

Computational thinking (CT- ajattelu) ja kemian opetus – CASE Lukion kemian kurssi KE3: Molekyylit ja mallit

1. Computational thinking – CT-ajattelu

1.1. Johdanto – CT-ajattelun käytön perustelu

Kemian opetuksessa on viime vuosikymmenen aikana tutkittu ja kehitetty uusia lähestymistapoja, pedagogisia innovaatioita sekä hyödynnetty yhä laajemmin tieto- ja viestintätekniiikan (digitalisaation, systemaattisen ajattelun) mukanaan tuomia ohjelmistoja ja toimintamalleja (mallintaminen, käsitekartta työskentely). Näitä voi lähestyä esimerkiksi oheisen kuvan mukaan luokitellen niitä pedagogisiin, kognitiivisiin ja metakognitiivisiin työkaluihin

Valinnat erilaisten työkalujen osalta tapahtuu joko tietoisina pedagogisina ja didaktisina valintoina (suunnitelmalliset lähtökohdat) tai vaistomaisina ehkä oppikirjoista poimittuina valintoina. Näiden työkalujen käyttämisen tueksi on hahmoteltu tiedekäytäntölähtöistä opetuksen ja oppimisen mallia ja nyt CT-ajatteluun pohjautuvaa pedagogista innovaatiota.



Kuva 1: Kemian opetuksen kokonaisuus

Computational thinking (CT-ajattelu) -lähestymistapaa on tutkittu verraten paljon ohjelmoinnin ja koodaamisen sekä matematiikan yhteydessä. Mutta kemian ja fysiikan opetuksessa ja oppimisessa CT-ajattelua on tutkittu vähemmän (muutama viite), vaikka näissä oppiaineissa on samantapaisia ajatteluprosesseja, kuten kokonaisuuden jakaminen osiin ja säännönmukaisuuden tunnistaminen, kuin matematiikassa ja ohjelmoinnissa. Siksi on tärkeää tutkia CT-ajattelua fysiikan ja kemian opetuksen yhteydessä. Suomessa ei ole suoraa ja täsmällistä vastinetta termille "computational thinking", mikä pakottaa avaamaan käsitteen sisältöä.

MaSCoT-hankkeessa on tehty systemaattista kirjallisuuskatsausta CT-ajattelusta matematiikan, fysiikan ja kemian opetuksen kontekstissa. Tässä artikkelissa jaetaan CT-ajattelun Shuten (Shute 2017, 2022) laatiman jaottelun mukaan CT-fasetteihin.

Taulukko 1: Fasetit, määritelmät ja esimerkit

Fasetti	Määritelmä	Esimerkki
Ongelman/asioiden jakaminen osiin	Ongelman/asioiden jakaminen osiin	Rakenneosien tunnistaminen
Kaavojen ja trendien tunnistaminen	Samankaltaisuuksien, johdonmukaisuuksien löytäminen	Jaksollinen järjestelmä, funktionaaliset ryhmät
Abstraktio, epäolennaisten yksityiskohtien sivuuttaminen	Monimutkaisten järjestelmien kuvaaminen, niiden mallintaminen	Reaktiotyypit
Algoritmien suunnittelu Looginen ajattelu	Väitteiden tai selitysten tukemiseen tai kumoamiseen. Selkeitä, rationaalisia ajatteluprosesseja	Prosessit, kemialliset analyysit
Yleistäminen ja siirto	Tietojen soveltaminen uusissa tilanteissa	Yhdisteluokkien määrittäminen
Iteraatio Virheenkorjaus ja virheiden korjaaminen	Samankaltaisten tehtävien toistaminen rutiinin ja paremman prosessin aikaansaamiseksi	Synteessien kehittäminen

CT-ajattelu on lähestymistapa ongelmien ratkaisemiseen, esim. monimutkaisten ongelmien jakaminen pienempiin ja hallittavampiin osiin, samankaltaisuuksien tai toistuvien asioiden tunnistaminen, algoritmien (toimintaohjeiden) ja loogisten vaiheiden suunnittelu, laskennallisten työkalujen ja tekniikoiden käyttö mallintamisessa, ongelmien ja tiedon analysoinnissa, luokittelussa ja ymmärtämisessä.

1.2. CT-ajattelu ja laskennallinen kemia

Kemiassa CT-ajattelu on yhteydessä **laskennalliseen kemiaan** (Computational Chemistry), jossa käytetään tietokonesimulaatioita, algoritmeja ja mallinnustekniikoita molekyylien, materiaalien ja kemiallisten reaktioiden ominaisuuksien ja käyttäytymisen selittämiseen ja mallintamiseen. CT-ajattelu on yhteydessä myös **keminformatiikkaan** (Cheminformatics), joka yhdistää laskennalliset menetelmät, tietotekniikan sekä kemiallisen tiedon ja käsittelyn.

