De Technologie van het Toeval

Monte Carlo en quasi-Monte Carlo

Ronald Kleiss[1]
IMAPP, FNWI, RU
versie van December 1, 2008

1 Inleiding: de Monte Carlo strategie

Het nemen van steekproeven is in veel gebieden van onderzoek een graag gebruikte aanpak om informatie te verkrijgen over grote verzamelingen (van mensen, dingen, of anderszins). Laat, bijvoorbeeld, iemand geïnteresseerd zijn in de gemiddelde lengte van de Nederlander. Het is natuurlijk geen doen om alle Nederlanders op te meten, maar het is vaak al voldoende om een voldoende groot aantal (bijvoorbeeld duizend) mensen op te meten en hun lengte te middelen. Dit soort onderzoek kan behoorlijk nauwkeurige resultaten opleveren, maar het heeft natuurlijk ook zijn eigen valkuilen: zo zou het, in het bovengenoemde voorbeeld, niet verstandig zijn om alleen basisscholen te bezoeken en de kinderen te meten, omdat je er dan gemakkelijk duizend bij elkaar hebt; of om de medische onderzoeken van militairen als basis te nemen.

Een iets 'wetenschappelijker' tintje heeft het probleem van *integratie*, dat wil zeggen de vraag hoe groot de oppervlakte onder een gegeven kromme is[2]. Men kan deze – altans in benadering – beantwoorden door het nemen van een steekproef, waarbij de waarde van de kromme op willekeurige punten bepaald wordt. Deze aanpak wordt de *Monte Carlo methode* genoemd, met een voor de hand liggende verwijzing[3]. Met name tijdens en na de Tweede Wereldoorlog, heeft, door de intrede van de computer, deze methode zich sterk ontwikkeld; hoewel de eerste Monte Carlo berekeningen al dateren uit

[1]R.Kleiss@science.ru.nl

[2]Men bedenke dat dit equivalent is aan de *gemiddelde* hoogte van de kromme, als het gebied waarover de kromme zich uitstrekt bekend is. Een integraal en een gemiddelde zijn dus in de meeste gevallen gelijkaardig.

[3]Er bestaan een groot aantal computerprogramma's die de Monte Carlo methode op een automatische manier hanteren voor de berekening van integralen. Met 'Monte Carlo' als inspiratie hebben ze namen als *Vegas*, *Divonne* (naar een casino bij Genève), en *Parnis* (idem, bij Athene).

het eind van de negentiende eeuw.

Vooraleer we met enig zelfvertrouwen kunnen claimen dat Monte Carlo werkt, moeten we natuurlijk wel een aantal vragen beantwoorden, te weten: kunnen we de correctheid van Monte Carlo wiskundig aannemelijk maken? Hoe groot moet de steekproef zijn om een gegeven nauwkeurigheid te bereiken? Hoe kunnen we garanderen dat de steekproef voldoende willekeurig is? Is het mogelijk om steekproeven te 'verbeteren'? In het hierna volgende zullen we ons hiermee bezig houden.

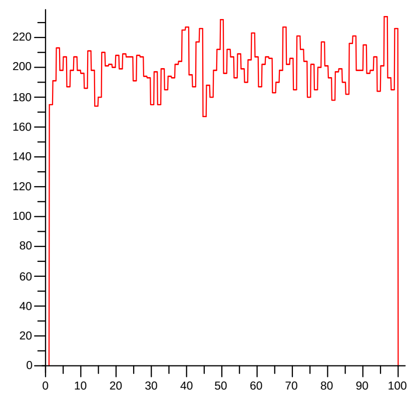
2 Kansberekening en afschattingen

De *waarschijnlijkheidsrekening* is de tak van wiskunde die zich met toeval en afschattingen bezighoudt. Wij zullen hier een paar van haar relevante uitspraken behandelen.

2.1 Kansverdelingen

Laat er van een toevalsproces een aantal mogelijke resultaten zijn. Een worp met een munt heeft bijvoorbeeld twee mogelijke uitkomsten, en een worp met een dobbelsteen heeft er zes: het IQ van een willekeurig gekozen voorbijganger kan elke uitkomst tussen (zeg maar) 30 en 180 opleveren. De temperatuur op een willekeurige plaats op aarde op een willekeurig tijdstip zal variëren tussen -70 en +60 graden Celsius; en zo voort. Niet alle uitkomsten zijn natuurlijk even waarschijnlijk, en dit wordt aangegeven met het begrip kansverdeling: met $P(x)$ geven we aan de kans om de uitkomst x te vinden in het toevalsproces[4]. Als we van een groot aantal resultaten van een toevalsproces een histogram maken, maken we een afbeelding van de kansverdeling.

