

教育部教學實踐研究計畫成果報告

Project Report for MOE Teaching Practice Research Program

計畫編號/Project Number : PMS1136170

學門專案分類/Division : 數理

計畫年度 :  113 年度一年期  112 年度多年期

執行期間/Funding Period : 2024.08.01 – 2025.07.31

以程式語言進行電腦模擬進階化學動力學

計畫主持人(Principal Investigator) : 林群欽

協同主持人(Co-Principal Investigator) :

執行機構及系所(Institution/Department/Program) : 國立中正大學化學暨生物化學系

成果報告公開日期 :  立即公開  延後公開

繳交報告日期(Report Submission Date) : 2025 年 9 月 19 日

# 以程式語言進行電腦模擬進階化學動力學

## 一、本文 (Content)

### 1. 研究動機與目的 (Research Motive and Purpose)

物理化學是在傳統化學四大主科中，普遍被學生與教師視為最具挑戰性的領域。此困境源於其學科本質與傳統教學方法的雙重限制。根據 Sözbilir<sup>1</sup> 的研究指出，學生對物理化學的負面觀感，主要來自於其概念高度抽象、課程內容繁重、數學要求過高，以及以教師為中心的單向講授模式。這些觀察與計畫主持人在多年教學現場的經驗高度吻合。

在化學動力學的教學中，我們觀察到的挑戰包含了：(1) 由數學造成的心理障礙：化學動力學的描述高度依賴微積分、微分方程與機率統計。許多化學系學生因數學背景相對薄弱，在學習上產生數學焦慮，一見到複雜的數學公式便放棄思考，難以將其視為描述物理現象的工具。(2) 分子層次概念的視覺化困難：分子碰撞理論、活化錯合物、擴散過程、隨機漫步等動力學常見的概念，在傳統教學僅依賴課本的靜態圖表與教師的口頭描述，學生難以建立直觀的物理圖像，無法深刻體會動力學參數（如速率常數  $k$ 、擴散係數  $D$ ）如何影響整個系統的宏觀行為。(3) 理論與應用的脫節：Fox & Roehrig<sup>2</sup> 的調查顯示，多數物理化學教師雖認同觀念理解的重要性，卻仍需透過數學解題來測驗學生，且因教學時數有限，難以充分連結理論與真實的實驗或研究情境。這導致部分擅長考試的學生雖能獲得高分，卻未必真正內化所學知識，更遑論將其應用於解決實際科學問題。綜上而論，若無法有效引導學生跨越數學門檻、建立物理直觀，物理化學課程將持續成為學生畏懼的科目，而非探索化學反應核心奧秘的有趣學科。

為了解決上述挑戰，本研究計畫將電腦模擬與程式設計深度整合至化學動力學課程中，引導學生從被動的知識接收者，轉變為主動的知識建構者。我們認為，透過引導學生使用 Python 程式語言親手撰寫模擬程式，而非僅操作現成的模擬軟體，能夠達到做中學 (learning by doing) 的理想效果。當學生需要親自將一個數學方程式轉譯為一行行的程式碼，並透過除錯使其成功執行時，他們被迫必須深入思考該模型的每一個變數與假設，藉此達成扎實且深入的學習。

本研究希望能藉此構想達到以下三種層次的目標：(1) 確實理解化學動力學，透過將抽象的動力學模型（如速率方程式、Maxwell-Boltzmann 分布）轉化為動態的視覺化結果，幫助學生建立直觀的物理圖像，使其超越公式的記憶，真正理解動力學參數的物理意義與系統的動態行為。(2) 培養 vibe coding 的能力，讓學生在 Google Colab 的平台上寫 Python 程式語言，並搭配其內建的 AI 與外部的 AI 工具進行科學計算、數據分析與視覺化的實用能力。這些技能不僅是當代化學研究不可或缺的工具，更能賦予學生獨立探索、驗證與預測科學現象的能力。

(3) 提升學生的學習動機以及對於學習科學自信，我們希望本研究可以提供學生一個能累積成就感的學習路徑，有效降低學生面對物理化學與程式設計的心理障礙。最終目標是培養學生利用量化工具解決問題的信心與意願，並內化為他們探索科學的工具。

