

Paul P. Martin¹
Marcus Kubsch²
Brandon J. Yik³
Benjamin T. Burlingham⁴
Nicole Graulich¹

¹Justus-Liebig-Universität Gießen
²Freie Universität Berlin
³University of Georgia
⁴Indiana University Bloomington

Modellierung von Lerntrajektorien beim KI-gestützten adaptiven Lernen in der Organischen Chemie

Notwendigkeit der adaptiven Förderung mechanistischer Begründungen

Chemiedidaktische Forschung der vergangenen 20 Jahre zeigt, dass das Erklären von Reaktionsabläufen eine zentrale Kompetenz in der Organischen Chemie darstellt (vgl. Graulich, 2015). Dieses mechanistische Begründen unterstützt Lernende beim Modellieren von Reaktionsmechanismen, der Vorhersage von Reaktionsprodukten und der Anwendung chemischer Konzepte. Auch in der Laborpraxis ist diese Fähigkeit essenziell, etwa beim Planen, Durchführen und Analysieren von Synthesen.

Dennoch haben Studierende beim mechanistischen Begründen viele Herausforderungen, die teils durch gängige Lehrpraktiken bedingt sind (vgl. Dood & Watts, 2023). Ein deskriptives Visualisieren von Reaktionsmechanismen führt beispielsweise dazu, dass Studierende Mechanismen als lineare, unkorrelierte Ereignisse wahrnehmen und Schwierigkeiten haben, deren Ursachen und Wirkungen zu erkennen (z. B. Weinrich & Sevia, 2017). Aufgrund dieser Herausforderungen ist eine explizite Förderung mechanistischer Begründungen in der Organischen Chemie erforderlich (Asmussen, Rodemer & Bernholt, 2023). Eine uniforme Förderung erweist sich jedoch oft als unzureichend, was eine stärkere Integration adaptiver Förderangebote motiviert (z. B. Asmussen, Rodemer & Bernholt, 2024; Dood, Dood, Cruz-Ramírez de Arellano, Fields & Raker, 2020; Lieber, Ibraj, Caspari-Gnann & Graulich, 2022).

In dieser Studie wurde ein KI-Modell entwickelt, das mechanistische Begründungen von Studierenden automatisiert bewertet und adaptive Förderangebote bereitstellt (vgl. Martin & Graulich, 2023). Der Beitrag untersucht, welche Lernenden von diesem KI-gestützten Ansatz profitieren.

KI-gestützte adaptive Förderung mechanistischer Begründungen

Traditionelle Lehre der Organischen Chemie fokussiert oft ausschließlich plausible Reaktionsprodukte, ohne alternative Reaktionspfade kritisch zu beleuchten. Um das Abwägen verschiedener Pfade zu fördern, wurden Studierende in dieser Studie angeleitet, die Plausibilität alternativer Produkte zu beurteilen (vgl. Lieber & Graulich, 2022; Lieber, Ibraj, Caspari-Gnann & Graulich, 2022). Die Begründungen wurden dabei anhand des Erklärungsmodells nach „Behauptung-Beleg-Begründung“ strukturiert (McNeill, Lizotte, Krajcik & Marx, 2006). Die Aufgaben umfassten vier Reaktionen: eine Ether-Synthese, eine Enamin-Hydrolyse, eine Aldol-Kondensation und eine Claisen-Kondensation. Während der ersten Erhebung zur Ether-Synthese wurden die allgemeine Argumentationskompetenz und das chemische Konzeptwissen der Studierenden diagnostiziert. Anschließend wurden die mechanistischen Begründungen der Studierenden vom KI-Modell bewertet, was eine stärkere longitudinale Individualisierung der Lehre ermöglichte (Martin & Graulich, 2024b). Übungsaufgaben und konzeptuell-strategisches Feedback wurden dabei im Verlauf des Semesters zu vier Zeitpunkten individuell an den Lernstand der Studierenden angepasst.