[4] In feite is de definitie iets ingewikkelder: de kans om een uitkomst tussen x en $x+(dx)$ te vinden is gelijk aan $P(x) \cdot (dx)$ als (dx) een klein intervalletje is. Wiskundig gezien is deze definitie beter, maar wij zullen ons hiermee niet al te zeer vermoeien.



Histogram van 20000 worpen met een 'honderzijdige' dobbelsteen. De ideale curve ligt dus bij de waarde 200: het feit dat het werkelijke histogram fluctueert is een illustratie van het toevalskarakter van de uitkomsten: een situatie waarbij elke van de honderd uitkomsten precies 200 keer voorkomt zou *uiterst* verdacht zijn!

Kansverdelingen voldoen uit hun aard aan een aantal voorwaarden: $P(x)$ mag nooit negatief zijn; als$P(x) = 0$ dan is de kans om de uitkomst x te vinden nul, hetgeen wil zeggen dat x als uitkomst onmogelijk is. De *totale* kans, op welke uitkomst dan ook, is natuurlijk gelijk aan 1 (oftewel honderd procent), en we geven dit aan met

$$\int P(x)\ dx \quad = \quad 1\ . \tag{1}$$

Een ander belangrijk begrip is dat van *onafhankelijke* uitkomsten: twee uitkomsten van een toevalsproces zijn onafhankelijk als de kans op een waarde x_1 van de ene uitkomst niet afhangt van de waargenomen uitkomst x_2 van de andere gebeurtenis. De kans op een gegeven combinatie van uitkomsten x_1 en x_2 is dan eenvoudig het product van de enkele kansen:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)\ P(x_2) \quad \Leftrightarrow \quad \text{de gebeurtenissen zijn onafhakelijk} \tag{2}$$

en zo verder: als duizend gebeurtenissen onafhankelijk zijn geldt voor hun uitkomsten $x_1, x_2, \ldots, x_{1000}$

$$P(x_1, x_2, \ldots, x_{999}, x_{1000}) = P(x_1)\ P(x_2)\ \cdots\ P(x_{999})\ P(x_{1000})\ . \tag{3}$$

Voor een toevalsprces dat een getal tussen nul en één oplevert, waarbij elke uitkomst x even waarschijnlijk is, geldt dus

$$P_u(x) \ = \begin{cases} 1 & \text{als } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{als } x \leq 0 \text{ of } x \geq 1 \end{cases} \tag{4}$$

De notatie 'u' geeft aan dat dit de zogenaamde *uniforme* kansverddeling is.

2.2 Gemiddelde

Vaak zijn we geïnteresseerd in de gemiddelde waarde van een aantal uitkomsten. Als bijvoorbeeld honderd worpen met een dobbelsteen een gemiddelde waarde van 5.1 geven is er gegronde reden om de dobbelsteen te verdenken, aangezien een goede dobbelsteen een gemiddelde in de buurt van 3.5 moet geven[5]. Met name als niet alle uitkomsten even waarschijnlijk zijn is de gemiddelde waarde van de uitkomsten niet eenvoudig het gemiddelde van alle mogelijke uitkomsten, maar moeten deze gewogen worden met elk hun eigen waarschijnlijkheid. Naast de uitkomst x zelf kunnen we ook belang stellen in iets dat van x afhangt, bijvoorbeeld x^2 of $1/(x+12)^9$. Een voorbeeld: iemand nodigt U uit voor een dobbelspelletje: als U 2 of 3 of 4 gooit ontvangt U 10 euro; voor 5 of 6 krijgt U 20 euro; maar gooit U 1, dan moet U 80 euro betalen. De gemiddelde opbrengst (ook wel de *verwachte* opbrengst, of de *verwachtingswaarde* genoemd) wordt, aannemende dat de dobbelsteen zuiver is, dan gegeven door de opbrengsten van alle mogelijke uitkomsten op te tellen, gewogen met hun waarschijnlijkheid. Dit levert de verwachtingswaarde

$$
\begin{aligned}
&\text{verwachte uitkomst} = \\
&\qquad \sum_{j=1,2,3,4,5,6} P(\text{dobbelsteen komt op } j)\ \cdot\ (\text{opbengst voor uitkomst } j) \\
&= \frac{1}{6}(-80)+\frac{1}{6}(+10)+\frac{1}{6}(+10)+\frac{1}{6}(+10)+\frac{1}{6}(+20)+\frac{1}{6}(+20) \\
&= -\frac{10}{6} \qquad (5)
\end{aligned}
$$