## 2. 研究問題 (Research Question)

基於上述研究動機與目的，本計畫將系統性地評估教學實踐於下列問題的成效。

(1) 在化學動力學課程中融入 Python 程式模擬，對於提升學生的整體學習成效有多大的影響？

(2) 利用電腦模擬，能增進學生對於化學動力學中抽象概念(例如：隨機過程、分子速度分佈、反應級數的動態意義)多少的理解？

(3) 其他次要的問題，包含了課程設計是否能有效提升學生對於 Python 程式語言的熟悉度，並降低其學習程式的心理障礙？本計畫能否有效降低學生因數學困難而對物理化學產生的負面感受？課程結束後，學生是否認為自己有能力與信心，將此模擬技能應用於未來的學習或研究中？

## 3. 文獻探討 (Literature Review)

本研究的教學設計，主要建立在電腦輔助學習 (computer-assisted learning) 與科學探究學習 (inquiry-based learning) 的理論基礎之上。

### 物理化學的學習困境

物理化學的學習困難是化學教育領域中一直存在的議題。Sözbilir<sup>1</sup> 系統性地整理了學生與教師的觀點，指出概念抽象 (abstract concepts, 52%)、以教師為中心的教學 (teacher-centered teaching, 44%) 與過度數學化 (too mathematical, 33%) 是造成學生學習困難與負面觀感的主要原因。Fox & Roehrig<sup>2</sup> 對美國大學物理化學課程的調查也發現，儘管教師們普遍認為學生對於物理化學的概念理解是首是要之務，但教學現場仍以傳統講授為主，且高達 61% 的教師認為學生「缺乏必要的數學背景」是學習失敗的主因。上述研究再次驗證了物理化學的學習需要抽象思維與數學工具的緊密結合，而傳統教學模式似乎成效有限。

### 以電腦模擬教學物理化學

電腦模擬被認為有潛力彌補傳統教學的不足。Rutten, van Joolingen, & van der Veen<sup>3</sup> 的回顧性研究指出，不論是作為傳統教學的補充或替代，電腦模擬都能有

效提高科學教育的成效。其優勢在於能將複雜、不可見的動態過程視覺化，讓學生能透過互動操作，探索變因與結果之間的關係。

De Jong & Van Joolingen<sup>4</sup> 在其經典的回顧研究中，提出了更深層的觀點。他們將電腦模擬學習置於科學推理 ( scientific reasoning ) 的框架下，該框架包含定義問題、提出假設、設計實驗、解釋數據、應用結果等階段。他們發現，電腦模擬的成效並非必然，其關鍵在於是否提供足夠的教學支持( instructional support )。若無適當引導，學生在假設生成、實驗設計與數據解釋等高階認知活動中，反而容易迷失方向或產生認知超載 ( cognitive overload )。

### 教學支持的關鍵角色

根據 de Jong 的理論，有效的教學支持是電腦模擬輔助學習成功的關鍵。他提出多種支持策略，與本計畫高度相關，包含了：模型進展 ( model progression )：教學模型應由簡至繁，避免學生因初期接觸過於複雜的模型而卻步。本研究的課程設計即遵循此原則，從基礎的 0 至 2 級反應，逐步過渡到較複雜的隨機過程與耦合反應。規劃支持 ( planning support )：透過提供學生特定的問題或任務，引導學生有目標、有結構地進行模擬與探索。本研究則在的課堂練習與期中期末報告，引導學生進行動力學的視覺化模擬。監控支持 ( monitoring support )：在過程中讓學生能檢視模擬的全貌，確認變數的角色與影響。這正是本計畫強調視覺化，讓學生能即時看到參數改變對圖形結果的影響。

本計畫不僅是讓學生使用模擬，而是建構模擬。透過親手撰寫程式碼，學生被迫進行更深層次的轉化過程( transformational processes )，將數學模型轉化為演算法，這本身就是一種高階的認知活動，可以帶來比單純操作現成軟體更深刻的學習效果。同時，考量到化學系學生普遍缺乏程式背景，如何在本課程中提供足夠的程式技能支持與科學探究支持，便成為本計畫成功的挑戰。


