



電腦可以做什麼有趣的事?

曾雪峰/國立臺灣大學光電所暨電機工程學系教授

用「計算」來從事科學研究,這不算是個新興領域, π 值大家應該很熟悉吧?這個重要的常數,在日常生活中處處可見(只要是圓形的東西,都和 π 值有關)。中國古代的**祖沖之**推算出**圓周率**的值介於 3.1415926 和 3.1415927 之間。這個準確至7位小數的 π 值的紀錄保持了將近十個世紀,到十五世紀才被打破。利用數學計算的方法來求 π 值,應該是人類早期的計算科學吧?(提到 π 值,有個非常容易的方法,可以讓你以現有桌上的個人電腦,就能很輕易的計算 π 值喔!我們在此先介紹一下背景知識,後面再跟各位介紹 \sim 。)

從古至今,「計算科學」的發展,十分緩慢,直到最近半個世紀。原因很容易理解,畢竟大量的計算古代只能仰賴手算,是非常累人又耗時的。到了早期計算機的出現,才開始有機器能將大量運算用機械來處理。當時的計算機是用真空管組成的,體積很大,整部電腦大約堆砌而成如房間大小,可想而知耗電量驚人。



圖 1 早期的電腦(圖片擷取自網路)



臺灣大學電機工程學系





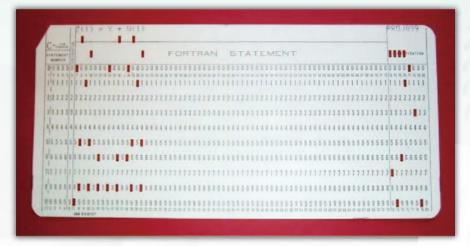




圖 2 早期需要用打洞的卡片來下指令給電腦(圖片擷取自網路)

近半個世紀電腦技術的快速發展,從 Steve Jobs and Steve Wozniak 推出的 Apple I, II 時代的桌上型個人電腦 (記憶體只有 48KB),到今天的一部輕薄短小的筆電(記憶體有~ 4GB,粗略估計增加了將近十萬倍!),其計算能力早已遠遠超過昔日大如房間的祖父級電腦了。





圖 3 (a) 1976 的相思木裡的 Apple I (圖片擷取自 Wikipedia) (b) 1980 年代的 Apple II 桌上型個人電腦(圖片擷取自網路)

早期的電腦,除了需要用電腦語言才能溝通之外,還需要用電腦卡片,電腦才「看」得懂。人們為了使用電腦還需要「打卡」,將程式打成一張張卡片,「輸入」電腦,才能執行。(這種早期人和電腦的溝通方式,在《Surely you're joking, Mr. Feynman!》《別鬧了,費曼先生》(天下出版)一書中有提到。)而現在的耳熟能詳的程式語言如:C++, Java 等等,已經是屬於高階語言,亦即和我們日常生活所用的語言相去不遠,容易理解學習。以現在的普及的個人電腦計算能力與記憶量,「計算科學」才算得到一個大展長才的機會。

我們在這裡要介紹一個很有意思的「數值模擬方法」,叫做「蒙第卡羅法(Monte Carlo method)」。這是一個非常淺顯易懂的方法,利用你的筆電或桌電,就可以輕易地計算 π 值。



Monte Carlo method

「蒙第卡羅(Monte Carlo)法」大約在1948年時,由 Nick Metropolis 所提出,是利用亂數以統計學的觀念來定量地解問題的方法。由於以「亂數」的概念為中心,因此 Metropolis 以二次世界大戰當時 Monaco 的一家他叔叔常去的賭場 Monte Carlo Casino 命名,而沿用至今。 在計算機出現以前,這個方法牽涉到非常大量的計算以致於實用困難,除非絕對必要,否則鮮少被使用。現在「蒙第卡羅法」使用的領域非常廣泛,舉凡基因工程、股市預測、生醫光學研究等等,都可以有「蒙第卡羅法」的應用。

那要如何用「亂數」來計算 π 值呢?給各位一個提示,這個方法叫做:「The poor dart-thrower」(飛鏢丟不準的人)。可能的話,讀到這裡,請你停下來一會兒,好好地想一想,亂數跟 π 值如何可以扯上關係?(自己想出來的,遠比別人告訴你的有價值!)