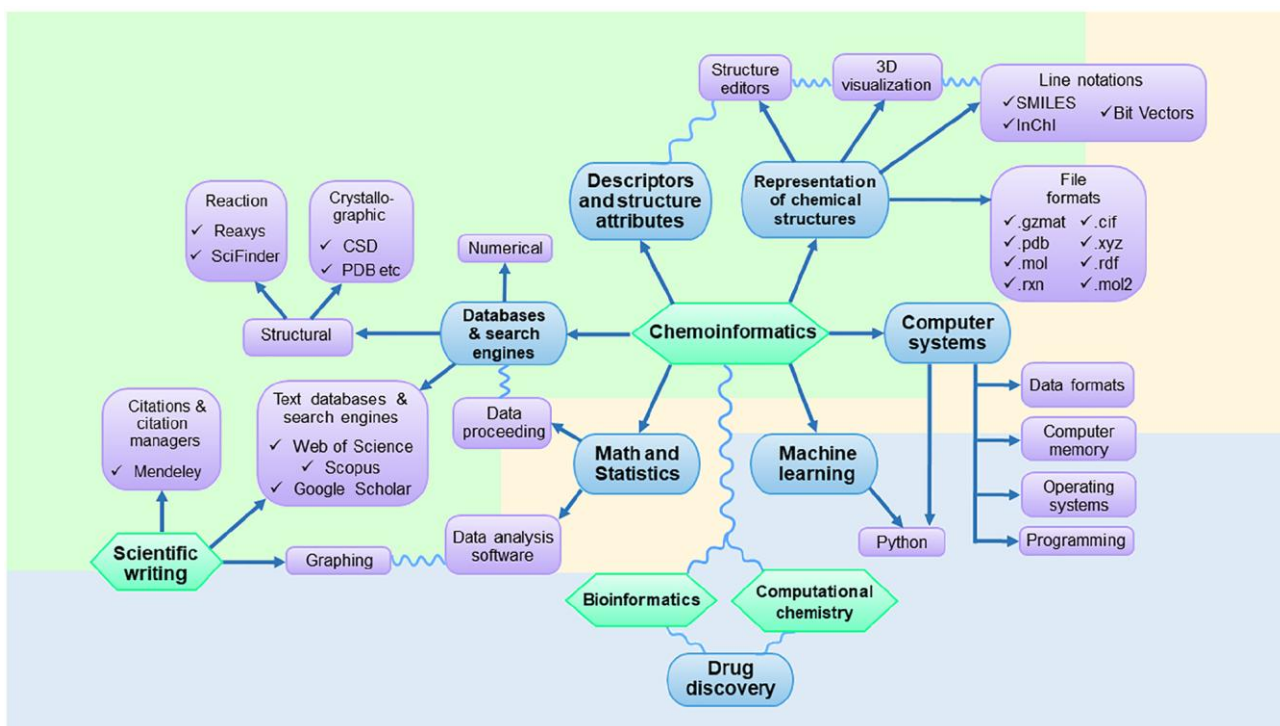
Lukion kemian opetuksessa CT-ajattelu tarjoaa uusia lähestymistapoja ja työkaluja lukion kemian opetukseen, mittaamiseen ja mittaustulosten käsittelyyn, käsitteiden ja mallien ymmärtämisen ja käsitteiden keskinäisten yhteyksien hahmottamisen välineitä. CT-ajattelulla voidaan tukea, kokeellisessa työskentelyssä saatujen havaintojen ja datan käsittelyssä sekä submikroskooppisen maailman mallintamisessa esim. MarvinSketch-ohjelman avulla.

1.3. Kirjallisuuskatsaus käsitteistä

Laskennallinen kemia on tärkeä työkalu fysikaalisessa kemiassa. Kemiallisten ilmiöiden mallintamista ja ymmärtämistä vaikeuttaa reaktioiden nopeus, erilaisten reaktiomekanismien tunnistamisen vaikeus ja erilaisten rakenneosasten pieni nanometriluokan koko. Näiden

mallintamisessa hyödynnetään matemaattisia menetelmiä ja 2D/3D-mallinnusta aineen rakenneosien (molekyylien, ionien tai atomien em. välisten vuorovaikutuksien) sekä reaktioiden kuvaamiseen.

Keminformatiikka termi "otettiin käyttöön vasta 1990-luvulla ensimmäisten kemian, tietokonepohjaista laskentaa, informaatiotutkimusta ja lääkeainetutkimusta yhdistävien projektien yhteydessä" (Wild 2012). Wild omassa kirjassaan käyttää käsitteestä määritelmää: "Keminformatiikka on tutkimusala, jossa tutkitaan kaikkea tietokoneilla esitettävää ja prosessoitavaa kemiallista ja kemiaan liittyvää biologista informaatiota". Tämä määritelmä sitoo tutkimusalaan laskennallisen kemian, molekyylihallinnuksen ja tietokoneavusteinen lääkesuunnittelun (Wild 2012). Seuraava kuva (kuva 1) kokoaa kaikki ulottuvuudet, joita voidaan keminformatiikkaan liittää.



Kuva 2: Keminformatiikan jäsentely (Kadtsyba 2022),

Wild esittelee kirjassaan laajasti keminformatiikan historiaa ja kehityspolkuja. Erilaisten esitystapojen (SMILES, InChI), tiedostomuotojen (MOL, CML) kirjo kertoo osaltaan molekyylihallinnuksen monimutkaisuuden puhumattakaan orgaanisen kemian reaktioiden kuvaamisesta.

