

計算機仿真實驗

• 李建會

由於計算機的快速發展，我們在歷史上第一次處在與伽利略 (Galileo Galilei) 時代的科學家們相同的位置上。計算機人工世界的創造為我們提供了了解大自然奧秘的全新手段。

十七世紀前半葉，伽利略創建了受控實驗的科學方法，這種方法是近代科學產生和發展的主要動力。它不僅產生了伽利略的運動學、牛頓的力學、拉瓦錫 (Antoine Laurent Lavoisier) 的氧化燃燒學說、法拉第 (Michael Faraday) 的電磁理論等物理科學學科，而且也產生了生理學、遺傳學、分子生物學、心理學等生命科學學科。可以肯定，這種方法仍然是推動現代自然科學向前發展的不懈動力。

然而，現代科學的許多研究已經越來越多地涉及到一些非常複雜的系統，而這些系統又由於各種原因使得我們根本無法用傳統的方法對之進行實驗。比如，據說遙遠的星系中旋轉着的巨大氣體雲往往在引力的作用下收縮成高密度的集結物，並最終成為恆星的中心團塊，而圍繞着它旋轉的較小團塊最後則變成伴隨該恆星的行星系統。很顯然，這種說法根本不可能用實際的實驗來檢驗。又如，假設排放到大氣中的二氧化碳的總量是當前的兩倍，這將給從今往後50年的全球平均溫度帶來甚麼樣的影響？這是氣象學家用來描述全球變暖問題的一個標準設想。對該問題的回答多種多樣：從根本不產生影響，到溫度升高攝氏五度，即產生所謂的溫室效應。究竟哪種說法正確，沒有人可能對之進行一次真實的實驗。因此，沒有人會真正知道結果。然而，我們每個人都很關心這一問題，因為溫度升幅過高會對農業收成以至到南北極冰蓋的繼續存在等一切方面產生顯著的影響。再如，假如有人提出要通過提高利率，比如在很短

的時間內上升500個基點，以檢驗關於貨幣和股票價格波動的某個新理論，可以肯定，任何一個國家的金融機構都不會同意。這種系統的運作對人們的日常生活太重要，任何人都不敢貿然作這類實驗。還有一些情況，比如核反應爐，由於過於危險，或者代價過於昂貴，因此關於它的許多想法並不能直接用實驗加以檢驗。

幸運的是，當今電子計算機的飛速發展，使我們擁有了一種新的工具，通過它，我們可以構造這些複雜的真實世界的矽替身。利用這些矽替身，我們可以在真實的計算機中進行可能的多種實驗，藉以構造複雜的物理、生物、認知和社會系統的新理論。計算機剛剛產生時，人們就開始用它來對一些複雜的系統進行仿真實驗，以發現這些系統的規律。然而，真正意識到計算機仿真實驗的方法論革命意義的，是美國聖菲研究所 (Santa Fe Institute) 從事複雜性研究的科學家們。自80年代末開始，聖菲研究所把複雜性作為自己的研究對象，以計算機為工具，試圖找到控制複雜系統運作的基本原理①。

1987年，聖菲研究所的蘭頓 (Christopher Langton) 組織召開了首屆「生命系統合成與仿真」的國際研討會，以期實現他多年夢想的、在計算機中創建「以矽為基礎的生命」的設想。這次研討會取得了巨大的成功。會場上展示了許多計算機仿真的人工生命系統，從螞蟻王國的集體行為、蛋白質分子的自組織到生態系統的計算機演化等等，無所不包。其中最引人注目的是曾因寫作《自私的基因》(*The Selfish Gene*) 而名揚天下的牛津大學著名生物學家道金斯 (Richard Dawkins) 演示的一個程式，它用反覆對一個初始模擬生物形態使用若干簡單的規則的方法，居然在計算機上描繪出與真實生物界驚人相似的生命演化和滅絕的過程。自1987年之後，生命的合成和仿真的研究快速發展，取得了很多有價值的成就。

