

漫談蒙地卡羅法的原理及其應用

鄭文吉¹

摘要

蒙地卡羅法是一種電腦模擬研究技術，除了用來模擬實驗過程外，亦可當作高階微積分及多自由度系統的計算輔助工具，或用以解決各種最佳化問題。所以目前在物理、化學、數學甚至社會科學等領域也都被廣泛應用。由於各領域學科所面臨的問題各不相同，因此蒙地卡羅法也常被加以修改以符合所需，並進而發展出許多有用的工具，如拔靴法、模擬退火法及遺傳演算法等，提供更有力的解題管道。

本文簡略介紹蒙地卡羅法的原理及在各領域試驗研究上的應用，希望能提供農業研究人員對蒙地卡羅法的認識，並進而加以應用。

關鍵語：蒙地卡羅法、拔靴法、模擬退火法、遺傳演算法

前言

科學家在進行試驗研究時，有時會受限於現實因素(如危險性太高或材料太珍貴等)，而無法直接對受測材料進行處理和測量，這時便會採用建立模型(model)的方式來代替真正的材料進行研究，這樣的研究方式稱為模擬(Simulation)。例如設計新型飛機或汽車時，利用縮小尺寸的汽車或飛機模型進行風洞試驗，來探討何種外型設計可以減低空氣阻力。除了製作實體物品模型外，也可以利用電腦技術，先依照物體外型尺寸建立 3D 電腦模型，然後就可以探討流體(如風或水流)通過這個物體表面時會產生的變化情形，而得到和利用實體模型進行模擬試驗一樣的效果，又能隨意更改設計重新進行模擬試驗，而不用再製造一個模型，這樣的研究方式稱為電腦模擬(Computer Simulation)。

1940 年代美國研發核子武器時，由於不清楚爆炸威力，不能隨意進行試爆，因此採用電腦模擬進行研究，因為這個方法大量運用到機率及亂數來模擬中子碰撞造成核子分裂的情形以估算所產生的能量，頗有賭博的意味，所以就用當時世界上最著名的賭場所在地「蒙地卡羅」來命名，稱之為蒙地卡羅法(Monte Carlo method)。不過，由於早期電腦的計算能力不佳，普及性也

¹ 行政院農業委員會高雄區農業改良場助理研究員

不高；此法一直到 1970 年代末期才開始被廣泛運用。隨著電腦運算速度大幅提升，蒙地卡羅法也逐漸成為一個非常有力的研究工具，除了最早期在核子科學方面的應用外，目前在物理、化學、數學、經濟學等領域也都被廣泛應用，成為一種重要的科學研究方法。除了用來作為數值分析求解的方法外，更可以和電腦模擬研究方法結合，科學家可以利用電腦模擬一個理想環境，然後利用亂數產生大量隨機狀況，藉以探討許多難以進行實際試驗的理論^(1,4)。這種利用蒙地卡羅法進行的電腦模擬研究，又稱為蒙地卡羅模擬法 (Monte Carlo Simulation method)。

本文將簡略介紹蒙地卡羅法的原理，並以實際研究報告作為範例，介紹蒙地卡羅法在各種領域試驗研究上的應用，及使用時應注意的事項。希望能提供農業研究人員對蒙地卡羅法的認識，並進而加以應用。

蒙地卡羅法的原理

蒙地卡羅法雖然是一種電腦模擬研究方法，但只要是在研究過程中使用到亂數來模擬試驗進行或直接當作試驗結果，就可以稱之為蒙地卡羅法的應用⁽⁴⁾。因此，蒙地卡羅法早在電腦發明前就已有類似的應用，而最早的蒙地卡羅法應用，當屬圓周率的估算。

圓周率 π 是圓周長與其直徑的比率，雖然定義很簡單，然而其值究竟為何，卻是幾千年來科學家一直想知道的答案。早在兩千多年前我國古算書「周髀算經」中便有“徑一周三”的圓周率記載，而舊約聖經中也有圓周率取此值之說。後來幾何學問世，由西方的阿基米德及中國的劉徽幾乎在同一時間發明“割圓術”，利用圓內接及外切正多邊形的方法進行夾擊，成為在三角函數和微積分出現前近兩千年的時間內估算圓周率 π 的方法。在南北朝時期(約西元 480 年)，中國數學家祖沖之利用劉徽割圓術繼續分割到 12288 邊形，又用劉徽多邊形面積公式求得 24576 邊形的面積，估算出 π 的近似值： $3.14159261864 < \pi < 3.141592706934$ 。此值精確到小數第 7 位，是此後一千多年內全世界最精密的 π 近似值⁽²⁾。

由於徒手計算 π 值十分辛苦，因此便有學者提出各種另類方法來估算圓周率。以下介紹其中兩個另類方法來說明蒙地卡羅法的運作原理：

一、Buffon 投針實驗

此法由法國科學家 Buffon 在 1777 年提出，方法是在桌面畫距離為 $2a$ 的平行橫線，再將長度為 $2l$ 的針反覆丟在桌面上(如圖 1 上)，然後計算所投針

