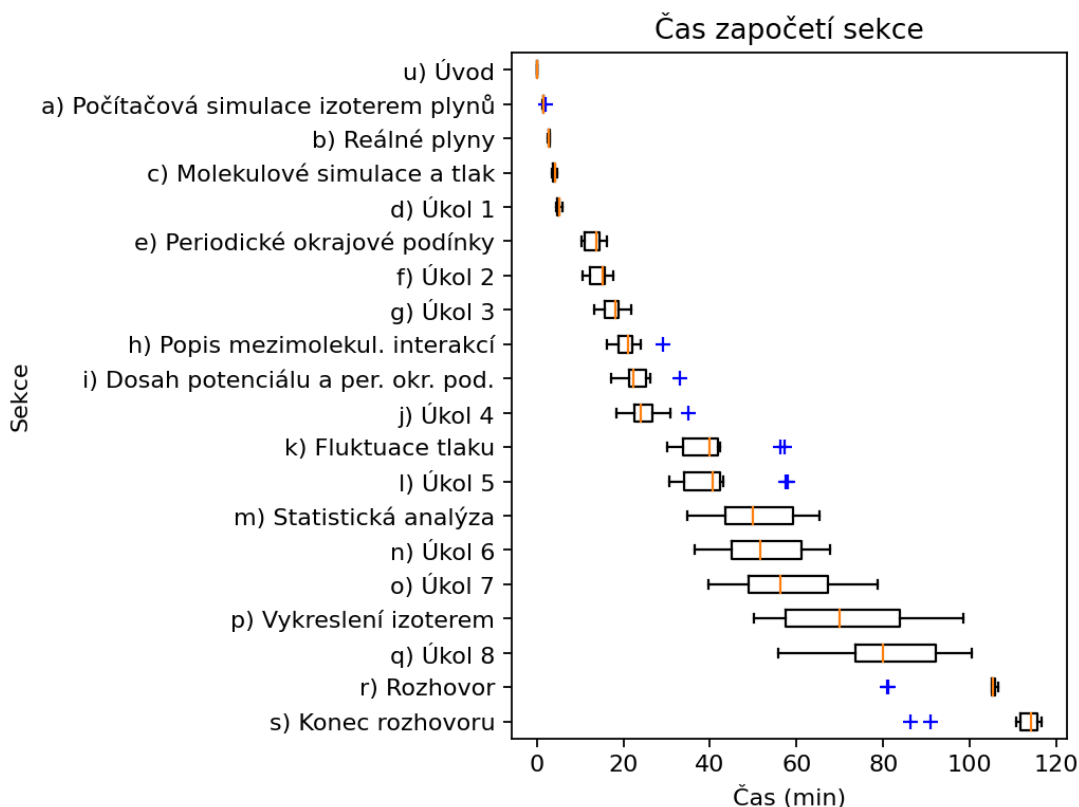
Ačkoliv byla metodologie vyhodnocení testování do určité míry naplánována před samotným testováním, byla následně upravena a upřesněna na základě povahy získaných dat. Detaily postupu vyhodnocení proto zmiňujeme v kapitole Výstupní část spolu s výsledky.

4 Výstupní část

Ve výstupní části prezentujeme data získaná testováním úlohy a odpovídáme na výzkumné otázky definované na začátku kapitoly Metodická část.

4.1 Doba trvání

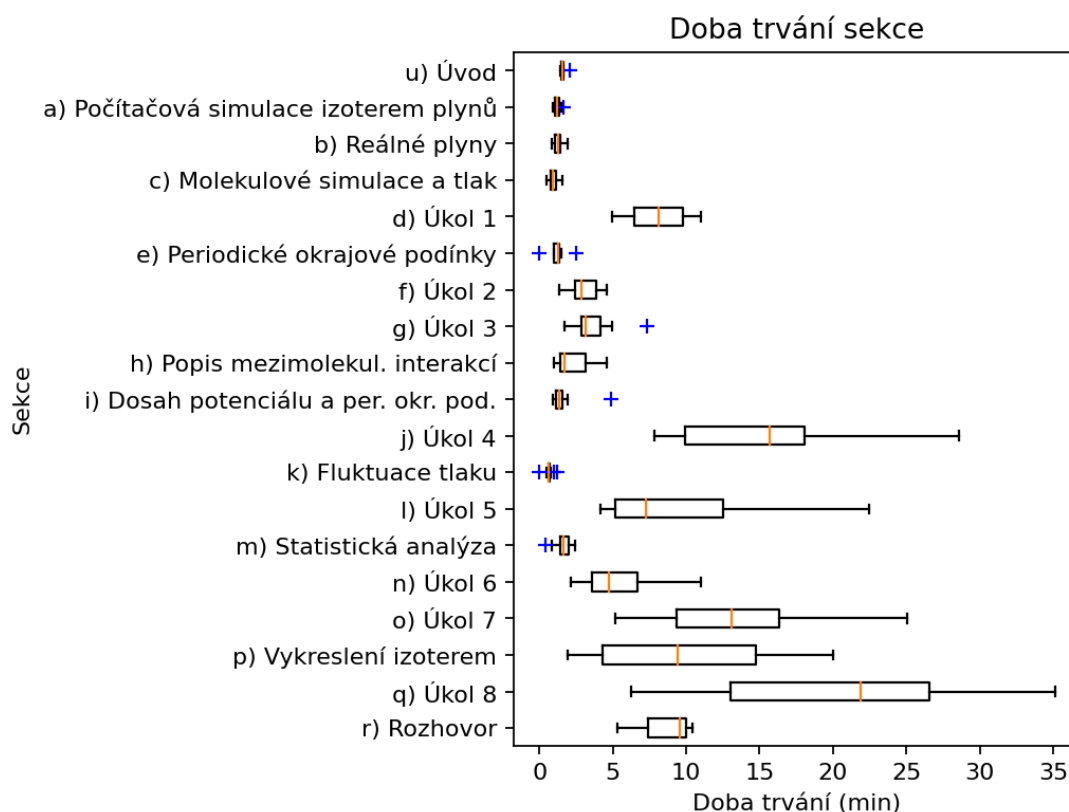
Z vyhodnocení doby trvání jednotlivých sekcí úlohy byl vyloučen účastník Test15, jelikož nestihl splnit všechny sekce úlohy. Vyřazení tohoto vzorku považujeme za oprávněné vzhledem k tomu, že účastník nebyl studentem PřF UK a nesplňoval některé z prerekvizit zmíněných v kapitole Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny. Získané hodnoty času započítání sekce všech studentů byly zobrazeny do grafu na obrázku 34 pomocí boxplot konvence definované v dokumentaci python knihovny Matplotlib (Hunter et al., 2012). Syrová data získaná při testování jsou v příloze A.1. Systematickou chybu těchto dat způsobenou nepřesným zaznamenáváním započítání nové sekce při testování odhadujeme maximálně na 10 s a považujeme ji za zanedbatelnou oproti náhodné chybě způsobené variancí získaných dat.



