Στοχαστική Προσομοίωση Monte Carlo Μοριακής Δυναμικής Διατομικού Αεριού ως Εργαλείο για τη Διδασκαλία στις Θετικές Επιστήμες

Σ. Ι. Ψυχάρης, Β. Ι. Τάτσης
Πανεπιστήμιο Αιγαίου
psycharis@rhodes.aegean.gr, premnt06024@rhodes.aegean.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στη παρούσα εργασία εργαζόμαστε με το λογισμικό Matlab – Simulink και την μέθοδο Monte Carlo προκειμένου να δημιουργήσουμε ένα μοντέλο που να προσομοιώνει τη συμπεριφορά ενός διατομικού αερίου. Οι προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων είναι ένα πολύτιμο εργαλείο για τον κονστρουκτιβισμό και την ανακαλυπτική μάθηση. Η παιδαγωγική χρήση της μοριακής δυναμικής παίρνει διαρκώς αυξανόμενες διαστάσεις λόγω των συγκριτικών πλεονεκτημάτων που προσφέρει. Μια μέθοδος που παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα στο στοχαστικό πεδίο της μοριακής δυναμικής είναι η μέθοδος Monte Carlo. Με βάση αυτά παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο, τον τρόπο δημιουργίας και λειτουργίας του μοντέλου αλλά και αποτελέσματα που προσεγγίζουν θεωρητικές τιμές για το αέριο υδρογόνο.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: *Προσομοίωση, Μοντέλο, Μοριακή δυναμική, Monte Carlo*

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι προσομοιώσεις που δημιουργούνται σε Η/Υ είναι πολύτιμες για ένα μεγάλο εύρος επιστημονικών τομέων όπως βιολογία, γενετική, γεωλογία, χημεία, φυσική, περιβάλλον, κοινωνικές επιστήμες, οικονομικά και μαθηματικά (Means et al., 1993). Οι προσομοιώσεις ως οπτικοποιημένα πειράματα δημιουργούν βέλτιστες συνθήκες μάθησης, συμπληρώνοντας τα πραγματικά πειράματα. Δίνουν στους μαθητές τη δυνατότητα να προσεγγίσουν με τον καλύτερο τρόπο στα της θεωρίας (Rezai & Kentz, 2002, Δενδρινός & Καλκάνης, 2007). Επίσης η χρήση των αναπαραστάσεων καθίσταται συμπληρωματική του γραπτού και του προφορικού λόγου και φαίνεται απαραίτητη κατά την κοινωνική αλληλεπίδραση (Ainsworth, 1999). Ανάλογα με το είδος της μοντελοποίησης διακρίνονται τρία είδη προσομοιώσεων (Kristensen & Pedersen, 2003): α) Συγκεκριμένη αναλυτική μοντελοποίηση, που βασίζεται στις μαθηματικές εξισώσεις που περιγράφουν τα φυσικά συστήματα. β) Πιθανοκεντρικά μοντέλα, όπου η δομή των συστημάτων προκύπτει από στατιστική ανάλυση δεδομένων πραγματικών συστημάτων. γ) Στοχαστικά μοντέλα, όπου η προσομοίωση βασίζεται στη δημιουργία πολλών τυχαίων (random) καταστάσεων, όπου η ανάλυσή τους οδηγεί στο τελικό αποτέλεσμα.

Οι τρισδιάστατες προσομοιώσεις δίνουν τη δυνατότητα για παρουσίαση των φυσικών συστημάτων σχεδόν όπως είναι, προωθώντας έτσι εμπειρίες που βοηθούν τους μαθητές να κατανοήσουν τα διδακτικά αντικείμενα (van Joolingen & de Jong, 1996). Από τη άλλη το οπτικό σύστημα παρατήρησης καταλαμβάνει στον άνθρωπο το μεγαλύτερο κομμάτι του εγκεφάλου του (Mzoughi et al., 2007). Έτσι η χρήση των Η/Υ δημιούργησε έναν μεγάλο αριθμό υποστηρικτών των οπτικοποιήσεων στην εκπαίδευση αφού διευκόλυνε το σχεδιασμό οπτικοποιήσεων δημιουργώντας ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών. (Δενδρινός & Καλκάνης, 2007).