Het is voor U beter niet op het aanbod in te gaan: als U tien keer speelt moet U verwachten zo'n zestien euro armer te worden.

In het algemene geval schrijven we voor de verwachte waarde van een functie $f(x)$ van de uitkomst x:

$$\langle f\rangle = \int P(x)\ f(x)\ (dx)\ . \qquad (6)$$

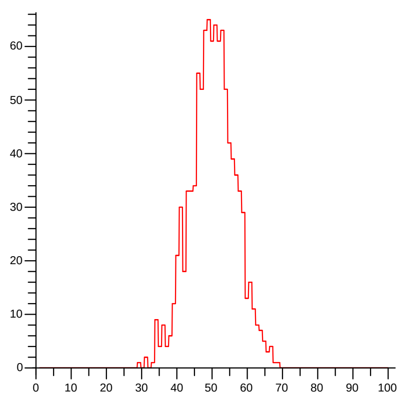
[5] Merk op dat voor een dobbelsteen $P(3.5)=0$: de *gemiddelde* uitkomst is niet per se een *mogelijke* uitkomst!

2.3 Afwijkingen van de verwachtingswaarde

Elke steekproef bevat natuurlijk maar een eindig aantal waarnemingen, dat we met N aangeven. Het is in het algemeen heel onwaarschijnlijk dat het gemiddelde dat uit een steekproef verkregen wordt precies gelijk is aan de verwachte waarde: als 100 keer met een zuivere munt gegooid wordt is de kans om *precies* 50 keer kop en 50 keer munt te vinden slechts 8 procent. We zijn daarom ook geïnteresseerd in de kans dat het gemiddelde van een eindige steekproef een bepaalde afwijking van de verwachtingswaarde oplevert. De relevante grootheid is de *verwachte (kwadratische) afwijking van de verwachtingswaarde*: dit heet de *spreiding* $\sigma(f)$ en deze wordt dus gegeven door

$$\begin{aligned} \sigma(f)^2 &= \left\langle \left(f - \langle f\rangle \right)^2 \right\rangle \\ &= \int P(x)\ \left(f(x) - \langle f\rangle \right)^2\ (dx)\ . \end{aligned} \tag{7}$$

De spreiding geeft een indicatie over hoeveel het resultaat van een steekproef van dat van de 'ideale' steekproef (nl. de verwachtingswaarde) afwijkt.



Verdeling van de gemiddelde waarden van 20 worpen met de 'honderzijdige dobbelsteen'. Vergelijk dit met de vorige figuur: de gemiddelden ligger in het algemeen een stuk dichter bij de verwachtingswaarde 50.

2.4 De grondwetten van Monte Carlo

2.4.1 De eerste schatter

Het basisprobleem in Monte Carlo is het bepalen van de integraal van een functie (de oppervlakte onder de kromme), dat wil zeggen de grootheid J_1:

$$J_1 = \int_0^1 f(x)\ (dx) \tag{8}$$

de integraal loopt van 0 tot 1, dat wil zeggen dat x alle waarden tussen 0 en 1 aanneemt. Gebruiken we vergelijking (4), dan kunnen we dit schrijven als

$$J_1 = \int P_u(x)\ f(x)\ (dx)\ \ , \tag{9}$$

en dit geeft ons integratieprobleem een nieuwe interpretatie: J_1 *is de verwachtingswaarde van* $f(x)$ *als de getallen* x *toevalsgetallen zijn die uniform verdeeld zijn tussen 0 en 1.* Dit is de basis van de Monte Carlo methode: om de integraal van $f(x)$ van 0 tot 1 te vinden kunnen we een groot aantal N getallen nemen die uit een toevalsproces komen zodanig dat ze verdeeld zijn volgens de uniforme kansverdeling P_u. Geven we de getallen aan met x_j (waarbij j de waarden $1, 2, \ldots N$ aanneemt), dan kunnen we voor elke x_j de waarde $F(x_j)$ bepalen. De 'eerste schatter' E_1 wordt dan gegeven door