也是在1987年，同在聖菲研究所訪問的斯坦福大學經濟學家阿瑟 (Brian Arthur) 和米歇根大學的計算機專家霍蘭德 (John Holland) 在談話中萌發了創建一個人工股市的設想，以使用來回答困惑人們幾十年的一系列金融問題。隨後他們就開始了對人工替身股市的研究和實現。這一年的10月19日星期一，是美國股市最慘痛的一天，紐約股市一天內下滑22.6%。為了防止在「黑色星期一」看到這類恐慌，紐約股市的董事會制訂了上限條款規則，即當道瓊斯平均指數從上一個收盤點上升或下滑超過某一點時，便禁止某一類型的交易。在剛剛引入這些規則時，沒有人知道它們是否會得到預期的結果，即能否使投資者暫停，反省他們的行為，而不是盲目的跳進一個混亂的股市並隨波逐流。有很多投資者甚至擔心，這些規則會加劇股市的混亂。這些擔心是多餘的嗎？當時人們並不確切地知道結果會如何。對交易所的董事來說，增加上限條款規則只不過是成敗參半的冒險。然而，借助於阿瑟等人所擁有的仿真程式，上述日子已經一去不復返了。我們可以利用計算機中的替身世界，進行可重複的受控科學實驗，以檢驗這些規則的成敗②。

關於「整體大於部分之和」這句古老的格言，細胞提供了活生生的證據。無論我們對細胞內的物理化學過程知道得多麼清楚，我們還是不可能明白這團生命的聚合體是怎樣作為一個整體運作的，因為我們以往所做的和觀察的都只是它的一個側面。然而計算機的發展已經使我們可以在計算機中「構造活的矽細胞」。日本慶應義塾大學環境情報部富田勝教授領導的研究小組就在做着這樣的努力，他們開發了一個有劃時代意義的軟體：E-CELL。這是一種生物學計算機模擬軟體，在計算機環境中構造虛擬的電子細胞，它不僅可以模擬單一的細胞事件和過程，而且亦可以從整體的角度為細胞描繪一幅全圖。E-CELL其實是一個建模的工具包或平台，它允許使用者規定細胞的基因、蛋白質以及其他分子，它們的胞內定位和估計濃度，給出各自單獨的相互作用所依賴的「遊戲規則」，然後把剩下的工作交給計算機來完成，看這些使用者輸入的「初始值」在細胞這個複雜系統裏是怎樣相互作用構成細胞的。電子細胞將把每個時刻特定位置、特定物質的變化通過畫面和數位告訴你，你可以僅僅用滑鼠去輕輕敲擊就能實現在分子生物學實驗室費勁的基因敲除、轉基因或基因修飾等操作，隨心所欲地將感興趣的細胞暴露在某一種生存環境下，無需考慮細菌的污染、RNA的降解或放射性損害。研究者所需做的就是輸入初始值，然後就是在計算機螢幕前等待E-CELL的模擬結果。這種方法無疑將提供一個非常簡捷經濟的鑒別候選藥物、研究基因功能，或者僅僅是探索支配細胞行為的網路^⑥。

富田勝的小組已經用E-CELL的早期版本建構了一個有127個基因的虛擬細胞。這個虛擬的細胞在計算機矽環境下「活」着，從虛擬的培養基中吸取着葡萄糖等養分，合成各種各樣的維繫細胞生存的酶和蛋白質，排出乳酸等代謝廢物。這個簡陋的細胞已經使富田勝獲得這樣一個意外的發現：當中斷虛擬細胞的葡萄糖供應時，細胞裏的ATP水平在下降之前竟然有一個短暫的上升。根據這個模擬結果，富田勝猜想，產生ATP的系列過程前期也需要ATP本身來供應能量，因此，當葡萄糖來源中斷後，這種自身消耗便不再進行，而行進在ATP產生途徑中後期的代謝中間產物還會維持一小會兒ATP的供應。可以明顯地看出，模擬試驗為在活細胞中進行的實在試驗提供了最有價值的提示和線索，濾掉了許多繁瑣而重複的過程，留給科學家饒有趣味的課題和材料。當然，為了恰如其分地模擬，我們首先要給模擬軟體充實許多素材，知道更多數目的基因及其功能，知道在柔軟的細胞及生物體裏潛藏的物理化學規則，最終能夠模擬「真實」有機體的完整細胞。

