

Vorstellungen von Lehramtsstudierenden der Chemie zu Evaluation und Entwicklungsprozess von Simulationen

Ausgangslage und Zielformulierung

Simulationen spielen sowohl im Chemieunterricht als auch in Wissenschaft und Gesellschaft eine zunehmend bedeutende Rolle. Im Kontext des Chemieunterrichts ist die Fähigkeit von Moleküldynamiksimulationen, Einblicke in die submikroskopische Ebene und deren dynamische Prozesse zu gewähren, von besonderem Interesse (Xie & Tinker, 2006). Die gesellschaftliche Relevanz von Simulationen wird z.B. in der Klimaforschung deutlich, wo sie zentrale Erkenntnisse für politische und ökologische Entscheidungsprozesse ermöglichen. Darüber hinaus ergeben sich grundlegende epistemologische Fragestellungen, etwa hinsichtlich der Validität und Reliabilität von Simulationsergebnissen (Durán, 2018), des Prozesses der Simulationsbildung und der daraus resultierenden *epistemischen Undurchsichtigkeit* (Humphreys, 2009). Diese Aspekte sind sowohl aus der Perspektive der *scientific literacy* als auch im Hinblick auf den spezifischen Umgang mit Simulationen und deren Ergebnissen im Chemieunterricht von Bedeutung. Vor diesem Hintergrund betonen Seoane et al. (2022), dass Simulationen nicht nur als Lehr-Lern-Gelegenheiten in den Unterricht integriert, sondern zugleich als Bestandteil naturwissenschaftlicher Praktiken aus einer epistemologischen Perspektive reflektiert werden sollten. Damit dies gelingen kann, benötigen Lehrkräfte Gelegenheiten, sich mit dem Einsatz und der Bedeutung von Simulationen in Unterricht und Wissenschaft auseinanderzusetzen. Für die bedarfsorientierte Gestaltung und Evaluation solcher Lerngelegenheiten ist es notwendig, zunächst die Vorstellungen von Lehrkräften zu Simulationen zu erfassen – ein Aspekt, der bislang, insbesondere im Bereich der Evaluation und des Entwicklungsprozesses von Simulationen weitgehend vernachlässigt wurde (ebd.). Ziel des Forschungsprojektes ist es daher, die Vorstellungen von Lehramtsstudierenden der Chemie in diesen spezifischen Bereichen der *meta-modelling knowledge* (Lazenby et al., 2020) zu analysieren und auf Grundlage modelltheoretischer Ansätze zu charakterisieren. Darüber hinaus sollen die Auswirkungen einer universitären Lerngelegenheit auf eben diese Vorstellungen untersucht werden, um eine erste Reflexion des Seminars anzustoßen und eine Grundlage für dessen Evaluation zu schaffen.

Die Epistemologie computerbasierter Simulationen

Computersimulationen werden in der wissenschaftsphilosophischen Literatur als eigenständige epistemische Praktiken verstanden, die neben Theorie und Experiment eine dritte Säule wissenschaftlicher Erkenntnis bilden (Heukmann, 2024). Simulationen werden in Anlehnung an Seoane et al. (2022) als „eine Darstellung des dynamischen Verhaltens eines Systems gemäß einem approximativen mathematischen Modell, das zu seiner Umsetzung auf einem Computer verwendet wird“, beschrieben. Sie sind dabei allerdings nicht bloß Repräsentationen realer Systeme, sondern konstruieren Phänomene aktiv durch Prozesse der Abstraktion und Idealisierung, wodurch sie spezifische Erkenntnisformen hervorbringen (Landriscina, 2013). Zugleich sind sie durch eine gewisse *epistemische Undurchsichtigkeit* gekennzeichnet, die u.a. durch den Prozess der Transformation innerhalb des Entwicklungsprozesses, sowie

der komplexen Rechenprozesse entsteht (Humphreys, 2009; Lenhard, 2015). Nach Birta & Arbez (2019) lässt sich der Prozess der Simulationsbildung in mehrere zentrale Schritte gliedern: die Definition des zu untersuchenden Systems, die Formulierung eines konzeptionellen Modells, die Transformation in ein diskretes Simulationsmodell sowie die Implementierung in ein lauffähiges Simulationsprogramm. Dabei spielen Fragen der Reliabilität, Validierung und Verifizierung in nahezu allen Phasen des Prozesses eine entscheidende Rolle (Oberkampff & Roy, 2012). In der bisherigen Forschung wird der Bereich der *meta-modelling knowledge* überwiegend im Zusammenhang mit Modellen untersucht (Lazenby et al., 2020; Upmeyer zu Belzen et al., 2019). Die oben genannten Aspekte stellen jedoch spezifische Merkmale von Simulationen dar, die sich in dieser Form nicht auf Modelle übertragen lassen. Simulationen weisen Gemeinsamkeiten mit Modellen auf, haben allerdings eine distinkte Epistemologie (ebd.). Dies macht eine literaturbasierte inhaltliche Erweiterung und Anpassung der ursprünglich auf Modelle bezogenen Dimensionen der *meta-modelling knowledge* erforderlich.