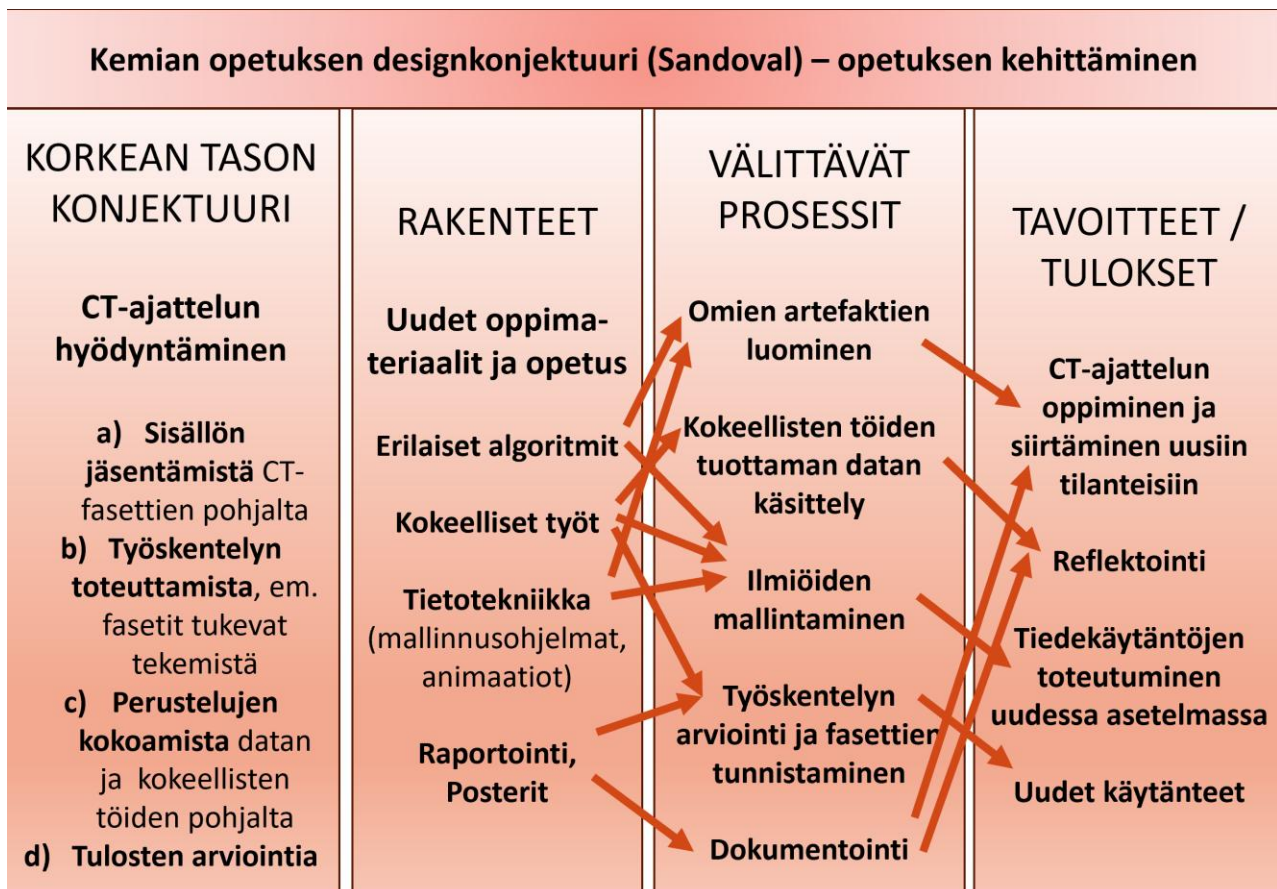
Ohjelmointi lukion kemian opetuksessa näyttäytyy välillisesti mm. molekyylihallinnusohjelmien käytön kautta. Lukiossa käytössä olevan MarvinSketch-ohjelman taustalla on laaja ohjelmointityö, johon on yhdistetty tietokantoja (dataa) sekä erilaisten aineiden ja aineen rakenneosien ominaisuuksia. MarvinSketch-ohjelman käyttöä ja mahdollisuuksia lukion kemian opetuksessa on esitelty MarvinSketch -oppikirjoissa (Myllyviita 2019; MarvinSketch 2022). Ohjelmointiin ja tietotekniikkaan vihkiytyneet opettajat ovat hyödyntäneet JavaScriptiä integroimalla Jsmol-ympäristöä omille verkkosivuille (vrt. EduMol, HTML5). Tämä on mahdollistanut omien oppimateriaalien tuottamisen molekyylihallinnukseen. Javascriptin (selainohjelmien ohjelmointikieli) laajempi käyttö mahdollistaa verkkosivustoilla erilaisten toimintojen (sivuston taiton, laskennan, yms.) hyödyntämisen.

Tieto- ja viestintäteknikkaa voi hyödyntää monella tapaa ja monella tasolla. Tieto- ja viestintäteknikan paikkaa pedagogisessa ajattelussa ja opetuksessa on kuvattu mm. TPACK- ja SARM-mallien avulla. TPACK-malli hahmottaa asiaa Shulmannin PCK-lähestymistapaa soveltaen ja SARM-malli taas teknologian käyttöönottoa opetuksen muutoksen näkökulmasta. CT-ajattelu antaa vielä hieman erilaisen lähestymistavan itse kemian opetuksen sisällön opettamiseen (didaktinen ulottuvuus).

1.4. Tutkimuksen metodologinen asetelma

Tässä artikkelissa lähestytään yhtä tutkimuksen tapausta kehittämistutkimuksen viitekehyksessä. Kehittämistutkimuksessa kehitetään uusia toimintamalleja, luodaan uudenlaisia artefakteja (esim. oppimisaihioita, pedagogisia valintoja) opetuksen tai opiskelun tueksi (Juuti & Lavonen, 2006). Samalla luodaan uusia tutkimuksen kannalta kiinnostavia ilmiöitä, jota on kiinnostavaa ja tarkoituksenmukaista tutkia, yhdistetään käytäntöä tutkimukseen.

Oppimisen ja oppimisympäristöjen (opiskeluympäristöjen) kehittämistä ja koko prosessia voidaan kuvata ns. Sandovalin (2014) oletuskartoituksen (Conjecture Mapping.) avulla. Kuvassa 7 kuvataan kehittämistutkimuksessa esille nousevia kehittämisideoita ja -lähtökohtia. Tavoitteena on uuden lähestymistavan kehittäminen ja tutkiminen. Tähtäämme ulko-opettelun sijaan ilmiöiden, käsitteiden ja prosessien ymmärtämiseen ja lähestymistapojen käyttämiseen uusissa tilanteissa.



Kuva 3: Sandovalin oletuskartoitus kemian opetuksen kehittämisestä

Tämän artikkelin tavoitteena on **selfstudy -lähestymistapaa** hyödyntäen koota opettajalle opetuksen suunnittelussa eteen tulevia vaiheita ja dokumentoida niitä havaintoja, joita tässä kohdataan.