Διδακτική χρήση Μοριακής Δυναμικής

Αντιλήψεις που άπτονται της σωματιδιακής δομής της ύλης δίνουν στο μαθητή τη δυνατότητα να προσεγγίζει τις ίδιες τις δομές των ουσιών αρχικά, αλλά και τις μεταβολές τους στη συνέχεια κατά τη διάρκεια των φαινομένων. Οι προσεγγίσεις του μικρόκοσμου γίνονται συνήθως με τη χρήση κατάλληλων στοχαστικών μοντέλων (Παπαγεωργίου κ.ά., 2007). Ο σχεδιασμός των αναλυτικών προγραμμάτων εμφανίζει μια περιορισμένη χρήση των διδακτικών προσεγγίσεων από τη σκοπιά της σωματιδιακής δομής της ύλης. Διεθνώς στα αναλυτικά προγράμματα ενσωματώνονται διαρκώς σωματιδιακές ιδέες από τις χαμηλές ακόμη βαθμίδες της εκπαίδευσης, όπως για παράδειγμα στην Αγγλία στο πρόγραμμα DfES (2003) (Παπαγεωργίου, 2007). Πολλοί ερευνητές προτείνουν εκπαιδευτικές προσεγγίσεις και πρακτικές της σωματιδιακής δομής της ύλης με σκοπό να εξυπηρετηθεί η περιγραφή και ερμηνεία ενός συνόλου φυσικών φαινομένων που εντάσσονται στο αναλυτικό πρόγραμμα της πρωτοβάθμιας εκπαίδευσης και συγκεκριμένα στα Φυσικά της Ε΄ και Στ΄ τάξης (Ιμβριώτη & Καλκάνης, 2007).

Γενικά από την αξιοποίηση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής για διδακτικούς σκοπούς προκύπτουν τα παρακάτω συμπεράσματα:

- Η μοριακή δυναμική είναι αποδείχθηκε ουσιαστική στην εκμάθηση των κύριων ιδιοτήτων της ύλης, αλλαγών που συνδέονται με τη θέρμανση ή την ψύξη μιας ουσίας, των αλλαγών φυσικής κατάστασης και εννοιών χημείας. (Bar, 1989).
- Οι επιδόσεις στο μικροσκοπικό πλαίσιο ήταν σαφώς πιο υψηλές απ΄ ό,τι στο μακροσκοπικό πλαίσιο ερμηνείας των φαινομένων (Νταλαούτη & Τσαπαρλής, 2007).
- Το μοντέλο της μοριακής δυναμικής μπορεί να ενοποιεί ποικίλα φαινόμενα, να τα αναπαριστά, να τα προβλέπει και να τα εξηγεί. (Lee et al. 1993). Δεν χρειάζεται έτσι η δημιουργία διαφορετικών μοντέλων για την προσομοίωση διαφορετικών φυσικών φαινομένων.
- Τα μοντέλα μοριακής δυναμικής χαρακτηρίζονται από απλότητα και οικονομία ως προς τον τρόπο λειτουργίας κατά την εφαρμογή τους σε Η/Υ (Lee et al. 1993). Κάτι που τα καθιστά ευέλικτα για εκπαιδευτική χρήση.

Η μοριακή δυναμική εξηγεί τα φυσικά φαινόμενα από την πιο απλή θεώρηση τους στην πρώτη δημοτικού μέχρι τη κβαντική θεωρία ερμηνείας των φαινομένων. Η γνώση παρέχεται ως ένα ενιαίο οικοδόμημα χωρίς ανατροπές και διορθώσεις δίνοντας έτσι πεδίο εφαρμογής της κονστρουβιστικής θεωρίας για την εκπαίδευση.

