



Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

REMUESTREO PARA ENSAMBLES DE RELOJES ATÓMICOS

Tesis

Que para obtener el Grado de:

Maestro en Ciencias con Especialidad en Probabilidad y Estadística

P R E S E N T A:

Ana Laura del Pilar Pérez Herrera

Director:

Dr. Miguel Nakamura Savoy

Guanajuato, Guanajuato, Octubre de 2014

Agradecimientos

Al Dr. José Mauricio López Romero, por propiciar el acercamiento con el CENAM para la elaboración de este trabajo, por su colaboración y asesoría en conceptos de frecuencia y tiempo, así como los datos proporcionados.

Al Dr. Miguel Nakamura Savoy, por las enseñanzas académicas impartidas como asesor de tesis, y por la paciencia y los consejos otorgados en su gran desempeño como tutor durante mi estancia en el CIMAT.

A mis sinodales, Dr. Joaquín Ortega Sánchez y Dr. Enrique Villa Diharce, por la revisión de esta tesis, por sus observaciones y sugerencias.

A mis padres, a mis hermanos, a todos los amigos que hice durante mi estancia en Guanajuato y a Armando, por su apoyo incondicional.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, CONACYT, por el apoyo económico brindado para la realización de mis estudios de posgrado.

Resumen

El Centro Nacional de Metrología, CENAM, en el área de frecuencia y tiempo, se encarga de la generación de un reloj virtual, combinando la información de un ensamble de relojes atómicos. En esta disciplina, se han definido estadísticas para el estudio de diversas características del ensamble, tales como la varianza de Allan y la varianza absoluta, las cuales sirven para abordar diversos problemas de interés, como la comparación de relojes virtuales. Sin embargo, las propiedades muestrales que poseen estas cantidades, para fines de cuantificación de incertidumbre, no siempre son consideradas ni suelen ser de fácil obtención analítica. El principal objetivo de esta tesis es contextualizar estadísticamente la problemática planteada por el CENAM, con el fin de habilitar inferencia estadística de manera formal.

En esta tesis se propone utilizar el método de aproximación bootstrap, basado en la noción de remuestreo. A partir de un conjunto de datos del ensamble del CENAM, se realizará análisis exploratorio para investigar características del ensamble que hagan pertinente el uso de un esquema de remuestreo en particular. Se concluirá que los componentes del ensamble se comportan como un proceso integrado de primer orden. Esto conllevará al estudio de diferentes esquemas de remuestreo propuestos en la literatura para este tipo de procesos, enfocándose en los de naturaleza no paramétrica. Éstos se basan en la partición de los datos en bloques, cuya longitud puede ser fija o aleatoria. Se implementarán dos de estos esquemas, aplicados al ejemplo base de comparación de dos relojes virtuales, se mostrará cómo el método bootstrap prueba ser útil y se analizará el efecto que los cambios en la longitud de bloque puede tener en los resultados.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Contexto y objetivo de la tesis	1
1.2. Datos	7
1.3. Esquema de la tesis	7
2. Conceptos de metrología en el área de frecuencia y tiempo	9
2.1. Varianza de Allan	10
2.1.1. Conceptos previos	10
2.1.2. Cálculo de la varianza de Allan	13
2.1.3. Comentarios sobre la varianza de Allan	17
2.1.4. Gráfica log-log	19
2.2. Reloj virtual: AT1	19
2.2.1. AT1	20
2.3. Sombrero de tres picos	23
3. Análisis exploratorio de datos y optimalidad	27
3.1. Análisis exploratorio de datos	27
3.1.1. Procesos estacionarios y algunas de sus propiedades	27
3.1.2. Análisis de los datos del ensamble	31
3.2. Optimalidad	41