Selfstudy keskittyy opettajankouluttajien käytännön tiedon hankkimiseen ja kehittämiseen sekä siihen, miten tämä tieto voi antaa tietoa ja tehostaa opetukseen liittyvää oppimista ja opetusta. Opetettavan aineksen kehittämisprosessi lähtee liikkeelle opettajankouluttajan kyvystä ja halukkuudesta julkisesti problematisoida itsestänselvyytenä pitämiään uskomuksia ja käytäntöjä opettamisesta ja oppimisesta sekä aktiivisesti etsiä vaihtoehtoisia näkökulmia kemian opetuksen käytäntöön.

1.5. Tutkimuskysymykset

Tutkimuksessa pyritään löytämään CT-ajattelun paikka kemian opetuksessa, miten edellä pohdiskeltu ja esitelty näkemys CT:stä kemian opetuksessa saadaan läpinäkyväksi (jolloin se voisi olla siirrettävissä uusiin oppimistilanteisiin) ja miten opettaja voi hyödyntää sitä oman opetuksensa jäsentämisessä ("punainen langan" hahmottaminen). Seuraavissa kahdessa kappaleessa kuvataan opettajan valmistautumista sisällön kemian aineenhallinnan osalta, CT:n ammentamista opetussuunnitelmasta ja yhdistämistä nykyaikaiseen tiedekäytäntölähtöiseen kemian opetukseen.

Tämä tutkimusprojekti käsittelee ja hakee vastauksia seuraaviin tutkimuskysymyksiin:

1. Miten kemian opetuksen sisällöt ja lähestymistavat muuttuvat CT-ajattelun avulla?
2. Miten CT-ajattelu käytännössä muuttaa opetusta sekä sisältöjen ja käsitteiden käsittelytapoja?

2. CT-ajattelun soveltamisesta kemian opetuksessa

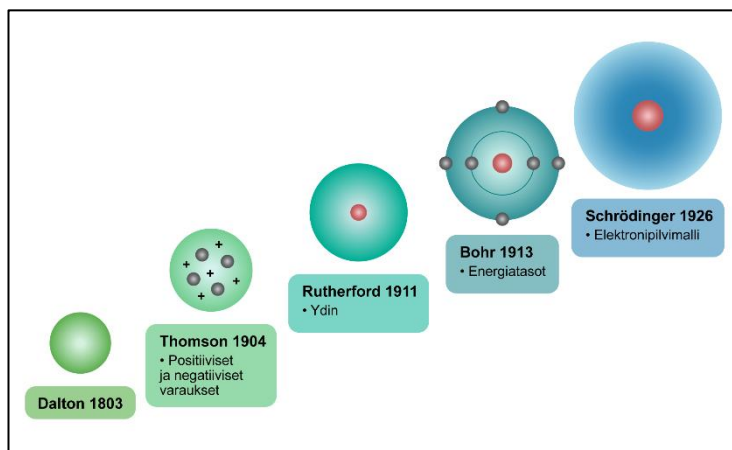
2.1. CT-ajattelu kemian ymmärtämisessä

CT-ajattelun soveltaminen eri kemian osa-alueisiin ja käsitteisiin avaa niiden

1. historiaa (iterointiprosessi, jossa esimerkiksi atomimallit kehittyvät),
2. suhdetta toisiinsa ja kokonaisuuteen (yleistäminen, jossa rakenneosat muodostavat molekyyliä) sekä
3. kemiallisten ilmiöiden, reaktioiden ja havaintojen ymmärtämistä ja selittämistä.

Tässä artikkelissa hahmotetaan tutkimusasetelmaa ja määritetään CT-ajatteluun perustuvaa toimintaympäristöä.

Atomimallien historia on yksi esimerkki CT-ajattelun eri fasettien käytöstä. Ymmärtääksemme atomin rakennetta, eri alkuaineiden ominaisuuksia ja käyttäytymistä niitä kuvaavat mallit on rakennettu selittämään ilmiöitä ja aineisiin liittyviä ominaisuuksia. Itse atomimallien historia on mallien kehittämistä entistä paremmin selittämään ilmiöitä ja ennustamaan aineen käyttäytymistä. (**iterointi**)



Kuva 4: Atomimallien historiaa

1. Atomien rakenteen ymmärtäminen alkaa sellaisten mallien tarkastelulla, jossa korostuvat atomin rakenneosat (atomin **jakaminen osiin**: protonit, neutronit ja elektronit) ja elektronien asettumista eri energiatasolle (elektronijakaumakaaviot).
2. Elektronikonfiguraatioiden tuottaminen ja tunnistaminen sekä kemiallisten ominaisuuksien ennustaminen atomin elektronirakenteen perusteella (**säännön mukaisuuksien tunnistaminen**) mm. Hundin sääntöä soveltaen.
3. Atomien monimutkaisten vuorovaikutusten kuvaaminen yksinkertaisella mallilla, kuten Bohrin mallilla kvanttimekaanisen mallin asemasta auttaa ymmärtämään joitakin alkuaineiden ominaisuuksia ja käyttäytymistä erilaisissa reaktioissa (**abstraktio, asioiden yksinkertaistaminen**).
4. Algoritmien tai simulaatioiden luominen elektronien käyttäytymisen, sidosten ja reaktioiden mallintamiseen (**algoritmien ajattelu**).
Tietojen esittäminen ja käsittely: Atomitietojen esittäminen rakenteellisessa muodossa laskennallista analyysiä varten (esim. käyttämällä taulukoita tai matriiseja elektronikonfiguraatioiden esittämiseen).