除了富田勝對E-CELL的努力，美國康涅狄格州立大學法明頓分校健康中心的計算機科學家沙夫 (James Schaff) 和生理學家洛 (Leslie Loew) 也在做同一個夢想，他們設計了一個“Virtual Cell”，放在他們的主機上，用戶可以以遠端登錄的方式運行各自的模擬試驗。

計算機仿真不僅可以模擬現實的難以進行真實試驗的複雜物件，而且可以模擬現實上已經不存在的物件。本世紀早期，蜥腳類恐龍化石第一次被發現

時，其頸部被描述為水平姿態。但近來發現的化石被重新搭建後，牠的頭遠遠高出地面，有着天鵝般曲線的頸部幾乎與地面垂直。這迅即引起了人們對這種恐龍的血液循環如何為頭部提供血液的爭論。一些研究者甚至認為牠可能有多個心臟。但是原始的化石標本很重且易碎，難以在其關節上移動，因而很難確定牠頸部的初始形態。為了解決這個問題，史蒂文 (Kent A. Steven) 和帕里什 (Michael Parrish) 開發了“DinoMorph”軟體來模擬兩種長頸蜥腳類恐龍即梁龍 (Diplodocus) 和迷惑龍 (Apatosaurus) 的頸部形態。該軟體模擬了每一對頸部脊椎運動的幾何學細節，得到了複雜的三維圖景。結果表明，牠們的頸部在放鬆時幾乎是水平的，向下傾斜的角度很小。頭部離地面很近，與頸部相比又有一個向下的角度。兩種恐龍的頸部沒有傳統假說所認為的那般柔軟，梁龍僅能使其頭部抬起來超過背部，迷惑龍的靈活性略好一些。這意味着長頸蜥腳類恐龍是沿着湖濱吃生長在地上的植物，而不是像長頸鹿一樣吃樹葉^④。

類似的計算機仿真實驗的成功例子還有很多。根據聖菲學派的可斯蒂 (John L. Casti) 和其他很多學者，計算機仿真實驗是自近代以來科學方法論的又一場革命。他們認為，由於計算機的快速發展，我們在歷史上第一次處在與伽利略時代的科學家們相同的位置上。「我們不再被迫生活在假言性的陰暗世界中，或僅僅敲下實際系統的碎片，孤立地研究這些碎片，期望可以將這一大塊片面的知識重新拼成對整體系統本身的理解。」「我們現在擁有了一種必要的工具，可以用來建立複雜系統的理論，這些理論最終將可以與牛頓及其繼承者所發展的用來描述簡單質點系統的力學過程的理論相媲美。」^⑤

總之，我們正處在科學方法的新的變革的重大時刻。計算機人工世界的創造為我們提供了全新的了解大自然奧秘的新手段。

註釋

① 沃爾德羅 (Mitchell M. Waldrop) 著，陳玲譯：《複雜：誕生於秩序和混沌邊緣的科學》(北京：三聯書店，1997)。

②⑤ 可斯蒂 (John L. Casti) 著，王千祥、權利寧譯：《虛實世界——計算機仿真如何改變科學的疆域》(上海：上海科技教育出版社，1998)，頁89；38。

③ Dennis Normile, “Building Working Cells ‘in Silico’”, *Science* **284**, 80-81 (2 April 1999).

④ Kent A. Stevens, J. Michael Parrish, “Neck Posture and Feeding Habits of Two Jurassic Sauropod Dinosaurs”, *Science* **284**, 798-800 (30 April 1999).

李建會 1964年生，北京大學科學與社會研究中心博士候選人，北京師範大學哲學系副教授。