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ MONTE CARLO

Ορίζεται ως η μίμηση της συμπεριφοράς ενός πολύπλοκου μοντέλου με πιθανοκεντρικό τρόπο και η χρήση στοχαστικών τεχνικών για τη μελέτη μη στοχαστικών μαθηματικών προβλημάτων (Δελαπόρτας, 1994). Τα στοχαστικά μοντέλα εξελίσσονται τυχαία ως προς το χρόνο ή οποιαδήποτε άλλη παράμετρο, περιγράφουν τη διαδοχική εξέλιξη ως προς την όποια παράμετρο και εκφράζονται από μια συλλογή τυχαίων καταστάσεων, σε κοινό χώρο πιθανοτήτων (Γκανάτσιου & Τζορτζιος, 2003). Αυτή η συλλογή ονομάζεται στοχαστικό μοντέλο ή διαδικασία. Η λέξη «στοχαστικό» εισάγει μια αβεβαιότητα στη δημιουργία του μοντέλου μιας και αυτό εξαρτάται από το «στοχασμό» του μελετητή. Ο μελετητής δημιουργεί με αφετηρία το βασικό μηχανισμό του φυσικού συστήματος και την κρίση του ως ένα βαθμό, στοχαστικά μοντέλα με αβέβαια αποτελέσματα, σε αντίθεση με τα ντετερμινιστικά μοντέλα που ο υπολογισμός γίνεται αναλυτικά, με σύνθεση των εξισώσεων που περιγράφουν τη λειτουργία των επιμέρους συστημάτων.

Η ανάπτυξη της στατιστικής θεωρία στις αρχές του 20^{ου} αιώνα, στα μαθηματικά και των ιδεών που πηγάζουν από αυτή, οδήγησε στην ανάπτυξη στοχαστικών μοντέλων στις φυσικές επιστήμες για φαινόμενα που δεν μπορούσαν να εκφραστούν μαθηματικά, με αναλυτικό τρόπο. Μια σημαντική θεωρία στην οποία εφαρμόζονται για πρώτη φορά στοχαστικές τεχνικές είναι η θεωρία των «Στοχαστικών – Μαρκοβιανών Ανελίξεων» (Stochastic-Markov Process Theory) ή όπως έχει επικρατήσει «Αλυσίδες Μαρκοφ» (Markov Chain) (Γκανάτσιου & Τζορτζιος, 2003, Δελαπόρτας, 1994). Η θεωρία αυτή βρίσκει εφαρμογή με πολύ καλά αποτελέσματα για τη μελέτη φυσικών φαινομένων και είναι η θεωρητική βάση για τη μέθοδο Monte Carlo (Voulgarakis, 2002). Δημιουργήθηκε από το Ρώσο μαθηματικό Markov (1856-1922) από τις μελέτες του για τον τρόπο αλλαγής σε ένα λογοτεχνικό κείμενο, των φωνηέντων σε σχέση με τα σύμφωνα. Με τον τρόπο αυτό γίνεται προσπάθεια να προβλεφθεί η εξέλιξη ενός τυχαίου φαινομένου λαμβάνοντας υπόψιν το βασικό μηχανισμό του μελετώμενου συστήματος.

Ιδανικά αέρια

Ο αριθμός των μορίων κάποιου αερίου είναι μεγάλος και η απόσταση που τα χωρίζει υπο ατμοσφαιρική πίεση είναι μεγάλη συγκρινόμενη με το μέγεθος των μορίων. Αυτό σημαίνει ότι τα μόρια καταλαμβάνουν έναν αμελητέο όγκο στο δοχείο που βρίσκονται ο περισσότερος χώρος είναι κενός, ανάμεσα στα μόρια. Μια βασική επιστημονική υπόθεση που έχει γίνει για προκειμένου να μελετηθεί η συμπεριφορά των αερίων είναι η υπόθεση του ιδανικού αερίου όπου παρουσιάζεται πιο απλοποιημένη συμπεριφορά.