## 4. 教學設計與規劃 (Teaching Planning)

研究的教學實踐，於國立中正大學化學暨生物化學系 112 學年度第二學期開設的化學動力學 ( 二 ) 課程中進行。授課對象為 10 位學生，包含大學四年級學生一名與碩士班研究生九名。此背景確保學生已具備基礎物理化學與動力學知識，使課程能聚焦於深入探討與模擬應用。課程使用的教材包含了 Houston ( 2012 ) 的 Chemical kinetics and reaction dynamics 、史上最強 Python 入門邁向頂尖高手之路王者歸來 ( 洪錦魁著 ) 及 Journal of Chemical Education 等期刊上的教學案例。

## 課程設計與進度安排

本課程設計的核心理念是理論講授與程式實作的緊密結合與交錯進行（圖一）。平均每週課程約有一半的時間，專門用於引導學生進行電腦模擬。課程內容的安排打破傳統課本章節順序，將能體現隨機性的傳輸現象提前，以便儘早建立學生從微觀粒子行為理解巨觀動力學現象的概念。

| 週數   | 1         | 2 | 3         | 4    | 5    | 6     | 7    | 8    | 9    | 10     | 11   | 12   | 13   | 14     | 15   | 16   |
|------|-----------|---|-----------|------|------|-------|------|------|------|--------|------|------|------|--------|------|------|
| 主題   | Python 介紹 |   | 隨機現象與傳輸性質 |      |      | 氣體動力論 |      |      |      | 化學反應速率 |      |      |      | 實驗資料擬合 |      |      |
| 課程內容 |           |   |           |      |      | 春假    |      |      |      | 期中報告   |      |      |      |        |      | 期末報告 |
| 成效評估 | 學期前測      |   | 單元前測      | 單元後測 | 單元前測 | 單元後測  | 單元前測 | 單元後測 | 單元前測 | 單元後測   | 單元前測 | 單元後測 | 單元前測 | 單元後測   | 學期前測 | 學期後測 |



圖一、課程單元與評量施測時機示意圖

本學期課程主要包含四個單元：隨機現象與傳輸性質、氣體動力論、化學反應速率與實驗資料擬合，課堂內容的形式包含了以程式（橘色）或授課（藍色）為主的內容。在學期初與學期末分別進行整體的前、後測問卷，各單元開始前與結束後，也進行成對的單元前、後測問卷（淺藍色），以追蹤學生在特定主題上的概念理解與能力成長。此外，於第十週與第十八週安排的期中與期末專題報告，則作為評估學生綜合應用能力。

## 成績考核與學習評量

為鼓勵過程性學習與合作，本課程以多元的方式估學生的理論理解、實作能力與合作精神，包含了：課堂作業（30%）：針對課堂模擬範例，指派延伸題目，要求學生修改參數、擴展模型，以深化理解。課堂參與（10%）：鼓勵學生在課堂中提問、參與小組討論。期中報告（30%）：以小組為單位，選定一篇與動力學相關的研究論文，進行初步的內容延伸模擬與報告。期末報告（30%）：在期中報告的基礎上，完成更深入的模擬、分析與討論，並繳交完整書面報告。

## 5. 研究設計與執行方法 (Research Methodology)

為達研究目的並回答研究問題，本研究採用混合方法研究，整合量化數據與質性資料，以期能更全面、更深入地探討此教學實踐的過程與成效。

### 研究架構

本研究的整體架構為準實驗研究法中的單組前後測設計。此設計的核心是在教學介入（融入程式模擬的動力學課程）之前與之後，對同一組學生施以測量，以評估介入措施所帶來的改變。

## 研究方法

為了確保教學成效的信度與效度，本計畫採用混合方法，整合量化與質性兩種途徑的資料收集與分析，希望能從不同面向進行交叉互證。量化的資料主要透過結構式問卷來進行系統性的數據測量。我們運用 Google Form 設計了「學期前後測」與「單元前後測」兩種問卷，內容涵蓋李克特五點量尺，用以評估學生在領域知識、Python 掌握程度、程式模擬能力及學習心理障礙等構念上的變化。問卷依據課程進度，於學期初末及四個核心單元教學前後共施測十次，以了解學生在不同時間點的學習狀態。質性資料的收集則包含了本人每週課程紀錄摘要，以及學生的學習產出，如課堂作業與期末專題報告等。