Obrázek 34 Čas započítání sekce zobrazený pomocí boxplot konvence. Oranžová čára uvnitř boxu představuje medián, box ohraničuje první až třetí kvartil. Úsečky vycházející z boxů označují nejvzdálenější bod spadající do 1,5násobku interkvartilního rozmezí. Modré křížky představují odhlehle hodnoty, které nespadají do 1,5násobku interkvartilního rozmezí.

Pro lepší znázornění doby trvání sekcí jsme vypočetli rozdíly dvou následujících sekcí a získaná data jsme zobrazili do grafu na obrázku 35 pomocí boxplot konvence,

stejně jako u obrázku 34.



Obrázek 35 Doba trvání sekcí zobrazená pomocí boxplot konvence.

Doby trvání sekcí se v průběhu úlohy prodlužují, což je dle našeho soudu způsobeno větším množstvím podúkolů připadajících na sekci, jejich rostoucí otevřeností a komplexností a klesajícím mírou scaffoldingu. Za povšimnutí stojí sekce, které se výrazně odchyľují od ostatních. V případě sekce Úkol 1 je výrazně delší doba trvání sekce pravděpodobně způsobena tím, že jde o první interakci s python kódem. Vysoká doba trvání sekce Úkol 4 je způsobena pravděpodobně vysokou konceptuální náročností. V obou zmíněných sekcích byly četné problémy a otázky, které budeme diskutovat v sekci Kategorizace událostí. Delší doba trvání sekce 3.2.1 může souviset s miskoncepcemi, které se objevily v sekci Úkol 4. Doba trvání závěrečných úkolů byla na jednu stranu omezena limitem času testování 105 minut, na druhou stranu modulována počtem a rozsahem reflexí, které v rámci testování proběhly.

Z grafů ovšem není patrné, že někteří studenti nestihli v rámci testování dokončit všechny úkoly v úloze. Konkrétně Test5 nestihl vykreslit všechna nasmulovaná data (což by mu zabralo odhadem dalších 5 minut), Test11 nestihl nasimulovat všechna data pro kritickou teplotu T_c (zde čas by se čas potřebný na dokončení úlohy pohyboval v řádu desítek minut). V obou zmíněných případech bylo nicméně testování ukončeno v sekci Úkol 8 a studenti již vyprodukovali nějaký graf izoterem. V případě Test15 bylo testování ukončeno v sekci 3.2.k. Účastník Test15 není studentem chemického oboru a jde tedy o ukázkou toho, jak by si v úloze vedl student nesplňující prerekvizity zmíněné v sekci Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny.

Mezi faktory, které by mohly zvýšit časovou náročnost úlohy při implementaci

do praktika z fyzikální chemie patří větší vytíženost lektorů v praktikách a menší klid na práci. Naopak možnost spolupracovat ve dvojici a absence nepřirozeného prostředí testování by mohla testování o něco urychlit. To ilustrujeme záznamem, kdy dvě ženy v rámci závěrečného rozhovoru po testování zmínili, že jim dělá problém mluvit nahlas a zároveň přemýšlet nad tím, co čtou nebo dělají.

Pokud odhlédneme od výše zmíněných odlehlých případů a vezmeme v potaz zmíněné faktory, vyslovujeme závěr, že s pomocí lektorů by měli všichni studenti splňující předpoklady zmíněné v sekci Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny mít možnost splnit úlohu ve stavu před testováním za dobu 180 minut, což je doba trvání bloku praktika.

Pro potřeby praktika jsme ze získaných dat shrnuli mediány času započetí a dobu trvání každé sekce do tabulky 2. Vzhledem k řádům, ve kterých se pohybovaly směrodatné odchylky, jsme hodnoty zaokrouhlili na minuty. Přibližnou dobu trvání dané sekce jsme vypočetli z rozdílu časů započetí po sobě následujících sekcí.

Sekce	Započetí (min)	Trvání (min)
a) Počítačová simulace izoterem plynů	2	1
b) Reálné plyny	3	1
c) Molekulové simulace a tlak	4	1
d) Úkol 1	5	9
e) Periodické okrajové podmínky	14	1
f) Úkol 2	15	3
g) Úkol 3	18	3
h) Popis mezimolekulových interakcí	21	1
i) Dosah potenciálu a per. okr. podmínky	22	2
j) Úkol 4	24	16
k) Fluktuace tlaku	40	1
l) Úkol 5	41	9
m) Statistická analýza	50	2
n) Úkol 6	52	4
o) Úkol 7	56	14
p) Vykreslení izoterem	70	10
q) Úkol 8	80	25
r) Konec vypracování úlohy	105	

Tabulka 2 Medián času započetí sekce a přibližná doba trvání sekce.

4.2 Kategorizace událostí

Přehled všech zaznamenaných událostí ve smyslu definovaném v kapitole Vypracování úlohy je v příloze A.2. V průběhu testování jsme události zapisovali do papírového laboratorního deníku a kategorizovali je na chyby (C), intervence (I), miskoncepce (M), otázky (O), problémy (P) a reflexe (R). U problémů jsme dále zaznamenali cestu vedoucí k řešení problému. U otázek a reflexí jsme zaznamenali odpověď instruktora. Po testování (zpravidla ve stejný den nebo v rámci několika dní po testování), byly události přepsány do tabulky a byla jim přiřazena kategorie obsahu.

Bylo zaznamenáno celkem 335 událostí, z toho 32 chyb, 11 intervencí, 36 miskoncepce, 115 otázek, 129 problémů a 12 reflexí.

4.2.1 Problémy, otázky a miskoncepce

Tyto tři kategorie byly vyhodnocovány společně, jelikož spolu často souvisí. Samotná kategorizace na tyto tři kategorie v některých případech nebyla zcela jednoznačná, protože např. některá miskoncepce mohla být následně zdrojem problémů nebo otázek.

Údálosti jsme se neprve pokusili kategorizovat zeshora dolů na základě rozčlenění i) problém v úloze; ii) neznalost základních konceptů; iii) neznalost netriviálních konceptů. Dospěli jsme ovšem k závěru, že takováto kategorizace není validní, protože a priori nevíme, zda některé z problému spadající do kategorie ii) nebo iii) nebyly způsobeny nějakou chybou v úloze, ať už faktickou, nebo didaktickou. Hodnocení, zda za danou událost může student, nebo autor úlohy, jsme shledali neúčinným a spíše kontraproduktivním.