Forschungsfragen und -design

Zur Erfassung der Vorstellungen von Simulationen bei Masterlehramtsstudierenden der Chemie wurde in drei Semestern (WiSe 22/23 bis WiSe 23/24) eine problemzentrierte Interviewstudie im Prä-/Post-Design durchgeführt (N=24). Als Intervention dient eine Seminareinheit, die aus zwei Lerneinheiten à 90 Minuten zum Thema „Lernen mit und über Simulationen“ besteht (Kirchhoff et al., 2025). In der Erhebung erstellen die Studierenden zunächst *concept maps* mit begleitenden *concurrent think alouds* (Van Someren et al., 1994). Daran schließt sich ein leitfadengestütztes Interview an, welches die für die Forschungsfragen relevanten Daten enthält:

- (F1) Inwiefern lässt sich das Modellverständnis von Simulationen bei Lehramtsstudierenden der Chemie in den Bereichen Prozess der Simulationsbildung und Evaluation von Simulationen charakterisieren?
- (FII) Inwieweit hat sich das Modellverständnis von Simulationen bei Lehramtsstudierenden der Chemie nach Bearbeitung der Lerneinheit in den Bereichen verändert?

Die Datenauswertung erfolgt durch eine inhaltlich strukturierende und evaluative qualitative Inhaltsanalyse nach Kuckartz & Rädiker (2022) mithilfe von f4transkript. Die inhaltsanalytischen Kategorien wurden deduktiv aus der Literatur entwickelt (Birta & Arbez, 2019; Oberkampff & Roy, 2012) und induktiv ergänzt. Im Anschluss wurden Niveaustufen anhand der inhaltsanalytischen Kategorien sowie der Niveaustufen nach Lazenby et al. (2020) gebildet.

Die Vorstellungen der Studierenden

Die Ergebnisse im Bereich des **Prozesses der Simulationsbildung** zeigen auf, dass die befragten Lehramtsstudierenden im Prä-Interview ein niedrige bis mittlere Niveaustufe aufweisen (F1). Dabei fällt auf, dass das Modellverständnis der Studierenden stark durch die Beurteilung des edukativen Nutzens von Simulationen geprägt ist. Studierende sprechen im Zuge der Simulationsbildung daher häufig über grafische oder repräsentative Aspekte (z. B. Layout, Visualisierung). In diesem Sinne wird Programmieren nicht als mathematisch-konzeptioneller Schritt erkannt, sondern als gestalterische Tätigkeit, während ein grundlegender Einbezug von Modellen in den Prozess häufig gänzlich fehlt. Wenige erreichen eine hohe bis sehr hohe Niveaustufe im Bereich der Simulationsbildung. Sie erkennen Modelle als zentrale Ausgangsbasis, verstehen deren zweckabhängige Anpassung im Sinne der *felicitous falsehoods* (Elgin, 2022) und beziehen mathematische, algorithmische sowie evaluative Aspekte in ihre

Betrachtungen ein. Darüber hinaus betrachten sie die Evaluation als wichtigen Aspekt der Simulationsbildung.

Im Bereich der **Evaluation von Simulationen** weist das Gros der Studierende ein niedriges bis mittleres Niveau auf. Sie bewerten Simulationen primär nach didaktischen und visuellen Kriterien, wobei Realitätsnähe und Anschaulichkeit als zentrale Gütekriterien gelten. Eine als gut empfundene Simulation wird als eine realitätsnahe Darstellung beschrieben, weshalb häufig der Abgleich mit experimentellen oder realen Daten als wichtigste Methode zur Bewertung genannt wird. Dieses Gütekriterium ist jedoch epistemologisch problematisch, da gerade kontrafaktische Annahmen Simulationen häufig erst funktional machen (Lenhard, 2015). Nur ein paar Studierende sind einer hohen Niveaustufe zuordbar, was sich dadurch zeigt, dass sie Simulationen als zweckorientierte epistemische Werkzeuge im Sinne der *adequacy for purpose* (Parker, 2020) deuten, sowie auf die Verifikation des Codes verweisen, womit sie zentrale Elemente der wissenschaftlichen Simulationspraxis erfassen.

In Bezug auf FII (Abb.1) zeigen die Ergebnisse insgesamt eine leichte Zunahme des Verständnisses in den untersuchten Bereichen. Dennoch bleiben insbesondere die Rolle von Modellen sowie die mathematische und algorithmische Grundlage der Simulationsbildung auch nach der Intervention weitgehend unberücksichtigt, was eine Anpassung des Seminarkonzepts nahelegt. In beiden Erhebungszeitpunkten steht außerdem der didaktische Nutzen im Vordergrund: Die Simulationsbildung sowie die Evaluation werden aus einer didaktischen Perspektive mit dem Schwerpunkt der Visualisierung beschrieben.