Drei zentrale Dimensionen mechanistischer Begründungen wurden durch die KI-gestützte Analyse identifiziert: die Themen, Kausalität und Granularität der Begründungen (Martin, Kranz, Wulff & Graulich, 2024a, 2024b; Martin & Graulich, 2024a, 2024c). Abschließend wurden die Begründungen auf einer Skala von 0 bis 5 nach ihrer Kausalität und Granularität bewertet, wobei eine Komplexität von 5 die Höchstpunktzahl darstellt.

Die Studie wurde von September bis November 2023 an einer US-amerikanischen Universität durchgeführt und erfasste die Lernverläufe von 266 Studierenden der Organische Chemie II.

Modellierung der Lerntrajektorien

Um zu bestimmen, für welche Studierenden der KI-gestützte Ansatz adaptiven Lernens hilfreich ist, wurden deren Lernverläufe über das Semester hinweg erhoben. Anschließend konnten diese Lernverläufe mittels longitudinaler Cluster-Analyse in verschiedene Lerntrajektorien gruppiert werden. Die beste statistische Passung lag für fünf Trajektorien unterschiedlichen Leistungsniveaus vor (Abb. 1). Eine Analyse des Lernzugewinns zeigt eine Zunahme der Komplexität mechanistischer Begründungen über das Semester hinweg. Besonders Studierende mittleren bis hohen Leistungsniveau verzeichneten Fortschritte in der Komplexität ihrer Begründungen, während leistungsschwächere Studierende weniger davon profitierten. Die Lernverläufe verdeutlichen zudem die starke Kontextabhängigkeit mechanistischer Begründungen. So zeigen sich beispielsweise erhebliche Herausforderungen bei der Begründung alternativer Produkte in der Aldol-Kondensation.

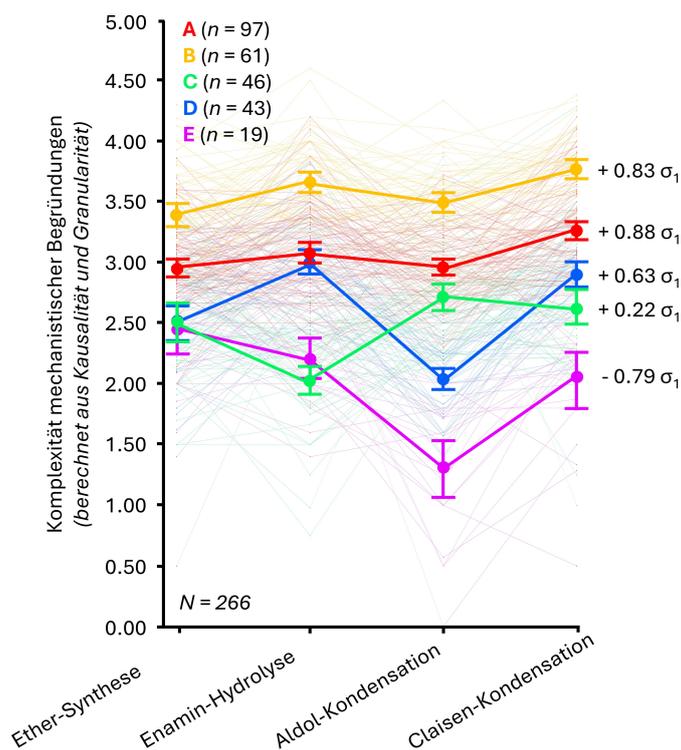


Abb. 1: Klassifikation der Lernverläufe in fünf Trajektorien. Hinweis: Die Lernzuwächse sind in Standardabweichungen relativ zur Ether-Synthese angegeben (σ_1).