Kemiallisten reaktioiden (tässä orgaanisen kemian) opiskelua tuetaan tukeutumalla CT-ajatteluun seuraavilla tavoilla:

1. Reaktioiden ja tuotteiden tunnistaminen ja luokittelu reaktiossa. Reaktio voidaan jakaa yksittäisiin vaiheisiin (reaktiomekanismit, joita ei lukion opetussuunnitelma kylläkään edellytä) tai reaktiityyppeihin, kuten nukleofiilisiin tai elektrofiilisiin reaktioihin, protoninsiirtoreaktioihin tai sidosten muodostumiseen ja katkeamiseen, additio-, eliminaatio-, substituutioreaktioihin (**osiin jakaminen**).
2. Erilaisten funktionaalisten ryhmien ja niiden ominaisuuksien ja reaktioiden tunnistaminen, kuten alkoholit, karboksyylihapot, ketonit (**säännönmukaisuuksien tunnistaminen**).
3. Elektronegatiivisuuden, substituenttien asettuminen ja määrän vaikutus (steerinen este) reaktiivisuuteen ja reaktiopolkuihin (**abstraktio, asioiden yksinkertaistaminen**).
4. Algoritmien rakentaminen orgaanisten reaktioiden tuotteiden ennustamiseen perustuen reaktion lähtöaineisiin ja olosuhteisiin, reaktiopolkujen kartoittamiseen ja todennäköisimmän polun tunnistamiseen (**algoritmien ajattelu**).
5. Molekyyliden mallinnusohjelmistojen käyttö molekyylien visualisointiin ja tuotteiden rakenteen ennustamiseen (**ohjelmointi**). Laskelmien ja datan käyttö reaktiovaiheiden ja siirtymätilojen energioiden määrittämiseen.

CT-ajattelun soveltaminen auttaa, kuten seuraavista esimerkeistä käy ilmi, kehittämään rakenteellisia ja analyttisiä lähestymistapoja opettaa seuraavia kemian keskeisiä käsitteitä,

malleja ja periaatteita siten, että opittua tietoa käsitteistä, malleista ja periaatteista voidaan entistä paremmin käyttää kemian alan ongelmien ratkaisemisessa:

- atomimallit ja jaksollinen järjestelmä
- kemialliset sidokset.
- hybridisaatio.
- erottelumenetelmät ja niiden valinta sekä optimoiminen orgaanisen ja epäorgaanisen kemian reaktiot reaktioiden lopputulosten ennustaminen sekä uusien yhdisteiden suunnittelu.

Tämän tutkimuksen ja artikkelien yhtenä tarkoituksena on kuvata opettajan näkökulmasta sitä prosessia, miten tuntien suunnittelussa ja toteutuksessa huomioidaan CT-ajattelun ja erilaiset fasetit.

2.2. CT-ajattelu ja opetussuunnitelma

Kemian opetuksessa on tärkeää oppia käsitteitä, symboleja (kemian kieli) ja periaatteita niin, että niitä voidaan käyttää kysymysten esittämiseen ja kokeiden suunnitteluun, aineistojen käsittelyyn ja mallien rakentamiseen, sekä ilmiöiden tunnistamiseen ja lopuksi myös ongelmien ratkaisemiseen. Opetussuunnitelman perusteissa (Opetushallitus 2019) todetaan useita seikkoja, jotka ovat CT-ajattelun suuntaisia, mutta eri tavalla jäsennettyjä.

On tärkeää painottaa ainekohtaista osaamista jo yläkoulun opetuksessa siksi, että erilaisten virhekäsitysten muodostumisia ja pinnallista ilmiöiden tulkintaa saadaan vähennettyä. Kuten tieteessä yleensä tapahtuu, uusi tutkimustieto selittää asioita paremmin ja tarkemmin, joskus aivan uudella tavalla. Tästä on hyvänä esimerkkinä atomimallin kehitys ja sen opetus. Oppiaineen pinnallinen osaaminen saattaa hyvinkin jättää atomin rakenteen ymmärtämisen Bohrin planeettamallin tasolle, kun lukiossa kemian reaktioiden ja ominaisuuksien ymmärtämiseksi on hallittava kvanttimekaanisen atomimallin mukainen lähestymistapa.

MaSCoT-hanke on mahdollistanut kemian opetuksen kehittämisen, siten että opiskelijoita voidaan ohjata tukeutumaan CT-ajatteluun, kun he esittävät kysymyksiä ja suunnittelevat kokeita, tulkitsevat aineistoja ja rakentavat ilmiötä tai ainetta kuvaavaa mallia, tai tunnistavat ilmiötä tai ratkaisevat ongelmia tukeutumalla ilmiötä tai ainetta kuvaavaan malliin. Toki kemiassa CT-ajattelu on ollut jo pitkään käytäntö, kuten aiemmin on todettu. CT-ajattelu sopii hyvin seuraavien mallien tarkasteluun, rakentamiseen ja käyttöön: jaksollinen järjestelmä, sähkökemiallinen jännitesarja, funktionaaliset ryhmät, erilaisten kemiallisten reaktioiden tyypittely, spektritietokannat. Toki näitä malleja tarkastellaan, rakennetaan ja käytetään, mutta CT-fasettien käytön korostaminen tekee tarkastelun, rakentelun ja käytön läpinäkyvämmäksi ja ymmärrettävämmäksi. CT-fasettien käyttö auttaa nimenomaan ymmärtämistä ja vähentää ulkoa opiskelun tarvetta. CT-ajattelu tarjoaa siten uudentyyppisiä työkaluja opetukseen ja opiskeluun – ei vain kemiallisten ilmiöiden ja käsitteiden tai mallien käsittelyyn – vaan se pyrkii myös avaamaan ja tuomaan läpinäkyväksi kemian rakenteen ja sen tavan jäsentää maailmaa, kuten alkuaineita, molekyyliä ja yhdisteitä, niiden ominaisuuksia ja reaktioita sekä kemian erilaisia ilmiöitä.

Tavoitteet ja taidot ohjaavat käyttämään opetuksessa erilaisia tiedekäytäntöjä (kts. seuraava kappale) ja CT-ajattelun fasetteja. Mm.