Proto jsme se přeorientovali na přístup zespoda nahoru, kdy jsme procházeli jednotlivé události v rámci kategorií P, O, M a přiřazovali jsme jim identifikátor konkrétního obsahu. V některých případech se tento identifikátor shodoval nebo vycházel z kategorie obsahu, která byla přidělena události při přepisování do tabulky, často ovšem identifikátor byl konkrétnější, především byl ovšem konzistentní s ostatními identifikátory. Při každém dalším předělení identifikátoru jsme totiž zkontrolovali, zda už nebyl ke stejné události nějaký identifikátor přidělen. Tímto způsobem jsme cca 280 událostem P, O, M přidělili 160 unikátních identifikátorů. Přehled událostí s přiřazenými identifikátory je v příloze A.3.

Následně jsme se zaměřili na opakující se identifikátory. Za události hodné největší pozornosti považujeme ty, které se objevily nejčastěji. Identifikovali jsme celkem 21 událostí, které se objevily alespoň u tří účastníků testování. Některé události jsme nyní mohli sloučit do skupin, čímž vzniklo 9 nadkategorií, které graficky shrnuje myšlenková mapa 36. V následujících odstavcích stručně popíšeme identifikované události a navrhneme, jak je řešit, případně navrhneme kroky k jejich předcházení.

- **Neví, jaký V_m zadat v d) (5).** Jedním ze zdrojů této události může být, jak se ukázalo, že ne všichni studenti znají tabulkovou hodnotu molárního objemu za standardních podmínek $V_m \doteq 22,4 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$. Její hodnotu lze ovšem dopočítat ze stavové rovnice ideálního plynu zmíněné v sekci 3.2.b. Dalším důvodem, proč tato událost nastala, může být znejištění studentů tím, že zadání je poněkud vágní. Cílem tohoto úkolu ovšem není simulovat za přesně daných podmínek, ale spíše simulovat za podmínek, které jsou zvolené s porozuměním.

Typická otázka: „Jaký molární objem tam mám dát?“

Odpověď: „Pokud hodnotu neznáte, tak ji lze vypočítat ze stavové rovnice ideálního plynu.“

- **Neví, jakou T zadat v d) (3).** Tato událost nejspíše vyvstávala z důvodu vágního zadání, podobně jako v předchozím případě. Pokud studenti zadají teplotu mezi 273 K a 300 K, získají kvalitativně žádané výsledky.

Typická otázka: „Jakou teplotu mám zadat?“

Odpověď: „V tomto případě není potřeba přesná hodnota. Zadejte přibližně teplotu, jakou máme tady v laboratoři.“



Obrázek 36 Kategorizace nejčastějších událostí. Čísla v závorce představují počet účastníků testování, u kterých se tato událost vyskytla.

- **Chyba v úpravách vztahů v j) (4).** Tyto chyby zahrnovaly typicky záměnu čitatele a jmenovatele. Zdrojem těchto chyb byla pravděpodobně především nepozornost, spěch, případně nedostatek cviku v úpravách vzorců. Správné odvození je v sekci Periodické okrajové podmínky.
- **Někde v j) zmizela třetí mocnina (3).** Příčiny chyby jsou podobné jako v minulém případě.
- **Nesprávné N v j) (8).** Tato událost je důsledkem chyb zmíněných výše. Správný výsledek vyjde následujícím výpočtem:

$$N = \frac{(2 \cdot 5,5\sigma)^3 \cdot N_A}{V_m} = \frac{8 \cdot 5,5^3 \cdot (0,3632 \text{ nm})^3 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}}{747 \cdot 10^{21} \text{ nm}^3 \text{ mol}^{-1}} \doteq 51,4$$

Pokud studenti došli až k číselnému výsledku, byly ve většině případů schopni samostatně vyhodnotit, jestli jejich výsledek je správný, nebo ne. V některých případech jim to pomohlo odhalit vlastní chyby, v jiných se museli zeptat.

- **Kontrola správného mezivýsledku v j) (4).** Vzhledem k předchozím neúspěchům nebo nejistotě si čtyři studenti nechali zkontrolovat mezivýsledek v sekci j), který byl správný. Původní myšlenka byla, že studenti si sami ověří správnost svého výsledku porovnáním s chybovou hláškou z Úkolu 3. Úkol 4 byl ale pro některé příliš dlouhý a náročný, jak jsme ostatně ukázali na grafu 35. Kontrola mezivýsledku se v tomto případě ukázala jako časově efektivní strategie.

Typická otázka: „Mám to dobře?“

Odpověď: Kontrola podle postupu v sekci Periodické okrajové podmínky.

- **Zadání V_m v d) ve špatných jednotkách (3).** Domníváme se, že v některých případech tato událost nastala, jelikož si studenti pamatovali konstantu 22,4, aniž by řešili jednotky. V kombinaci s nepřechtením komentáře v kódu, kde je požadavek na zadání molárního objemu v $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$, toto vedlo k chybě. Při zadání hodnoty $V_m = 22,4 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ se objeví chybová hláška, se kterou by se studenti měli setkat až v sekci 3.2.g. Tato chybová hláška většinou studentům nepomohla v uvědomění si chyby v převodu.

Typická otázka: „Co mám blbě (v Úkolu 1)?“

Odpověď: „V jakých jednotkách zadáváte molární objem?“

- **Chyba v převodech jednotek V_m v j) (3).** Zde byl problém v převodu $1 \text{ cm}^{-3} \text{ mol}^{-1} = 10^{21} \text{ nm}^{-3} \text{ mol}^{-1}$. Některé studenty navíc překvapila samotná hodnota exponentu, i když ho měli dobře. Typická hodnota počtu částic N při použití špatného převodu jednotek je buďto řádově větší nebo menší než správný výsledek $N \approx 50$.

Typická otázka: „Tady mi to nevychází (výsledek úkolu 4).“

Odpověď: „V jakých jednotkách zadáváte molární objem?“

- **Neví, které V_m dosadit v j) (3).** Tato událost byla pravděpodobně způsobena, tím, že studenti si neuvědomili, co vlastně počítají a ztratili se ve

změti vzorečků. Automaticky pak dosazovali hodnotu $V_m = 22400 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$. V takovém případě jim měla vyjít hodnota $N \doteq 2$, což je podmínka, která je splněna v úkolu 1 a 2. Výpočet v sekci j) se ovšem týká úkolu 3, kde byl molární objem 30krát snížen.