Είναι γνωστό από τη Θερμοδυναμική (Serway, 2003) ότι ένα ιδανικό αέριο μπορεί να περιγράφει μακροσκοπικά από τρεις ιδιότητες, τη πίεση (p), τη θερμοκρασία (T) και τον όγκο (V) του αερίου. Η «Καταστατική εξίσωση των αερίων» μας δίνει ότι:

$$pV = nRT = \text{σταθ.} \qquad pV = NkT\,. = \text{σταθ} \tag{1α, β}$$

R: η σταθερά των ιδανικών αερίων, n: ο αριθμός των mole, N: ο συνολικός αριθμός των μορίων, k: η σταθερά Boltzmann. Η εσωτερική ενέργεια των μορίων του αερίου δίνεται θεωρητικά από τη σχέση:

$$(2)\quad U = \frac{3}{2} nRT$$

Η πίεση (p) που ασκούν τα μόρια συγκρουόμενα με τα τοιχώματα του δοχείου είναι:

$$(3)\quad p = \frac{Nmu^2}{3V}$$

V: ο όγκος του δοχείου που περιέχεται το αέριο.

Η θερμοκρασία του αερίου υπολογίζεται λύνοντας τη σχέση 1β ως προς T. Με δεδομένο ότι τα μόρια του αερίου συγκρούονται συνεχώς οπότε και αλλάζουν την ταχύτητα κινήσεώς τους μπορούμε να πούμε ότι οι ταχύτητες των μορίων ενός αερίου δεν είναι ίδιες αλλά κατανέμονται σε μια περιοχή τιμών. Οι Maxwell – Boltzmann προσδιόρισαν την κατανομή των τιμών των ταχυτήτων θεωρητικά πριν ακόμα υπάρξει η δυνατότητα για πειραματικές μετρήσεις. Η κατανομή Maxwell – Boltzmann ομοιάζει με την κανονική κατανομή οπότε για τη δημιουργία του μοντέλου θα χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα αυτή ώστε η γεννήτρια τυχαίων αριθμών που θα δίνει κίνηση στο εκάστοτε μόριο να παρουσιάζει κατανομή τιμών ίδια με αυτή της κανονικής κατανομής. Η ποσότητα $\overline{u^2}$ ονομάζεται μέσο τετράγωνο της ταχύτητας και ορίζεται:

$$(4)\quad \overline{u^2} = \frac{\sum u_i^2}{N}$$

Μια πολύ χρήσιμη ποσότητα για τη μοριακή δυναμική των αερίων είναι η ενεργός ταχύτητα (u_{rms}) των μορίων:

$$(5\alpha, \beta, \gamma)\quad u_{rms} = \sqrt{\overline{\upsilon^2}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{\sum u_i^2}{N}}$$

Η παρακάτω σχέση περιγράφει τη δύναμη που αναπτύσσεται σε ένα μόριο όταν αυτό αντιδρά ελαστικά με τα τοιχώματα του δοχείου.

$$(6)\quad F = \sum_{i=1}^{N} \frac{mu_{xi}^2}{d}$$

Οπου d η οριζόντια απόσταση μεταξύ των τοιχωμάτων του δοχείου. Ως μοντέλο που περιγράφει τη ταλάντωση του μορίου θεωρούμε δύο τουλάχιστον άτομα συνδεδεμένα μεταξύ τους με ένα φανταστικό ελατήριο. Η δύναμη που ασκείται στα μόρια δίνεται από το νόμο του Hook με k το συντελεστή ταλάντωσης και χ την απόσταση ταλάντωσης. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η συνολική κινητική ενέργεια ενός αερίου N μορίων που κινούνται και ταλαντώνονται χωρίς να περιστρέφονται εκφράζεται από:

$$U = \sum_{i}^{N} E_{mi} + E_{ri} = \sum_{i}^{N} \frac{1}{2} m_i u_i^{2} + \frac{1}{2} k_i x_i^{2} \qquad (7)$$