1. ”*Opiskelijan aikaisemmista kokemuksista ja havainnoista edetään ilmiöiden kuvaamiseen ja selittämiseen sekä aineen rakenteen ja kemiallisten reaktioiden mallintamiseen kemian merkkikielellä ja matemaattisesti*” (abstraktio, yksinkertaistaminen).

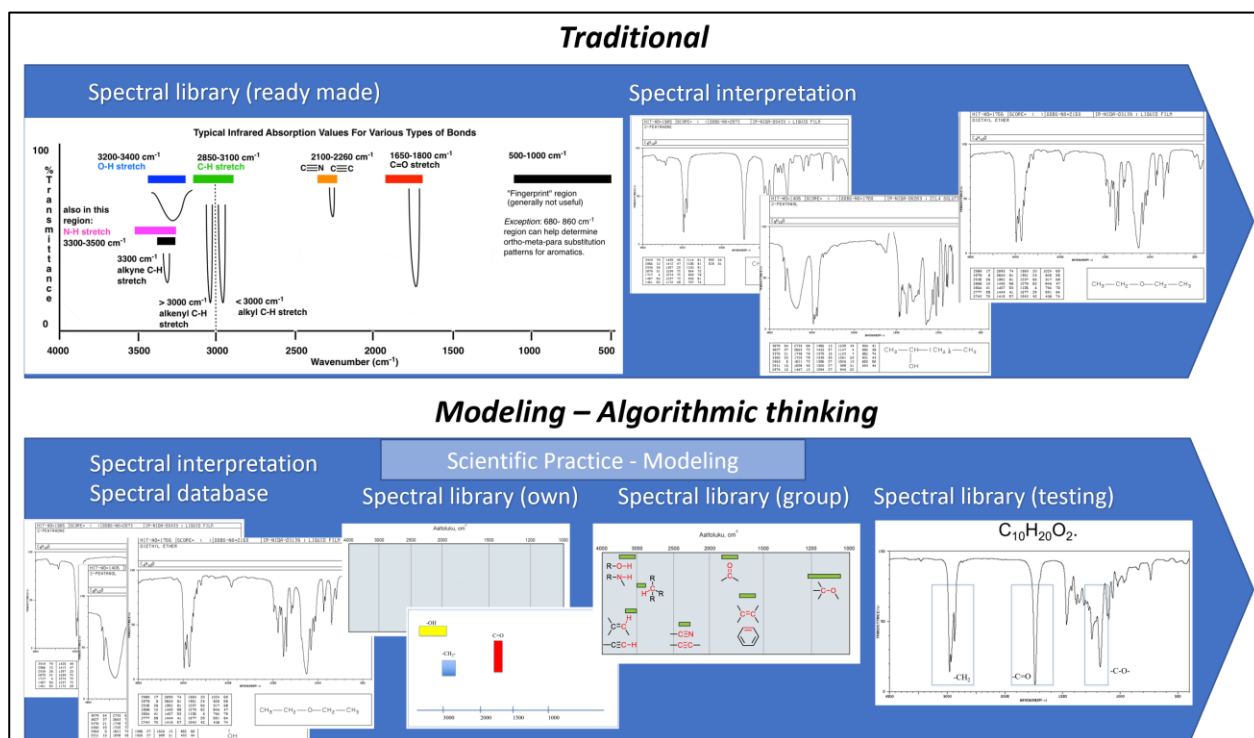
2. "Kehitetään opiskelijan käsitteellistä ja menetelmällistä osaamista. Opetuksen keskeisiin lähtökohtiin kuuluu havainnointi ja tutkiminen (algoritminen ajattelu).
3. Kokeellisuus eri muodoissaan tukee käsitteiden omaksumista ja ymmärtämistä, tutkimisen taitojen oppimista ja luonnontieteiden luonteen hahmottamista. Opiskelun edetessä tutkimisen taidot kehittyvät sekä kokonaisvaltaisesti että kunkin moduulin keskeisten sisältöjen osalta (yleistäminen).
4. "Mittaaminen, luokittelu ja muut tutkimisen taidot kehittyvät erilaisten menetelmien harjoittelun kautta." (kuvioiden ja säännönmukaisuuksien tunnistaminen)
5. "Myös opiskelijan tiedon käsittelyn ja esittämisen taidot karttuvat. Kokeellisen työn taidot etenevät kohti oman tutkimuksen suunnittelua. Samalla opiskelija oppii tekemään johtopäätöksiä sekä arvioimaan ja argumentoimaan tutkimuksen tuloksia (iterointi).

"Tutkimuksellinen opiskelu ja ongelmanratkaisu edellyttävät luovaa lähestymistapaa ja kehittävät luovaa ajattelua" (Opetushallitus 2019), mikä on johdonmukaisesti CT-lähestymistavan tavoite (ja lähtökohta).

3. CT-ajattelun todentaminen, CASE KE3-kurssi

3.1. CASE: Spektroskopian opetuksen muuttuminen

CT-ajattelun hahmottamiseksi kemian opetuksessa, tässä artikkelissa on pyritty kuvaamaan KE3-kurssin (Molekyylit ja malli) opettajan ajattelun avautumista spektroskopian osalta. Perinteinen tämä lähestyä spektroskopian (infrapunaspektroskopia) opetusta on opettaa käyttämään valmiina spektrikarttoja, joissa kuvataan eri funktionaalisten ryhmien absorptiopiikkien sijaintia. Molekyylin spektrin piikkien sijaintien perusteella tunnistetaan molekyyli. Aiempi tieto molekyylin empiirisestä ja molekyylikaavasta mahdollistaa aineen tunnistamisen.



Kuva 5: Spektroskopian opetuksen muuttuminen perinteisestä lähestymistavasta uuteen.