的總次數(N)及針與橫線相交的次數(n)，如此 Buffon 便宣稱：

$$\text{圓周率 } \pi \approx \frac{2lN}{an}$$

雖然 Buffon 本人並未說明此公式來源，但其原理隨後被證明如下：

假設 M 為針的中點，又 y 為 M 至其最近平行線的距離，針與水平面的夾角為 φ ，則其垂直面的投影為 $l \sin \varphi$ ，因此當 $y \leq l \sin \varphi$ 時，即表示針與平行線相交。由於 $0 \leq y \leq a$ 、 $0 \leq \varphi \leq \pi$ ，故針與平行線相交的機率即為圖 1 下的陰影面積所佔比例：

$$P = \frac{n}{N} = \frac{1}{\pi a} \int_0^{\pi} l \sin \varphi \, d\varphi = \frac{2l}{\pi a}$$

$$\text{故： } \pi = \frac{2l}{Pa} = \frac{2lN}{an}$$

因此，只要不斷重複作投針的動作，再以觀測所得的針線相交機率 P 值配合已知的 l 與 a 值，就可以反推求得我們想要的圓周率 π 。

這個方法採用逢機的原理來解決另一項看似毫不相干的問題，可以說是歷史上最早的蒙地卡羅法應用，又稱之為 Buffon 之針(Buffon's needle)^(2,4)。今天我們可以利用電腦模擬的方式重作這個實驗，而不用真的拿一堆針去丟。只要反覆取各種 y 和 φ 的逢機亂數值來模擬針落下的位置和角度，即可求得針和其中一條橫線相交的機率 P，進而反推求得我們想要的 π 值。

二、由圓面積估算反推 π 值

以圖 2 的圓形面積估算為例，已知半徑為 r 的圓在二維座標空間的表示法為 $x^2 + y^2 \leq r^2$ ，因此要估算此圓的面積，只要利用電腦在 $-r \leq x, y \leq r$ 的二維座標平面(方框部分)隨機產生亂數點，當 $x^2 + y^2 \leq r^2$ 時(灰色部分)，即表示此點落在該圓面積中。再計算分布在

不同地方的亂數點落在圓內的次數(n)占全部點數(N)的比例($\frac{n}{N}$)，由於已知正方形面積為 $4r^2$ ，便

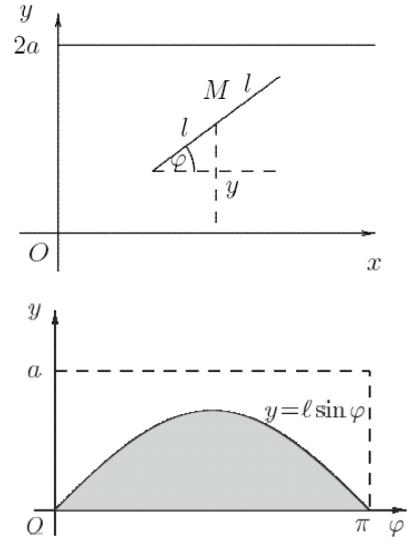


圖 1. 圖示 Buffon 投針實驗
Fig 1. The Diagram of Buffon's needle experiment
(吳,2004)

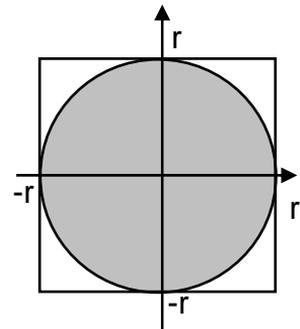


圖 2. 圓面積的估算
Fig 2. Estimates of the area of a circle

可以求得圓形的面積為 $4r^2\left(\frac{n}{N}\right) = \pi r^2$ 。因此，圓周率 π 估值可由落在圓內的亂數點比例 $\frac{4n}{N}$ 加以估算，由於這個估值本身不包含圓半徑 r ，也可證明用這個方法估算圓周率 π 跟所使用的圓半徑大小無關。

三、兩種方法的比較

以上兩種方法都是以重複取逢機數字來估算圓周率，因此估計值會隨著不斷取樣而隨時變化，並非固定值。但當取樣點數越多，這個估計值就會呈現收斂的趨勢，越來越接近實際的圓周率。

然而，這兩種方法應用的原理卻有所不同，差別在於所取得的逢機亂數的用途，這也是蒙地卡羅法的兩種主要應用模式。第一個例子是以逢機方法模擬真實的投針實驗過程，然後再觀察模擬實驗的結果，以取代真正的實驗～也就是以機率的方法來解決非機率的問題。第二個例子則是以逢機亂數點落在正方形和內接圓上面的比例來估算 π 值，這是直接把逢機亂數拿來當作實驗觀測值使用。

蒙地卡羅法的應用

由於蒙地卡羅法起源於核子物理學的研究，因此最初的應用範圍也大多以此為主。但後來發現，蒙地卡羅法可以作為許多難解問題的另類解法，加上電腦運算速度大幅提升，可以在很短的時間內進行大量取樣及反覆運算以取得估計解答，所以目前在物理、化學、數學甚至社會科學等領域也都被廣泛應用，大致可分為以下4大類：⁽⁴⁾

一、模擬真實實驗過程

前面提過以模擬投針的方式估算圓周率的方法，就是以蒙地卡羅法模擬實驗過程的例子。這種方法也可以應用到各種領域，利用電腦模擬一個理想的實驗環境或操作過程，例如絕對公正的骰子、沒有摩擦力的平面，或者沒有地心引力或空氣阻力的空間等等。因此利用電腦模擬技術，即可進行許多在真實世界中很難操作、或者根本無法被進行的實驗。因為有這樣的優點，電腦模擬現在廣為學術界各領域專家使用，成為解決問題的常見工具。例如商業上的風險分析、經濟學上的政策模擬、都市計畫中的交通流量、甚至在飛機汽車製造、量子力學、積體電路設計等方面，都可以應用到模擬的過程。

舉例來說，在量子物理的研究上，科學家可以創造一個能量不會溢出的

理想空間，並放入定量的粒子數，然後在這個理想空間內建立各種物理性質，再利用電腦隨機移動粒子，以模擬高溫時粒子運動的情況；反之也可以降低溫度，觀察粒子在低溫中因最低能量而產生凝結的現象。

