Критерий нормальности Колмогорова-Смирнова

Постановка задачи

Мы исследуем отклонение распределения гистограммы эмпирического распределения (EDF) от теоретического или другого эмпирического распределения. Прежде всего нас интересует поиск отклонения эмпирической функции распределения(EDF) от нормального распределения, заданного функцией CDF — кумулятивной функцией распределения вероятности.

1. Мы хотим доказать или опровергнуть гипотезу нормального распределения положительных исходов H_0.
2. Мы исходим из предположения, что распределение с большим фиксированным временем накопления может оказаться ниже, чем распределение с динамическим управлением заданиями (окном).
3. При нормальном законе распределения мы планируем сформулировать критерий, который бы подходил для раннего выявления нерабочих режимов оборудования генерации случайных чисел.

Мы добавляем в ПО возможность анализа статистических данных и проверки гипотезы о нормальном распределении вероятности при данной выборке.

Возможные нерабочие состояния оборудования генерации ГПСЧ. Оборудование может эксплуатироваться вне рабочих режимов при повышении тактовой частоте, занижения напряжения питания и ограничения по времени окна накопления данных. Формально работоспособность можно проверить только путем загрузки тестовых заданий (seed/nonce), на которые известна тестовая последовательность отклика. Но этот метод не всегда доступен. Если оборудование частично неработоспособно, то при параллельной генерации часть диапазона не будет отсылать отклики, создавая паттерн в значениях. Паттерны могут проявляться в графическом, тензорном представлении. Статистика оперирует со случайными выборками, т.к. в нашем случае часть оборудования параллельной генерации может не отвечать в течение коротких или продолжительных не прогнозируемых интервалов времени. Некоторая неоднородность может возникать в процессе сбора данных из-за коллизий на линии.

Нормальный закон распределения плотности вероятности будет выражаться в терминах математического ожидания и дисперсии. Для математической оценки отклонения используются

различные критерии, среди которых выделяется критерий Колмогорова-Смирнова, критерий Пирсона. Нас прежде всего интересуют методы основанные на вероятности распределения и дающие строго математический критерий применимый к однородному или нормальному распределению плотности вероятности. Сам алгоритм генерации так же может иметь некоторую скрытую неоднородность, которая проявляется на специфичных значениях параметра (seed). Для исследования и моделирования поведения аппаратных генераторов мы используем простые 64/128 битные генераторы с большим периодом повтора, в частности MWC64/128 и Xoroshiro64/128. Обработка статистических данных с аппаратного генератора возможна с использованием файла выборочных значений из потоковых данных. Файл содержит параметры генератора (seed, timestamp) подобные тесту NIST `Longest Runs of Ones in a Block` с временными метками возникновения длинной последовательности единиц/нулей в блоке 64/256 бит. Длины прогонов единиц и ноликов (Runs) можно анализировать статистическими тестами.

 Cumulative distribution function for the normal distribution

CDF (Кумулятивная функция распределения для нормального распределения вероятности) — это функция, которая показывает вероятность того, что случайная величина X примет значение меньше или равное заданному числу x, т.е. $P(X \leq x)$. CDF является возрастающей функцией, начинается с 0 и достигает 1, преобразуя функцию плотности вероятности (PDF) в накопленное значение вероятности до точки x.

Положим, что X распределена *нормально*. Тогда CDF для X задается формулой:

$$F(t;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{t} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\,dx.$$

Здесь параметр μ — это математическое ожидание распределения, а σ — его стандартное отклонение.

Положим, что X распределена *биномиально*. Тогда CDF для X задается формулой:

$$F(k;n,p) = \Pr(X \leq k) = \sum_{i=0}^{\lfloor k \rfloor} \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i}.$$

Здесь p — вероятность успеха, функция описывает дискретное распределение числа успехов в последовательности из n независимых экспериментов, а $\lfloor k \rfloor$ — целая часть k.

Рекомендации по анализу статистики представлены в ГОСТ Р 50.1.033-2001 и ГОСТ Р 50.1.037-2002:

- [Р 50.1.033-2001] РЕКОМЕНДАЦИИ ПО СТАНДАРТИЗАЦИИ. Прикладная статистика. Правила проверки согласия опытного распределения с теоретическим. Часть I. Критерии типа хи-квадрат.
- [Р 50.1.037-2002] РЕКОМЕНДАЦИИ ПО СТАНДАРТИЗАЦИИ. Прикладная статистика. Правила проверки согласия опытного распределения с теоретическим. Часть II. Непараметрические критерии (рассматривает критерий Колмогорова и критерий Смирнова).

См. также:

- Kolmogorov–Smirnov test
- Normality test

Критерий согласия Колмогорова

Применение критерия согласия А. Н. Колмогорова в практике осложняется следующими обстоятельствами. Для сопоставления функций эмпирического и теоретического распределений необходимо знать значения математического ожидания и среднего квадратического отклонения наблюдаемой случайной величины, которые обычно неизвестны.

В 1933 г. А. Н. Колмогоров доказал важную теорему: если функция $F(x)$ непрерывна, то при $n \to \infty$ вероятность события $\sup_x |F_n(x) - F(x)| < t/\sqrt{n}$ стремится к распределению Колмогорова.

Формулировка

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка объёма n, порождённая случайной величиной, которая задаётся непрерывной функцией распределения $F(x)$. Пусть $F_n(x)$ — эмпирическая функция распределения. Тогда $\sqrt{n}\sup_{x\in\mathbb{R}} |F_n(x) - F(x)| \to K$ по распределению при $n \to \infty$, где K — случайная величина, имеющая распределение Колмогорова.

*Неформально говорят, что скорость сходимости эмпирической функции распределения к её теоретическому аналогу имеет порядок $1/\sqrt{n}$.

Обозначим нулевую гипотезу H_0 как гипотезу о том, что выборка подчиняется распределению $F(x) \in C^1(\mathbb{X})$. Тогда по теореме Колмогорова для введённой статистики справедливо:

$$\forall t > 0\colon \lim_{n\to\infty} P(\sqrt{n}D_n \leqslant t) = K(t) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (-1)^j e^{-2j^2t^2} = \theta_4(e^{-2t^2}),$$

где $D_n = \sup_x |F_n(x) - F(x)|$.

Теорема Смирнова

Пусть $F_{1,n}(x)$, $F_{2,m}(x)$ — эмпирические функции распределения, построенные по независимым выборкам объёмом n и m случайной величины ξ. Тогда, если $F(x) \in C^1(\mathbb{X})$, то

$$\forall t > 0 \colon \lim_{n,m\to\infty} P\left(\sqrt{\frac{nm}{n+m}} D_{n,m} \leqslant t\right) = K(t) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (-1)^j e^{-2j^2t^2},$$

где $D_{n,m} = \sup_x |F_{1,n}(x) - F_{2,m}(x)|$.

Теорема Смирнова позволяет построить критерий для проверки двух выборок на однородность.

Критерий согласия, как его используют тестах запишется

$$\forall t > 0 \colon \lim_{n,m\to\infty} P\left(\sqrt{\frac{nm}{n+m}} D_{n,m} > t\right) = 1 - K(t) = 2\sum_{j=1}^{+\infty} (-1)^{j-1} e^{-2j^2t^2},$$

Критерий согласия Кёйпера (KS_Kuiper)

> Изначально, я смотрел в код проекта `Dieharder` (набор тестов для проверки ГПСЧ), где применяется ряд вариантов теста KS, включая тест Кёйпера. В этой связи, следует упомянуть критерий. Теорема Колмогорова порождает много вариантов оценки статистики. Многие методы в прикладной статистике кажутся математически не обоснованными. Например, применение метода для нормального распределения при условии, что в ядре операции выполняется сравнение с линейной функцией - недопустимо.

Мы отдельно рассматриваем левые и правые отклонения, относительно нормального распределения $F(x,\theta)$, D_n^+ и D_n^-. В критерии Кёйпера используется статистика вида: $V_n = D_n^+ + D_n^-$.

Критерий согласия Кёйпера является вариантом критерия согласия Колмогорова и был предложен для проверки простых гипотез о принадлежности анализируемой выборки полностью известному закону, то есть для проверки гипотез вида
$H_0 : F_n(x) = F(x,\theta)$ с известным вектором параметров теоретического закона.