Typická otázka: „Za molární objem mám dosazovat ideální plyn?“

Odpověď: „V tomto případě Vás zajímá případ z úkolu 3). Dosadte tu hodnotu, kterou jste dosadili, když jste dostali chybovou hlášku.“

- **Dosazení $\sigma = 1$ v j) (5).** Tato častá událost může mít více příčin. V některých případech se domníváme, že studenti interpretovali informaci, že σ je vnitřní jednotkou simulace tak, že ji mohou ignorovat. Jiným zdrojem této události je možnost, že informace $1 \sigma = 0,3632 \text{ nm}$ se studentům v hlavě přetransformovala na $\sigma = 1$. Uvedením této informace v sekci 3.2.h a nikoliv přímo v sekci 3.2.j jsme cílili na propojení informací a hlubší pochopení významu σ . V několika případech to ovšem vedlo k této chybě.

Na základě testování navrhuje z úlohy zcela vyřadit redukované jednotky ε a σ a hodnotu r_{cut} a graf Lennard-Jonesova uvést v SI jednotkách.

- **Doměnka, že N_{ef} je počet částic (4).** V tomto případě jde o poněkud nešťastné značení označení dvou rozdílných veličin stejným písmenem. Koncept efektivního počtu vzorků je nedostatečně vysvětlen, zejména není zjevné, že vzorkem myslíme zapsané pozorovatelné veličiny v jedné iteraci integračního algoritmu. Navrhujeme této miskoncepci předcházet přeznačením N_{ef} a zdůrazněním, že nejde o počet částic.
- **Změna textu na editor dvojklikem (3).** V Jupyter Notebooku se dvojkliknutím na text přejde do editoru textu v jazyce markdown. Tento editor je méně přehledný a má jiný vzhled než text, což studenty může zaskočit. Ačkoliv je v sekci 3.2.a explicitně uvedeno, jak lze editor přepnout na text, dva studenti přesto potřebovali pomoc.

Typická otázka: „Co jsem udělal/a špatně?“

Odpověď: „Přepnuli jste text na editor. Zpět na text se vrátíte stisknutím Ctrl + Enter.“

- **Problém se scrollováním při zapnuté vizualizaci (4).** Vizualizace simulace je implementovaná tak, že v každém novém snímku je znovu načten grafu vytvořený python knihovnou matplotlib. Jupyter Notebook má tendenci posouvat uživatele tam, kde vzniká nějaký nový výstup, což se ale při zapnuté vizualizaci děje neustále. Pokud se za této situace student pokusí scrollovat níže, může ho Jupyter Notebook vracet na vizualizaci. V některých případech se naopak studentovi podařilo doscrollovat pod simulační okno, ale pak se mu nedařilo dostat se zpět. Ve všech případech se však studenti nakonec dostatečně usilovným scrollováním zpět k simulacímu oknu dostali. Alternativní řešení je počkat na konec simulace nebo simulaci zastavit.
- **Neví, jak se vrátit do kmenové složky (4).** Orientace v adresáři v Jupyter Notebooku může pro některé uživatele být neintuitivní, jelikož v něm není žádné tlačítko, které by uživatele posunulo o jednu úroveň nahoru.

Lze to provést kliknutím na jméno složky, která je o jednu úroveň výše. Kliknutím na symbol souboru se člověk vrátí do kmenové složky, ze které byl soubor spuštěn. V ideálním případě by bylo vhodné Jupyter Notebook spouštět ze složky obsahující úlohu, aby se předešlo tomu, že se studenti ztratí.

Typická otázka: „Jak se dostanu do analyzuj výstupy? (Nachází se v pv-praktikum_outputs)“

Odpověď: „Kliknutím na python-md se vrátíte do kmenové složky a Jupyter Notebook analyzuj výstupy najdete tam.“

- **Nezobrazení p v analyzed observables (3).** Pokud mají studenti v Jupyter Notebooku otevřený soubor pv-praktikum_analyzed_observables.csv a přidají do něj pomocí statistické analýzy nové hodnoty, nezobrazí se v něm automaticky. Csv soubor je potřeba zavřít a znovu otevřít.

Typická otázka: „Co mám udělat, aby se promítl zbytek dat do csv?“

Odpověď: „Zkoušeli jste to vypnout a zase zapnout?“

- **Neví, jak vyvolat kód v d) (3).** Při prvním setkání s blokem kódu byli někteří studenti nejistí a potřebovali se ujistit, že postupují správně.

Typická otázka: „Jak mám spustit simulaci?“

Odpověď: „Klikněte kdekoli do kódu a stiskněte Ctrl + Enter.“

- **$\{V_m\} > 22400$ v o) (4).** Ačkoliv jsme v sekci 3.2.b zmínili, že odchylky od ideálního plynu se projevují za nižších molárních objemů, čtyři studenti při provádění simulací v sekci 3.2.o molární objem zvýšili nad hodnotu odpovídající laboratorním podmínkám. V těchto oblastech jsou simulace, Van der Waalova rovnice i rovnice ideálního plynu prakticky shodné a studenti se zde tedy nedozví nic zajímavého. I pokud by nasimulovali i menší molární objemy, požadavek na zahrnutí nadměrně vysokého molárního objemu do grafu izoterem povede k moc nízkému rozlišení. Bylo by žádoucí do kódu simulace implementovat mechanismus, který studenty na tento fakt upozorní.

- **Nerozmyslí si a a b v b) (5).** Otázku na interpretaci parametrů Van der Waalovy rovnice pět studentů přeskočilo. Zde lze jen těžko spekulovat, zda to bylo kvůli tomu, že se k otázce zapomněli po přečtení vrátit, kvůli tomu, že vůbec nevěděli, nebo to naopak považovali za triviální. Lze nicméně předpokládat, že vzhledem k tomu, že otázka není vyznačená jako úkol a neplyne z ní žádný výstup, studenti nepovažovali za nutné na odpovídat (a měli v jistém smyslu pravdu).

- **Nepřečte si ValueError v g) (4).** Důvodem této události bylo buď to, že studenti sice hledali v chybové hlášce, ale nehledali na jejím konci, jak radila otázka v úkolu 3, nebo ji zcela přeskočili. Syntaxe python chybových hlášek může být pro začátečníky poněkud složitá a nemusí být lehké v ní najít potřebné informace. V tomto ohledu je zde potenciál pro zpřehlednění, pokud by se kontrola splnění podmínky pro počet částic odehrávala v kódu blíže k vyvolání simulace, tedy nejlépe hned v rámci funkce parse_settings.

- **Nezapne periodické okrajové podmínky v d) (3).** Zde se domníváme, že přeskočení tohoto podúkolů je způsobeno nevhodným seřazením úkolů. Studenti po provedení první simulace měli tendenci pokračovat dále a zapomněli se vrátit k druhému podúkolů. Vylepšení by zahrnovalo očíslování dílčích úkolů a zařazení druhého úkolů až pod blok s kódem.
- **Neznalost písmen řecké abecedy (4).** U čtyř studentů se projevila neznalost písmen řecké abecedy σ , ε , případně znaku Σ pro sumaci. Neschopnost pojmenovat veličinu σ mohla přispět k miskoncepci $\sigma = 1$.