又如，在證券交易市場上，常有所謂的投資顧問提供投資人各種建議，也就是俗稱的「明牌」。但余(2007)以逢機模擬的方式，隨機抽取 10 支股票進行交易，並與某位股市名嘴所推薦、號稱可以達到 7.05%平均投資報酬的 10 支「熱門股票」進行比較。結果發現，在 1000 次的模擬中，逢機選股有 26%(260 次)的機會報酬率不小於 7.05%，顯然這位投資顧問所建議的明牌根本與隨機選股無異⁽¹⁾。

二、當作計算輔助工具

前面曾提過以蒙地卡羅法估算圓形面積的方法。這種方式也可以應用在各種函數圖型面積的計算上，甚至多維次函數的求解。以一維函數圖面積的計算為例，除了採用積分方式求解外，也可以將圖形分割為許多柱型面積的總和來求其近似值(如圖 3)。因此，該段面積 I 即可由下面兩種方式求得：

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

然而，當遇到高維次積分或者難以被積分的函數，由於無法直接以積分方式計算，便需要用柱型分割的方式求近似解。這時，柱型分割得越細，所求得的 I 值也越精確。然而分割越精細，就需要越多次的計算；若維次不只是一次，則計算次數將隨維次而呈指數增加，而使計算曠日費時。

舉例來說，科學家在研究具有 N 個分子的氣體分子動力學時，可能就會遇到以下的高維次積分：

$$Z = \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N e^{-\frac{1}{kT} \sum_{i < j} v(i, j)}$$

其中， Z 是 $3N$ 維次的積分， $v(i, j)$ 是某種兩兩一組的作用， k 是波茲曼(Boltzmann)常數， T 是系統的溫度。這樣的積分由於維次太高，無法直接求解。但若改以柱型分割的方式計算，即使每一維度的座標軸只分割 10 次(一般計算積分當然不會分割這麼少次)，整個積分就必須求值 10^{3N} 次。因此，假設系統有 20 個分子，就必須求解 10^{60} 次。就算以每秒能計算一億次

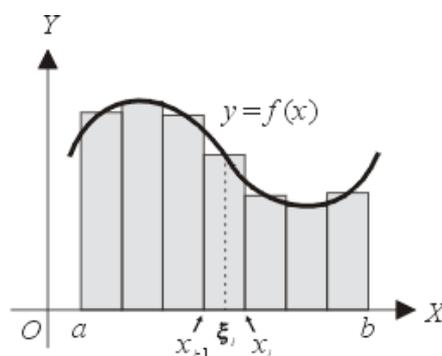


圖 3.以分割柱型估算函數圖形面積
Fig 3. Using segmentation column chart to estimate the function graphical area.

的超級電腦，還是需要 10^{52} 秒～相當於 3.17×10^{44} 年才能算得完。但若改用蒙地卡羅法，就可以同時對所有維次的變數取亂數點來進行估算，故維次的多寡對於計算並無影響，而可以迅速得到近似結果。因此，以蒙地卡羅法來進行估算，可能是解決此類問題唯一的方法。

三、作為多自由度系統的另類解法

在物理學研究上，例如要求解 Ising 模型、場論模型等，除了需要求解高維次微積分外，往往還需考慮一大塊物質中的許多原子、甚至原子中的許多電子等的交互作用，而形成具有大量自由度(degree of freedom)的系統，這時問題的複雜度也隨之大幅提高。

在生命科學的研究上也有類似的問題。例如，蛋白質的功能取決於它的 3D 結構，當蛋白質變性(denature)後會失去結構，但在適當環境下又可以自行折疊而恢復原狀。然而，這個看似簡單的過程其實具有極高的複雜度。舉例來說，一個具有 100 個胺基酸的蛋白質，其結構便可能有 2^{100} 種～約 10^{30} 種組合。若以嘗試錯誤的方式進行亂湊排列，即使 1 秒鐘能進行 1 兆次嘗試，仍需要 10^{18} 秒～相當於 3.17×10^{10} 年才能嘗試完畢。然而在自然界中，這樣大小的蛋白質只需要幾分鐘甚至幾秒鐘就可以重新折疊回原來的 3D 結構，顯然這樣的動作並非隨機進行。因此 Wolynes(1995)提出蛋白質的漏斗(Funnel)假說，認為各個可能結構在能譜圖上呈現類似漏斗狀的分布，而最佳的最終自然結構則是位於此漏斗的底部，因此胺基酸序列的快速折疊現象便成為可能⁽¹²⁾。

為驗證此假說，管(1999)進行蛋白質摺疊過程的模擬，以胺基酸的親水性(Hydrophilic)與疏水性(Hydrophobic)來加以區分，而親水性以極性(Polar)來代表，如此可以把蛋白質原來的胺基酸序列簡化為一條只有 H 和 P 兩種珠子的串珠，又稱為 HP 晶格模型。雖然模型簡化了，但由於在中間過程的可能結構還是會隨著胺基酸的序列長度而呈指數函數暴增，因此又引入蒙地卡羅法的重要取樣(Importance Sampling)觀念，也就是只選擇最可能的幾個方向扭轉(如圖 4)，太遠的則加以忽略，以減少取樣範圍並縮短計算時間，如此才得以完成。



圖 4. 蛋白質鏈扭轉的幾個最可能方向
Fig 4. Several possible directions for reversing the protein chain (管, 1999)

結果發現，在經過某個轉折點後，所有可能的中間態結構會驟減，而經

由中間態結構往低能量狀態的各折疊路徑通過機率則會往某個方向大幅集中，因而證實了過去經由實驗觀察及理論建議所假設的二態折疊過程⁽⁵⁾。

四、作為最佳化問題的另類解法

最佳化問題存在於各行各業，是一種跨領域的學科。舉凡作業排程、決策分析、交通路線規劃甚至產品設計等，都會遇到最佳化的問題。最早且最有名的最佳化問題，當屬所謂的「旅行推銷員問題」(Traveling Salesman Problem)。這位推銷員需要從某個固定城市出發，然後跑遍多個城市去推銷他的商品，由於城市之間的距離都不一樣，而老闆規定他必須把所有城市全部跑過一遍，因此他必須決定如何走才最省時間，也就是要找出一個距離最短的路徑。