Для однородного распределения используется сравнение с линейной кумулятивной функцией однородного распределения $F(x) = i/n$, нижняя и верхняя оценка:

$$D_n^+ = \max\left(\frac{i}{n} - F(x_i)\right),$$

$$D_n^- = \max\left(F(x_i) - \frac{i-1}{n}\right), \quad i = 1, ...n,$$

n — объём выборки, $x_1, x_2, ..., x_n$ — упорядоченные по возрастанию элементы выборки.

> Важно понимать, что тесты строятся с использованием последовательной выборки случайных чисел с применением генератора ГПСЧ с однородным распределение U(0,1). Тест предполагает сортировку массива данных. Выполнить сортировку для большого массива данных - длительная процедура. От критерия согласия Колмогорова-Смирнова в тесте остается только само распределение Колмогорова, которое рассчитывается асимптотически. В проекте Dieharder используются два метода расчета распределения Колмогорова, один из них - приближенный в тесте Кёйпера.

При справедливости простой проверяемой гипотезы статистика $\sqrt{n}V_n$ в пределе подчиняется[1] распределению:

$$G(v) = 1 - 2\sum_{n=1}^{\infty}(4n^2v^2 - 1)e^{-2n^2v^2}.$$

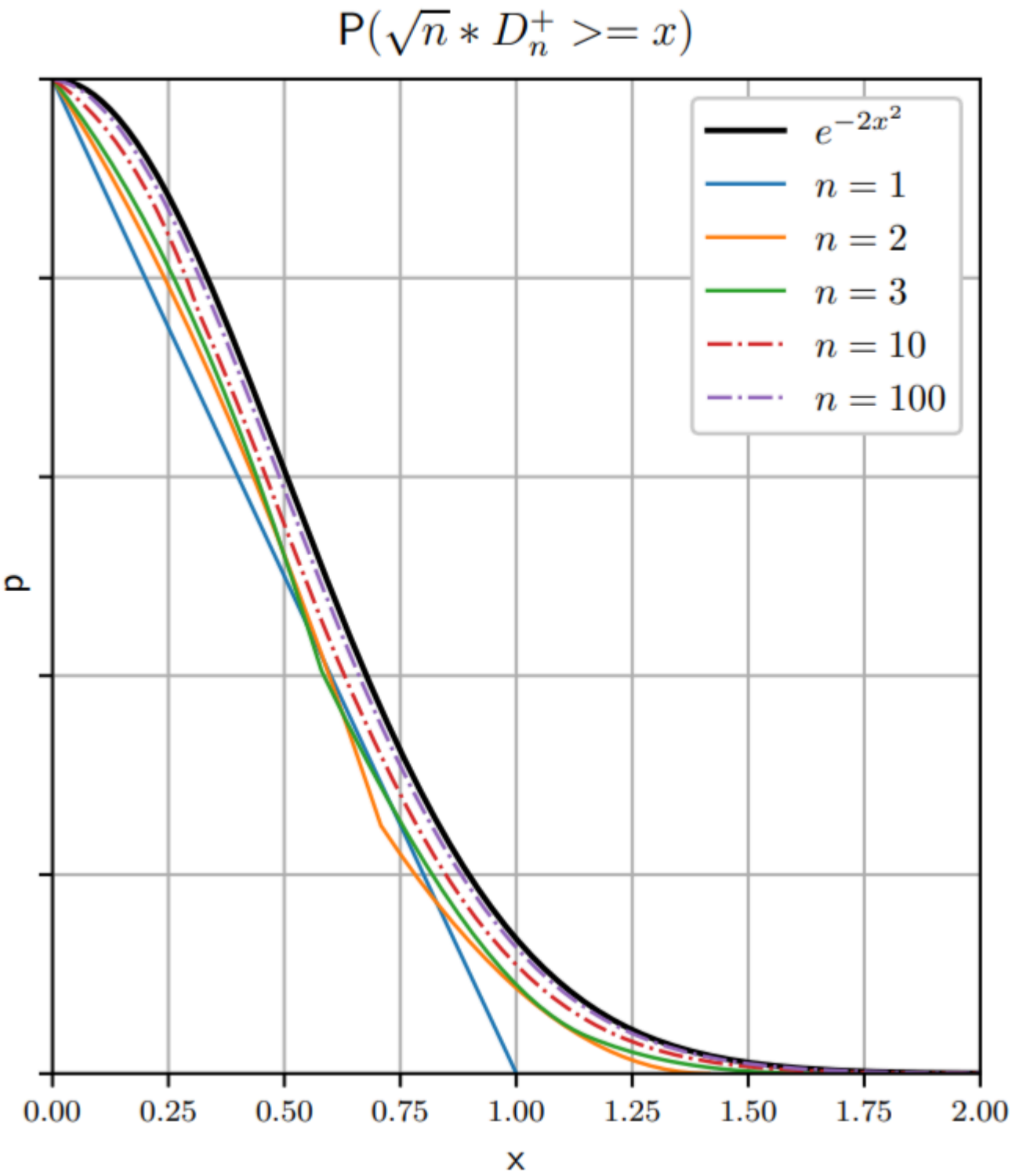
где n - число элементов выборки.

[1] Kuiper N. H. Tests concerning random points on a circle // Proc. Konikl. Nederl. Akad. Van Wettenschappen. 1960. Ser. A. V. 63. P. 38 — 47.

[1802.06966] Computing the Cumulative Distribution Function and Quantiles of the One-sided Kolmogorov-Smirnov Statistic

> Обзорная часть работы отсылает к односторонней границе Смирнова и точной формуле для вероятности (Smirnov-Birnbaum-Tingey).

$$\lim_{n\to\infty}\mathbb{P}(\sqrt{n}D_n^+ \le \epsilon) = \lim_{n\to\infty}\mathbb{P}(\sqrt{n}D_n^- \le \epsilon) = 1 - e^{-2\epsilon^2}$$



[503.11673] The Kolmogorov-Smirnov (KS) statistic revisited, 2025

> Мне нравится идея вернуться к математическим основам и вывести критерий для дискретной математики из мультиномиального (биномиального) распределения. Прежде всего четкий акцент - критерий согласия предназначен для сравнения EDF и CDF. Обсуждается идея использования оценки DKWM (Dvoretzky–Kiefer–Wolfowitz-Massart). Оценка дает коридор для эмпирической функции распределения.

В работе Представлена Теорема (Smirnov-Birnbaum-Tingey).
Точная формула вероятности превышения односторонней статистики имеет вид:

$$\mathbb{P}(D_n^- > \epsilon) = (1-\epsilon)^n + \epsilon \sum_{j=1}^{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor} \binom{n}{j} \left(\epsilon + \frac{j}{n}\right)^{j-1} \left(1 - \epsilon - \frac{j}{n}\right)^{n-j}.$$

В контексте теоремы Смирнова — Бирнбаума — Тингей и связанных с ней результатов по односторонним статистикам Колмогорова — Смирнова важную роль играет неравенство DKWM. Это неравенство даёт точную верхнюю оценку вероятности того, что максимальное отклонение эмпирической функции распределения $F_n(x)$ от истинной $F(x)$ превысит заданный уровень ϵ:

$$\mathbb{P}(D_n > \epsilon) \leq 2e^{-2\epsilon}$$

Полоса DKWM неасимптотическая (работает для любого конечного n), очень простая в вычислении и не требует таблиц.

Теорема Гнеденко — Рвачёвой — Феллера дополняет теорему Смирнова — Бирнбаума — Тингей (одновыборочный случай) и даёт распределение для одностороннего критерия Колмогорова — Смирнова с двумя выборками.

Следствие (асимптотика)
При $n = m \to \infty$

$$\mathbb{P}\big(D_{n,n}^+ \geq \frac{r}{\sqrt{n}}\big) \to e^{-r^2}.$$

> Это асимптотика нормального распределения вероятностей.