4. Nociones básicas de bootstrap	47
4.1. Bootstrap para variables independientes e idénticamente distribuidas	48
4.2. Bootstrap para procesos estacionarios débilmente dependientes	51
4.2.1. Métodos no paramétricos	52
4.2.2. Método paramétrico	61
4.2.3. Método semiparamétrico	62
4.3. Comentarios sobre la longitud de bloque y extensión al caso multivariado	63
4.4. Bootstrap para procesos integrados de orden uno	63
4.5. Intervalos de confianza y pruebas de hipótesis vía bootstrap	64
4.5.1. Intervalos de confianza	65
4.5.2. Pruebas de hipótesis	67
5. Bootstrap no paramétrico para ensamblés	69
5.1. Caso de estudio: Gráfica log-log	71
5.1.1. Remuestreo utilizando un modelo erróneo.	71
5.1.2. Remuestreo del ensamble mediante CMBB	73
5.1.3. Remuestreo del ensamble mediante SB	77
5.1.4. Métrica para la gráfica log-log	86
5.2. Comentarios y consideraciones	89
5.3. Ejemplo base: Comparación de dos relojes virtuales	93
6. Comentarios generales y conclusiones de la tesis	95
Bibliografía	99

Índice de figuras

2.1. Esquema para la obtención de las diferencias de horas de los relojes del ensamble. Fuente: Dr. Mauricio López, CENAM.	13
2.2. Esquema de la varianza de Allan sin traslape.	15
2.3. Esquema de la varianza de Allan con traslape.	17
2.4. Gráfica log-log ilustrativa tomada de [4].	20
3.1. Gráfica de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos.	32
3.2. Gráfica de la primera diferencia de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos.	33
3.3. Gráfica de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos para la partición seleccionada de la serie.	35
3.4. Gráfica de la primera diferencia de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos para la partición seleccionada de la serie.	36
3.5. Gráfica de los residuos de la regresión (3.1).	37
3.6. ACF de los residuos de la regresión (3.1).	38
3.7. PACF de los residuos de la regresión (3.1).	39
3.8. ACF de los residuos de la primera diferencia de la serie original.	40
3.9. PACF de los residuos de la primera diferencia de la serie original.	41

3.10. Coeficientes de correlación entre las diferencias $CsK(t)-CsL(t)$, $CsK(t)-Maser(t)$ y $CsK(t)-CsM(t)$	42
3.11. Coeficientes de correlación entre las primeras diferencias de las series que representan las diferencias $CsK(t)-CsL(t)$, $CsK(t)-Maser(t)$ y $CsK(t)-CsM(t)$	43
4.1. Esquema de bloques sin traslape.	55
4.2. Esquema de bloques con traslape.	56
4.3. Esquema de bloques circulares con traslape.	58
4.4. Esquema de bloques circulares sin traslape.	58
4.5. Esquema de bloques circulares cuya longitud tiene una distribución geométrica.	59
5.1. Gráfica log-log obtenida mediante remuestreo i.i.d.	73
5.2. Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia $CsK-CsL$ utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\ 000$	75
5.3. Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia $CsK-Maser$ utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\ 000$	75
5.4. Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia $CsK-CsM$ utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\ 000$	76
5.5. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia $CsK-CsL$	78
5.6. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia $CsK-Maser$	79
5.7. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia $CsK-CsM$	80
5.8. Gráfica log-log de las réplicas BS de la diferencia $CsK-CsL$ utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\ 000$	82
5.9. Gráfica log-log de las réplicas SB de la diferencia $CsK-Maser$ utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\ 000$	82
5.10. Gráfica log-log de las réplicas SB de la diferencia $CsK-CsM$ utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\ 000$	83
5.11. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia $CsK-CsL$	84
5.12. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia $CsK-Maser$	85

5.13. Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK–CsM.	87
5.14. Gráfica de las distancias calculadas para cada diferencia de tiempo, con el método CMBB y SB, considerando los diferentes valores de los parámetros ℓ y p	90

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto y objetivo de la tesis

La palabra tiempo tiene diferentes acepciones; la Real Academia Española proporciona 17 definiciones diferentes, entre las que se encuentran