這個問題看起來簡單，實際上是一個非常複雜的數學問題。因為兩兩城市間走法的組合會隨城市數目增加而快速暴增。4個城市間的走法只有 $4! / 2 = 3$ 種，但10個城市間的走法就快速增加到 $9! / 2 = 181,440$ 種；加上城市間的距離各有不同，也必須同時考慮，而使問題更加複雜。這類問題在演算法(Algorithm)領域被稱之為難解(Nondeterministic Polynomial-time Complete, NPC)問題，它的複雜度會隨系統的單位數目 N 呈 e^N 或 $N!$ 等所謂超多項式函數的規模增加，而非以一般多項式函數的規模增加，使得計算十分花費時間，甚至根本算不完。因此如何設計一種方法來從中選出一個最短路徑，便成為解決最佳化問題的基本目標。此外，由於所有可能的解法組合太多，不可能逐一嘗試，因此這類最佳化問題往往只要求實用解，即使不是最佳解也沒關係。這時候，蒙地卡羅法就可以派上用場了^(3,4,6)。

從蒙地卡羅法衍生出來的重要研究工具

蒙地卡羅法問世已有數十年，期間經過各領域研究人員不斷的改進以配合需要。例如馬可夫鏈蒙地卡羅法(Markov chain Monte Carlo method)，便是將原本要求需要完全逢機取得的隨機數字，改成允許與前一數字具有某種關係，也就是後面的數字可以從前面的數字經某種公式運算求得，但又不失去原有的均勻分散及無規律的逢機數字要求。如此可使逢機數字的取得更具彈性且更迅速，而能使用電腦運算產生大量的逢機數字，而不需要事先建立龐大的逢機數字表，使蒙地卡羅法的應用更為方便。

此外，科學家在模擬自然現象的過程中，也發展出許多有用的研究工具，介紹如下：

一、拔靴法(Bootstrap)：

拔靴法是由 Efron 於 1979 年所提出的重複取樣方法，其基本概念是利用現有的 n 個樣本 X 為虛擬母體，再以不斷的歸還取樣方式隨機取出一系列 b 組的隨機樣本 $X^{*1} \sim X^{*b}$ ，且每組隨機樣本 X^* 均有 n 個樣本，再由這些模擬出來的隨機樣本進行統計分析與檢定。由於拔靴所得的樣本都是以逢機取樣方式從同一個虛擬母體 X 取得，因此可視為相互獨立且具有相同的分布，這樣就可以在母體取樣分布未知的狀況下，利用小樣本來估算母體取樣分布並進行檢定。

舉例來說，老師想瞭解學生統計學期中考與總成績的相關性，因此從全部選修統計學的 75 位學生抽出 15 位來作調查。然而，如果單單只有這 15 個樣本，並無法了解全體學生的狀況，因此便利用拔靴法，由這 15 個樣本重複歸還取樣 10000 次，每次均取 15 個，再計算其標準差為 0.0654。接著為了驗證拔靴法取樣結果，又利用蒙地卡羅法由 75 個母體中任意抽出 15 個樣本，如此同樣進行 10000 次取樣，所得標準差為 0.0540。分別繪製頻度分布圖如圖 5，可見二者分布狀況和標準差都十分類似。

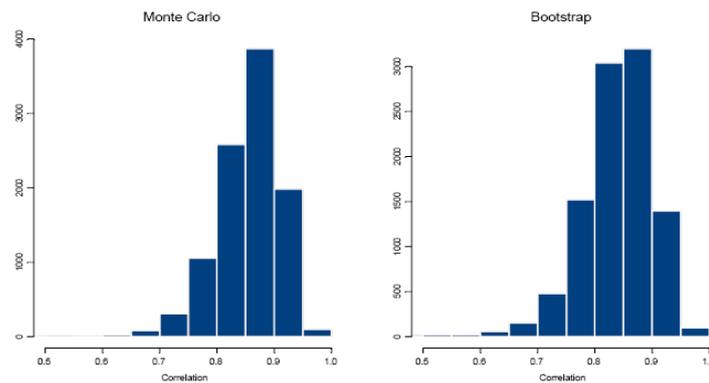


圖 5. 蒙地卡羅法(左)與拔靴法(右)取樣分佈的比較

Fig 5. The sampling distribution of Monte Carlo (left) and the bootstrap method (right).(余,2007)

因此，當我們無法針對整個母體作重複取樣來了解其分布情形時，就可利用拔靴法來模擬重複取樣的動作。例如進行社會科學方面的問卷調查研究時，由於無法進行多次問卷調查來取得重複樣本，這時就可以利用拔靴法針對已取樣的樣本再進行重複取樣，來推測母體的統計分布情形。

必須注意的是，拔靴法與蒙地卡羅法雖然同樣都是利用逢機方式進行取樣，但蒙地卡羅法是從整個母族群直接抽樣出所需的樣本數量，而拔靴法則是利用已被取出的樣本為對象進行反覆取樣。因此，其取樣誤差除了原本作

為母體的原始樣本本身的取樣誤差外，還需要加上第二次重新取樣時所造成的誤差。因此作為取樣母體的樣本也應該有一定的數量，而且必須是以逢機取樣的方式取得，否則還是無法代表真正的母體狀況⁽¹⁾。