Критерий Крамера — Мизеса — Смирнова

ω^2-статистика Мизеса. Cramér–von Mises test

Базовая идея - рассмотрение интеграла отклонения эмпирической кумулятивной функции от непрерывной кумулятивной функции нормального распределения.

$$\omega^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [F_n(x) - F^*(x)]^2 \, \mathrm{d}F^*(x)$$

Заметим, что вместо интегрирования по dx предложено интегрирование по функции распределения dF(x), статистика не зависит от вида непрерывной функции распределения. Такое определение именуется как Smirnov's distribution-free statistic.

В статистических тестах почему-то вместо кумулятивной функции нормального распределения возникает сравнение с линейной функцией (кумулятивной функцией однородного распределения) и в тестах используется приближение

$$S = n\omega^2 = \frac{1}{12n} + \sum_{i=1}^{n} \left[F_n(x_i) - \frac{i - 0.5}{n} \right]^2 .$$

> Магия числа 12 не ясна. Очевидно эта поправка, для согласования критерия при малых n, связанная со способом дискретизации данных.

Критерий Андерсона-Дарлинга

Ω^2-статистика Мизеса. Anderson–Darling test

The Anderson–Darling and Cramér–von Mises statistics belong to the class of quadratic EDF statistics (tests based on the empirical distribution function).[2] If the hypothesized distribution is F, and empirical (sample) cumulative distribution function is F_n, then the quadratic EDF statistics measure the distance between F and F_n by

$$\Omega^2 = n \int_{-\infty}^{\infty} \left[F_n(x) - F(x)\right]^2 w(x)\, dF(x),$$

где n число элементов выборки, $w(x)$ - весовая функция.

В случае $w(x) = 1$, используется статистика Крмаера-Мизеса (Cramér–von Mises). Тест Андерсона-Дарлинга (Anderson–Darling) (1954) основан на квадратичной дистанции

$$\Omega^2 = n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left[F_n(x) - F(x)\right]^2}{F(x)\left(1 - F(x)\right)}\, dF(x),$$

с весовой функцией $w(x) = \left[F(x)\left(1 - F(x)\right)\right]^{-1}$. В таком виде тест может быть более чувствителен к отклонениям на краях распределения.

Формулу можно упростить используя асимптотику, для случая однородного распределения:

$$S_\Omega = -n - 2\sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{2i-1}{2n} \ln(F(x_i,\theta)) + \left(1 - \frac{2i-1}{2n}\right) \ln(1 - F(x_i,\theta)) \right\},$$

где n — объём выборки,
$x_1, x_2, ..., x_n$ — упорядоченные по возрастанию элементы выборки.

- Anderson T. W., Darling D. A. Asymptotic theory of certain «goodness of fit» criteria based on stochastic processes // Ann. Math. Statist. — 1952. — V. 23. — P. 193—212.
- Anderson T. W., Darling D. A. A test of goodness of fit // J. Amer. Stist. Assoc., 1954. — V. 29. — P. 765—769.

> Хочется упростить статистику применительно к однородному распределению. Кумулятивная функция однородного распределения $F(x) = x$. Для анализа мы рассматриваем квадратичное отклонение от непрерывного распределения $F(x)$. И это должно напоминать среднеквадратичное отклонение. В идеале надо выражать нормировку отклонения в терминах функции распределения вероятности. И таким образом, мы приходим к критерию Пирсона. Следовало бы начать изложение с критерия Пирсона. Или вывести формулу критерия из формулы Байеса для полной вероятности. Далее рассмотреть асимптотику приводящую к использованию логарифмов в критериях нормальности, подобно тому как логарифмы возникают в машинном обучении.

Хи-квадрат статистика Пирсона

Данный раздел, следует начать с математической статистики.
[1] Б. А. СЕВАСТЬЯНОВ КУРС ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ. ГЛАВА 14 Статистические критерии

> Я выделяю этот учебник, потому что он соответствует подготовке научной школы Колмогорова. Мне не нравится вводить критерии без обоснования. Большинство эмпирических методик тестирования ГПСЧ опираются на χ^2- статистику Пирсона.

В соответствии с заданным разбиением подсчитывают число
n_i выборочных значений, попавших в i-й интервал, и вероятности попадания в интервал
$P_i(\theta) = F(x_{(i)}, \theta) - F(x_{(i-1)}, \theta)$,
соответствующие теоретическому закону с функцией распределения $F(x, \theta)$.
Статистика критерия согласия χ^2 Пирсона определяется соотношением

$$\chi^2 = n \sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i/n - P_i(\theta))^2}{P_i(\theta)}.$$

Пример использования

Выдержка из документации TestU01:

```
void sstring_Run (unif01_Gen *gen, sstring_Res3 *res,
                  long N, long n, int r, int s);
```

Это вариант **теста на серии единиц** (run test), приспособленный для битовой строки.

В битовой строке длины n серии последовательных единиц (1) можно рассматривать как **зазоры** (gaps) между блоками последовательных нулей (0). Длины этих зазоров (или серий) являются независимыми **геометрически распределёнными** случайными величинами, увеличенными на 1; то есть вероятность того, что длина серии равна i, составляет 2^{-i} для $i = 1, 2, \ldots$. Естественно, то же самое верно, если поменять местами 0 и 1 и рассматривать серии нулей.

Тест строит битовую строку до тех пор, пока не получим ровно **n серий единиц** и **n серий нулей**, то есть всего **2n серий**.

Выбираем некоторое целое положительное число k.
Для j = 0 и j = 1 обозначим:

- $\chi_{j,i}$ — количество серий j-битов длины i, для i = 1, …, k−1
- $\chi_{j,k}$ — количество серий j-битов длины ≥ k

При справедливости нулевой гипотезы H_0 (битовая строка случайна) для каждого j вектор (X_{j,1}, …, X_{j,k−1}, X_{j,k}) имеет **мультиномиальное (многомерное биномиальное) распределение** с параметрами
(n, p_1, p_2, …, p_{k−1}, p_k),
где

- $P_i = 2^{-i}$ для $1 \le i < k$
- $P_k = 2^{-(k-1)}$, то есть p_k = p_{k-1}

Тогда, если величина $n \cdot P_k$ достаточно велика, статистика Хи-квадрат

$$\chi^2 = n \sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i/n - P_i(\theta))^2}{P_i(\theta)(1 - P_i(\theta))}.$$

приближённо имеет **распределение хи-квадрат** с **k−1** степенями свободы.

Более того, величины χ_0^2 и χ_1^2 приближённо **независимы**, поэтому их сумма $\chi^2 = \chi_0^2 + \chi_1^2$

приближённо подчиняется распределению хи-квадрат с **2(k−1)** степенями свободы.
Функция расчета выполняется по предложенной статистике, для последовательностей нулей и

единиц.

```
X2 = 0.0;
for (j = runs_min; j <= runs_min; j++) {
        t = Count1[j] - nP[j];
    X2 += t * t / (nP[j] * (1.0 - P[j]));
}
```

Тут P_j - вероятность, которая дается как геометрическая прогрессия 1/2, 1/4, 1/8...; nP_j - произведение объема выборки n на вероятность. Подобным образом рассчитываются две статистики для ноликов и единиц, суммируются и выводится общий показатель, к которому применяются процентные точки p-value.