$$E_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f(x_j) \tag{10}$$

en zoals we gezien hebben is de *verwachtingswaarde* van E_1 (die immers zelf een toevalsgetal is omdat hij gebaseerd is op de toevalsgetallen $x_{1,2,\ldots,N}$) gelijk aan het gevraagde antwoord:

$$\langle E_1 \rangle = J_1\ \ . \tag{11}$$

Het Monte Carlo recept is dus eenvoudig: neem toevalsgetallen x_j, en bereken het *gemiddelde* van de waarden $f(x_j)$: dit geeft een schatting voor de integraal J_1.

2.4.2 De tweede schatter

Zoals we gezien hebben is de kans dat een toevalsgetal precies gelijk is aan zijn verwachtingswaarde heel klein (soms zelfs nul). Dat wil zeggen dat het resultaat van de eerste schatter er in het algemeen een beetje naast zit. Maar ook hierover heeft de wiskunde iets te zeggen. Zoals uit het tweede hierboven gegeven histogram blijkt, liggen de waarden van gemiddelden in het algemeen veel dichter bij de verwachtingswaarde dan de waarden van de afzonderlijke toevalsgetallen. Het is ook zo dat, naarmate het gemiddelde over meer getallen genomen wordt, de afwijkingen van de verwachtingswaarde steeds kleiner worden. Dit wordt weergegeven in de *wet van de grote getallen*: het gemiddelde van N toevalsgetallen $f(x_1)$ heeft voor grote N een kansverdeling die helemaal bekend is, met een verwachtingswaarde (zoals gezien) gelijk aan J_1 en een spreiding σ die gegeven wordt door

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\left(J_2 - {J_1}^2\right) \quad , \quad J_2 = \int f(x)^2\,(dx) \ . \tag{12}$$

De spreiding in de gemiddelden hangt dus af van de integraal van het kwadraat van f, maar wat belangrijker is: de spreiding wordt kleiner er kleiner naarmate N groter er groter wordt: als we N vier keer zo groot nemen wordt σ twee keer zo klein, als N honderd keer zo groot wordt levert dat in σ een factor 10 meer nauwkeurigheid op, enzovoorts.

De meer wetenschappelijke betekenis van σ luidt als volgt: als we N keer de functie f evalueren voor goede toevalsgetallen x_j, is de kans dat het echte antwoord J_1 verder van onze schatting E_1 af ligt dan één keer σ gelijk aan ongeveer 30%: de kans dat J_1 meer dan 2σ verwijderd is van E_1 is minder dan 5%, en de kans op een verschil van meer dan 3σ is minder dan 0.5%. We zien hier dat het toeval behoorlijk getemd kan worden door maar N groot genoeg te nemen. In de natte-vinger benadering dat $\int f(x)^2\ dx$ wel ongeveer het kwadraat van $\int f(x)\ dx$ zal zijn, geldt ruwweg dat $N = 10000$ een nauwkeurigheid van 1% voor het antwoord geeft, en dat is vaak al genoeg. Zijn we niet tevreden, dan nemen we gewoon meer toevalsgetallen, en met $N = 10^6$ hebben we een nauwkeurigheid bereikt van 1 promille.

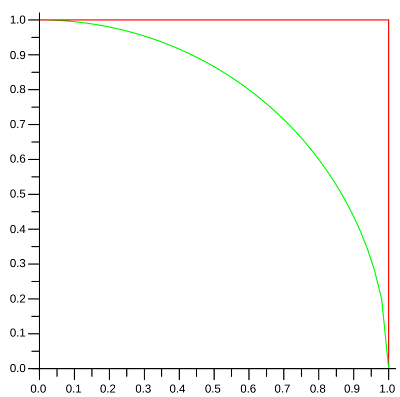
Net zoals de integraal zelf moet natuurlijk ook σ geschat worden. Gelukkig is hiervoor de volgende formule voorhanden: we kunnen ook de 'tweede schatter' E_2 berekenen volgens

$$E_2 = \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{j=1}^{N} f(x_j)^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^{N} f(x_j) \right)^2 \right) \quad , \tag{13}$$

en het valt te bewijzen dat inderdaad $\langle E_2 \rangle = \sigma^2$. Met andere woorden: de toevalsgetallen x_j, mits zd inderdaad goede toevalsgetallen zijn, stellen ons in staat een integraal numeriek af te schatten, en eveneens een schattting te maken van de onnauwkeurigheid waarmee het resultaat behaaald is!