二、模擬退火法(Simulated Annealing, SA)：

模擬退火法是從材料科學方面的研究發展出來的尋優技術。當我們將某種金屬加熱至一定的溫度，使其中的金屬晶粒分子游離後，它的所有分子會在狀態空間中自由運動，然後隨著溫度的下降，這些分子逐漸停留在不同的狀態，在某種溫度時，分子會重新以一定的結構排列，而形成最穩定的結晶狀態，這樣的過程稱為「退火」(Annealing)。這樣經由退火過程所形成的金屬硬度最高，是最理想的材料。但因為退火所需的溫度掌控非常不容易，若不小心降溫太快，造成驟冷現象，這時金屬分子將會陷入半穩定狀態，這時就需要很長的時間才能進入另一個穩定狀態。因此在實際應用上，通常是先加熱到一定溫度後，再放入水或油中急速冷卻，這樣的過程稱為「淬火」。金屬經過淬火之後表面會硬化，但內部因為晶粒分子排列還不夠完美，會產生不可預期的作用力，導致金屬脆化易斷，因此需要再加熱使分子再重新排列，這個過程稱為「回火」。經由多次的淬火與回火，可使金屬結構越來越完美，硬度也越來越高。然而，如何控制淬火與回火過程並沒有一定的規律，通常只能靠經驗老到的師傅來操作才行。如果能夠找出真正理想的退火降溫程序，控制溫度或環境變化，使整個結構達到最穩定的狀態，便可以直接以退火的方式產生最理想的金屬結構，這也成為材料科學研究者的重要課題。

為探討退火現象，科學家利用蒙地卡羅法進行模擬，最後由 Kirkpatrick 等於 1983 年提出模擬退火法(Simulated Annealing)，並成功地應用在解決各種最佳化問題中，目前已廣泛應用到各領域^(3,4)。

應用模擬退火法來解決問題時，必須先針對問題選定一個目標函數，一般稱之為廣義能量函數 $E(x)$ ，然後設定一個足夠高的溫度 T 作為起始溫度，如果起始溫度太低，有時會難以產生變化。接著便開始進行運算以模擬熱平衡過程，首先計算目前系統組態的能量 E ，然後再隨機的將系統組態稍作改變，並計算變動後的系統組態的能量 E' ，接著計算變動成功的機率 $P = \min(1, e^{-\frac{E'-E}{kT}})$ ，並以此來決定系統組態是否改變。當 $E' < E$ 時，表示變動後能量降低， $e^{-\frac{E'-E}{kT}} > 1$ ，機率 P 值取較小的 1，因此採用這個變動的組態；但當 $E' > E$ 時，表示變動後能量提高，雖然看來並沒有改善，但並不是完全不採用，因為仍

有 $P = e^{-\frac{E-E'}{KT}}$ 的機率會接受這個變動。透過這樣的設計，可以避免系統變化時不會落入局部最低區域，而有機會跳出該區域，達到真正的最低能量狀態。而整個模擬退火法的重點就在於如何訂定退火策略(或稱為降溫程式)，以決定在每一個溫度所停留的時間及降溫的比例⁽³⁾。

將模擬退火法的目標函數配合問題的特性加以修正，就可以應用到其他領域，而成為解決最佳化問題的工具。例如前面提過的蛋白質 3D 結構折疊問題，便是尋求最低能階之狀態；旅行推銷員問題，則是尋求最短距離之路徑；在工廠作業排程方面，則是尋求最低工時、人力或成本的組合；至於產銷供應鏈的研究，則是要尋找最短供應時間或最低運輸成本。諸如此類，都是最佳化問題的應用。

三、遺傳演算法(Genetic Algorithm, GA)：

在生物的演化過程中，生物能透過交配基因重組與突變等種種方式，把自己的特徵遺傳給下一代，而在一代代遺傳過程中，透過環境的天擇，使得後代適應環境的能力越來越強。因此整個演化過程就是不斷進行基因的重組、突變和天擇篩選，最後留下來的就是最能適應環境的後代。Holland 在 1975 年依據生物演化的特性，提出一種選擇最佳搜尋方向的模式，並應用在最佳化問題的求解，稱之為遺傳演算法(Genetic Algorithm)。

雖然遺傳演算法跟前面提過的模擬退火法都是解決最佳化問題的技術，但由於遺傳演算法是使用隨機運算來取代確定法則去搜尋合適的解，因此可說是一種多路徑的隨機搜尋最佳化方法。由於它具有平行搜尋能力，可以同時比對許多解答，因此搜尋效能大大提昇，並且可以獲得多組解以供使用者選擇，這些特性跟前面所提的模擬退火法並不相同。

遺傳演算法主要步驟如下：

- (一)首先針對問題選定目標函數(適應度函數)，並且將這個目標函數作為一個適應環境的能力的指標，並設定控制參數。
- (二)透過一定的編碼技術，將系統組態編成一組基因碼。
- (三)先隨機產生一群基因碼，作為第一個親代群體。
- (四)透過以下三種遺傳演算子，完成世代交替及天擇的演化過程：
 - 1.交換(cross over)：將兩親代基因取出，透過交換部分基因碼方式產生子代。
 - 2.突變(mutation)：將親代的部分基因碼隨機改變，產生子代基因。
 - 3.選擇(selection)：從子代基因中選擇出較優秀的基因，使它們有機會參與下

一代的繁殖過程。基因的優秀程度則用前面所提到的目標函數來決定，函數值越高的越有機會被保留下來。

(五)反覆進行上個步驟，直到世代次數到達限定值，或目標函數值收斂到某一個極值時停止，以免陷入無窮運算的困境。如此所得到的就是最優良的後代，也就是最佳的解答。

遺傳演算法目前已經應用在許多不同的問題上，並且得到了一定的成果。但是由於以上所提到的各種算子，在使用時都有許的不同的控制參數。對於較複雜的問題，我們往往很難選擇出適當的控制參數以便有效地找出最佳解，因此需要再加以改進⁽³⁾。