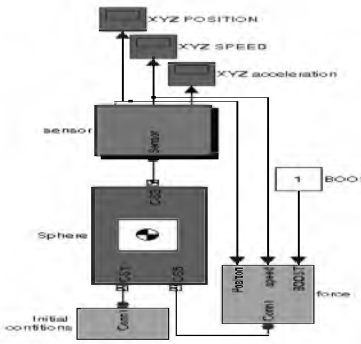
ΜΟΝΤΕΛΟ ΔΙΑΤΟΜΙΚΟΥ ΑΕΡΙΟΥ

Προκειμένου να δημιουργήσουμε το μοντέλο ενός διατομκού αερίου θα εργαστούμε με το λογισμικό Simulink του Matlab. Το Simulink είναι ουσιαστικά γλώσσα προγραμματισμού (MathWorks 2002) και συνδυάζει ευκολία χρήσης για δημιουργία μοντέλων, αξιοπιστία ως προς τα φυσικά συστήματα, εποπτικότητα προγραμματισμού, (Kalagasidis et al., 2006), τεράστιες δυνατότητες γραφικών απεικονίσεων σε 2, 3 διαστάσεις και σε εικονική πραγματικότητα (Hanselman, 2001) ενώ προσφέρεται σε ένα διαδραστικό περιβάλλον.

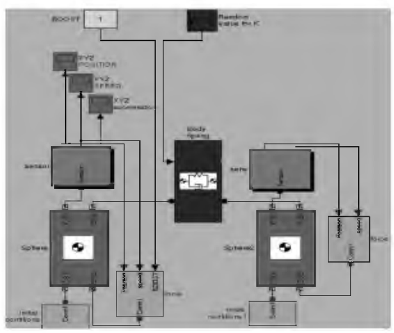
Από τη βιβλιογραφία (Serway, 2003) γνωρίζουμε ότι η μάζα κάθε μορίου είναι $33{,}55\times10^{-25}$gr. Από τη σχέση 5β υπολογίζουμε ότι η ενεργός ταχύτητα των μορίων είναι $1{,}93\times10^{3}$m/sec για θερμοκρασία T=300°K. Δημιουργώντας ένα μοντέλο που περιλαμβάνει 8 μόρια ο αριθμός των mol θα είναι $n=1{,}33\times10^{-23}$mol, από τη σχέση 2 υπολογίζουμε εσωτερική ενέργεια $U=4{,}98\times10^{-23}$ J και από τη σχέση 1α πίεση $p=1{,}23\times10^{24}$ N/m^2. Οι παραπάνω τιμές είναι θεωρητικές και περιμένουμε να επαληθευτούν από τα αποτελέσματα του μοντέλου.

Αλγόριθμος

- Δημιουργούμε σφαίρα μάζας $m=16{,}75\text{x}10^{-25}$gr με το μπλοκ «body» (Εικ. 1).



Εικόνα 1. *Μοντέλο σφαίρας*



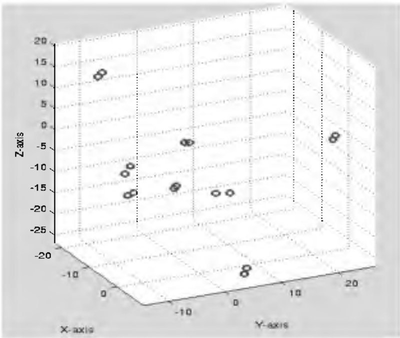
Εικόνα 2. *Μοντέλο διατομικού μορίου*

- Ορίζουμε αρχικές συνθήκες μηδενικής βαρύτητας, θέσης και βαθμών ελευθερίας από τα μπλοκ «environment, linear position, joint, ground»
- Δίνουμε κίνηση στη σφαίρα με τιμές από τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών χρησιμοποιώντας το μπλοκ «body actuator». Η κατανομή των τιμών είναι Gaussian μιας και η θεωρητική κατανομή ταχυτήτων Maxwell – Boltzmann των μορίων προσομοιάζει αυτή της κατανομής Gauss.