Weiterhin waren wir daran interessiert, die Zugehörigkeit zu einer Lerntrajektorie zu erklären. Mithilfe einer diskriminanten Analyse wurde untersucht, ob sich die Komplexität der mechanistischen Begründungen über alle Lerntrajektorien hinweg simultan bezüglich deren Kausalität und Granularität entwickelt. Die Ergebnisse der diskriminanten Analyse zeigen, dass 97 % der Varianz in der Komplexität mechanistischer Begründungen durch eine Diskriminante erklärt werden kann, die Kausalität und Granularität nicht separiert. Dies deutet darauf hin, dass Kausalität und Granularität zwei Facetten derselben Kompetenz, jedoch keine distinkten Fähigkeiten abbilden. Folglich gibt es keine Lerntrajektorie, die in nur einer der beiden Facetten eine überdurchschnittlich hohe oder niedrige Kompetenz aufweist.

Darüber hinaus wurden Unterschiede in der Themennutzung der Studierenden mittels Chi-Quadrat-Test untersucht, der ein signifikantes Ergebnis lieferte ($\chi^2(12) = 111,11, p < 0,0001$). Leistungsschwächere Studierende hatten Herausforderungen bei der Anwendung thermodynamischer und kinetischer Konzepte (Trajektorie C: $n(\text{erwartet}) = 41,68, n(\text{beobachtet}) = 23, p = 0,0038$; Trajektorie E: $n(\text{erwartet}) = 17,21, n(\text{beobachtet}) = 4, p = 0,0014$), während leistungsstärkere Studierende in diesem Bereich erfolgreicher waren (Trajektorie A: $n(\text{erwartet}) = 87,88, n(\text{beobachtet}) = 120, p = 0,0006$). Somit erweist sich die Nutzung energetischer Konzepte als zentraler Prädiktor für komplexe mechanistische Begründungen in der Organischen Chemie.

Schließlich wurde der Einfluss weiterer kognitiver und affektiver Variablen auf die Zugehörigkeit zu einer Lerntrajektorie mittels multinomialer ordinaler Regression untersucht, die ebenfalls ein signifikantes Ergebnis erbrachte ($\chi^2(24) = 141,82; p < 0,0001; R^2 = 0,1826$). In der kognitiven Dimension zeigte sich das chemische Konzeptwissen als zentraler Prädiktor für komplexe mechanistische Begründungen, wohingegen keine Unterschiede zwischen den Trajektorien in Bezug auf die allgemeine wissenschaftliche Argumentationskompetenz festzustellen waren. Darüber hinaus förderte ein hohes Selbstvertrauen bei der Aufgabenbearbeitung die Komplexität der Begründungen, während die empfundene Aufgabenschwierigkeit keinen Einfluss auf den Lernfortschritt hatte.

Auswirkungen von KI-gestützter Adaptivität

Die Ergebnisse zeigen, dass KI-gestützte Adaptivität Leistungsunterschiede nicht verringert und diese in manchen Fällen sogar verstärkt (Abb. 1). Der Nutzen von Adaptivität für die Lehre muss folglich diskutiert werden (vgl. Dumont & Ready, 2023): Adaptivität kann nicht zu gleichen Lernbedingungen führen, da sie darauf abzielt, Lernressourcen individuell anzupassen. Eine Gleichheit des Inputs ist somit nicht gegeben. Adaptivität führt, wie zahlreiche Studien zeigen, allerdings auch nicht zu gleichen Lernergebnissen. Leistungsstärkere Studierende können anspruchsvollere Lernpfade bewältigen und profitieren dadurch von diesen erweiterten Lerngelegenheiten. Eine Perspektive der Angemessenheit zeigt jedoch den Nutzen von Adaptivität: Sie kann einen minimalen Konsens an Basiskompetenzen fördern, sodass alle Lernenden befähigt werden, aktiv an der Gesellschaft und im Berufsleben teilzunehmen. KI-gestützte Adaptivität ermöglicht es somit, zentrale Basiskompetenzen individuell anzuleiten und somit die jeweilige Lerngeschwindigkeit eines Lernenden zu berücksichtigen. Nach dem Erwerb von Basiskompetenzen kann KI eine gezielte Förderung weiterer Fähigkeiten unterstützen.