蒙地卡羅法在統計檢定上的應用

當我們想要評估某個統計分析方法的檢定效率時，除了需要具備數理統計的理論基礎及採用正確的試驗設計方法外，更重要的就是電腦模擬技術。因為電腦模擬除了成本低廉，操作方便容易掌控外，更重要的就是實際上很難取得那麼多理想的觀測值當作樣本，來進行統計方法的評估⁽¹⁾。然而利用電腦模擬技術，就可以產生大量符合需求的觀測值，再透過待評估的統計方法進行檢定，看是否能正確檢定出差異情形，以比較其效率。

為探討處理平均值多重比較法的效率，Carmer 與 Swanson(1971)利用蒙地卡羅法產生逢機觀測值，來比較五種當時常用的處理平均值多重比較法的檢定效果，包括：

- 1.LSD：普通的最小差異顯著 LSD 法(Least Significant Difference)
- 2.FLSD：先經過 F 檢定後，再進行 LSD 法
- 3.TSD：Turkey 的差異顯著檢定法(Turkey's Significant Difference)
- 4.DMRT：Duncan 的多重範圍檢定(Duncan's Multiple Range Test)
- 5.BLSD：採用貝氏定理為基礎修正後的 LSD 法(Bayesian LSD)

模擬試驗假設進行 15 種處理組合，其理論處理平均值列表如表 1。試驗採逢機完全區集設計(RCBD)，分別採用 3、4、6 及 8 次等 4 種重複數，模擬試驗數據由以下模式產生： $Y_{ij} = \mu + \tau_i + \beta_j + \varepsilon_{ij}$ ，其中 μ 為試驗總平均，定為 100； τ_i 及 β_j 表第 i 個處理的第 j 個重複； ε_{ij} 為取樣變異，是從符合 $N(0,10)$ 的常態分布下以逢機取樣的方式獲得。如此每個試驗組合進行 1000 次模擬試驗，總計進行 $15 \times 4 \times 1000 = 60000$ 次模擬試驗，再以所得樣本分別利用上述 5 種檢定法進行檢定。由於我們已知實際上處理間是否真有差異存在，因

表 1. 模擬研究所使用的 15 種處理組合

Table 1. Sets of true treatment means used in simulation study. (Carmer and Swanson, 1971)

Set	σ^2 *	No. comparisons with true diff. = 0	True treatment means									
1	0.000	45	100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100									
2	0.067	1	104, 103, 102, 101, 100, 100, 99, 98, 97, 96									
3	0.600	1	112, 109, 106, 103, 100, 100, 97, 94, 91, 88									
4	0.967	1	120, 105, 103, 101, 100, 100, 99, 97, 95, 80									
5	1.600	20	112, 112, 112, 112, 112, 88, 88, 88, 88, 88									
6	1.656	0	114, 113, 112, 111, 110, 92, 90, 88, 86, 84									
7	1.677	1	120, 115, 110, 105, 100, 100, 95, 90, 85, 80									
8	2.731	1	122, 120, 118, 104, 100, 100, 96, 83, 80, 77									
9	0.000	190	100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 100									
10	0.063	14	104, 104, 103, 103, 102, 102, 101, 101, 100, 100, 100, 96									
11	0.568	14	112, 112, 109, 109, 106, 106, 103, 103, 100, 100, 100, 88									
12	1.367	1	122, 120, 118, 106, 105, 104, 103, 102, 101, 100, 100, 78									
13	1.579	14	120, 120, 115, 115, 110, 110, 105, 105, 100, 100, 100, 80									
14	2.663	10	120, 120, 120, 120, 120, 112, 111, 110, 109, 108, 108, 78									
15	2.719	1	124, 123, 122, 120, 118, 116, 103, 102, 101, 100, 100, 76									

* σ^2 = relative expected value of fixed effects component for treatments in treatment mean square = $[\sum_{i=1}^t \tau_i^2 / (t-1)] / (\sigma^2 + 100)$, for $t = 10$, or 20 .

此便可以觀察當處理間真正發生差異時，這 5 種檢定法能得到正確結論的比率，及三種可能的錯誤機率(type-I、II、III error)發生的比率。

結果發現，TSD 法因為對於真正存在的差異缺乏檢定敏感度，故首先被淘汰。而未經 F 檢定即採用 LSD 法，因常會有誤判情形，因此也不適合採用。剩餘三種檢定法中，DMRT 法因常出現較低的第一型錯誤機率，敏感度較 FLSD 及 BLSD 法差；且 FLSD 及 BLSD 法由於先經過 F 檢定的把關，比完全只看處理數目決定顯著程度的 DMRT 法更好。至於 Carmer 與 Swanson 則推薦使用 FLSD 法，因為它對研究者較為熟悉，加上計算簡便，且又採用容易取得的 student-t 表作為顯著臨界值，在應用上可能會比較適合⁽⁷⁾。

由這個研究也可看出另一個作者並未特別指出的結果，就是最小差異顯著法雖然非常理想，但必須先經過 F 檢定確定試驗有顯著差異時，才能進一步進行最小差異顯著檢定。若未經過 F 檢定就盲目利用 LSD 法進行最小差異顯著檢定，反而容易造成錯誤的結論。

蒙地卡羅法在遺傳育種上的應用

在作物育種上，要決定採用何種育種策略，必須先對育種材料間的種質多樣性及遺傳關係有所認識，包括 1.取樣的方法；2.各種資料的基本特性和限制；3.應該選擇使用遺傳距離觀測值、群集程序或其他多變量數據的分析方法；及 4.遺傳關係為何。透過正確的遺傳背景的了解，並且應用正確的統計工具，才能決定正確的育種策略⁽⁹⁾。

由於高等生物的遺傳育種行為十分複雜，因此要應用蒙地卡羅法在遺傳育種的研究上時，必須先對整個遺傳行為加以了解，並且作出初步的模式假說，才能用蒙地卡羅法驗證該模式是否合理。以下舉兩個應用範例加以說明：

例 1.