4.2.2 Chyby

Z identifikovaných 32 chyb bylo 19 jednoduše opravitelných. Protokol těchto chyb a jejich opravy jsou v tabulce 3.

Sekce	Chyba	Oprava
b	nižších	nižších
b	kde p je tlak, kde V_m	kde p je tlak, V_m
c	pozic a rychlostí částic	pozic částic
d	inter val	interval
f	Reálné plyny ale sestávají	Makroskopické systémy ale sestávají
g	částic zpět N na 5	částic N zpět na 5
h	Lennardův–Jonesův	Lennard-Jonesův
h	$U_{LJ}(r)$ potenciál	potenciál $U_{LJ}(r)$
h	položena rovna nule	položena rovná nule
i	potenciálu dostatečně velký	potenciálu moc velký
j	V praxi	V naší simulaci
j	boxu L , a molárním objemem	boxu L , molárním objemem
j	počet číselně	počet částic číselně
k	byl reálná doba trvání	byla reálná doba trvání
l	molární objem na V_m	molární objem V_m
l	stride_xyz = ,	stride_xyz = 0.3,
l	csv soubor ... tlaku	csv soubory ... tlaku
m	tomuto času	tomuto času
n	spust analýzu ... z modulu aaf	spust analýzu ... z modulu ana
p	V grafech, které ...	<i>V grafech, které ...</i>

Tabulka 3 Seznam provedených oprav chyb.

4.3 Nabyté poznatky

Abychom určili, jak přispívá vypracování úlohy studenty k nabytí poznatků o molekulových simulacích, analyzovali jsme odpovědi studentů na otázky 1 – 5 definované v sekci Rozhovor. V odpovědích na otázky jsme hledali klíčové koncepty, označené indexem ve sloupci očekávaná odpověď v tabulce 1. Do tabulky 4 jsme na základě analýzy přepisů rozhovorů (viz příloha A.4) zanesli počet výskytů daného konceptu v odpovědích účastníků testování.

Číslo	Koncept	Výskytů	Podíl
1.1	kvalitativně shoda sim s VdW	7	0,6
1.2	kvantitativně odlišnosti sim od VdW	5	0,4
1.3	vliv V_m (id/VdW vs sim)	8	0,7
1.4	vliv T (id/VdW vs sim)	6	0,5
2.1	síly pomocí potenciálu	1	0,1
2.2	počítačový program	3	0,3
2.3	časový vývoj	3	0,3
2.4	záznam veličin (tlaku)	5	0,4
3.1	levnější	7	0,6
3.2	rychlejší	7	0,6
3.3	jediný potřebný přístroj je počítač	6	0,5
4.1	velké systémy trvají dlouho	1	0,1
4.2	malé systémy mají arteakty	0	0,0
4.3	omezené meze platnosti	7	0,6
5.1	fluktuaace	2	0,2

Tabulka 4 Míra nabytí poznatků po vypracování úlohy. Vyjmenované koncepty vycházejí z didaktických cílů úlohy definovaných v sekci Stanovení didaktických cílů.

Sloupec „Podíl“ jsme vypočetli jako podíl počtu výskytů a počtu účastníků testování ($N = 12$). Pokud se koncept vyskytl u více než poloviny účastníků, považovali jsme úlohu za úspěšnou v zprostředkování tohoto konceptu. Jak ovšem bude širěji diskutováno v sekci Limitace metody testování, tato data nelze spolehlivě použít pro předpověď plnění didaktických cílů u cílové skupiny této úlohy. Lze na základě nich ovšem diskutovat silné a slabé stránky úlohy.

Za silnou stránku úlohy považujeme, že vede studenty k interpretaci výsledků simulace (koncepty 1.1 – 1.4) a umožňuje jim nahlédnout jak výhody simulace (koncepty 3.1 – 3.3), tak její omezené meze platnosti. Naopak slabými stránkami bylo vysvětlení principu molekulových simulací (koncepty 2.1 - 2.4), vysvětlení vlivu velikosti systému na simulaci (koncepty 4.1 a 4.2) důležitosti statistické analýzy (koncept 5.1).

Pokud jde o vysvětlení principu molekulových simulací, při zpětném pohledu domníváme se, že tento cíl byl poněkud ambiciózní. V porovnání s celosemestrálními kurzy zmíněnými v sekci Příklady zařazení simulací v konkrétních vzdělávacích kontextech je rozsah této úlohy velice omezený a nelze předpokládat, že studenti budou z této jedné zkušenosti schopni rozlišovat, jaké koncepty jsou stěžejní pro molekulové simulace obecně, a jaké jsou speciálním případem pro úzký okruh simulačních metod.

Nízký počet výskytů dalších zmíněných konceptů může být způsoben tím, že studenti tyto koncepty přijmali jen pasivně v rámci doplňkových textů úlohy, ale nemuseli je aktivně využít pro plnění úkolů.

4.4 Náměty na vylepšení úlohy

Z nejčastějších událostí zmíněných v sekci Problémy, otázky a miskoncepce a z rozsahu nabytých poznatků vyplynuly následující nápady na zlepšení úlohy:

- nepoužívat redukované jednotky σ a ε , hodnotu r_{cut} uvést v SI jednotkách;
- označit počet korelovaných vzorků n_{ef} napsat explicitně zmínit, že to je něco jiného, než počet částic;
- vytvořit „cheat sheet“ pro ovládání Jupyter Notebooku;
- v části d) zadat explicitně, ať studenti vypočítají V_m ze stavové rovnice;
- vytvořit kotvy v kódu skriptu simplemd, které studenty upozorní v případě, že překračují oblast, ve které by měli simulovat;
- ukázat studentům nástroj pro vykreslení izoterem ještě před úkolem 7 a definovat požadovaný rozsah molárních objemů podle přednastaveného rozsahu v grafu;
- očíslovat podúkoly a změnit pořadí tak, aby se minimalizovalo vrácení se v textu;
- snížit dosah potenciálu na $r_c = 4,5\sigma$, což by vedlo zhruba ke dvojnásobné rychlosti simulací.

Zpracování těchto změn nebylo součástí této práce, před zařazením úlohy do výuky nicméně budou ve vhodném rozsahu implementovány.

4.5 Limitace metody testování

Z testovaného vzorku, zpětné vazby účastníků testování a samotného metody testování plynou jistá omezení pro platnost našich závěrů.