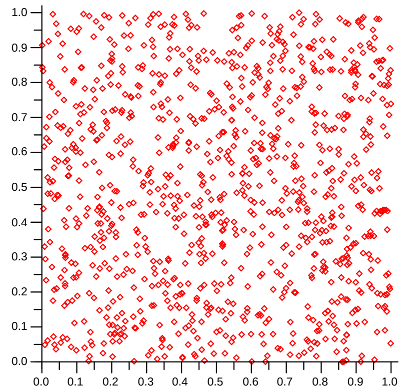
3 Hoe groot is π?

Een aardig voorbeeld van het gebruik van Monte Carlo (en tevens, in feite, de oudste toepassing, hoewel inderdtijd in een enigzins andere vorm) is de bepaling van de waarde van het getal $\pi = 3.141592653\cdots$.

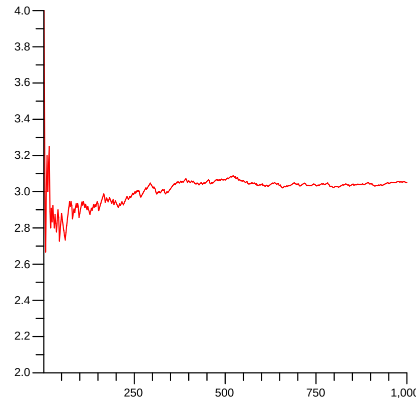


Het vierkant in de figuur hiernaast heeft een oppervlakte van 1; de kwart-cirkel omschrijft een oppervlakte van $\pi/4$ aangezien de oppervlakte van een hele cirkel met straal 1 gelijk is aan π.

De Monte Carlo benadering van het probleem is, punten unuiform en onafhankelij van elkaar te nemen in het vierkant: we doen dit door de twee coördinaten x en y van de punten te kiezen uit toevalsgetallen die verdeeld zijn volgens P_u; en dan te bepalen welke getallen in het vierkant ook binnen de cirkel liggen, dat wil zeggen dat $x^2 + y^2 < 1$. Naarmate N, het aantal gegenereerde punten, toeneemt moet de bepaling van π ook nauwkeuriger worden.



De eerste 1000 gegenereerde punten in het vierkant



De geschatte waarde van π tijdens het genereren van de eerste 1000 punten

Als methode om werkelijk π te berekenen is deze vorm van Monte Carlo betrekkelijk zinloos: heden ten dage zijn van π ongeveer één miljard (!) decimalen bekend, en om deze te krijgen zouden we ruimschoots meer dan 10^{18} toevalgetallen nodig hebben! De reden hiervoor is dat de 'fout', het verschil tussen E_1 en J_1, weliswaard kleiner wordt met groeiende N, maar niet erg snel omdat het verband gegeven wordt door $1/\sqrt{N}$. De reden dat Monte Carlo in real-life problemen vrijwel altijd de voorkeur heeft is het feit dat het $1/\sqrt{N}$ gedrag van de fout *universeel* is: andere methoden van integratie *kunnen* een fout geven die sneller krimpt dan $1/\sqrt{N}$ maar *meestal* doen ze dat niet. In het bijzonder bij integratieproblemen met veel variabelen in Monte Carlo vrijwel altijd de meest robuuste en snelste methode.

4 Toevalsgetallen

Aan de basis van de Monte Carlo strategie ligt dus het idee van een 'bron' of 'stroom' van toevalsgetallen[6]. Hoe kunnen we zulke getallenreeksen verkrijgen? Een aantal mogelijke manieren dienen zich aan

[6]In het jargon *random getallen* genoemd.