當我們對於有限大小的族群進行連續選拔時，其效果會隨著選拔世代而衰退。因此 Jannink(2003)利用蒙地卡羅法模擬育種選拔過程，以比較純累加性及具有累加性×累加性交感作用的狀況下的連續選拔效果。方法是假設有某個由 A、B 兩個等位基因控制的性狀，其累加性及累加性×累加性交感作用所呈現的基因型值如表 2 所示。環境變異利用常態分布模擬數字取得，將基因型值與環境變異值加總後即為性狀的表現型值，再利用既定的選拔強度加以篩選，將未達到預定值的個體去除，剩下的則進行逢機雜交產生下一世代。為避免陷入無窮運算的狀態，整個電腦模擬過程在進行到遺傳變方降低到初始時的 10 萬分之 1 以下時即自動結束。

表 2. 不同基因型累加性及累加性×累加性交感作用效果
Table 2. Genetic models used in the deterministic simulations. Each table cell represents a two-locus genotype and its genotypic value is given. (Jannink, 2003)

	Additive		
	AA	Aa	aa
BB	2a	a	0
Bb	a	0	-a
bb	0	-a	-2a
Additive × additive epistasis			
	AA	Aa	aa
BB	ϵ	0	$-\epsilon$
Bb	0	0	0
bb	$-\epsilon$	0	ϵ

Jannink(2003)在 10 種品種(基因型)中分別任選 2、4 及 8 種進行混合選拔，並假設累加性效果 $a=1$ 、交感效果 $\epsilon=2$ ，天然雜交率 $r=0.5$ ，環境變異 $V_e=500$ ，選拔強度 $SP=50\%$ ，起始世代的 A、B 等位基因頻度 $P_A=P_B=0.5$ ，如此使初始基因型值平均值為 0。開始選拔後，分別計算每個世代的累加性及交感效果的選拔反應，結果如圖 6。可以發現隨著世代改變，選拔反應越來

越小，最後達到水平狀態；而交感作用下的選拔反應比累加性作用更為持久而有效⁽⁸⁾。

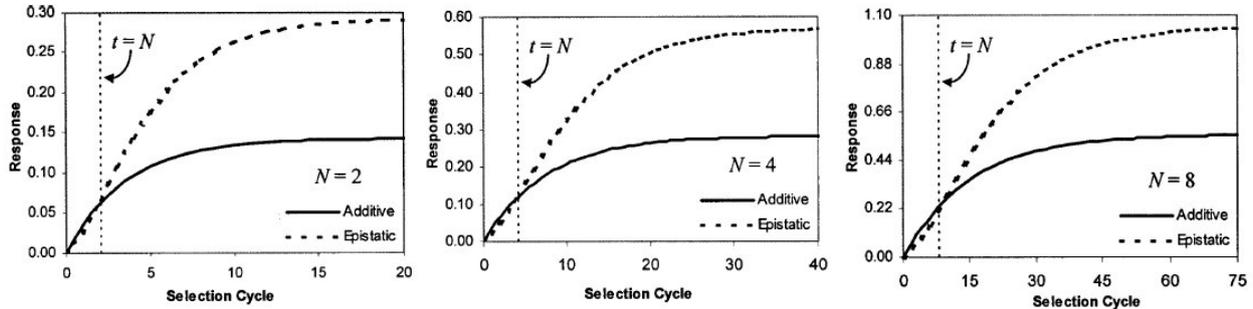


圖 6.不同親本數下各世代間累加性與交感效果的選拔反應

(Jannink, 2003)

Fig. 6. Response to selection in the population mean under additive and epistatic models.

例 2.

利用人工回交的方式，可以有效的加快特定基因從貢獻親(donor)轉入現有優良品種的速率。Stam 與 Zeven(1981)提出模式，可以利用標誌子基礎的天然回交結果，來預測貢獻親所提供的目的基因出現在輪迴親(recurrent)基因組中的特定區域的機率，以及它在特定染色體或全基因組的比例⁽¹¹⁾。而 M. Humberto(2000)則以蒙地卡羅法進行模擬回交試驗來驗證了此一模式，該試驗探討三種狀況：1. 4 個輪迴親與 2 個貢獻親；2. 1 個輪迴親與 1 個貢獻親；3. 2 個輪迴親與 1 個貢獻親。假定模擬染色體長度為 200cM (centimorgans)，將之以 1cM 為單位進行分割，再模擬以符合卜瓦松分布的機率下使之發生逢機交換，在這樣的條件下連續進行兩次模擬回交(BC1 及 BC2)，3 個狀況各回交 200 株，經過 5000 次模擬回交試驗，將模擬結果與 Stam 與 Zeven(1981)所提模式的理論值進行比較，結果如圖 7。經檢定結果發現，模擬值與理論值間並無顯著差異，顯示該模式應可應用在回交育種計畫裡，作為試驗規畫和結果預測的參考⁽¹⁰⁾。

以上兩例中，例 1 是以基因來進行操作，因此可以用電腦模擬基因重組過程，而性狀表現值則由基因型轉換所得的數值和另外取得的環境變異常態分布逢機數字的總和加以表示。例 2 則除了以模式轉換出各回交世代的調查數字外，另外配合卜瓦松分布來模擬染色體內發生基因交換(crossover)的現象。雖然兩者操作模擬的方法和原理不盡相同，但基本上都是應用蒙地卡羅法逢機產生調查數據來模擬育種過程的進行。如果要在田間進行這些試驗，除了需要花費大量人力物力與時間，由於不可能對試驗材料進行如此精密的掌控，因此有些試驗可能根本難以進行，而利用蒙地卡羅法就可以克服這樣的困難。

