

Rapport: Olav Thon stiftelsen – støtte til undervisningsrelaterte forskningsprosjekter

Sluttrapport, 23.4.2019

Prosjekttittel: **Komplekse matematiske algoritmer oven-fra-og-ned: Monte Carlo-metoder for stignering forklart av studenter til studenter**

Prosjektleder (PL): **Titus S. van Erp**, Professor, epost: titus.van.erp@ntnu.no, Institutt for Kjemi, Fakultet for naturvitenskap, NTNU

Hovedbidragsytere: **Anders Lervik** (Forsker), **Ola Aarøen** (PhD stipendiat), and **Oda Dahlen** (PhD 11.1.2019).

Prosjektperiode: 2016-2017-2018

Vi har i dette prosjektet forbedret studentaktiv læring for komplekse algoritmer i molekylære simuleringer ved å utvikle databaserte øvinger og interaktive visualiseringsverktøy. Spesielt har vi hatt som mål å eksemplifisere de nyeste metodene i fagfeltet, noe som inkluderer metoder som utvikles akkurat nå i gruppen til Prof. van Erp [1, 2]. I tillegg har vi også ferdigstilt øvinger for mer grunnleggende områder som kaos, tidssteg, integratorer og detaljert balanse i Monte Carlo.

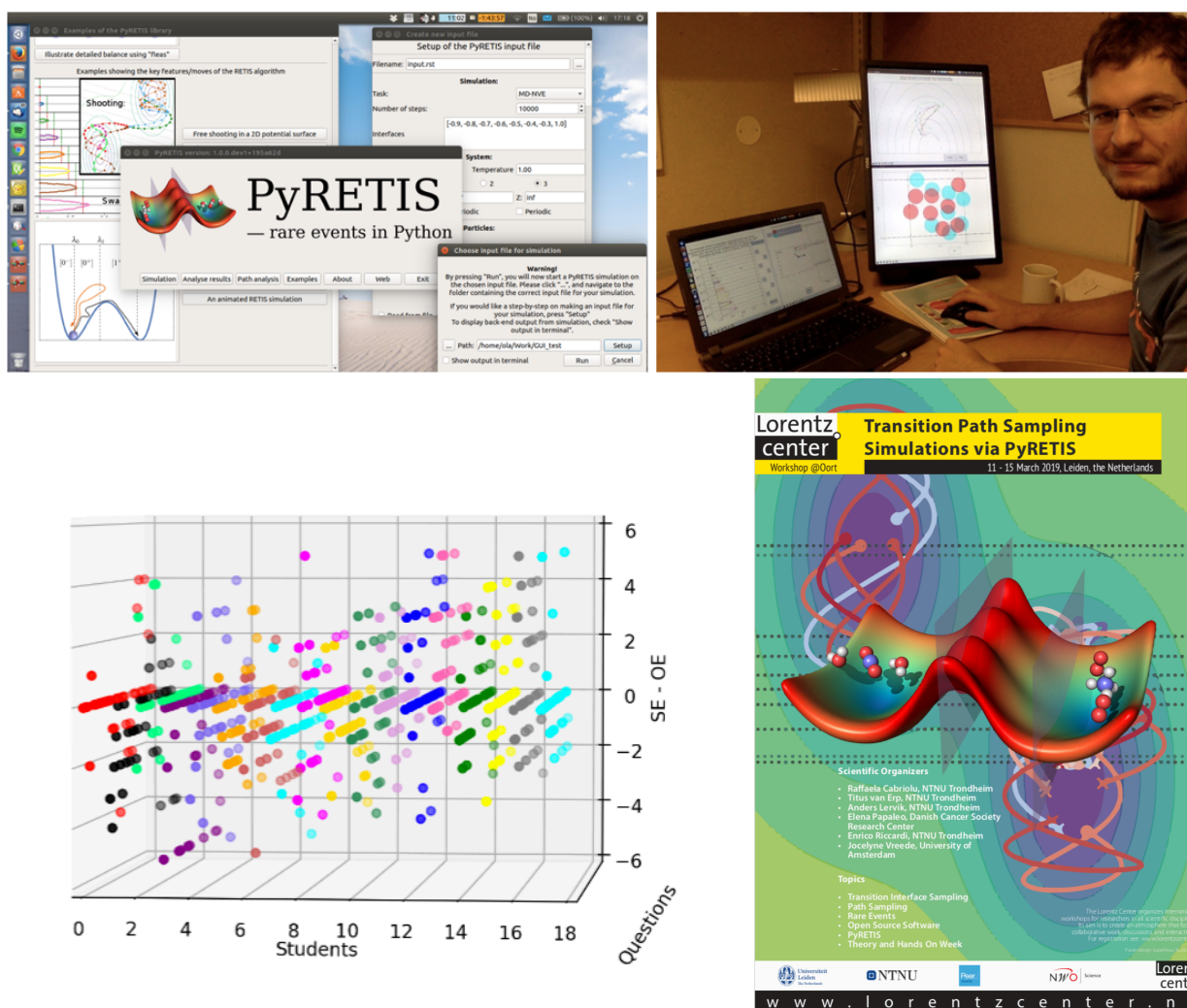


Figure 2: Øverst til venstre: Eksempler på øvinger via det grafiske grensesnittet. Øverst til høyre: Ola Aarøen jobber med utviklingen av det grafiske grensesnittet og øvingene. Nederst til venstre: en graf fra den didaktiske artikkelen som er ferdigstilt. Nederst til høyre: plakat for kunngjøring av vårt arbeidsseminar i Leiden, Nederland.