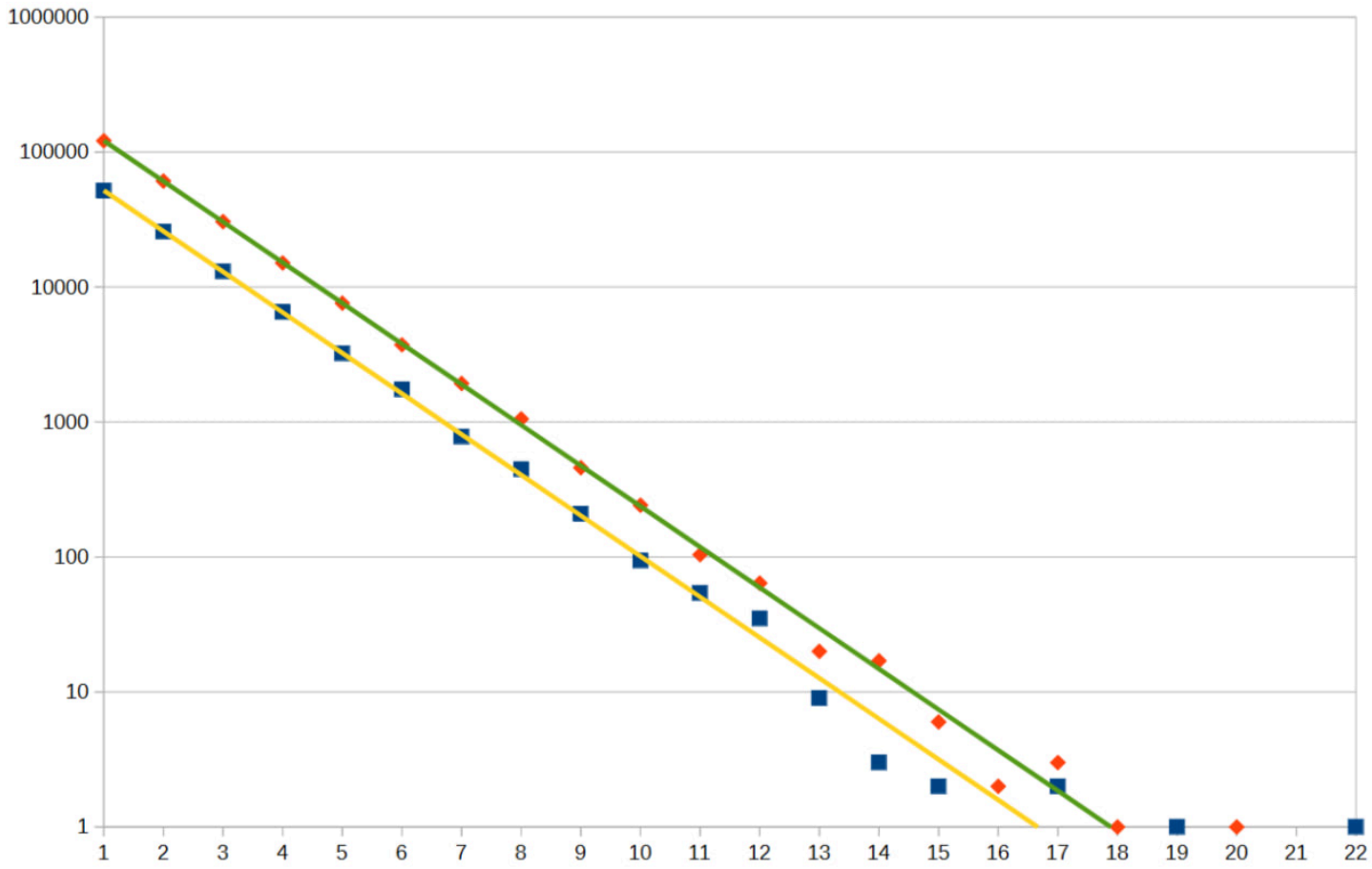


Рис. Пример распределения серий прогонов нулей, в логарифмическом масштабе для генератора типа Hash-DRNG. Представлены две независимые выборки и геометрическое распределение для каждой.

Заметим, что данные с малым числом nP вносят существенные шумы, и шум увеличивается с геометрической прогрессией при увеличении j обычно в расчет статистики берутся значения с $nP > 10$.

Оценка p-value выполняется по критерию Пирсона. В формуле метода Runs присутствует весовая функция $1/(1-P_i)$, которая проявляется только при малых степенях геометрической прогрессии P_i.

Тест Шапиро-Уилка

Тест Шапиро-Уилка — это популярный статистический метод для проверки, насколько выборка данных соответствует нормальному (гауссову) распределению, особенно эффективный для малых и средних выборок (до 2000 наблюдений). Он сравнивает упорядоченные значения выборки с ожидаемыми значениями нормального распределения, возвращая p-value: если p > 0.05, данные считаются нормальными; если p ≤ 0.05, нормальность отвергаем (отклоняем нулевую гипотезу).

Основные моменты:

- **Цель**: Определить, принадлежат ли данные нормальному распределению.
- **Гипотезы**: H_0 (Нулевая гипотеза): Данные распределены нормально. H_1 (Альтернативная): Данные не распределены нормально.
- **Принцип работы**: Основан на сравнении квантилей выборки с квантилями идеального нормального распределения. Статистика теста W вычисляется как:

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} a_i x_{(i)}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2},$$

где $x_{(i)}$ — упорядоченные значения выборки, a_i — коэффициенты, зависящие от n.

- **Интерпретация p-value (уровень значимости)**:
  - p-value > 0.05: Нет оснований отвергать H_0, данные можно считать нормальными.
  - p-value ≤ 0.05: Отвергаем H_0, данные значительно отличаются от нормального распределения.
- **Преимущества**: Считается одним из наиболее мощных тестов для проверки нормальности, особенно хорош для небольших выборок.
- **Ограничения**: Для очень больших выборок (>5000) рекомендуется использовать другие тесты, такие как тест Андерсона-Дарлинга.

См. также: Shapiro–Wilk test.

Дополнительные критерии нормальности

Помимо упомянутых, существуют другие тесты на нормальность:

- **Тест Андерсона-Дарлинга**: более чувствительная к отклонениям на краях распределения.
- **Тест Лиллиефорса**: Модификация Колмогорова-Смирнова для случаев, когда параметры распределения оцениваются по выборке.
- **Тест Жарке-Бера**: Основан на асимметрии и эксцессе, эффективен для больших выборок.
- **Критерий хи-квадрат (Pearson)**: Для проверки согласия с любым распределением, включая нормальное, требует дискретизации данных.

Криптографические генераторы Hash-DRNG и CTR-DRNG

[NIST SP 800-90Ar1] Recommendation for Random Number Generation Using Deterministic Random Bit Generators.

Национальный стандарт NIST предлагает два варианта криптографических генераторов:

1. использовать в качестве основы хэш-функцию типа SHA256 или SHA3.
2. использовать блочный шифр AES в режиме CTR.

Обозначим общую идею использования криптографической хэш-функции в режиме Hash-DRNG. Оговорка. В SHA3 функция KECCAK может использоваться в режиме генерации потока бит (SPONGE-SQUEEZE алгоритм - отжимание губки), см SHAKE. В SHA2 хэш-функция может применяться по-блочно. Для генерации используется хэш функция в режиме генерации потока бит,заданной длины `returned_bits = HashGen(bit_len, V)` . Аргументом является предыдущее состояние (`V`). Новое состояние `H = Hash(V); V = V+H+C+Seed` - это рандомизация счетчика `C` , состояния `V` и `Seed` , с использованием той же хэш-функции.

К генератором случайных чисел (PRNG) можно применить требования:

1. Функция перебора состояний без повторов с псевдослучайным выходом.
2. Функция рандомизации выходных значений для заданной длины (бит).

На примере алгоритма MWC64x:

Состояние представлено, как пара чисел {x,c}: $S = (x + \beta c) \bmod P$, где $P = A\beta - 1$, $\beta = 2^s$.

1. Итерация выполняется на математической операции: $S = S\beta^{-1} \bmod P$.
2. Рандомизация (скрамблер) выходного значения: $x \oplus c$;

Пакеты тестирования ГПСЧ

Существуют пакеты тестирования генераторов, которые позволяют сравнить в различных тестах. На практике используют тесты вроде NIST SP 800-22 (dieharder, TestU01) для проверки равномерности вывода бит генератора. По результатам теста генератор принимается нормальным или отвергается.