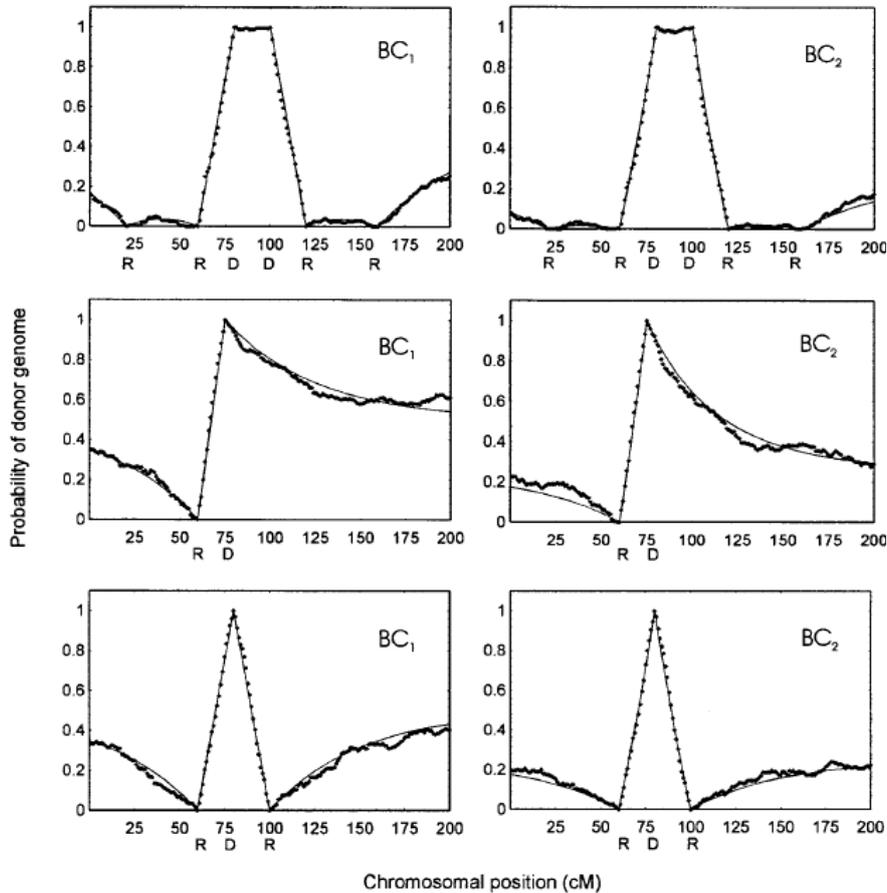


圖 7. 三種狀況下的模擬回交試驗結果，點為模擬值，線為理論值 (M. Humberto, 2000)
 Fig. 7. Graphical representation of the introgression results, generated by Monte Carlo simulations of marker-based selection in backcross breeding. The continuous line represents the theoretical probabilities of donor genome along the given chromosome, as calculated by the model herein presented. The dots show the observed frequencies as obtained by the simulations.

討論

蒙地卡羅法問世至今已有 60 餘年歷史，隨著電腦運算速度大幅提升和普及化，蒙地卡羅法逐漸成為各科學領域一個非常有力的研究工具，除了直接用電腦模擬實驗過程所發生的現象，或者當作高階微積分及多自由度系統的計算輔助工具，或用以解決各種最佳化問題，所以目前在物理、化學、數學甚至社會科學等領域也都被廣泛應用。由於各領域學科所面臨的問題各不相同，因此蒙地卡羅法也常被加以修改以符合所需，並進而發展出許多有用的工具，如拔靴法、模擬退火法及遺傳演算法等，提供更有力的解題管道。

然而，蒙地卡羅法在農業上的應用似乎不像其他領域的研究那樣普遍，這可能是因為農業領域研究的對象是生物，其複雜性較高，難以使用簡單的數學模式來描述所發生的現象。不過，或許目前我們還無法完全靠電腦模擬出整個作物生長發育過程或者世代交替現象，但還是可以應用蒙地卡羅法來探討特定的問題，或者提供作為另一種解題的思考方向。

參考文獻

1. 余清祥. 2007. 3.模擬、10.模擬檢定、11.Bootstrap. 政治大學統計系「統計計算與模擬」課程上課講義.
2. 吳振奎. 2004. π 論. 數學傳播 28(2):70-82.
3. 李世炳、鄒忠毅. 2004. 簡介導引模擬退火法及其應用. 物理雙月刊 24(2):307-319.
4. 林誠謙. 1989. 蒙地卡羅法簡介. 物理會刊 11(2):163-176.
5. 管靜芳. 1999. 蛋白質折疊問題之蒙地卡羅模擬. 物理雙月刊 21(3):405-409.
6. 謝銘傑(編譯). 1990. 第七章 難纏的問題～並不是每個問題都可輕易解決的. 演算法學 pp. 149-170.
7. Carmer, S.G., and M.R. Swanson. 1971. Detection of differences between means: A Monte Carlo study of five pairwise multiple comparison procedures. *Agron. J.* 63:940-945.
8. Jannink, J.L. 2003. Selection dynamics and limits under additive x additive epistatic gene action. *Crop Sci.* 43: 489-497.
9. Mohammadi, S.A. and B.M. Prasanna. 2003. Analysis of genetic diversity in crop plants-salient statistical tools and considerations. *Crop Sci.* 43:1235-1248.
10. M. Humberto, Reyes-Valdés. 2000. A model for marker-based selection in gene introgression breeding programs. *Crop Sci.* 40:91-98.
11. Stam, P., and A.C. Zeven. 1981. The theoretical proportion of the donor genome in near-isogenic lines of self-fertilizers bred by back-crossing. *Euphytica* 30:227-238.
12. Wolynes P.G., Onuchic J.N., Thirumalai D. 1995. Navigating the folding routes. *Science* 267:1619-1620.