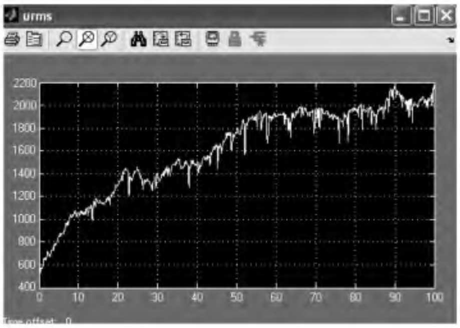
- Παρεμβάλουμε ένα πολλαπλασιαστή boost ώστε να μεταβάλουμε την ασκούμενη δύναμη.
- Δημιουργούμε δεύτερη σφαίρα μάζας m=16,75x10^{-25}gr. Συνδέουμε τις δύο σφαίρες με το μπλοκ «body spring» (Εικ. 2).
- Συνδέουμε την τιμή του συντελεστή ταλάντωσης (κ) με γεννήτρια τυχαίων αριθμών.
- Κάθε φορά που μια σφαίρα πλησιάζει στο όριο των 30 m που είναι τα όρια του «δοχείου» ασκείται πάνω τους δύναμη από τη σχέση 7, τέτοια ώστε να εξουδετερώνει την κάθετη στο επίπεδο ορμή και να της προσδίδει μια αντίθετης κατευθυνσης.
- Αναπαράγουμε το παρόν μοντέλο ώστε να δημιουργήσουμε και άλλα μόρια.
- Δημιουργώντας αλγόριθμους από τις εξισώσεις υπολογισμού μέσης (Εξ. 4) και ενεργής ταχύτητας (Εξ. 5γ), εσωτερικής ενέργειας (Εξ. 7) και πίεσης (Εξ. 3) και κάνοντας λήψη των δεδομένων κίνησης των σφαιρών από τα μπλοκ «body sensor» υπολογίζουμε τα σχετικά μεγέθη.
- Οι βαθμοί ελευθερία είναι 6 σε X, Y, Z
- Ο χρόνος προσομοίωσης είναι 100 sec.

Αποτελέσματα

Η κίνηση των μορίων παρουσιάζεται με τρισδιάστατο γράφημα (Εικ. 3) όπου τα μόρια φαίνονται να κινούνται σε πραγματικό χρόνο και να ταλαντεύονται τα άτομά τους.



Εικόνα 3. *Τρισδιάστατο γράφημα*

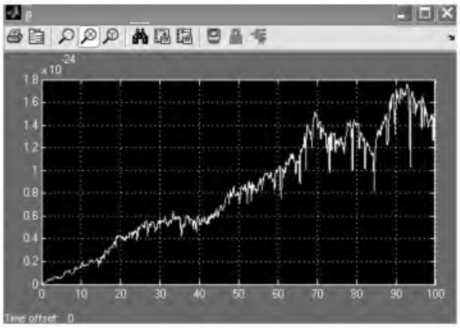


Εικόνα 4. *Ταχύτητα μορίων (m/sec)*

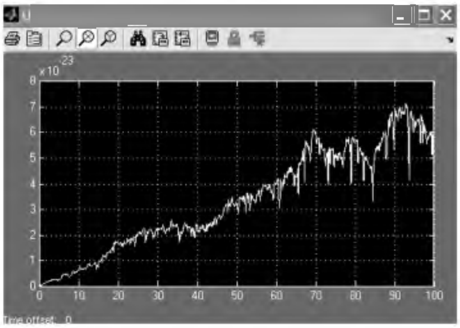
Η ενεργός ταχύτητα των μορίων παρουσιάζεται σε γράφημα (Εικ. 4) και σε πραγματικό χρόνο. Η θεωρητική τιμή είναι 1902m/sec για T=300^{o}K και όπως βλέπουμε στο γράφημα προσεγγίζεται σχετικά.