- **Natuurlijke random getallen** We kunnen hierbij denken aan worpen met een munt of dobbelsteen. Iets 'wetenschappelijker' zou zijn het observeren van radioactief verval waarbij het aantal vervalsgebuertenissen per seconde een toevalsgetal zou kunnen geven. Ook kan met denken aan het observeren van de loopbewegingen van mieren, het vlooigedrag van apen, of iets dergelijks. Al deze methoden hebben nadelen die we kunnen formuleren als volgt:
  - Slechte kwaliteit: het feit dat we het loopgedrag van mieren niet goed kunnen voorspellen betekent nog niet dat het echt willekeurig is. Het verval van radioactieve kernen is[7] wel echt willekeurig, maar de frequentie van verval neemt af in de loop van de tijd, waarvoor gecorrigeerd zou moeten worden. Dobbelstenen en munten zijn (evenals Lottomachines) aardig voor een spelletje maar beslist niet zuiver genoeg voor wetenschappeljke toepassingen. In het algemeen is het zodanig moelijk om voor 'natuurlijke' processen de kwaliteit van de toevalsgetallen te garanderen dat ze alleen al daarom gevaarlijk zijn.
  - Snelheid: de meeste processen geven getallen met een snelheid die ver ligt onder dat wat moderne toepassingen vereisen: daarbij is zo'n miljoen per seconde al een ondergrens!
  - Reproduceerbaarheid: misschien wel het belangrijkste bezwaar. In verreweg de meeste toepassingen van Monte Carlo op de computer moeten de programma's gecorrigeerd, verbeterd en foutvrij gemaakt worden. Daarbij is het cruciaal dat misdragingen van het programma gereproduceerd worden om fouten te isoleren en analyseren. Bij een 'natuurlijke' reeks toevalsgetallen, die als het goed is zich nooit precies herhaalt, is dit zo goed als onmogelijk. In de praktijk van computer-Monte Carlo is dit wel het grootste bezwaar!
- **Toevalsgetallen uit de wiskunde** Het idee van 'toeval' is in de wiskunde op tal van plekken aanwezig. We bespreken er hier twee:
  - Willekeurige decimalen: verreweg de meeste getallen vormen, in decimale notatie, een rij cijfers waarvan we eenvoudig kunnen be-

[7] Zie het college van Prof. Landsman!

wijzen dat ze zich nooit herhaalt[8]. Is dit een goede bron van 'toevalscijfers'? Eigenlijk niet! Zo is het niet moelijk een getal te construeren waarvan de ddecimalen zich nooit herhalen maar waarin bijvoorbeeld de decimaal 7 nooit voorkomt. Beroemde getallen zoals π hebben een decimalenrij die er op het eerste gezicht willekeurig uitziet maar waarvan we (nog) niet hebben kunnen aantonen dat alle decimalen, of combinaties van decimalen met de juiste frequentie voorkomt[9].

– 'Chaotische' processen: het fenomeen van chaos is tegenwoordig vrij goed begrepen. Het betreft hier processen waarvan de uitkomst na een klein aantal stappen voorkomen onvoorspelbaar wordt. Als voorbeeld is er de 'logistieke stapper': hierbij volgt op een gegeven getal x_n tussen 0 en 1 een nieuw getal x_{n+1} tussen 0 en 1, volgens de regel

$$x_{n+1} = 4\,x_n\,(1 - x_n) \tag{14}$$

Inspecteren we reeks aldus verkregen getallen, dan lijken deze op het eerste gezicht een goede reeks toevalsgetallen, alhoewel niet verdeeld volgens $P_u(x)$. De 'logistieke stapper' kan omgewerkt worden in een rij getallen y_n die wel volgens P_u verdeeld moet zijn als we definiëren

$$x_n = \left(\sin(2\pi y_n)\right)^2 \tag{15}$$

maar nadere analyse leert ons dat de logisitieke stapper dan niets anders inhoudt dan de regel

$$y_{n+1} = 2\,y_n \ \text{ modulo } 1 \tag{16}$$

waarbij de modulo-regel inhoudt dat alleen de decimalen achter de komma meegenomen worden. Omdat elk getal in een computer

[8]Een *rationeel* getal, dat wil zeggen een getal dat geschreven kan worden als een breuk a/b met a en b gehele getallen, geeft altijd een zichzelf vroger of later herhalende rij. Elk *irrationeel* getal, dat niet als een breuk kan worden geschreven, geeft een zich nooit herhalende rij decimalen.