For å oppnå dette målet, har vi utviklet et grafisk miljø med integrerte læringsverktøy i vår open-source simuleringspakke PyRETIS (www.pyretis.org). Dette inkluderte grafiske grensesnitt og sanntids visualiseringsverktøy. De grafiske grensesnittene gjør det veldig lett for studenter å eksperimentere med koden, siden det er mulig å endre parametere, og få umiddelbar tilbakemelding via animerte resultater grafisk på skjermen. Dette er mye mer intuitivt sammenliknet med å endre parametere i en inn-fil, lese om sammenhengen mellom parametere og de statistiske teoriene som

er brukt, og til slutt få en ut-fil med resultater som deretter må analyseres. PyRETIS-koden som inkluderer læringsverktøyene ble utgitt i 2017 med en publikasjon i *Journal of Computational Chemistry* [3].

Koden ble først offentlig demonstrert under et PhD-arbeidsseminar i Mainz, Tyskland, der vi var invitert av organisatorene fra Max Planck instituttet og universitetet i Mainz. Etter dette har vi inkorporert våre databaserte øvinger i master/PhD-kurset *Molekylmodellering* ved NTNU og dette er nå en standard del av kurset som er høyt verdsatt. Etter at studentene har arbeidet med alle de interaktive øvingene, så presenterer de sine funn til de andre studentene. Det at studentene arbeider med nye metoder som aktivt er under utvikling i fagfeltet er ekstra motiverende og dette reflekteres klart i entusiasmen som studentene viser i presentasjonene sine.

Ola Aarøen som utviklet en stor del av de interaktive verktøyene gav et foredrag om dette i seminarserien *Virtual Simulation Lab* (www.virtualsimlab.com) der PhD-studenter presenterer og forklarer hverandre om programmerings- og visualiseringsaspekter ved sitt arbeid. Dette foredraget er tilgjengelig på: https://youtu.be/9twqyfD_1Ac.

Oda Dahlen undersøkte kvantitativt effekten av våre dataøvinger for læringsutbyttet til studentene. Hun undersøkte også hypotesen om at selvevaluering er et verdifullt verktøy for å differensiere og skreddersy læringsprosessen til hver individuelle student med tanke på ferdighetsnivå og interesser. Målet med denne studien er å etablere en stor database med mulige øvinger som studenter veiledes igjennom ved hjelp av en algoritme. Etter å ha gjennomført en øving, så skal algoritmen velge ut den neste øvingen. Dette kan f.eks. være en øving som er veldig lik den forrige eller helt forskjellig, dersom algoritmen konkluderer med at læringsmålene til den forrige øvingen var tilstrekkelig oppnådd. Oda presenterte hennes arbeid ved en konferanse i Oslo og har sendt inn en artikkel om studien til et fagfelleurdert tidsskrift [4].

Fakultet for naturvitenskap ved NTNU har nå oppdaget potensialet i vårt initiativ og har derfor bevilget 250kNOK til et nytt prosjekt, VIRAL, som har som mål å videreutvikle den didaktiske innovasjonen beskrevet ovenfor. Videre har Lorentz-senteret i Leiden, Nederland, vært vert for et PhD/postdoc arbeidsseminar om våre modelleringsmetoder og PyRETIS-programmet. På dette arbeidsseminaret var det 42 internasjonale deltakere som fikk opplæring i teorien bak stigeringsmetoder med praktiske applikasjoner. I den første praktiske sesjonen av arbeidsseminaret brukte vi de interaktive verktøyene utviklet i Olav Thon prosjektet, siden disse gir den mest intuitive introduksjonen.

References

- [1] T. S. van Erp, "Reaction rate calculation by parallel path swapping," *Phys Rev Lett*, vol. 98, no. 26, p. 268301, 2007.
- [2] R. Cabriolu, K. M. S. Refsnes, P. G. Bolhuis, and T. S. van Erp, "Foundations and latest advances in replica exchange transition interface sampling," *J. Chem. Phys.*, vol. 147, p. 152722, OCT 21 2017.
- [3] A. Lervik, E. Riccardi, and T. S. van Erp, "PyRETIS: A well-done, medium-sized python library for rare events," *J. Comput. Chem.*, vol. 38, no. 28, pp. 2439–2451, 2017.
- [4] O. Dahlen, A. Lervik, O. Aarøen, R. Cabriolu, R. Lyng, and T. S. van Erp, "Teaching complex molecular simulation algorithms: Using self-evaluation to tailor web-based exercises at an individual level," *submitted*, 2019.