NIST, TestU01 и Dieharder

Сборка пакета тестирования TestU01 под GNU/Linux:

```
$ mkdir TestU01
$ cd TestU01
$ curl -OL http://simul.iro.umontreal.ca/testu01/TestU01.zip
$ unzip TestU01.zip
$ export basedir=`pwd`
$ cd TestU01-1.2.3/
$ ./configure --prefix="$basedir"
$ make -j 8
$ make -j 8 install
$ cd ../
$ mkdir lib-so
$ mv lib/*.so lib-so/.
$ gcc -std=c99 -Wall -O3 -o test-xoroshift.c test-xoroshift.c -Iinclude -Llib -ltestu01 -lprobd
```

Для примера приведу результаты тестирования Xoroshiro64* и MWC64x.

```
/* тест MWC64x с использованием библиотеки TestU01 */
#include "TestU01.h"
#define A1 0xFFFEB81BuLL
static uint64_t state[1]={~0};
static uint32_t mwc64x(void) {
    uint64_t x = state[0];
    state[0] = A1*(uint32_t)(x) + (x>>32);
    return x^(x>>32);
}
int main()
{
    // Create TestU01 PRNG object for our generator
    unif01_Gen* gen = unif01_CreateExternGenBits("MWC64x", mwc64x);
    // Run the tests.
    bbattery_SmallCrush(gen);
    // Clean up.
    unif01_DeleteExternGenBits(gen);
    return 0;
}
```

Заметим, что в метод MWC64 добавлена операция XOR: `x ^ (x>>32)` . Я бы назвал это словом "рандомизатор" или "скрамблер", эта операция позволяет улучшить прохождение некоторых тестов. С той же целью, в метод `Xoroshiro64` добавлено умножение результата итерации на большое простое число. Авторы метода xoroshiro предлагают несколько таких "скрамблеров", отчего алгоритмы отмечаются звездочками и плюсиками.

```
const uint64_t result_plus = s0 + s1;
const uint64_t result_plusplus = rotl(s0 + s1, R) + s0;
const uint64_t result_star = s0 * S;
const uint64_t result_starstar = rotl(s0 * S, R) * T;
```

Скрамблер - это линейное или нелинейное отображение, при заданной ширине слова, сохраняющее число состояний.

Для тестирования и сравнения генераторов предлагают методику *Hamming–Weight Dependencies* HWD. В публикации авторы ссылаются на ряд тестов "Hamming–Weight" из пакета TestU01, присутствующие в наборе Crush-тестов. Метод тестирования 64 битных генераторов, сводился к отдельному тестированию старшей и младшей части.

Для улучшения прохождения тестов авторы рекомендуют использовать старшие биты выхода генератора при переводе в вещественные числа.

Метод преобразования, который реализует этот тезис выглядит следующим образом

```
float to_float(uint32_t x) {
    return (x>>8)*0x1.p-24f;
}
double to_double(uint64_t x) {
    return (x>>11)*0x1.p-53;
}
```

Аналогично, в наших тестах при работе с MWC64 мы использовали преобразование

```
/* преобразование чисел в формат float32 дает распределение [0,1) */
static inline float u64_float(uint64_t x) {
        return ((uint32_t)((x>>32) ^ (x&0xFFFFFFFFU)) >> 8) * 0x1.0p-24f;
}
```

Пакет TestU01 предлагает *два* метода инициализации и использования генератора. Первый вариант мы протестировали - он на выходе дает значение 32 бита на итерацию. Второй вариант работает в вещественных числах double и задает функцию генератора, как `double(*gen)()` :

```
double uniformX () {
    return (((uint64_t)mwc64_next()<<21))*0x1.0p-53;
}
int main() {
    unif01_Gen* gen = unif01_CreateExternGen01("MWC64x-U[0,1)", uniformX);
    bbattery_SmallCrush(gen);
    return 0;
}
```

По ссылке представлены результаты теста MWC64x в режиме генератора однородного распределения U(0,1). Для сравнения привожу результаты теста Xoroshiro64* при тех же условиях.

Для генерации однородного распределения float U(0,1) на GPU мы рекомендуем использовать генераторы MWC64x. Для генерации в формате double следует использовать генераторы 128 бит, такие как MWC128 и Xoroshiro128.

Hamming–Weight Dependencies test

Для тестирования мы приспособили тест [HWD]. Тест запускался без изменений с различнми генераторами MWC и Xoroshiro. см. prngs_hwd.c.

```
$ gcc -O3 -march=native -DHWD_BITS=64  -o hwd hwd.c
$ ./hwd
```

генератор MWC64x тест провалил. Все генераторы MWC128 и Xoroshiro64/128 тест проходят с числом итераций порядка 10^{12}.

Выборочное тестирование с использованием TestU01

Полный набор тестов из 100-150 методов может занимать существенно много времени. Следует выбрать методы наиболее подходящие для решения конкретной задачи. Тестовая задача - выбор параметров генерации MWC64/128 и выбор скрамблера выходных данных. При этом нас интересует использование генератора в режиме генерации однородного распределения U(0,1) в задачах моделирования физических процессов, таких как молекулярная динамика.

Скрамблеры - нелинейное преобразование. Источник идей - алгоритмы SHA1, SHA2, SHA3. Скрамблеры в алгоритмах Xoroshiro.

Скрамблеры - линейное преобразование.

- Грей код - обладает уникальным свойством в итерации меняется только один бит.
- Скрамблеры на циклических сдвигах и XOR.
- Скрамблеры на полиномиальной арифметике, используются нередуцируемые полиномы.
- Скрамблеры на аффинных преобразованиях.

Грей код в тестах применяется для выявления корреляций, а не как целевое решение. В генераторах ГПСЧ применять НЕ рекомендуется.

Зачем нам понадобились скрамблеры. Допустим мы иследуем некоторый генератор ГПСЧ, аргумент функции содержит seed и счетчик-итератор, который может увеличиваться линейно. Наш тест - проверить, как виляет применение линейного или нелинейного итератора на однородность распределения в различных статистиках и сравнить с линейным. Применяется статистика: AD, KS, χ^2.

Для выбора параметров генератора MWC64/128 и оценки эффективности линейных и нелинейных скрамблеров в задачах моделирования физических процессов (молекулярная

динамика) можно использовать целевую подвыборку тестов из набора Crush пакета TestU01. Эта подвыборка фокусируется на выявлении артефактов, критичных для многомерной равномерности и линейных зависимостей, при этом остаётся выполнимой по времени (в отличие от полного набора тестов BigCrush).

см. Провальный пример теста линейности xoroshiro128+, то как можно использовать TestU01 с кастомным набором параметров. MWC64x при тех же настройках тест проходит.

Критерии отбора тестов при подборе парметров ГПСЧ и скрамблеров

- Многомерная равномерность — критична для молекулярной динамики, где последовательности используются для генерации координат/скоростей в 3D-пространстве и во времени.
- Чувствительность к линейным структурам — для оценки эффективности линейных скрамблеров (Грей-код, аффинные преобразования).
- Чувствительность к нелинейным зависимостям — для проверки скрамблеров, вдохновлённых хэш-функциями (SHA) и Xoroshiro.
  Битовая независимость — скрамблеры работают на уровне битов; важно проверить отсутствие корреляций.

Подвыборка тестов (из набора Crush TestU01)

Следующие 13 тестов обеспечивают баланс между глубиной анализа и временем выполнения:

Тест (имя в TestU01)	Тип проверки	Обоснование выбора
snpair_ClosePairs	Многомерная равномерность	Выявляет аномальные скопления точек в высоких размерностях — критично для распределения частиц в молекулярной динамике.
smarsa_BirthdaySpacings	Распределение расстояний в гиперкубе	Чувствителен к латтисной структуре линейных генераторов; эффективен против артефактов линейных скрамблеров.
scomp_LinearComp	Линейная сложность битовой последовательности	Прямо тестирует устойчивость к линейным зависимостям — ключевой тест для сравнения линейных и нелинейных скрамблеров.