Domníváme se, že zvolená výzkumná metoda souběžný think-aloud spolu se záznamem problémových událostí, dobře posloužila k identifikaci častých problematických konceptů (viz kapitola Problémy, otázky a miskoncepce) a umožnila sepsat Náměty na vylepšení úlohy. Data zjišťující rozsah nabytých poznatků ovšem nejsou zcela průkazná, a to z několika důvodů. K testování jsme oslovili studenty, u kterých jsme očekávali zájem o vzdělávání se v nových oblastech. Data budou pravděpodobně ovlivněna tímto výběrovým kritériem. Zkoumaný vzorek navíc ne zcela odpovídal cílové skupině práce. V některých případech jde o studenty, kterým chyběla část prerekvizit vyjmenovaných v sekci Očekávaná vstupní úroveň cílové skupiny, v jiných případech naopak šlo o studenty, kteří mají se simulace již předchozí zkušenosti, nebo o studenty, kteří v minulosti řešili podobnou úlohu v prostředí Jupyter Notebook.

Pro kvantitativní stanovení míry naplnění didaktických cílů navrhujeme provést navazující výzkum formou buďto post-testu podobně jako Braca; Kalman (2021), nebo ještě lépe kombinaci pre-testu a post-testu po vzoru Minshall; Yeziarski (2021), přičemž testové otázky budou uzavřené, jasně definované, a budou mít jednoznačnou správnou odpověď.

4.6 Verze úlohy po opravě chyb

PDF úlohy po opravě chyb je součástí příloh A.5, A.6 a A.7. Soubor obsahující úlohou ve formátu Jupyter Notebook, python skripty a všechny další soubory potřebné pro fungování úlohy jsou v příloze A.8.

Pro správné fungování simulací v úloze je potřeba mít nainstalovaný Jupyter Lab a následující knihovny pythonu: numpy, pandas, numba, os pathlib, matplotlib, pint a IPython.display.

Závěr

Molekulové simulace představují progresivní vědeckou metodu, která nachází stále více uplatnění ve vědě, např. při popisu chování plynů či biomolekul, a v některých případech může i nahradit reálný experiment. Z těchto a řady dalších důvodů je žádoucí rozvíjet kompetence studentů VŠ a univerzit v oblastech aplikací molekulových simulací, optimálně již v rámci jejich bakalářského studia. Proto jsme na základě aktuálních pedagogických přístupů vytvořili a otestovali novou úlohu do fyzikálně-chemického praktika, která může být zařazena do výuky jako první seznámení s molekulovými simulacemi pro studenty chemických bakalářských oborů.

Vytvořená úloha se zaměřuje na simulaci nadkritického argonu klasickou molekulovou dynamikou, přičemž argon je modelován Lennard-Jonesovým potenciálem s dosahem potenciálu $5,5\sigma$. Úloha je koncipovaná na 180 minut a zahrnuje 8 dílčích úkolů. Výstupním úkolem úlohy je naměřit dvě izotermy v rozsahu, kde simulace vykazuje odchylky jak od stavové rovnice ideálního plynu, tak od Van der Waalsovy rovnice.

Realizace v prostředí Jupyter Notebook umožnila kombinovat počítačový kód a psané instrukce. Pojetí úlohy vychází z konceptů badatelsky orientované výuky a scaffoldingu.

Po vytvoření úlohy jsme navrhli metody testování úlohy a položili jsme si následující výzkumné otázky:

1. Jakou dobu stráví studenti plněním jednotlivých sekcí úlohy?
2. Jaké nejčastější problémové události se vyskytují při plnění úlohy studenty?
3. Jak přispívá vypracování úlohy studenty k nabytí poznatků o molekulových simulacích?
4. Jak je možné úlohu vylepšit, aby byla časově efektivnější, předcházela častým problémovým událostem a lépe vedla k plnění didaktických cílů?

Odpovědi na tyto otázky poskytuje výstupní část. Zde zmíníme ty nejdůležitější závěry.

Ověřili jsme, že většina studentů je schopná vytvořenou úlohu splnit za 105 minut. S adekvátní pomocí instruktorů v praktiku by měli všichni studenti, dosahující očekávané vstupní úrovně pro praktikum z fyzikální chemie, mít možnost splnit úlohu za dobu 180 minut, což je maximální doba, kterou plnění může zabrat při implementaci do praktika z fyzikální chemie. Jako 9 nejčastějších problémových událostí při plnění úlohy jsme identifikovali: volbu počátečních parametrů, algebraické úpravy vztahů, nepochopení veličin, přeskokování obsahu, chybnou volbu molárního objemu, kontrolu mezivýsledku s instruktorem, ovládání Jupyter Notebooku, neznalost písmen řecké abecedy a převody jednotek. Identifikace těchto problémů vedla k následnému sestavení námětů na vylepšení úlohy, kam patří např. definovat požadovaný rozsah molárních objemů podle přednastaveného rozsahu v grafu, očíslovat podúkoly a snížit dosah potenciálu na $4,5\sigma$. Náměty na vylepšení budou před zařazením úlohy do výuky ve vhodném rozsahu implementovány.

Úloha vede studenty k interpretaci výsledků simulace a umožňuje jim nahlédnout jak výhody simulace, tak její omezené meze platnosti. Proto ji navrhuje

zařadit do výuky v rámci praktika z fyzikální chemie, případně do cvičení v rámci přednášky z fyzikální chemie.

V budoucnu bychom úlohu chtěli dále zkoumat v reálném výukovém kontextu, a to zejména z hlediska míry naplnění didaktických cílů. Pro lepší evaluaci výsledků studentů při vypracování úlohy bychom chtěli vytvořit vzorový protokol. Lepší orientaci v simulačním jádře simplemd by mohlo napomocť sespání přehledné dokumentace.