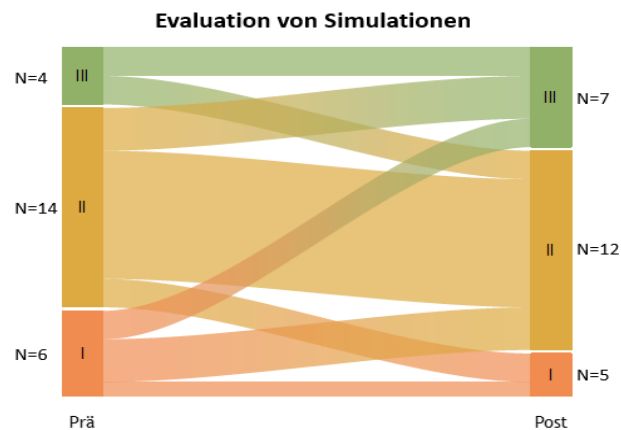


Abb. 1 Veränderung der Niveaustufen im Bereich Evaluation von Simulationen (Prä/Post-Vergleich).

Fazit und Ausblick

Die Ergebnisse verdeutlichen, dass Lehramtsstudierende Simulationen überwiegend als didaktische Visualisierungswerkzeuge verstehen und Modelle sowie mathematische Bestandteile im Prozess und der Evaluation nur selten berücksichtigen. Nach der Lerneinheit zeigen sich erste Verbesserungen, insbesondere im Verständnis des Prozesses der Simulationsbildung, als iterativen, modellbasierten Prozess. Es bleibt jedoch fraglich, ob eine einmalige, 90-minütige Lehrintervention ausreicht, um epistemologische Vorstellungen nachhaltig zu entwickeln. Darüber hinaus ist es für die Weiterentwicklung des universitären Lehrangebots zentral, den Modellbezug und die mathematisch-algorithmische Dimension stärker zu betonen, um ein tieferes epistemologisches Verständnis in den Bereichen zu fördern.

Literatur

- Heukmann, B. L. (2024). Mit Simulationen im Biologieunterricht das Verständnis von Nature of Science reflektieren und fördern. In *Biologiedidaktische Nature of Science-Forschung: Zukunftsweisende Praxis* (S. 71–83). Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg.
- Birta, L. G. & Arbez, G. (2019). *Modelling and simulation*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-18869-6>
- Durán, J. M. (2018). *Computer simulations in science and engineering*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-90882-3>
- Elgin, C. (2022). Models as felicitous falsehoods. *Principia: an international journal of epistemology*, 26(1), 7–23. <https://doi.org/10.5007/1808-1711.2022.e84576>
- Humphreys, P. (2009). The philosophical novelty of computer simulation methods. *Synthese*, 169(3), 615–626. <https://doi.org/10.1007/s11229-008-9435-2>
- Kirchhoff, A., Hoppmann, J. & Schwedler, S. (in press). Mit Simulationen lehren lernen – Eine digitale Lernwerkstatt für digital angereicherten Chemieunterricht. *HLZ*.
- Kuckartz, U. & Rädiker, S. (2022). *Qualitative Inhaltsanalyse: Methoden, Praxis, Computerunterstützung : Grundlagentexte Methoden* (5. Auflage). Grundlagentexte Methoden. Beltz Juventa. <https://www.beltz.de/fileadmin/beltz/leseproben/978-3-7799-6231-1.pdf>
- Landriscina, F. (2013). *Simulation and learning: A model-centered approach* (1st ed.). Springer New York. <https://ebookcentral.proquest.com/lib/kxp/detail.action?docID=1205294>
- Lazenby, K., Stricker, A., Brandriet, A., Rupp, C. A., Mauger-Sonnek, K. & Becker, N. M. (2020). Mapping undergraduate chemistry students' epistemic ideas about models and modeling. *Journal of Research in Science Teaching*, 57(5), 794–824. <https://doi.org/10.1002/tea.21614>
- Lenhard, J. (2015). *Mit allem rechnen - zur Philosophie der Computersimulation*. DE GRUYTER. <https://doi.org/10.1515/9783110401363>
- Van Someren, M. W., Barnard, Y. F. & Sandberg, J. A. C. (1994). The Think Aloud Method - A Practical Guide to modelling cognitive processes. https://www.researchgate.net/publication/215439100_The_Think_Aloud_Method_-_A_Practical_Guide_to_Modelling_CognitiveProcesses
- Oberkampff, W. L. & Roy, C. J. (2012). *Verification and validation in scientific computing* (Reprint). Cambridge Univ. Press.
- Parker, W. S. (2020). Model evaluation: An adequacy-for-purpose view. *Philosophy of Science*, 87(3), 457–477. <https://doi.org/10.1086/708691>
- Seoane, M. E., Greca, I. M. & Arriasecq, I. (2022). Epistemological aspects of computational simulations and their approach through educational simulations in high school. *SIMULATION*, 98(2), 87–102. <https://doi.org/10.1177/0037549720930084>
- Upmeyer zu Belzen, A., Krüger, D. & van Driel, J. (Hrsg.). (2019). *Models and Modeling in Science Education. Towards a Competence-Based View on Models and Modeling in Science Education*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-30255-9>
- Xie, Q. & Tinker, R. (2006). Molecular dynamics simulations of chemical reactions for use in education. *Journal of Chemical Education*, 83(1), 77. <https://doi.org/10.1021/ed083p77>