Тест (имя в TestU01)	Тип проверки	Обоснование выбора
scomp_MatrixRank	Ранг случайных бинарных матриц	Обнаруживает линейные артефакты в блоках битов; чувствителен к слабым линейным скрамблерам.
sstring_HammingWeight2	Баланс 0/1 в последовательностях	с набором параметров из теста [HWD]
sstring_HammingIndep	Независимость весов Хэмминга	Выявляет корреляции в плотности единиц — критично для нелинейных преобразований (например, на основе модульной арифметики).
sstring_Run	Длины серий битов	Проверяет локальную независимость; чувствителен к артефактам Грей-кода (изменение одного бита).
sstring_LongestHeadRun	Максимальная серия единиц в блоке	выявляет экстремальные несбалансированные серии.
swalk_RandomWalk1/2	Случайные блуждания	Тестирует поведение в непрерывных пространствах; имитирует траектории частиц в динамике.
sknuth_MaximumTest	Распределение максимумов	Использует статистику AD/KS для оценки хвостов распределения — напрямую связано с критериями нормальности
sbit_TwoBitOverlap	Корреляции пар битов	Проверяет локальные нелинейные зависимости — важно для скрамблеров, имитирующих хэш-функции.
sspectral_Fourier1	DFT — периодические структуры	(эквивалент NIST DFT; выявляет циклы в 1D).
sspectral_Fourier3	многомерный сперктральный тест	Многомерный Fourier — периодичности в высших размерностях; усиливает выявление скрытых структур в многомерных

Тест (имя в TestU01)	Тип проверки	Обоснование выбора
		данных. Рекомендуется для ГПСЧ в физическом моделировании, где корреляции в координатах (x,y,z) могут искажать результаты.

Соответствие тестам NIST-800-22A

The NIST test suite The NIST (National Institute of Standards and Technology) of the U.S. federal government has proposed a statistical test suite for use in the evaluation of the randomness of bitstreams produced by cryptographic random number generators.

The NIST tests and the equivalent tests in TestU01 are:

1. The `Monobit` test. This corresponds to `sstring_HammingWeight2` with L = n.
2. The `Frequency` test within a Block. Corresponds to `sstring_HammingWeight2` .
3. The `Runs` test. Is implemented as `sstring_Run` .
4. The test for the `Longest Run of Ones` in a Block. Is implemented as the test `sstring_LongestHeadRun` .
5. The `Binary Matrix rank` test. Is implemented as `smarsa_MatrixRank` .
6. The `Discrete Fourier Transform` test. Is implemented as `sspectral_Fourier1` .
7. The Non-overlapping Template Matching Test,
8. The Overlapping Template Matching Test,
9. Maurer's "Universal Statistical" Test,
10. The Linear Complexity Test as `scomp_LinearComp` ,
11. The Serial Test,
12. The Approximate Entropy Test,
13. The Cumulative Sums (Cusums) Test,
14. The Random Excursions Test, and
15. The Random Excursions Variant Test.

[NIST.SP.800-22r1a] A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, 2010

Подготовка данных:

- Для 64/128-битного генератора преобразуйте выход в double в $U(0,1)$
- При использовании 32-битных тестов используется разбиение 64-битного слова на два 32-битных. Старшие/младшие 32-битные слова тестируются незовисимо и вместе.

- Для выбора оптимального сочетания используется сравнительный анализ результатов теста для трех конфигураций
  i. Исходный MWC без скрамблера (базовый случай).
  ii. MWC + линейный скрамблер (например, Грей-код или аффинное преобразование).
  iii. MWC + нелинейный скрамблер (например, на основе свёртки с полиномами).

Сравните распределение p-value по тестам: удачный скрамблер должен «исправить» провалы базового генератора в `LinearComp`, `MatrixRank`, `BirthdaySpacings`.

Дополнение внешними статистиками:

Для финальной верификации применяются собственые реализации критериев AD, KS, χ² к большим выборкам (10^8–10^9 итераций). Поверх теста применяется цикл прогона по начальным значениям SEED с использованием шага 2^32 значений, цикл состоит из 512 раз.

1. **Leading/Trailing Zeros** Методика расчета основана на статистике χ^2 и напоминает `Longest Runs of Ones in a Block`, но работает со словами 32 или 64 бита, в то время как тест [NIST-800-22A] предлагает 8 и 128 бит. Особенность теста - прогоны бит исследуются в старшей части числа с использованием операции `__builtin_clzll` - подсчет числа нулевых бит. Аналогично может быть выполнена операция подсчета числа нулевых бит от начала слова `__builtin_ctzll`.

Расчет вероятностей опирается на полную вероятность и геометрическую прогрессию 2^{-i}, где i - номер строки в таблице. Мы исходим из того, что сумма вероятностей приблизительно равняется удвоенному значнию в первой строке таблицы. Сумма частот в таблице будет давать число n.

- $nP_i = n \cdot 2^{-i}$, для $i = 1...M$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{M} \frac{(x_i - nP_i)^2}{nP_i}$$

Условием суммирования ялвяется $nP_i \geq 100$.

- см. Полиномиа́льное (мультиномиа́льное) распределе́ние

Таблица. Значение χ^2 статистики для 2^{30} итераций, $\chi^2 = \chi^2_H + \chi^2_L$

функция PRNG	текущее	среднее	пиковое
mwc64,A=FFFEF0E2	30.3	44.3	76.3

функция PRNG	текущее	среднее	пиковое
mwc64,A=FFFECC43	43.6	44.4	77.0
mwc64,A=FFFE7369	36.6	44.7	74.7
mwc64,A=FFFE60AF	39.1	43.7	76.0
mwc64,A=FFFE5BD5	32.6	44.8	77.7
mwc64,A=FFFE5A0A	43.2	45.1	83.8
mwc64,A=FFFE53E3	49.0	43.9	69.0
MWC128	44.9	43.8	
Xoroshiro128++	34.9	44.1	
sha256d	42.5	43.2	

В таблице представлен метод MWC64 с различным параметром и без использования скрамблера выходных значений. Для сравнения представлены MWC128, Xoroshiro128++ и Hash-DRNG на базе функции SHA256, функция SHA256 вызывается дважды. Все функции протестированы при одинаковых условиях, число итераций `2^30`, усреднение статистики (средняя колонка) выполнено по 512 циклам. Исоходный код теста CLZ test.

2. **Difficulties** Данный тест заимствован из способа вычисления... и может использоваться как интегральный аналог теста `Leading Zeros`. Значения, которые попадают в категорию N-бит, суммируются со своей сложностью. Сложность вычисляется, как вещественное число по формуле:

```
static inline double difficulty(uint64_t x) {
  return 1/(x? (double)x : 0.5);
}
```

Заметим, что может не хватать точности вычисления `double` для накопления результатов теста. В тесте мы использовали `_Float64x`, - формат для накопления результата с числом итераций порядка 2^{32}.

Выбор 64-битного скрамблера/рандомизатора

Сначала нужно доказать, что метрика *сложность* предложенная в предыдущем параграфе достаточно точно отражает суть скрамблера, который не меняет *сложность* генератора, но улучшает однороденость распределение в тесте **Leading/Trailing Zeros**. Для этого мы прогоняем через тест обычный счетчик `x = x+1` , который дает референсное значение (2.089) при полном прогоне 2^{32} итераций. Хороший скрамблер не меняет *сложность* распределения! Хороший скрамблер должен улучшать прохождение теста HammingWeight2.

Мы подобрали несколько линейных и нелинейных скрамблеров из числа операций, которые применяются при построении хэш-функций. В частности, мы рассмотрели скрамблеры предложенные в для хэш функции на модульной арифметике [2023/1025].
Скрамблеры применяем линейные и нелинейные:

Эффективные линейные скрамблеры:

$$x \mapsto x \oplus (x \lll i) \oplus (x \lll j)$$

Эффективные нелинейные скрамблеры:

$$x \mapsto x \oplus (\bar{x} \lll i) \odot (x \lll j)$$

Обращаем внимание, что подобные скрамблеры используются для пермутаций в множестве стандартов хэш-функций, включая SHA3 и SHA2.
Из стандарта SHA2 заимствовали 64-битные операции Sigma0, Sigma1, Sum0, Sum1

$$x \mapsto (x \ggg 1) \oplus (x \ggg 8) \oplus (x \gg 7), \quad \text{- Sigma0} \tag{1}$$
$$x \mapsto (x \ggg 19) \oplus (x \ggg 61) \oplus (x \gg 6), \quad \text{- Sigma1} \tag{2}$$
$$x \mapsto (x \ggg 28) \oplus (x \ggg 34) \oplus (x \ggg 39), \quad \text{- Sum0} \tag{3}$$
$$x \mapsto (x \ggg 14) \oplus (x \ggg 18) \oplus (x \ggg 41), \quad \text{- Sum1} \tag{4}$$

Заметим, скрамблеры построенные на битовой операции XOR, сдвигах и вращении можно представить в виде матрицы аффинного преобразования поле $GF(2^{64})$. Такие матрицы-Циркулянты обладают или могут обладать {уточнить} свойством Maximum Distance Separable (MDS).