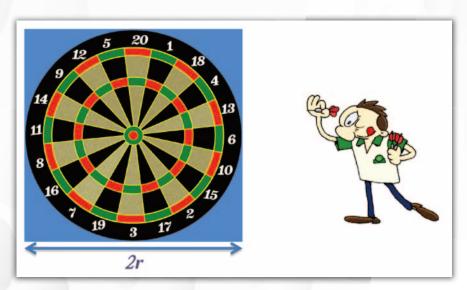


圖 4 以一個完全沒準度的射手而言,飛鏢落在靶上的機率與靶的面積成正比。(圖片擷取自網路)

這個概念很單純,想像有個人每次丟飛鏢,的確能射到正方形的區域內,但是否能落在靶上,卻完全無法控制。果真如此,我們可以假設:

假設#1:飛鏢落在正方形之內任何地方的機率均等。

假設#2:飛鏢落在靶內的機率正比於靶的面積。

也就是說,飛鏢落在靶上的機率是正比於靶面積的大小:

Probability { 飛鏢落在靶上 }
$$\sim \frac{\text{Area of Target}}{\text{Area of Square}} = \frac{\pi \cdot r^2}{(2 \cdot r)^2}$$



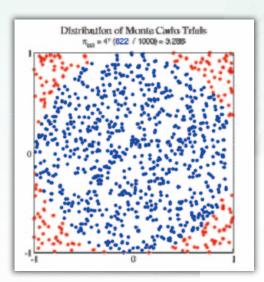


圖 5 Example of 投擲 1000 次飛鏢。藍色是落在靶上的飛鏢,紅色則是落在靶外的飛鏢(圖片擷取自網路)

```
inside= 0;
outside= 0;
N= 3000;
for n= 1:N
    x= rand (1);
    y= rand (1);
    if sqrt ((x-0.5) ^2 + (y-0.5) ^2) <= 0.5
        inside= inside+1;
    else
        outside= outside+1;
    end
end
fprintf (`pi=%u\n´, 4 * inside/(inside+outside))</pre>
```

 \blacksquare 6 Matlab program for calculating π with 3,000 darts

想當然爾,光投擲一次來估算π值,應該是很不準的。如果投擲很多次飛鏢,多次平均,這個估計應該可以越來越準確,計算π值的精確度越高。當然,亂數的產生越「隨機」也會使的計算越正確。如圖7是一個實際用「蒙第卡羅法」計算的結果,以十萬次估算出來約為3.14134。如果以十億次的亂數估算出π值約為3.14159848,與正確的π值相比,大約準確到小數點後第五位。由於亂數不同,就好像每次射飛鏢落點不同,每次計算結果也不全然相同。

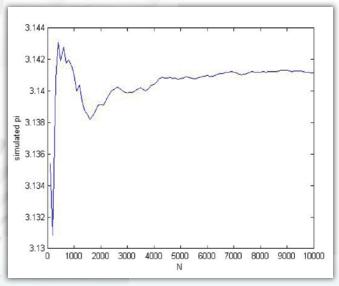


圖 7 蒙第卡羅法以十萬個亂數估算的 π值





與其他估算 π 值的數值方法比起來,「蒙第卡羅法」是一個觀念很容易了解及使用的方法,只需要很簡單的程式基礎,用自己家裡的電腦,就可以算。以一般的個人電腦,大約只需要跑幾分鐘,估算出來的 π 值精確度就能輕易超越祖沖之多年努力的成果喔~。

除了計算 π 值以外,「計算科學」是可以做一些非常有趣的事喔!(你能想像是什麼嗎?)把電腦計算的能力應用在自然界的物理定律的預測與描述,我們可以很「正確地」模仿自然界的物理、化學等現象,就是所謂的「電腦模擬」!讓我們來看幾個典型的例子~:

近年來的電影特效越做越誇張,可是卻又看起來很逼真!例如:電影 X 戰警,把金門大橋連根拔起 (Golden Gate Bridge destroyed in X-Men),把潛水艇從水中凌空漂浮起來 (Magneto levitates a submarine out of the water),更不用說變形金剛系列電影,機械人變身,把以建築聞名的芝加哥市一棟棟摩天大樓打得爛爛的等等。(精彩圖片,在網路很容易找到。)

為什麼這些特效會看起來「很像」真的呢?特別是如果你看看二十年前老電影的特效,就會有「怎麼差這麼多?電影技術真的進步了~」的感覺,新的特效比起老電影的特效真是好的太多了!這些都是用「計算科學」模擬出來的成果!因為利用了數值方法,把電影裡的物品,以符合自然運動定律的特性適當地呈現出來,模擬一些假想的情況。如果這些物品以符合運動定律的方式來移動,看起來就會很真了。

大家應該可以想像,除了電影或電玩特效方面之外,「數值計算」一個重要的應用是在「科學研究發展方面」。以電腦模擬(Simulation)分析問題,在很多很多的領域都被廣泛的運用。就模擬原理來說,Simulation 大致可以分為「直觀的模擬(Heuristic Simulation)」與「嚴謹的模擬(Rigorous Simulation)」兩類。嚴謹的模擬顧名思義可以知道這是精確模擬的方法。大家可能會覺得奇怪,為什麼會有「不精確」的模擬呢?簡單地說,以往由於模擬的困難度,例如說當問題太複雜,太多變數,現有的計算機速度不夠快或記憶容量不夠大時,只好提出一種「折衷」的辦法,將問題簡化,使得能夠用當時的工具來計算。然而這個「簡化的版本」,常常沒有嚴謹的理論根據,乃是根據「直觀想像」來簡化問題,其物理特性或被扭曲,或甚至忽略。這樣的方法,雖然「物理意義」與「準確度」有待商権,但在人類科學發展過程,卻扮演著重要的角色。「計算不夠快、記憶容量不足」等技術性的問題,以今日電腦科技快速的發展的趨勢,很多困難都會隨時間迎刃而解。科學研究精神重在嚴謹、精確,因此,在這裡我們只討論精確嚴謹的模擬方法(Rigorous Simulation)。

日常生活等實際的問題,常常牽涉到大量的變因,比起教科書習題、考試等單純化的題目,困難複雜得多。例如:我們想要了解光在某個特定情況下會如何傳播?要分析這樣的光學問題,首先要知道光是電磁波的一種,因此必須要倚賴電磁學的基本原理:馬克士威方程式(Maxwell's equations)。(電學與磁學中的法拉第定律、安培定律、高斯定律等等,都是屬於馬克士威方程式的一部分。)因此,要精確地分析描述光的特性與傳播方式,最正確的方式是解馬克士威方程式:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

圖 8 電磁學的基本原理:馬克士威方程式(Maxwell's equations)





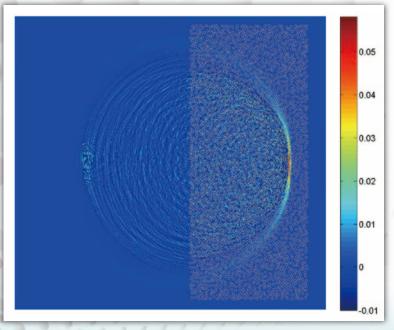
不幸的是,就如同你所見,要解這些看似「深奧幽玄」的聯立偏微分方程式通常是很困難的。問問學過電磁學的朋友你就會知道,人類有能力精確求解的電磁學問題只有非常非常少的幾個「理想化」的簡單特例,譬如說:點電荷啦,無限長直導線,無窮大的平面,正球體,正球殼等等。基本上,我們人類頭腦簡單,只知道如何算幾種「簡單的幾何形狀」,稍微複雜一點,我們就不會精確地算了。

那怎麼辦呢?難道電磁學的問題只能用來考試,沒有實際用途? 感謝今天電腦科技的快速發展,自從 James C. Maxwell 提出電磁學的基本方程式,直到最近數十年,利用電腦與「數值計算方法」,在虛擬空間中,建構虛擬實驗來幫助分析了解真實世界中的物理現象,我們人類才第一次有機會能用馬克士威方程式 (Maxwell's equations) 來做一些很複雜、實際問題的精確計算分析。