我們將針對問卷結果進行平均、標準差與百分比等量化分析，再利用長條圖等視覺化方式，呈現學生在各項能力與態度上的變化趨勢。這些量化結果也會與課堂筆記、學生報告及問卷開放式回饋等質性資料交互比對，希望除了能了解是否有教學成效外，也能藉此成效如何產生，或更了解學生的學習歷程。

## 6. 教學暨研究成果 (Teaching and Research Outcomes)

### (1) 教學過程與成果

課程開始前，僅有兩位同學具備基礎的程式概念，其餘皆對 Python 感到陌生，教學初期的重心完全放在基礎語法與邏輯的建立。如第 1 週的課堂筆記所示，學生在最初的練習中便遭遇了許多挑戰，不僅對「基本公式忘記」，更缺乏如「設定預設值」等程式概念，且容易將「變數弄混」。然而，即使在此階段，學生已能主動提出具體問題，如「如何印出階乘的運算過程」或「如何找出所有索引」，顯示出強烈的學習動機。第 2 週引入 for loop 時，學生在處理費波納契數列的雙變數的更新上遇到了更大的困難。第 4 週，當課程推進到較為抽象的 Fick's Second Law 的推導與模擬時，學生出現了搞不清楚在幹嘛的情況。反映出了，當數學的抽象程度與程式的複雜度同時提升時，學生尚無法跟上。因此我在隔週週統整不同的模擬方式，並讓學生透過修改初始條件等較簡單的任務，再次建立信心與連結感。春假後，學生對於程式碼的熟悉度有所下降，尤其在將速度分布轉換為能量分布的模擬中，花了較多時間才完成。學生的回饋也反映了此階段的掙扎，例如在「隨機現象」單元後，有學生表示「應用的部分可以花更長的時間去琢磨，比如之前的 random 還是有點不懂」。這顯示學生渴望更深入的應用與更長的內化時間。

進入學期中段，學生已具備基礎的程式能力，教學重心從如何進程式模擬轉向要進行怎樣的程式模擬。為此期中考的設計方式是讓每組都讀共同的三篇論文，並根據各篇內容分別進行延伸的模擬，報告時再當下抽籤決定哪組要報告那篇。也因為大家都閱讀討論過相同的文章，並進行延伸模擬，因此在提問時也可

以更深入具體。學生瞭解規則後都因為覺得十分困難而笑出來了，但實際在報告討論時，過程都十分熱絡，顯示這方法確實奏效。

課程後期，學生已習慣了利用程式模擬輔助學習的方式，在學習以 ODE（常微分方程）進行模擬時，他們已能主動提問關於「ODE 與解析解在模擬結果上的差異」，並進一步討論數值解的誤差問題。當介紹更複雜的 Gillespie 隨機演算法時，學生亦能提出「為何在二階反應中需要考慮所有粒子間的碰撞可能性」這類觸與模型假設有關係的深入問題。

在學期後測裡，學生普遍認為程式模擬最大的幫助在於「視覺化」，例如「做出可視化的圖能更直觀去想像過程」、「可以快速的方式把複雜的方程式做出可視化模型」。他們也體認到程式作為研究工具的潛力，如「可以在有想法的時候，隨時調整參數看結果，非常方便」。儘管仍會面臨「瘋狂在 debug」的困擾，以及「看到一整片的程式碼會有點眼花撩亂」的挑戰，但學生已能清晰地將程式模擬視為一種工具，並具有應用於解決問題初步能力。

如表一的量化分析所示，在課程主題「物理化學」與「化學動力學」的理解程度，亦分別從 2.8 分與 2.2 分，提升至 3.4 分與 3.3 分，期末後測學生對於程式語言的知識則為 3.0 分，顯示學生皆有明顯的成長。然而在學習這些相關知識的心理障礙並沒有明顯的改變，這些心理因素可能是長年學習上的挫折所造成，難以在短時間內改變。但學生皆高度認同程式模擬對於學習動力學的幫助(4.1 分)。在各教學單元的分析上(如表二)，「對於單元內容的了解程度」以及「以 Python 進行單元內容模擬與視覺化的能力」都約有 1 分的進步。值得注意的是，學生對於「進行電腦模擬教學時課程的支持程度」始終給予了極高的評價，四個單元的後測平均分數皆高於 4.6 分。