Literatur

- Asmussen, G., Rodemer, M., & Bernholt, S. (2023). Blooming student difficulties in dealing with organic reaction mechanisms—an attempt at systemization. *Chemistry Education Research and Practice*, 24 (3), 1035-1054
- Asmussen, G., Rodemer, M., & Bernholt, S. (2024). Stepping stones to success: A qualitative investigation of the effectiveness of adaptive stepped supporting tools for problem-solving in organic chemistry to design an intelligent tutoring system. *International Journal of Science Education*, Early View Article, 1-23
- Dood, A. J., Dood, J. C., Cruz-Ramírez de Arellano, D., Fields, K. B., & Raker, J. R. (2020). Using the research literature to develop an adaptive intervention to improve student explanations of an S_N1 reaction mechanism. *Journal of Chemical Education*, 97 (10), 3551-3562
- Dood, A. J., & Watts, F. M. (2023). Students' strategies, struggles, and successes with mechanism problem solving in organic chemistry: a scoping review of the research literature. *Journal of Chemical Education*, 100 (1), 53-68
- Dumont, H., & Ready, D. D. (2023). On the promise of personalized learning for educational equity. *Npj science of learning*, 8 (1), Article 26
- Graulich, N. (2015). The tip of the iceberg in organic chemistry classes: how do students deal with the invisible? *Chemistry Education Research and Practice*, 16 (1), 9-21
- Lieber, L. S., & Graulich, N. (2022). Investigating students' argumentation when judging the plausibility of alternative reaction pathways in organic chemistry. *Chemistry Education Research and Practice*, 23 (1), 38-53
- Lieber, L. S., Ibraj, K., Caspari-Gnann, I., & Graulich, N. (2022). Closing the gap of organic chemistry students' performance with an adaptive scaffold for argumentation patterns. *Chemistry Education Research and Practice*, 23 (4), 811-828
- Martin, P. P., & Graulich, N. (2024a). Beyond Language Barriers: Allowing Multiple Languages in Postsecondary Chemistry Classes Through Multilingual Machine Learning. *Journal of Science Education and Technology*, 33 (3), 333-348
- Martin, P. P., & Graulich, N. (2024b). Lehre in der organischen Chemie individualisieren. *Nachrichten aus der Chemie*, 72 (3), 8-11
- Martin, P. P., & Graulich, N. (2024c). Navigating the data frontier in science assessment: Advancing data augmentation strategies for machine learning applications with generative artificial intelligence. *Computers and Education: Artificial Intelligence*, 7, Article 100265
- Martin, P. P., & Graulich, N. (2023). When a machine detects student reasoning: a review of machine learning-based formative assessment of mechanistic reasoning. *Chemistry Education Research and Practice*, 24 (2), 407-427
- Martin, P. P., Kranz, D., Wulff, P., & Graulich, N. (2024a). Exploring new depths: Applying machine learning for the analysis of student argumentation in chemistry. *Journal of Research in Science Teaching*, 61 (8), 1757-1792
- Martin, P. P., Kranz, D., Wulff, P., & Graulich, N. (2024b). Tiefgreifende Analyse von Argumenten in der Organischen Chemie mit maschinellem Lernen. In H. van Vorst (Ed.), *Frühe naturwissenschaftliche Bildung. Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik. Jahrestagung in Hamburg 2023*, 74-77
- McNeill, K. L., Lizotte, D. J., Krajcik, J., & Marx, R. W. (2006). Supporting students' construction of scientific explanations by fading scaffolds in instructional materials. *Journal of the Learning Sciences*, 15 (2), 153-191
- Weinrich, M. L., & Sevian, H. (2017). Capturing students' abstraction while solving organic reaction mechanism problems across a semester. *Chemistry Education Research and Practice*, 18 (1), 169-190