Uusi tapa opettaa spektroskopian perusteita korostaa oppijoiden aktiivista roolia mm. oman spektrikartan laatimisen kautta. Lukiolaisten itsensä laatima spektrikartta (oman mallin luominen) perustuu erilaisten molekyyliarakenteiden ja spektrien vertailuun (annettu aineisto), toistuvien spektriipiikkien löytäminen ja niiden yhdistäminen rakenteissa ilmeneviin säännönmukaisuuksiin (funktionaalisten ryhmien tyypilliset absorptiopeikit). Tältä pohjalta tuotetaan työkalu tuntemattomien molekyylien tunnistamiseen (ensin itsenäisesti, sitten ryhmässä). Seuraavana vaiheena on spektrikarttojen testaaminen tuntemattomien molekyylien tapauksissa.

Viereinen kuva kertoo sen, miten algoritminen ajattelu tuotetun spektrikartan avulla mahdollistaa hyvin pitkälle menevän tuntemattoman molekyylien tunnistamisen. Laajempi tuntemattoman molekyylin tunnistamisen prosessi sisältää:

- empiirisen kaavan määrittämisen - polttoanalyysin tulokset (ainemäärälaskut)
- molekyylikaavan määrittämisen (massaspektrin tai CNMR:n spektrin tms. työkalun hyödyntäminen)
- funktionaalisten ryhmien tunnistamisen, IR- tai NMR-spektrien tulkinnan avulla
- lopullisen rakenteen määrittämisen eli rakennekaavan piirtämisen (3D-mallinnus)

Kurssin yhteydessä tehtiin kysely, jossa tiedusteltiin mm. Voidaanko algoritmista ajattelu soveltaa spektrien tulkinnassa? Jos voi, niin miten? Jos ei, niin miksi ei? Kyselyyn vastasi 17 kurssilaista ja kooste tästä kysymyksestä kuvaa algoritmisen ajattelun ymmärtämistä.

Taulukko 2: Spektrien tulkintaan liittyvän kyselyn tulokset

Kyllä, sillä IR-spektristä voidaan löytää samoja piikkejä eri yhdisteissä.

Voidaan, sillä siitä pystytään havaitsemaan monia eri asioita

Voidaan opetella ulkoa eri spektroskopiassa tarvittavia asioita

Kyllä voidaan soveltaa esim. siten että tunnistetaan kaaviossa esiintyviä toistuvia kuviota ja käyriä ja niiden perusteella tutkittavia aineita.

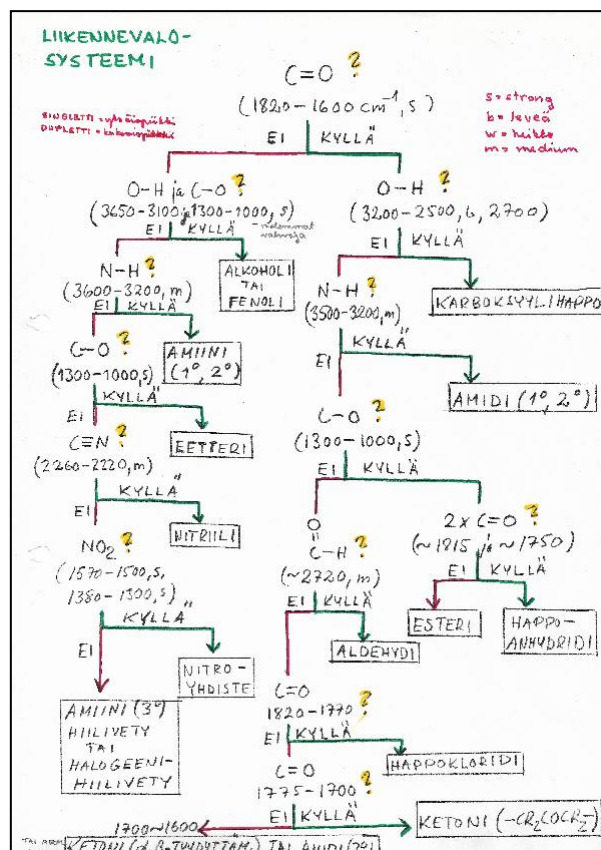
Kyllä, voidaan. Esimerkkejä: tärkeiden piirteitä spektreistä, esim. huiput; spektrien luokittelu luokkiin tai ryhmiin niiden ominaisuuksien perusteella

Voi, sillä spektrin tulkinnassa, voidaan purkaa asiat pienimmiksi osiksi, esim. spektrin avulla voidaan tulkita onko molekyyli yksidoksinen vai monidoksinen.

Voidaan, sillä spektreistä löytyvien erilaisten muotoja (esim. piikkejä) voidaan etsiä ja havaita erilaisten algoritmien avulla.

kyllä, sillä spektrin eri osia voidaan tarkastella vuorollaan, sen tarkastelu voidaan ikään kuin palotella pienempiin osiin

Kyllä. Jokaisia viivoja pitää tutkia tarkasti ja päätellä.



Kyllä voidaan. Esimerkiksi piikkiä tunnistamalla "aaltoluku" käyrässä sekä sovittamalla niitä, voidaan tunnistaa myös kuvioista sekä luokitella niitä, käsittelemällä spektrejä ja voidaan pyrkiä määrittämään näytteet pitoisuutta sekä koostumusta spektrien tulkintoiden avulla.

Algoritmista ajattelua voidaan soveltaa spektrien tulkinnassa. Algoritmisen ajattelu auttaa spektrien tunnistamisessa, koska sen avulla voidaan luoda sääntöjä joita hyödyntäen voidaan erottaa eri aineiden spektrejä toisistaan.

Voidaan. Jos verrataan usein toistuvaa spektriä voidaan tekoälyllä verrata sitä muihin.

Kyllä voi. Spektrien tulkinnassa voidaan käyttää erilaisia algoritmeja, jotka analysoi spektrin erityistä piirteitä ja tunnistamaan spektrin tiettyä piirteitä.