## (2) 教師教學反思

在為期 16 週的教學實踐中，作為授課教師與研究者，我也獲得了寶貴的教學反思。首先，觀察並記錄學生在學習過程中（如 Fick's Law 推導）卡關的地方，是即時調整教學策略的契機。當數學的難度與程式複雜度同時提升時，是學生最容易發生認知超載的時機，未來教學應更有意識地將複雜問題分解。其次，我也應證了堅持讓學生親手寫程式的陣痛期，對於內化其技能的必要性。若為求方便而直接提供完整程式，學生可能會停留在只能操作的階段，無法進一步地建構更複雜的模擬系統。最後，要求學生「延伸模擬學術論文」的專題報告設計，雖具高度挑戰性，卻是引導學生從知識學習邁向科學研究的關鍵一步，能有效迫使學生思考模型的邊界、假設與局限性，是標準化練習題無法達成的教學深度。

表一、學期前後測學生自我評估各項指標之描述性統計(N=10)。本表呈現學生於學期初(前測)與學期末(後測),在知識理解、學習心理障礙、程式模擬能力與學習態度等指標上的自我評估平均分數(M)與標準差(SD)。評量採李克特五點量尺,分數越高代表該項能力或認同程度越高;惟「心理障礙」向度分數越低代表障礙程度越低。

| 前後測共同問題                       | 前測        | 後測        | p 值  |
|-------------------------------|-----------|-----------|------|
| 對於數學(微積分、矩陣或機率)的知識或理解能力       | 2.7 ± 0.7 | 3.2 ± 0.8 | 0.21 |
| 對於以數學(微積分、矩陣或機率)作為工具的心理障礙     | 3.0 ± 1.3 | 3.0 ± 1.3 | 1.00 |
| 整體來說,對於物理的知識或理解能力             | 2.7 ± 0.8 | 3.3 ± 1.0 | 0.21 |
| 整體來說,對於學習物理相關知識的心理障礙          | 2.3 ± 0.9 | 2.3 ± 0.5 | 0.90 |
| 整體來說,對於化學的知識或理解能力             | 3.2 ± 0.6 | 3.6 ± 1.0 | 0.49 |
| 整體來說,對於學習化學相關知識的心理障礙          | 1.9 ± 0.7 | 2.1 ± 0.9 | 0.71 |
| 對於物理化學的知識或理解能力                | 2.8 ± 0.8 | 3.4 ± 0.9 | 0.17 |
| 對於學習物理化學相關知識的心理障礙             | 2.3 ± 1.3 | 2.3 ± 0.9 | 0.68 |
| 你對於化學動力學的理解程度                 | 2.2 ± 0.9 | 3.3 ± 1.0 | 0.03 |
| 你是否能在有動力學模型的情況下,進行模擬預測以及視覺化?  | 2.7 ± 1.3 | 3.6 ± 1.0 | 0.19 |
| 你因為數學造成對物化的負面感受強度?            | 2.8 ± 1.1 | 2.6 ± 0.9 | 0.51 |
| 你是否能認為自己有能力對任何物化現象進行模擬?       | 2.4 ± 0.7 | 2.6 ± 0.7 | 0.84 |
| 前測問題                          |           |           |      |
| 具程式經驗學生,對於學習或使用程式的心理障礙 (N=5)  | 1.8 ± 0.8 |           |      |
| 未具程式經驗學生,對於學習或使用程式的心理障礙 (N=5) | 2.8 ± 1.3 |           |      |
| 後測問題                          |           |           |      |
| 對於程式語言的知識或理解能力                | 3.0 ± 1.1 |           |      |
| 對於學習程式語言相關知識的心理障礙             | 2.2 ± 1.2 |           |      |
| 程式模擬對於學習動力學的幫助程度              | 4.1 ± 0.8 |           |      |
| 程式模擬對於學習過程的困擾程度(如因為對程式不熟悉)    | 3.0 ± 0.5 |           |      |