В нашей работе использованы скрамблеры

$$x \mapsto x \oplus (x \lll 1), \quad \text{- Gray} \tag{5}$$
$$x \mapsto x \oplus (x \lll 1) \oplus (x \lll 2) \tag{6}$$
$$x \mapsto x \oplus (\bar{x} \lll 1) \odot (x \lll 2) \tag{7}$$
$$x \mapsto x \oplus (\bar{x} \lll 1) \odot (x \lll 2) \odot (x \lll 3) \tag{8}$$

И скрамблеры перестановки байт, векторная операция `shuffle`

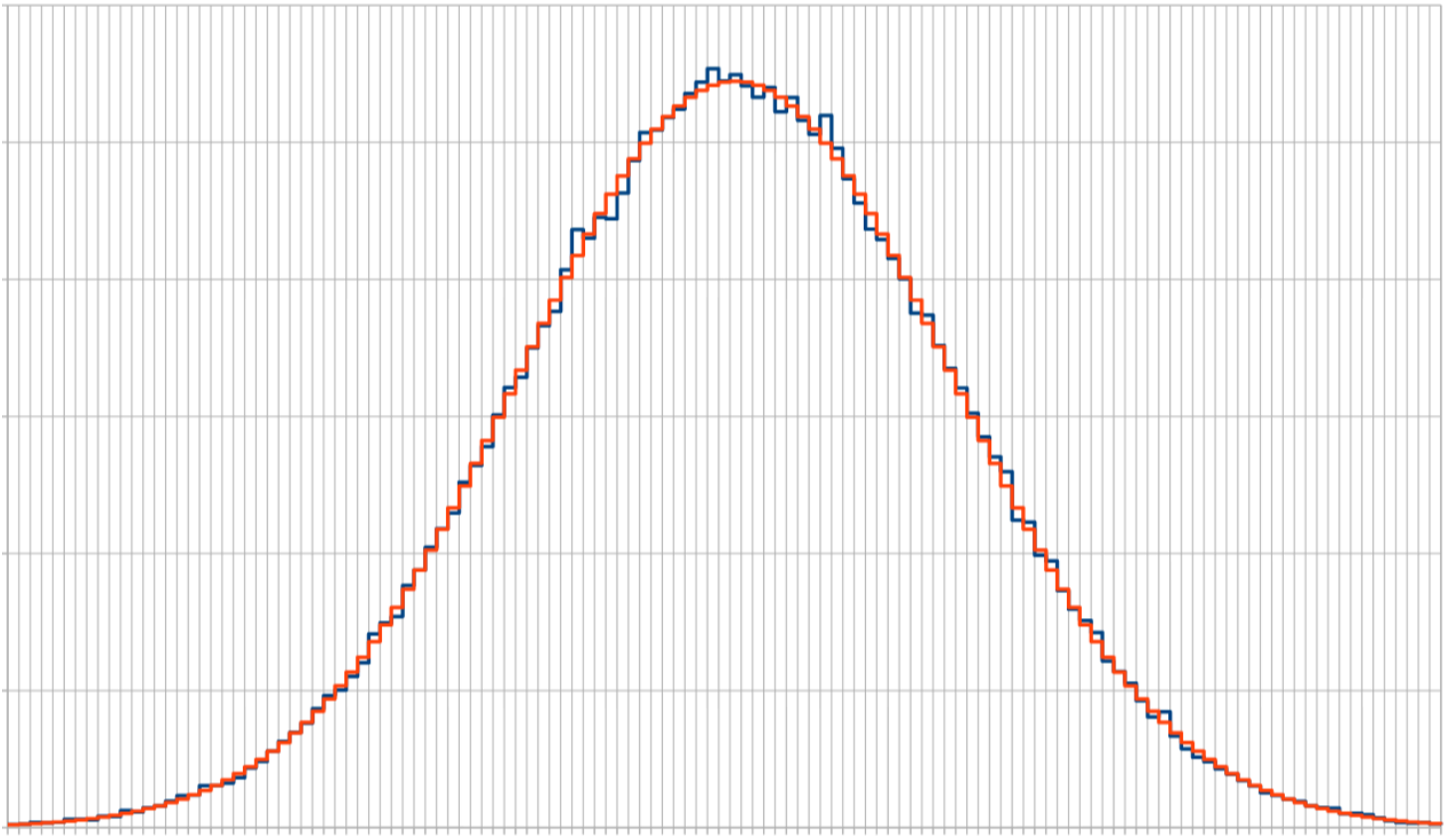
$$x \mapsto x \oplus (x \lll 32), \quad \text{- XOR} \tag{9}$$
$$x \mapsto x \oplus (x \lll 8) \oplus (x \lll 16) \tag{10}$$
$$x \mapsto x \oplus (\bar{x} \lll 8) \odot (x \lll 16) \tag{11}$$
$$x \mapsto x \oplus (\bar{x} \lll 8) \odot (x \lll 16) \odot (x \lll 24) \tag{12}$$

По результатам нашего теста ограниченно годными мы признаем скрамблер `Gray` , но не рекоменудем его к применению в составе ГПСЧ. Остальные методы из нашего списка (линейные, нелинейные, битовые и байтовые перестановки) проходят тест *сложности*. Скрамблеры, использованные в составе Xoroshiro128 тест НЕ проходят, и скрамблеры из SHA512 тест НЕ проходят.

Методы MWC с линейным скрамблером $x \oplus (x \lll 32)$ мы по традиции будем обозначать буквой x, например `MWC64x` .

Генерация последовательности псевдослучайных чисел с нормальным распределением

Тестовая задача - определить нормальность распределения полученного при использовании генераторов ГПСЧ. Отправная точка - построение гистограммы эмпирического распределения и сравнение с гистограммой нормального распределения при $n \to \infty$.



Гистограмма получена при накоплении результатов с использованием нормального распределения от генератора MWC64. Нормальное распределение получается из однородного с использованием преобразования Бокса-Мюллера.

Рекомендация: если мы тестируем нормальность после преобразования uniform → normal, Anderson–Darling выглядит предпочтительнее KS/Lilliefors. KS тест выделяет максимальное отклонение, в то время как AD считает суммарное отклонение с учетом весовой функции.

Разработка алгоритма

Мы хотим сформулировать алгоритм, который применяет принципы выявления гиперплоскостей в многомерном распределении. Пока что существует только концепция эксплуатирующая идею многомерного способа разложения статистики. В наших тестах мы использовали 2D разложения статистики "салфетки", на которых могут проявляться сетки и полосы при подборе периода. Наш подход - графические тесты последовательностей. При наличии полос и периодических структур, может использоваться Фурье преобразование.

Общая идея графического теста - представление разложения на плоскости или в единичном кубе и поиск вектора нормали к гиперплоскости, в которой проявляется периодическая структура. Это можно представить методом поворота единичного кубика под углом, где проекция на плоскость имеет периодическую структуру.