Literatura

1. KOLAFA, Jiří. *Molekulové modelování a simulace* [online]. 2023-05-22. [cit. 2024-03-15]. Dostupné z: <https://old.vscht.cz/fch/cz/pomucky/kolafa/molsim-disp.pdf>.
2. RAHMAN, A. Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon. *Physical Review* [online]. 1964, roč. 136, č. 2, A405–A411 [cit. 2024-05-23]. Dostupné z DOI: 10.1103/PhysRev.136.A405. Publisher: American Physical Society.
3. ALLEN, Michael P.; TILDESLEY, D. J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Oxford University Press, 1987. ISBN 0-19-855645-4.
4. ATKINS, Peter; PAULA, Julio De; KEELER, James. *Physical Chemistry* [online]. 12th ed. Oxford University Press, 2022 [cit. 2024-03-15]. ISBN 0-7167-8759-8. Dostupné z DOI: 10.1093/hesc/9780198847816.001.0001.
5. MALIJEVSKÝ, Anatol. *Lekce ze statistické termodynamiky* [online]. 2009. [cit. 2024-03-15]. Dostupné z: <https://ufch.vscht.cz/files/uzel/0014067/lekce.pdf?redirected>.
6. KÁCOVSKÝ, Petr. *Přednáška z termodynamiky a statistické fyziky*. 2023.
7. DVOŘÁK, Leoš. *Hamiltonovy rovnice - Teoretická mechanika* [online]. 2022. [cit. 2024-03-16]. Dostupné z: https://kdf.mff.cuni.cz/vyuka/Teoreticka_mechanika/TM_07_HamiltonovyRovnice_ver_01d.pdf.
8. KÁCOVSKÝ, Petr. *Kanonický soubor - Termodynamika a statistická fyzika* [online]. 2021. [cit. 2024-03-15]. Dostupné z: <https://kdf.mff.cuni.cz/vyuka/TaSF/SF-4-KanonickySoubor.pdf>.
9. RAPAPORT, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 1995. ISBN 0-521-44561-2.
10. KOLAFA, Jiří. *Metodika Simulace, Chyby*. *Molekulové modelování a simulace*. VŠCHT, 2024. Dostupné také z: <https://old.vscht.cz/fch/cz/pomucky/kolafa/simul06.pdf>.
11. JANKE, Wolfhard. *Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimation*. 10. vyd. John von Neumann Institute for Computing, 2002. ISBN 3-00-009057-6. Dostupné také z: https://www.physik.uni-leipzig.de/~janke/Paper/nic10_423_2002.pdf.
12. KOŠOVAN, Peter. *Fyzikální chemie I (a) - MC260P112*. 2023. Dostupné také z: <https://is.cuni.cz/studium/predmety/index.php?do=predmet&kod=MC260P112&skr=2023>.
13. KOLAFA, Jiří. *Simolant 02/2024. Molecular simulation in 2D*. 2024-04-28. Dostupné také z: <https://old.vscht.cz/fch/software/simolant/index-en.html>.
14. KOLAFA, Jiří. *Molekulové modelování a simulace*. 2024. Dostupné také z: <https://old.vscht.cz/fch/cz/pomucky/kolafa/N403027.html>.
15. ALLEN, Michael P. Educational aspects of molecular simulation. *Molecular Physics*. 2007, roč. 105, č. 2, s. 157–166. Dostupné z DOI: 10.1080/00268970601138721.

16. PRIGOZHIN, Maxim B.; SCOTT, Gregory E.; DENOS, Sharlene. Mechanical Modeling and Computer Simulation of Protein Folding. *Journal of Chemical Education*. 2014, roč. 91, č. 11, s. 1939–1942. Dostupné z DOI: 10.1021/ed400719c. _eprint: <https://doi.org/10.1021/ed400719c>.
17. SCHWEDLER, Stefanie; KALDEWEY, Marvin. Linking the submicroscopic and symbolic level in physical chemistry: how voluntary simulation-based learning activities foster first-year university students' conceptual understanding. *Chem. Educ. Res. Pract.* 2020, roč. 21, č. 4, s. 1132–1147. Dostupné z DOI: 10.1039/C9RP00211A. Publisher: The Royal Society of Chemistry.
18. CONSORTIUM, Concord. *Next-Generation Molecular Workbench*. 2017. Dostupné také z: <https://learn.concord.org/nextgen-molecular-workbench>.
19. HATI, Sanchita; BHATTACHARYYA, Sudeep. Incorporating modeling and simulations in undergraduate biophysical chemistry course to promote understanding of structure-dynamics-function relationships in proteins. *Biochemistry and Molecular Biology Education*. 2016, roč. 44, č. 2, s. 140–159. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1002/bmb.20942>. _eprint: <https://iubmb.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/bmb.20942>.
20. JEANMAIRET, Guillaume; LEVY, Nicolas; LEVESQUE, Maximilien; BORGIS, Daniel. Introduction to Classical Density Functional Theory by a Computational Experiment. *Journal of Chemical Education*. 2014, roč. 91, č. 12, s. 2112–2115. Dostupné z DOI: 10.1021/ed500049m.
21. PEDASTE, Margus; MÄEOTS, Mario; SIIMAN, Leo A.; JONG, Ton de; RIESEN, Siswa A. N. van; KAMP, Ellen T.; MANOLI, Constantinos C.; ZACHARIA, Zacharias C.; TSOURLIDAKI, Eleftheria. Phases of inquiry-based learning: Definitions and the inquiry cycle. *Educational Research Review* [online]. 2015, roč. 14, s. 47–61 [cit. 2024-01-02]. ISSN 1747-938X. Dostupné z DOI: 10.1016/j.edurev.2015.02.003.
22. SUN, Yanyan; YAN, Zhenping; WU, Bian. How differently designed guidance influences simulation-based inquiry learning in science education: A systematic review. *Journal of Computer Assisted Learning* [online]. 2022, vol. 38, no. 4, s. 960–976 [cit. 2023-12-02]. ISSN 1365-2729. Dostupné z: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/jcal.12667>. Publisher: John Wiley & Sons, Ltd.
23. LIN, Tzu-Chiang; HSU, Ying-Shao; LIN, Shu-Sheng; CHANGLAI, Maio-Li; YANG, Kun-Yuan; LAI, Ting-Ling. A REVIEW OF EMPIRICAL EVIDENCE ON SCAFFOLDING FOR SCIENCE EDUCATION. *International Journal of Science and Mathematics Education*. 2012, roč. 10, č. 2, s. 437–455. ISSN 1573-1774. Dostupné z DOI: 10.1007/s10763-011-9322-z.
24. ROSŮLKOVÁ, Monika. *Psycholog Lev Semjonovič Vygotskij* [online]. Hradec Králové, 2014 [cit. 2024-03-16]. Dostupné z: <https://theses.cz/id/nabz14/STAG86615.pdf>. Bakalářská práce. Univerzita Hradec Králové.