Η πίεση που ασκεί το αέριο στην επιφάνεια του δοχείου προκύπτει θεωρητικά από τη σχέση 1 και είναι p=1,23$\times 10^{24}$ N/m^2, τιμή η οποία προσεγγίζεται από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης (Εικ. 5).

Η εσωτερική ενέργεια του συστήματος παρουσιάζεται στο παρακάτω γράφημα (Εικ. 6). Η θεωρητική τιμή είναι U=4,98$\times 10^{-23}$ J. και σε αυτή την περίπτωση το μοντέλο προσεγγίζει τις θεωρητικές τιμές.



Εικόνα 5. *Πίεση στα τοιχώματα (N/m²)*



Εικόνα 6. *Εσωτερική ενέργεια (J)*

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η μέθοδος Monte Carlo μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής. Λόγω των περιορισμών που επιβάλει η πεπερασμένη υπολογιστική δύναμη δεν είχαμε την δυνατότητα να δημιουργήσουμε περισσότερα μόρια και έτσι να έχουμε πιο αξιόπιστα αποτελέσματα. Παρόλα αυτά τα αποτελέσματα προσέγγισαν τις θεωρητικές τιμές αποδεικνύοντας την αξιοπιστία της μεθόδου. Με περισσότερα μόρια και μεγαλύτερη συχνότητα των τυχαίων αριθμών, θυμίζουμε ότι στην πραγματικότητα συμβαίνουν εκατομμύρια συγκρούσεις ανά δευτερόλεπτο, τα αποτελέσματα θα ήταν ακόμη περισσότερο κοντά στις θεωρητικές τιμές.

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης μπορεί να απεικονίζονται τρισδιάστατα και να προσφέρουν την καλύτερη δυνατή οπτικοποίηση της συμπεριφοράς των μορίων διατομικού αερίου.

Τα αποτελέσματα προσέγγισαν τα πραγματικά συστήματα. Λόγω της μεθόδου Monte Carlo κάθε φορά παρατηρείται διαφορετική συμπεριφορά των μορίων. Έτσι οι μαθητές που θα χρησιμοποιήσουν την προσομοίωση θα έχουν μια δυναμική εμπειρία της συμπεριφοράς διατομικών μορίων αερίου. Μπορεί να εξηγήσει φυσικά φαινόμενα με διαφορετικό – μοριακό – τρόπο, καταφέρνοντας έτσι να γίνουν τα φαινόμενα κατανοητά σε μεγαλύτερο μέρος μαθητών.

Πέραν της ρεαλιστικής προσέγγισης του μοντέλου οι δυνατότητες του Simulink το καθιστούν εξαιρετικά διαδραστικό μιας και ανά πάσα στιγμή ο χρήστης μπορεί να επέμβει σε οποιαδήποτε παράμετρο και να δει τη συμπεριφορά του αερίου. Το μοντέλο που προτείνουμε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία φυσικής και χημείας σε δευτεροβάθμια και τριτοβάθμια εκπαίδευση. Μπορεί επίσης να επεκταθεί σε μεγάλο μέρος θερμοδυναμικών διαδικασιών και να προσαρμοστεί σε ειδικές καταστάσεις. Στην παρούσα εργασία παρουσιάσαμε τη γενική περίπτωση.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ainsworth S. (1999). The functions of multiple representations, *Computers and Education*, 33, 131-152.

Bar, V. (1989). Children's views about the water cycle, *Science Education*, 73, 481-500.

Hanselman, D. C. (2001). *Mastering Matlab 6: a Comprehensive Tutorial and Reference*. Upper Sadddle River: Prentice Hall.

Kalagasidis, A., Weitzmann, P., Nielsen, T., Peuhkuri R., Hagentoft C., Rode, R., (2006). The International Building Physics Toolbox in Simulink, *Energy and Buildings*, Elsevier B.V.