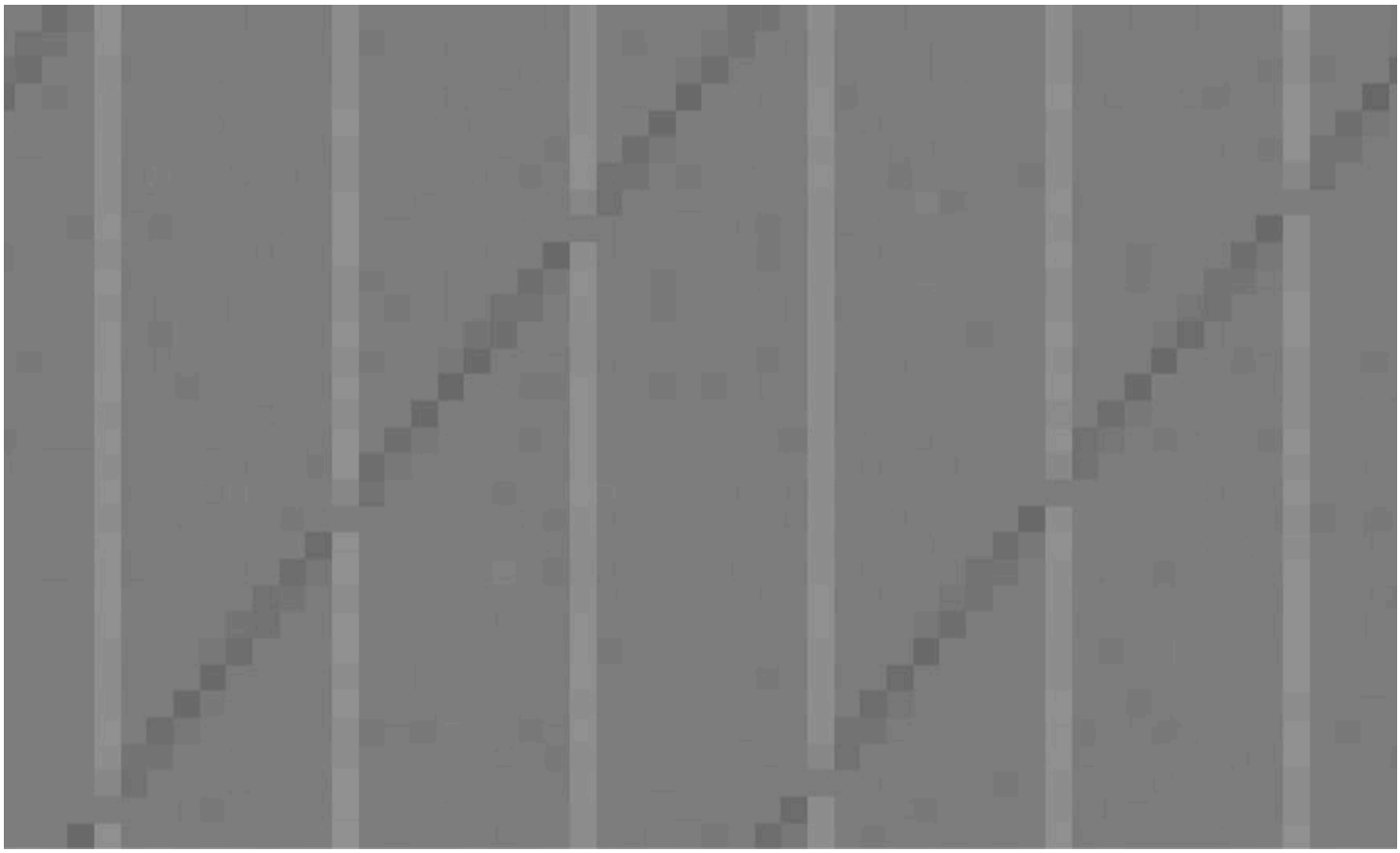


Рис. 1 Вывод статистики на плоскости, тест `MWC32` с параметром `A=0xFF00` . Выполнен подбор периода. Подбор выполнялся по критерию средне-квадратичного отклонения, при однородном распределении. Видно, что выделяются темные (D^-) и яркие полосы (D^+). Темные и яркие полосы имеют свой период повтора.

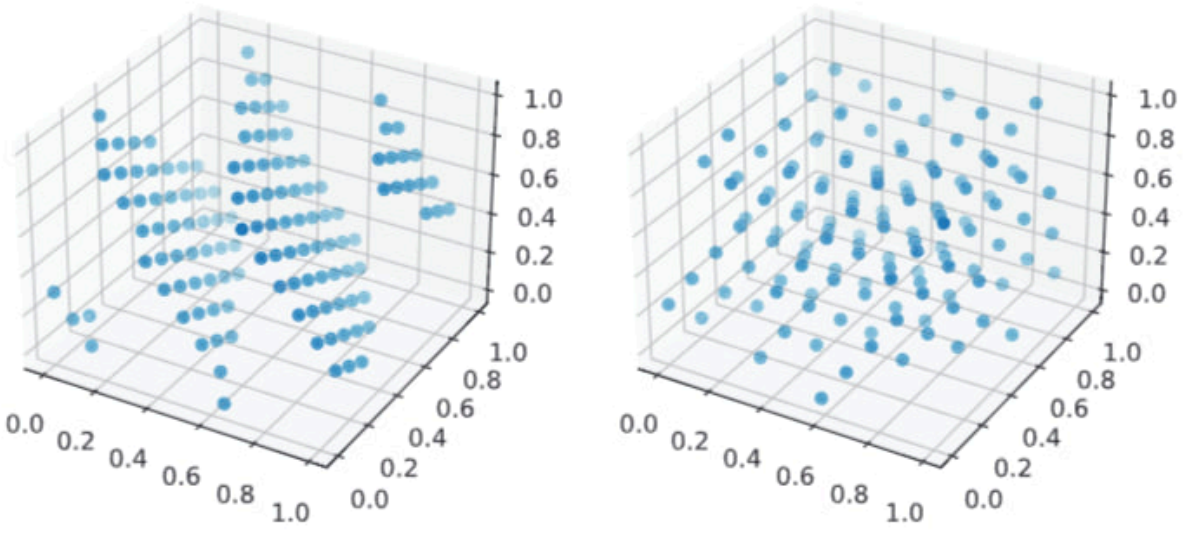


FIGURE 1 A 3D example of the hyperplanes generated by two LCGs with $m = 128$: $a = 37$ (left, $f_3 = 0.545562$) or $a = 29$ (right, $f_3 = 0.833359$). Note the hyperplane structure of the multiplier with a low spectral score

Одна из идей тестирования с ограниченной областью применения предлагается спектральным тестом Д.Кнута. Область применения - линейные конгруэнтные генераторы.

Ключевые концепции алгоритма

1. **Представление статистических данных в форме тензора**: Данные — это тензор размерности $N \times M \times K \times \dots$ (например, 3D-тензор для событий по категориям). Это позволяет моделировать многомерные зависимости.
2. **Перестановка (permutation)**: Мы предполагаем использование операций над тензором: перестановки, группировки и нормировки. Рассматриваем возможность проецирования на гиперплоскость. Задача — найти гиперплоскость, на которой данные будут представлены в 2D и обладать контрастным распределением (например, с помощью методов PCA или UMAP/t-SNE для снижения размерности).
3. **Группировка блоков (folding)**: Разбиваем тензор на блоки и агрегируем их (сумма, среднее, максимум и т.д.), имитируя "складывание салфетки". Это помогает выявить скрытые паттерны.
4. **Выявление паттернов**: После каждой операции проверяем распределение в полученной матрице на отклонение от нормальности. Используем:
   - Статистические тесты (например, тест Шапиро-Уилка для нормальности; тест Колмогорова-Смирнова).
   - Визуализацию (гистограммы, 2D-heatmaps) для выявления "узоров"/"водяных знаков".
   - Метрики отклонения: kurtosis (эксцесс), skewness (асимметрия), при сравнении с нормальным распределением.
   - Спектральный анализ: (sspectral_Fourier1/3 или кастомный FFT), дополняет графический поиск гиперплоскостей: периодические полосы в 'салфетках' проявляются как пики в спектре.
5. **Итеративный поиск**: Перебираем комбинации перестановок и группировок, чтобы найти конфигурацию с наибольшим отклонением. Для оптимизации можно использовать генетические алгоритмы или градиентный спуск.

Дополнение: Алгоритм можно расширить на машинное обучение, интегрируя автоэнкодеры (см AutoEncoder и LDA) для выявления аномалий в распределениях. Это позволит автоматизировать раннее выявление нерабочих режимов оборудования.

- Linear Discriminant Analysis (LDA)

Рекомендация (для 2D-визуализации)

1. Есть метки классов + линейная разделимость: LDA → почти всегда лучший старт
2. Есть метки, но данные нелинейные: LDA → UMAP/t-SNE → AutoEncoder
3. Нет меток, данные табличные: PCA → UMAP → Vanilla / Denoising AE
4. Нет меток, изображения/эмбеддинги: Convolutional-AE / ViT-AE → UMAP