|                          | 隨機現象與傳輸性質     |               | 氣體動力論         |               | 化學反應速率        |               | 實驗資料擬合        |               |
|--------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
|                          | 前測            | 後測            | 前測            | 後測            | 前測            | 後測            | 前測            | 後測            |
| 對於單元內容的了解程度              | $2.3 \pm 0.9$ | $3.4 \pm 1.0$ | $2.6 \pm 1.0$ | $3.5 \pm 0.8$ | $2.8 \pm 0.9$ | $3.9 \pm 0.7$ | $2.2 \pm 1.0$ | $3.4 \pm 0.9$ |
| 對於 Python 的掌握程度          | $2.7 \pm 0.8$ | $2.9 \pm 0.9$ | $2.8 \pm 0.8$ | $3.3 \pm 0.7$ | $2.5 \pm 0.7$ | $3.6 \pm 0.7$ | $3.2 \pm 0.8$ | $3.0 \pm 0.9$ |
| 以 Python 進行單元內容模擬與視覺化的能力 | $1.8 \pm 0.6$ | $2.7 \pm 0.8$ | $1.9 \pm 0.9$ | $3.2 \pm 0.8$ | $1.8 \pm 0.8$ | $3.5 \pm 0.7$ | $2.1 \pm 1.2$ | $2.9 \pm 1.1$ |
| 進行電腦模擬教學時課程的支持程度         |               | $4.5 \pm 0.5$ |               | $4.4 \pm 0.5$ |               | $4.6 \pm 0.5$ |               | $4.8 \pm 0.5$ |

### (3) 學生學習回饋

學生的回饋，為本研究最真實與直接的評量。量化上，學生不僅對物理化學和程式語言的理解能力提升，學生也極度認同視覺化模擬對於對力學學習的幫助。在質性回饋中，學生普遍肯定視覺化的幫助，一位學生寫道：「可以將抽象的公式化為實際的圖形，比較參數的變化，更容易理解。」回饋也反映了學習過程的真實掙扎，如「好像會又好像不會，還沒有學到東西變成自己的」，這精準地描述了知識內化過程中的過渡階段。同時，學生對於教學支持給予了平均 4.7 分的高度評價，並提出了如「在使用函數前多加解釋」等具體建議，這些都為未來課程的精進提供了寶貴的方向。

## 7. 建議與省思 (Recommendations and Reflections)

本研究的量化與質性數據一致地證明，引導學生親手撰寫程式進行動力學模擬的教學模式，能有效提升化學動力學的學習成效，不僅顯著深化學生對抽象概念的理解，也成功培養了學生應用計算思維進行科學探究的能力，而此過程中的多層次教學支持，則是實踐成功的關鍵要素。基於本次實踐經驗，我們建議未來有意採行類似教學模式的教師，可考慮強化前期的基礎程式教學支持，例如提供非同步預習材料或舉辦工作坊，以縮短學生的「語法陣痛期」；同時，應持續推廣連結真實研究的專題任務，並可建立同儕學習與教材共享的機制，以促進更廣泛的學習效益。

在研究省思與未來展望上，我們認知到本研究仍有其限制。受限於 10 位學生的「小樣本」規模，以及缺乏對照組的「單組前後測設計」，研究結果在統計推論的普遍性與因果效應的論證上，仍有精進的空間。未來的研究，除了可考慮擴大樣本或進行跨校合作外，若條件許可，亦可設計準實驗研究，與採用傳統教學模式的班級進行比較，以獲取更嚴謹的證據。展望未來，本次研究成功驗證的教學模式，具有高度的可擴展性，有望應用至物理化學的其他領域，如「量子化學」與「統計熱力學」等同樣抽象且高度數學化的單元。透過系統性地開發系列課程模組，我們期盼能逐步革新物理化學的教學風貌，真正幫助學生領略物理化學的理論之美，並掌握開啟現代科學研究大門的關鍵鑰匙。

## 二、參考文獻 (References)

1. Sözbilir M. What Makes Physical Chemistry Difficult? Perceptions of Turkish Chemistry Undergraduates and Lecturers. *Journal of Chemical Education*. 2004;81(4):573.
2. Fox LJ, Roehrig GH. Nationwide Survey of the Undergraduate Physical Chemistry Course. *Journal of Chemical Education*. 2015;92(9):1456-1465.
3. Rutten N, van Joolingen WR, van der Veen JT. The learning effects of computer

simulations in science education. *Computers & Education*. 2012;58(1):136-153.

4. De Jong T, Van Joolingen WR. Scientific discovery learning with computer simulations of conceptual domains. *Review of Educational Research*. 1998;68(2):179-201.

### 三、附件 (Appendix)