以電腦模擬一個「虛擬空間」(virtual space),簡單地說,就是以電腦的記憶體來記錄、描述這個虛擬空間中每個點的物理性質,並且「要求」在此虛擬空間中,所有點都互相滿足基本的物理定律。例如說要模擬「自由落下的蘋果」,其基本的物理定律就是年頓運動定律與萬有引力定律。

若以「光學研究」為例,我們今天要探討在圖 9 情況下光會如何傳播,那基本物理定律就是馬克士威方程式(Maxwell's equations)。有時候有更複雜的情況,例如牽涉光學又牽涉到力學,那就需要把光學與力學的基本定律都一以考慮進來。既然在這個虛擬空間中所有的物體都(被要求)滿足自然界的基本物理原理,那讓時間流動,則可以想見,在這個虛擬空間中所描述的現象,就會和自然界中的真實情況一樣!我們就可以藉由這個虛擬的實驗來探討、分析自然界中的問題。也許你有疑問,既然自然界就可以做實驗了,那這個虛擬的實驗以什麼好處呢?實際實驗常常有量測上的限制與誤差、雜訊等實際的困難,而這個虛擬的實驗,基本上所有在電腦記憶體中的物理量都是可以精確得到的。更重要的,這個虛擬的實驗有點像是個「很理想的實驗」,可以做到「無雜訊」、「超高精確度」等實際技術上所難以達到的。數值模擬方法有所謂的:時域有限差分法(Finite-Difference Time-Domain Method),有限元素分析法(Finite Element Method)等等,都可以用來建構滿足基本物

理方程式的虛擬實驗。虛擬實驗是以數值方法把物理定律解析解「具象化」的研究方法。某方面來說,它可以比實驗更接近理論的理想值。更重要的是,「虛擬實驗」可以精確分析以往所沒辦法處理的「不規則結構」等複雜的實際問題!



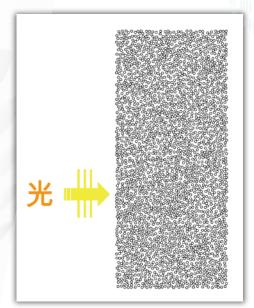


圖 9 光照在不規則的結構會經過多次的干涉、 繞射、折射、反射等複雜的現象。





「計算科學」是門龐大的學問,在各個不同的學科都有廣泛的應用。近年來快速的發展,產生了許多新的應用、前所未有的研究領域。有的學問困難的問題經過許多年、許多人的努力,已經漸漸研究透徹,然而,「計算科學」才剛剛起步,更令人振奮的是,電腦的計算能力正在快速成長:昨日難以計算的題目,明日很可能彈指之間就能完成。最近聽了一個優秀前輩孟懷縈*院士的演講,給我很大的啟發,我在此轉述她的話語,希望也能給各位一些發想:「…,以前人類的研究方法不外乎兩種:理論推導(theoretical derivation based on reductionism)與實驗探索(experimental exploration based on controlled environment),…,然而今天各位,你們有了一個新的選擇:『Computational Thinking ! 』現在,你們很幸運地出生在這個時代,可以使用前所未有的科技(計算機),研究極其複雜、多變因的問題,你們可以處理分析大量的數據,並嘗試各式各樣的新構想!這都是沒有電腦的先賢所沒有的優勢,you are only limited by your 好奇心與創造力!」

* 註: 孟懷縈(孟懷縈(英文名:Teresa H. Meng,1961 年一),原籍台灣的美國科學家與企業家,中華民國中央研究院院士、美國國家工程學院院士,IEEE Fellow,史丹佛大學電機系講座教授,Atheros 通訊公司創辦人,以領導分散式無線網路技術發展而最為知名。)

孟懷縈院士

- 科學研究方法:
 - 理論推導 based on reductionism
 - 實驗探索 based on controlled environment
 - –Computational thinking!
 - complexity, uncertainty, data analysis & ideas
 - problem domain and solution domain <u>only</u> limited by 好奇心 and 創造力~

圖 11 孟懷縈院士:「科學研究的方法:理論推導、實驗探索,以及『Computational thinking!』」