Voi ensin katsoa mitä samaa kahden molekyylin spektrissä on, ja sen jälkeen mietitään eroja.


Esim. Voi tunnistaa OH-ryhmän yms.

Kyllä, algoritmista ajattelua voidaan soveltaa spektrien tulkintaan. Sitä voidaan käyttää esimerkiksi spektrien automaattisessa analysoinnissa, kuten huippujen tunnistamisessa, signaalien kohinan poistamisessa ja spektrien vertailussa.

Tämän perusteella algoritmisen ajattelun läpinäkyminen opetuksessa lienee selvää, mikä oli opetuksen tavoitteenakin. Pohdintaa tämän jälkeen aiheuttaa, miten tämä ajattelutapa siirtyy muihin teemoihin. Opettajan näkökulmasta opetuksen kehittäminen ja sisällön muovaaminen oppikirjapohjaisesta ajattelusta CT-lähestymistavan mukaiseen viitekehukseen vaatii monenlaista opettajalta uutta ajattelua ja asioiden hahmottamista.

Seuraavassa kuvassa on spektroskopian opetusta hahmotettu CT-lähestymistavan eri ulottuvuuksia mukaisesti. Samankaltaista toteutusta ja opetuksen tukimaateriaalia tuottamista muodenkin kemian opetuksen osa-alueiden osalta on mielekästä opetuksen kehittämiseksi ja uusien pedagogisten innovaatioiden löytämiseksi.

CT-ajattelu ja spektroskopia



Osiin jakaminen: Spektroskooppisten tekniikoiden jakaminen niiden peruseräiteisiin ja komponentteihin (UV-Vis, IR, NMR).

Kuvioiden tunnistaminen: Tunnista spektreissä toistuvat kuviot, kuten karakteristiset absorptiohuiput IR-spektroskopiassa tai kemialliset siirtymät NMR-spektroskopiassa.

Kvantitatiivinen analyysi: IR- ja NMR –spektrien intensiteetin ja pitoisuuksien/atomien lukumäärän välinen suhde.

Abstraktio: Kokoa molekyylien energiasiirtymien käsite, jotka johtavat tiettyihin spektroskooppisiin signaaleihin.

Algoritmien suunnittelu: Algoritmien luominen spektrien analysointiin ja tulkintaan:

Kuivovertailu: Käytä spektrikarttoja yhdisteiden tunnistamiseksi.

Laskennallinen simulaatio ja analyysi: Tunnettujen molekyylien muodostamien spektrien hahmottaminen.

Data-analyysi ja koneoppiminen: Yhdisteiden luokitteluun, molekyylien ominaisuuksien ennustaminen spektreistä.

Kuva 6: CT-ajattelu ja spektroskopia koottuna

4. Johtopäätökset ja seuraavat vaiheet

Miten CT-ajattelun on todellisuudessa toteutunut oppitunnilla? Miten tämä voidaan mitata tai todentaa? Pulmalliseksi muodostunee oikeiden menetelmien ja mielekkäiden data-aineistojen kerääminen, koska CT-ajattelun hyödyntämistä ei ole tutkittu, eikä siihen ole olemassa valmista mallia.

Tämän hankkeen ja tutkimuksen puitteissa on tilaisuus aloittaa oppimateriaalien ja opetuksen uudistaminen niin, että tämä lähestymistapa kattaa merkittävän osan lukion kemian opetuksesta.

Computational thinking -lähestymistapa tuo kemian opetukseen ulkoa oppimisen tilalle johdonmukaisuutta, ajattelun ja päättelyn työkaluja. Edellä kuvattujen pilotin tulosten avulla työstetään seuraavia pilotteja, työkaluja CT-fasettien läpinäkyvyyden mahdollistamiseen ja niiden tunnistamiseen ja hyödyntämiseen työskentelyssä.

Jatkotutkimuksissa haetaan vastauksia em. kysymyksiin:

- miten CT-ajattelu saadaan läpinäkyväksi oppijoiden ajattelussa
- miten CT-ajattelua hyödynnetään niin kokeellisessa työskentelyssä kuin ilmiöiden ja havaintojen tekemisessä ja selittämisessä
- miten eri kemian teemoja voisimme käsitellä toisin oppimateriaaleissa ja opettaja-aineistoissa

Lähteet:

Kadtsyba, A. & et. (2022). Basic Cheminformatics Course for First-Year Chemistry Students. *J. Chem. Educ.* 2022, 99, 2932–2942.

Lukion opetussuunnitelman perusteet 2019. Määräykset ja ohjeet 2019:2a. Opetushallitus

Myllyviita, A (2019, 2021) Orbitaali – MarvinSketch II, <https://peda.net/p/myllyviita/OrbitaaliMarvinSketch2painos> (Ladattu 23.11.2023)

Myllyviita, A. (2019). Tiedekäytäntötähtöinen opetus kemiassa. Verkkomateriaali: <https://peda.net/p/myllyviita/tkloppiminen> (ladattu 7.2.2024).

Myllyviita A. & Juuti K.(2022) Digitaalisuus ja projektioppiminen, kirjassa Juuti K., Lavonen J. & Salmela-Aro K. (2022): Projektioppiminen luonnontieteissä, Gaudeamus

Sandoval, W. (2014). Conjecture mapping: An approach to systematic educational design research. *Journal of the Learning Sciences*, 23(1), 18-36.

Shute, V.J., Sun, C., Asbell-Clarke, J. (2017). Demystifioi laskennallinen ajattelu. *Educational Research Review*, 22, 142-158. <https://doi.org/10.1016/j.edurev.2017.09.003>.

Wild, D. (2012, suom. 2021). Johdatus Keminformatiikkaan - Intensiivinen itseopiskeluopas aloittelijoille. Edumendo