[9]Dit betreft de notie van een *normaal* getal. In de decimalenrij van zo'n getal komt niet alleen bijvoorbeeld de decimaal '2' gemiddeld een op de tien keer voor, maar komt ook de decimalencombinatie '256' gemiddeld een op de duizend keer. Het is niet bekend of π normaal is.

met alleen een eindig aantal decimalen kan worden gegeven, is na heel weinig stappen (ongeveer 30) de informatie van het begingetal y_1 uitgeput en zitten we eigenlijk alleen maar te kijken naar de afrondingsfouten die onze computer maakt – een nutteloos en, vanuit het standpunt van kwaliteit gezien, gevaarlijk idee!

- **Gelogen random getallen via de computer** Wat we nodig hebben is een eenvoudig *algorithme*, dat wil zeggen een in de computer geprogrammeerde regel, die een reeks getallen oplevert die we als toevalsgetallen hanteren. Uiteraard is zo'n reeks *niet* toevallig, immers de volgende getallen liggen al impliciet in het algorithme besloten! We spreken dan ook van *pseudo-toevalsgetallen*[10]. Men zou geneigd zijn te denken dat een algorithme dat willekruig-lijkende reeksen getallen produceert zelf wel ingewikkeld of onbegrijpelijk zou moeten zijn, maar niets is minder waar! In feite is het beste soort algorithme er één waarin het volgende getal x_{n+1} uit het voorgaande x_n wordt verkregen via een regel die nog eenvoudiger is dan de logistieke stapper:

$$x_{n+1} = \Big(a\, x_n + c\Big) \text{ modulo } 1 \quad , \tag{17}$$

  waarbij natuurlijk a en c zorgvuldig gekozen moeten worden (zo zou $a = 1$ een heel slechte keuze zijn). In feite zijn de toevalsgetallen die we eerder gezien hebben in verband met de berekening van π gebaseerd op deze regel.

  Een andere mogelijheid is om het getal x_{n+1} niet alleen van x_n te laten afhangen, maar ook van nog eerdere waarden. Zo levert ook de keuze

$$x_{n+1} = \Big(x_{n-9} + x_{n-23}\Big) \text{ modulo } 1 \tag{18}$$

  uitstekende resulaten op! Het bedenken van algorithmes van pseudotoevalsgetallenreeksen is een kleine maar levendige industrie.

- **Doet-ie het of doet-ie het niet?** Een 'generator' van toevalsgetallenreeksen moet in het algemeen worden getest alvorens te kunnen worden geaccepteerd. Dit is in het bijzonder het geval wanneer iemand zijn favoriete algorithme aan de rest van de wetenschappelijke gemeenschap wil aanprijzen. Zonder uizondering hebben deze testen

[10]Het Oudgriekse werkwoord 'pseudein' betekent 'liegen'.

de vorm van het doen van een berekening met behulp van de getallenreeks, waarbij van de toevoren bekend is wat de *verwachtingswaarde* (en de spreiding) van de uitkomst zou zijn als de getallenreeks echt zuiver toevallig ware. Hierbij doet zich het volgende aardige filosofische probleem voor. Een echt zuivere toevalsreeks geeft natuurlijk nooit precies de verwachtingswaarde, zoals we gezien hebben: in ongeveer 30% van de gevallen zit zo'n reeks er zelf meer dan één σ naast. Een goede getallenreeks faalt dus (op het 1-σ niveau) een op de drie testen! Helaas komt men in de litteratuur nog maar al te vaak auteurs tegen die trots claimen dat hun favoriete algorithme *alle* tests glansrijk doorstaan heeft! Hier bijt onze 'contrôle van het toeval' dus in zijn eigen staart...

5 Beter dan toeval: quasi-Monte Carlo

5.1 Het voordeel van toeval

Zoals we gezien hebben is bij Monte Carlo berekening van een integraal de verwachte (relatieve) fout ongeveer $1/\sqrt{N}$. Voor de numerieke berekening van integralen over één enkele variabele (eendimensionale integralen) bestaan algorithmes die niet op toevalsgetallen gebaseerd zijn en een veel kleinere fout geven, bijvoorbeeld $1/N^2$ of zelfs nog beter. Monte Carlo heeft echter het voordeel dat **(a)** de foutschatting geldt onder heel ruime voorwaarden, tewijl de niet-Monte Carlo algorithmes alleen opgaan voor bepaalde klassen van functies[11]; en **(b)** de foutschatting van Monte Carlo ongewijzigd blijft voor integralen over meer variabelen (meerdimensionale integralen), in tegenstelling tot de andere regels: zo gaat het algorithme dat in één dimensie met $1/N^2$ in vier dimensies met $1/\sqrt{N}$, en in hogere dimensies (wat werkelijk heel vaak voorkomt) nog slechter. Het verschil zit hem in het feit dat de niet-Monte Carlo integratieregels het patroon van de te gebruiken getallen van tevoren vastleggen, en er dus plekken in de (meerdimensionale) ruimte zijn waar de integratieregel nooit kijkt, terwijl echte toevalsgetallen vroeger of later willekeurig dicht bij ieder punt uitkomen.

