



מכון ויצמן למדע

WEIZMANN INSTITUTE OF SCIENCE

Thesis for the degree  
Doctor of Philosophy

עבודת גמר (תזה) לתואר  
דוקטור לפילוסופיה

Submitted to the Scientific Council of the  
Weizmann Institute of Science  
Rehovot, Israel

מוגשת למועצה המדעית של  
מכון ויצמן למדע  
רחובות, ישראל

By  
Haim Edri

מאת  
חיים אדרי

מביאים את הנחות הפישוט לקדמת הבמה:  
פיתוח מבוסס מחקר של תכנית לימודים בפיסיקה חישובית בהקשרים כימיים וביולוגיים.

Bringing Simplification Assumptions to the Forefront in Chemical and  
Biological Physics: Research-Based Development of an Introductory  
Computational Science Curriculum.

Advisors:  
Prof. Edit Yerushalmi  
Prof. Bat-Sheva Eylon

מנחות:  
פרופ' עידית ירושלמי  
פרופ' בת-שבע אילון

July 2019

תמוז תשע"ט

## Abstract

In the world of contemporary research and technology, the boundaries between the disciplines have become blurred. For example, simplified models in physics are used to conceptualize phenomena in multi-particles systems that are of interest to chemistry, biology and material engineering and can be solved with analytical or numerical tools. However, the current high school science curriculum does not engage students in simplifying complex phenomena, nor does it equip them with the conceptual foundation and numerical tools they need to analyze phenomena in multi-particle systems. Thus, it fails to provide students who are interested in science and engineering with key pillars of their intellectual foundation that they are likely to need in their professional future. Central position papers have called for introductory level science curricula to better reflect the growing interest in contemporary science, interdisciplinary work, scientific modeling and computational tools.

The "Interdisciplinary Computational Science: Chemical and Biological Physics" (ICS) program developed as a collaboration between the Department of Science Teaching, the Department of Chemical and Biological Physics, and the Davidson Institute for Science Education in the Weizmann Institute for Science responded to this call. This novel three-year program (10<sup>th</sup> to 12<sup>th</sup> grade) is oriented toward capable motivated high school science students who are interested in interdisciplinary, project-based work. It takes place as a regional class at the Davidson Institute and at the University of Haifa (for the Arab sector), and grants matriculation credit for an advanced science course.

How can instruction help introductory level students construct physics-based models for phenomena involving multi-particle systems? A number of educational programs in the literature have addressed this challenge in the context of introductory courses in physics, some of which have been successfully implemented in several universities. These programs include an introductory statistical thermodynamics course, some even provide computational tools, but they do not emphasize the process of modeling, or in particular the simplification assumptions of complex phenomena in a multi-particle system such as structure formation in materials. The ICS program was based on these pioneering programs, in order to address the missing aspects.

This dissertation describes the design-based research accompanying the curricular design of the first unit of the ICS program, entitled "Particle Dynamics", that lasts one year (10<sup>th</sup> grade). The Particle Dynamics unit engages students in constructing a series of computational models intended to explain Brownian motion and diffusion. Analysis of the development in time of the particles' trajectories at different time scales serves to justify the shift from the Newtonian model of the particle motion in a vacuum (anchored in students' prior knowledge of Newton's laws) to a Random Walk model for colloidal particles in a solvent, with fine-grained and coarse grained-modeling. Instruction explicates the simplification methods, and challenges naive perceptions of simplification and modeling that are widespread among high school science students. The use

of computational tools allows the students to explore the behavior of “messy” phenomena in multi-particle systems that cannot be treated analytically.

The study consisted of both a formative evaluation of the curricular design leading to refinements of the curriculum during three consecutive cycles, as well as an investigation of the students’ perceptions of modeling that emerged as the result of their participation in the program. In particular, the ways in which the students integrated and differentiated the scientific principles of the discipline from the programming procedures, and their conceptions of the simplification assumptions were explored in the context of two-particle and multi-particle systems.