25. BRACA, Franco; KALMAN, Calvin. Comparison of laboratorials and traditional labs: The impacts of instructional scaffolding on the student experience and conceptual understanding. *Physical Review Physics Education Research*. 2021, roč. 17, s. 1–29. Dostupné z DOI: 10.1103/PhysRevPhysEducRes.17.010131.
26. PAUL, Ariel; PODOLEFSKY, Noah; PERKINS, Katherine. Guiding without feeling guided: Implicit scaffolding through interactive simulation design. In: [online]. Philadelphia, PA, USA, 2013, s. 302–305 [cit. 2023-11-08]. Dostupné z DOI: 10.1063/1.4789712.
27. MINSHALL, Brianna L.; YEZIERSKI, Ellen J. Data-driven activity reform: employing design research to improve scaffolding and concept development. *Chem. Educ. Res. Pract.* 2021, roč. 22, č. 1, s. 136–145. Dostupné z DOI: 10.1039/D0RP00157K. Publisher: The Royal Society of Chemistry.
28. GOODSON, Boyd M.; GE, Qingfeng; WANG, Lichang. Development and Implementation of a Two-Level Inquiry- and Project-Based Modular Approach to Teaching a Second-Semester Physical Chemistry Laboratory Course. *Journal of Chemical Education*. 2023, roč. 100, č. 5, s. 1885–1894. Dostupné z DOI: 10.1021/acs.jchemed.2c01225.
29. HUNNICUTT, Sally S.; GRUSHOW, Alexander; WHITNELL, Robert. Guided-Inquiry Experiments for Physical Chemistry: The POGIL-PCL Model. *Journal of Chemical Education*. 2015, roč. 92, č. 2, s. 262–268. Dostupné z DOI: 10.1021/ed5003916. _eprint: <https://doi.org/10.1021/ed5003916>.
30. KSICHT. *KSICHT ~ Korespondenční Seminář Inspirovaný Chemickou Tématikou*. [online]. 2024. [cit. 2024-05-08]. Dostupné z: <https://ksicht.natur.cuni.cz/>.
31. ALHADRETI, Obead; MAYHEW, Pam. Rethinking Thinking Aloud: A Comparison of Three Think-Aloud Protocols. In: *Proceedings of the 2018 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2018, s. 1–12. CHI '18. ISBN 978-1-4503-5620-6. Dostupné z DOI: 10.1145/3173574.3173618.
32. HUNTER, John; DALE, Darren; FIRING, Eric; DROETTBOOM, Michael. *Matplotlib - matplotlib.pyplot.boxplot*. 2012. Dostupné také z: https://matplotlib.org/stable/api/_as_gen/matplotlib.pyplot.boxplot.html.

Seznam obrázků

1	Generalizovaný kompresibilitní diagram pro vybrané plyny. Upraveno z (Atkins et al., 2022, s. 22).	10
2	Lennard-Jonesův potenciál a jeho části odpovídající Van der Waalsově atrakci a sterické repulzi.	15
3	Lennard-Jonesův potenciál s cutoffem 2.5σ . V grafu jsou též pro názornou představu zobrazeny atomy jako koule o průměru 1σ ve vzdálenosti odpovídající minimu potenciálu.	16
4	Ilustrace podmínky pro cutoff potenciálu v periodických okrajových podmínkách. Zvolení cutoffu částice D většího než polovina délky hrany boxu by vedlo k interakci s částicemi A, B a C dvakrát . . .	18
5	Ukázka grafického rozhraní programu Simolant (Kolafa, 2024). . .	21
6	Obecný rámec badatelsky orientované výuky. Přeloženo podle (Pedaste et al., 2015)	24
7	Myšlenková mapa zobrazující aspekty scaffoldingu. Upraveno podle Lin et al. (2012).	25
8	Porovnání nasimulovaných izoterem při podkritických a kritických teplotách, při hodnotě cutoffu potenciálu $r_c = 2.5\sigma$. Význam zkratek: id = stavová rovnice ideálního plynu, VdW = Van der Waalsova stavová rovnice, sim = simulace.	30
9	Porovnání nasimulovaných izoterem při různých teplotách pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c	31
10	Porovnání nasimulovaných izoterem při různých teplotách pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c . Dvojitě logaritmický výnos.	32
11	Generalizovaný kompresibilitní diagram simulačních dat a Van der Waalsovy rovnice pro různé hodnoty cutoffu potenciálu r_c	33
12	Závislost doby trvání simulace na počtu částic pro vybrané teploty, za použití dosahu potenciálu $r_c = 5,5\sigma$ a doby trvání simulace $t_{\max} = 500$. t_{tot} součet dob trvání všech zobrazených simulací provedených za dané teploty.	34
13	Závislost tlaku na počtu částic při teplotě 196 K a molárním objemu $7732 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$	34
14	Obsah části a.	37
15	Obsah části b.	37
16	Obsah části c.	37
17	Obsah části d.	38
18	Snímek vizualizace simulace v Úkolu 1.	39
19	Snímek vizualizace simulace v Úkolu 1 se zapnutou vizualizací periodických okrajových podmínek.	39
20	Obsah části e.	40
21	Obsah části f.	41
22	Obsah části g.	41
23	Obsah části h.	42
24	Obsah části i.	43
25	Obsah části j.	43

26	Obsah části k.	44
27	Obsah části l.	44
28	Obsah části m.	45
29	Obsah části n.	46
30	Příklad výstupu statistické analýzy	46
31	Obsah části o.	47
32	Obsah části p.	48
33	Obsah části q.	48
34	Čas započetí sekce zobrazený pomocí boxplot konvence. Oranžová čára uvnitř boxu představuje medián, box ohraničuje první až třetí kvartil. Úsečky vycházející z boxů označují nejvzdálenější bod spadající do 1,5násobku interkvartilního rozmezí. Modré křížky představují odhlehle hodnoty, které nespádají do 1,5násobku interkvartilního rozmezí.	52
35	Doba trvání sekcí zobrazená pomocí boxplot konvence.	53
36	Kategorizace nejčastějších událostí. Čísla v závorce představují počet účastníků testování, u kterých se tato událost vyskytla. . .	56

Seznam tabulek

1	Didaktické cíle úlohy. Horní indexy odpovídají konceptům bodovaným v rámci vyhodnocení (kapitola Nabyté poznatky).	36
2	Medián času započetí sekce a přibližná doba trvání sekce.	54
3	Seznam provedených oprav chyb.	60
4	Míra nabytí poznatků po vypracování úlohy. Vyjmenované koncepty vycházejí z didaktických cílů úlohy definovaných v sekci Stanovení didaktických cílů.	61

Seznam použitých zkratek

- LJ potenciál ... Lennardův–Jonesův potenciál
- ZPD ... zone of proximal development – zóna nejbližšího vývoje
- PřF UK ... Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
- VŠ ... vysoká škola
- id ... stavová rovnice ideálního plynu
- VdW ... Van der Waalsova stavová rovnice
- sim ... simulace
- simplemd (z anglického simple molecular dynamics – jednoduchá molekulová dynamika)
- per. okr. pod. ... periodické okrajové podmínky

A Přílohy

Přílohy A.1 – A.7 jsou ke stažení v SISu. Příloha A.8 je k dispozici na vyžádání od autora.

A.1 Časy započetí sekce

A.2 Přehled událostí

A.3 Kategorizace udalosti

A.4 Přepis rozhovorů

A.5 Úloha - simuluj-pv-praktikum-badatelsky

A.6 Úloha - analyzuj-vystupy-badatelsky

A.7 Úloha - vykresli-izotermy-badatelsky

A.8 simulace_pro_praktikum