[11] Zo mogen zulke functies bijvoorbeeld geen dis-continue sprongen maken: voor Monte Carlo is zoiets geen enkel bezwaar.

5.2 Quasi-toevalsgetallen

Het kan voorkomen dat we ondanks de aantrekkelijke kanten van Monte Carlo toch niet tevreden zijn met het $1/\sqrt{N}$ gedrag van de fout. Bij wiskundige analyse blijkt dit gedrag gelegen in de *niet-uniformiteit* van de toevalsgetallen, welker verdeling natuurlijk 'gaten' en 'ophopingen' bevat zolang N eindig is. Is het nu mogelijk om 'betere' getallen te vinden? Deze moeten voldoen aan twee voorwaarden. In de eerste plaats moeten de gaten en ophopingen afwezig zijn, of in ieder geval kleiner dan men voor echte toevalsgetallen verwacht[12]. In de tweede plaats moet het algorithme vroeger of later willekeurig dicht in de buurt van elk gegeven punt uitkomen. Zulke gettallenreeksen, die we aangeven met *quasi*-toevalsgetallen, bestaan inderdaad, en hun toepassing wordt *quasi-Monte Carlo* genoemd. Een van de meest aantrekkelijke reeksen is de *van der Corput* reeks, die het best geïllustreerd kan worden door het begin van de reeks te geven. Een van der Corput reeks is gebaseerd op een geheel getal k, en loopt dan alle (rationele) getallen af met noemer k, daarna met noemer k^2, enzovoort, op een zodanige wijze dat de 'gaten' in de verdeling zo snel mogelijk gevuld worden. Voor $k = 2$ vinden we dan de reeks

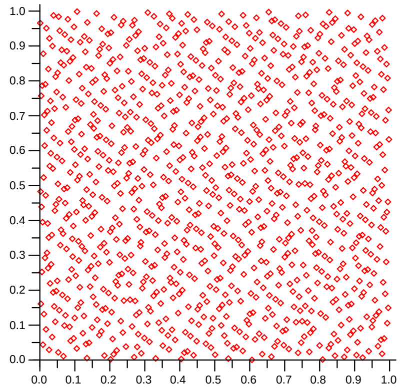
$$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{3}{8}, \frac{7}{8}, \frac{1}{16}, \frac{9}{16}, \frac{5}{16}, \frac{13}{16}, \frac{3}{16}, \ldots$$

en voor $k = 3$

$$0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{9}, \frac{4}{9}, \frac{7}{9}, \frac{2}{9}, \frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{1}{27}, \frac{10}{27}, \frac{19}{27}, \frac{4}{27}, \ldots$$

In twee dimensies geven deze het volgende patroon:

[12] Enige reflectie leert ons dat een eindig aantal getallen natuurlijk altijd gaten in zijn verdeling moet hebben.



Het patroon van de eerste 1000 punten uit de van der Corput reeks met $k = 2$ en $k = 3$. Zelfs op het oog al is de verdeling van de punten gelijkmatiger dan die van echte (of pseudo)-toevalsgetallen

Quasi-toevalsgetallen hebben natuurlijk ook hun beperkingen. Ze zijn bijvoorbeeld uitdrukkelijk *niet* onafhankelijk! De verdeling in hogere dimensies is ook slechter omdat dan hogere waarden voor k nodig zijn. Hieraan is wel weer een mouw te passen door bijvoorbeeld de volgorde in de reeks te 'husselen'. Met deze technieken moet het in principe mogelijk zijn een fout ter grootte $\log(N)^d/N$ te bereiken voor een d-dimensionale integraal, een hele verbetering ten opzichte van $1/\sqrt{N}$.