Lee, O., Eichinger, D.C., Anderson, C.W., Berkheimer, G.D., & Blakeslee, T.D. (1993). Changing middle school students' conceptions of matter and molecules, *Journal of Research in Science Teaching*, 30, 249-270.

Means, B., Blando, J., Olson, K., Middleton, T., Morocco, C., Remz, A. R. & Zorfass, J. (1993). *Using Technology to Support Education Reform*, U.S. Department of Education, U.S. Government Printing Office.

Mzoughi, T., Herring, S. D., Foley, J. T., Morris M. J., & Gilbert, P. J. (2007). WebTOP: A 3D interactive system for teaching and learning optics. *Computers & Education*, 49, 110-129.

R. Serway, *Physics for scientist and engineers*, Thomson, 2003.

Rezai, R., & Katz, L. (2002). Using computer Assisted instruction to Compare the inventive model and the radical Constructivist approach to teaching Physics. *Journal of Science Education and Technology*, 11(4), 367-380.

The MathWorks inc. (1999). *Simulink, Dynamic System Simulation for Matlab*, Using Simulink Version 3.

Tversky, B., Morrison, J. & Betrancourt, M. (2002). Animation: Can it facilitate? *Human computer Studies*, 57, 247-262.

van Joolingen, W.R., & de Jong, T., (1996). Discovery Learning with Computer Simulations, In *Simp_sio Investigaç_o e Desenvolvimento de Software Educativo* Convento dos Capuchos.

Voulgarakis, N. K., (2002). *Non Linear Localization in model Systems and Materials*, Phd Thesis, University of Crete.

Γκανάτσιου, Χ., Τζώρτζιος, Σ., (2005). Επιστημολογική προσέγγιση των στοχαστικών μοντέλων και οι εφαρμογές τους στις βιολογικές επιστήμες. *22ο Συνέδριο Ελληνικής Μαθηματικής Παιδείας*, Λαμία.

Δελλαπόρτας, Π. (1994). *Προσομοίωση και Στοχαστικά Μοντέλα – Πανεπιστημιακές Παραδόσεις*. Οικονομικό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Δενδρινός, Μ. & Καλκάνης, Θ. Γ. (2007). Η συμβολή των δυναμικών οπτικοποιήσεων στη διδασκαλία/μάθηση φυσικών, μηχανικών και πειραματικών διαδικασιών. Μια εφαρμογή σε φοιτητές/υποψήφιους δασκάλους και επιμορφούμενους δασκάλους στο Παιδ. Τμήμα Δημ. Εκπαίδευσης. *5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση*, Γιάννενα, Μάρτιος.

Ιμβριώτη, Δ., Καλκάνης, Γ., *Το Πρότυπο του μικρόκοσμου στην πρωτοβάθμια εκπαίδευση – Εκπαιδευτικές προσεγγίσεις για την Ε΄ και Στ΄ τάξη του Δημοτικού Σχολείου – Λογισμικό και αξιολόγηση, 5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση*, Ιωάννινα, 15-18 Μαρτίου.

Νταλαούτη, Π. & Τσαπαρλής, Γ. (2007). Το σωματιδιακό μοντέλο της ύλης – Διδακτική πρόκληση για την στ΄ τάξη του δημοτικού σχολείου. *5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση*, Γιάννενα, Μάρτιος.

Παπαγεωργίου, Γ. (2007). Συμπόσιο: Σωματιδιακά μοντέλα και μικρόκοσμος στο δημοτικό σχολείο. *5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα, 15-18 Μαρτίου*.

Παπαγεωργίου, Γ., Johnson, P. & Φωτιάδης, Φ. (2007). Διδασκαλία και μάθηση φυσικών φαινομένων με χρήση κατάλληλου λογισμικού στα πλαίσια της σωματιδιακής θεώρησης της ύλης. *5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση*, Γιάννενα, Μάρτιος.