This dissertation makes a methodological and theoretical contribution to the study of students' conceptualizations of simplification assumptions in the modeling process. The methodological contribution includes a category system that was formulated to serve as an analysis tool, which specifies the extent in which students portray expert-like motivations for simplification and consider the components of simplification assumptions that are used by physicists. The theoretical contribution relates to the data analysis collected from the midterm exam, and to the two case-studies investigated in the context of students' final projects. The analysis characterizes students' perceptions which were shaped through their exposure to the Particle Dynamics unit combining knowledge in physics, programming and scientific modeling. The findings showed that at least half of the students developed rich and complex views of the simplification process: they perceived the goals of modeling in relation to the phenomena measured, discussed timescales to characterize models, and understood the key characteristics of coarse-grained modeling. These results suggest that interested and capable high school science students can develop expert-like simplification approaches to coarse-grained and fine-grained modeling.

## תקציר

בעולם המחקר והטכנולוגיה העכשוויים, הגבולות בין תחומי הדעת והמחקר הולכים ומיטשטשים. פיזיקה בפרט, משמשת לניתוח תופעות מורכבות במערכות מרובות חלקיקים הרלוונטיות לכימיה, ביולוגיה והנדסת חומרים, להמשגתן כמודלים מפורטים, ולחיזוי התנהגותן בכלים אנליטיים וחישוביים. מסמכי עמדה מרכזיים קוראים לשקף בצורה טובה יותר בתוכנית הלימודים של קורסי מבוא מדעיים, את העניין הגובר של מדע עכשווי בחיבור בין תחומי הדעת המדעיים, במידול מדעי, ובפרט במידול המשלב כלים חישוביים. כנגד, תוכנית הלימודים הנוכחית בבתי הספר התיכוניים אינה עוסקת בפישוט תופעות מורכבות, ואינה מציינת תלמידים בתשתית הידע המדעי ובכלים החישוביים הנחוצים לניתוח תופעות במערכות מרובות חלקיקים; ולפיכך, היא איננה מקנה לתלמידים המתעניינים במגוון תחומים מדעיים וטכנולוגיים את הבסיס האינטלקטואלי ללימודיהם ולעיסוקיהם המקצועיים בעתיד.

התוכנית החדשנית "מדע חישובי בינתחומי: פיסיקה כימית וביולוגית" (להלן, מ"ח בינתחומי) פותחה בשיתוף פעולה בין המחלקה להוראת המדעים, המחלקה לפיסיקה ביולוגית וכימית ומכון דוידסון לחינוך מדעי במכון ויצמן, במטרה לתת מענה לקריאות מסמכי העמדה. זוהי תוכנית תלת שנתית (י'-י"ב), המיועדת לתלמידי תיכון מוכשרים ומתעניינים, מתקיימת ככיתה על אזורית בקמפוס מכון דוידסון ברחובות ובאוניברסיטת חיפה (עבור המגזר הערבי), ומוכרת על ידי משרד החינוך כמקצוע מדעי המעניק 5 יחידות לימוד מדעיות. התוכנית משלבת הקנייה של התשתית המושגית הנחוצה לניתוח תופעות מורכבות במערכות מרובות חלקיקים במדע בינתחומי, ומשלבת עבודה פרויקטנטית הנותנת מענה לצורך של תלמידים אילו בבעלות ואוטונומיה בהתמודדות עם בעיות מורכבות. באופן מסורתי, מוצגת התשתית המושגית בקורסים מתקדמים לתואר ראשון ולתארים מתקדמים. האם וכיצד ניתן לעצב תכנית לימודים וסביבת למידה לקורס מבוא, שעניינו מידול פיסיקלי של תופעות מורכבות במערכות מרובות חלקיקים? בספרות מוכרות כמה תכניות לימוד שמטרתן לתת מענה לאתגר הזה, במסגרת קורסי מבוא בפיזיקה; אחדות מהן מופעלות בהצלחה במגוון אוניברסיטאות. תוכניות אלו מציגות רצף לימודי להוראת תרמודינמיקה סטטיסטית ברמת קורס מבוא, וחלקן אף מקנות כלים חישוביים; אלא שהן אינן מדגישות את תהליך הפישוט והמידול של תופעה מורכבת במערכת מרובת חלקיקים, ואינן מגיעות לניתוח היווצרות מבנים בחומרים. התוכנית מ"ח בינתחומי נבנתה על סמך תוכניות חלוץ אלו במטרה לתת מענה להיבטים החסרים.

עבודה זאת מתמקדת בעיצוב מבוסס מחקר של היחידה הראשונה בתוכנית מ"ח בינתחומי, הנקראת "דינמיקת חלקיקים", הנלמדת לאורך שנת לימודים אחת (כיתה י') ומתחשבת בידע המצומצם עימו מגיעים התלמידים מחטיבת הביניים. ביחידה זו תלמידים עוסקים בבניית סדרה של מודלים חישוביים עבור תנועה בראונית ודיפוזיה. ניתוח ההתפתחות בזמן של מסלולי חלקיקים מתבצע בסקלות מרחב וזמן שונות במידול גס ועדין (coarse-grained and fine-grained modeling). הנחות הפישוט בסקלות הזמן והמרחב השונות מסייעות להבהיר ולהצדיק את המעבר ממודל דטרמיניסטי לתנועת חלקיקים בריק (המתבסס על ידע מוקדם של תלמידים במכניקה ניוטונית), למודל אקראי עבור תנועת חלקיקים קולואידיים בממס. מהלך ההוראה מחזין את שלב הפישוט בבניית המודלים, ומאתגר תפיסות נאיביות של תלמידים לגבי מודלים מדעיים. השימוש בכלים חישוביים מאפשר לתלמידי תיכון לחקור את התנהגותן של תופעות במערכות מרובות חלקיקים, ולבנות עבורן מודלים חישוביים בכוחות עצמם, שכן מידול אנליטי של תופעות מורכבות כאלה מצריך ידע מתמטי מתקדם, שאינו בהישג ידם.

המחקר המוצג בעבודה זו מורכב משני חלקים: החלק הראשון מתמקד בהערכה מעצבת, שליוותה את פיתוח תכנית הלימודים, במספר גרסאות שלוטשו במהלך שלושה מחזורי הפעלה. החלק השני כולל מחקר עיצובי, הבוחן את תפיסות התלמידים לגבי מידול מדעי שנוצרו במהלך האינטראקציה שלהם עם הגרסה המגובשת של תוכנית הלימודים. המחקר חושף כיצד תלמידים מבחינים בין ההליך החישובי, העקרונות הפיסיקליים, וההמשגה האפיסטמית (בפרט הנחות פישוט), בהקשר של מערכות של שני חלקיקים ומערכות מרובות חלקיקים.

למחקר תרומה מתודולוגית ותיאורטית. התרומה המתודולוגית כוללת מערכת של קטגוריות שפותחה בהתאם לתפישות מומחים ושיכולה לשמש כלי לניתוח של: סוגי מוטיבציות להנחות פישוט; מרכיבי הנחות הפישוט; ופישוט הליך הפתרון. התרומה התיאורטית מתייחסת לניתוח נתונים שנאספו באמצעות מבחן אמצע וראיונות עם תלמידים על פרויקט הגמר שלהם. הניתוח מאפיין את תפישות התלמידים ובוחר את האופן שבו הם מתייחסים להנחות הפישוט ומשתמשים בהן, לאחר שלמדו במהלך השנה תכנים המשלבים ידע פיזיקלי, תכנות ומידול מדעי. הממצאים מראים שלפחות חצי מהתלמידים שהשתתפו בתוכנית הצליחו בסוף השנה לפתח תמונה עשירה ומורכבת של הליך הפישוט הכוללת המשגה של מטרות המידול ביחס לתופעה; שימוש בסקלות זמן בכדי לאפיין את המודלים; והבנה של המאפיינים המרכזים במידול גס ועדין. מחקר זה מצביע על כך שתלמידי תיכון מוכשרים המתעניינים במדעים, יכולים לפתח תפישות של פישוט המתקרבות לאלה של מומחים, הכוללות תפישה של מידול גס ועדין.