- I) *duración de las cosas sujetas a mudanza,*
- II) *magnitud física que permite ordenar la secuencia de los sucesos, estableciendo un pasado, un presente y un futuro,*
- III) *época durante la cual vive alguien o sucede algo,*
- IV) *edad.*

Sin importar la acepción que se tenga del tiempo, el ser humano ha estado interesado en su medición y contabilización desde hace más de 5000 años, siendo la primera evidencia probablemente los obeliscos creados por la civilización egipcia, cuya sombra reproduce el ciclo de un día. La unidad del tiempo en el Sistema Internacional de unidades (SI) es el segundo, el cual a partir de 1967 deja de estar definido en términos de días solares y se define en términos del átomo de cesio como

¹ “*La duración de 9 192 631 770 oscilaciones de la radiación emitida en la transición entre los dos niveles hiperfinos del estado fundamental del isótopo 133 del átomo de cesio.*”

La necesidad de tener una medición con la mayor precisión y estabilidad posible de un segundo recae en la importancia que las particiones cada vez más pequeñas del mismo tienen en telecomunicaciones, sistemas de navegación e incluso en la definición de otras unidades como el metro, el cual actualmente se define en términos de la distancia que viaja la luz en un intervalo de $1/299\,792\,458$ de un segundo.

El tiempo es medido con relojes, los cuales tienen tres componentes principales:

- **Resonador:** Dispositivo que oscila a una frecuencia determinada, es decir, produce un fenómeno periódico.
- **Oscilador:** Está compuesto por un resonador y la fuente de energía que lo mantiene funcionando.
- **Dispositivo para contabilizar:** Es un mecanismo cuyo propósito es llevar un registro de las oscilaciones transcurridas; por ejemplo las manecillas del reloj.

Las características deseables de la frecuencia del resonador de un reloj son estabilidad y precisión, ya que de ellas dependerá la calidad que se tenga de la medición del segundo. A través de la historia se han creado relojes con diversos tipos de osciladores; para el lector interesado, la historia sobre la evolución y características de los relojes puede ser consultada en la referencia [5]. De particular interés es que la definición vigente del segundo surge con el uso de resonadores atómicos, los cuales son actualmente de los resonadores más estables y precisos. Los relojes que utilizan este tipo de resonadores se denominan relojes atómicos, y están diseñados para generar una señal de un pulso por segundo.

¹Definición oficial del BIPM; en 1997 se aclaró que se trata de un átomo de cesio a una temperatura de 0K.

La institución que se ocupa de la medición del tiempo a nivel internacional es el Buró Internacional de Pesas y Medidas, BIPM. No obstante, a nivel local existen entidades encargadas de la medición nacional del tiempo; en México esta entidad es el Centro Nacional de Metrología, CENAM, a través de la División de Frecuencia y Tiempo. Esta división tiene como responsabilidad

² “establecer, mantener y mejorar los patrones nacionales de tiempo y frecuencia.”

El trabajo de esta tesis fue motivado por una inquietud concreta, dirigida hacia las responsabilidades de la División de Frecuencia y Tiempo, formulada por el Dr. J. Mauricio López Romero, quien es jefe de la división, y su desarrollo es producto de entender y abordar el problema en términos de estadística.

Una de las principales preocupaciones de los diferentes centros de metrología reside en la combinación de la información de un grupo de relojes propios de cada centro, muy precisos y estables para la generación de un reloj que tenga mejores propiedades que cualquiera del grupo. El reloj resultante no es físico por lo que se denomina *reloj virtual*; asimismo, el grupo de relojes que se utiliza en la generación del reloj virtual se denomina un *ensamble* de relojes. Típicamente, este ensamble de relojes se encuentra localizado en un mismo local físico, y las labores del laboratorio también incluyen su correcto mantenimiento preventivo y correctivo.

El reloj virtual generado por el BIPM es la escala de Tiempo Universal Coordinado, UTC, la cual es calculada mediante la relación

$$\text{UTC} = \text{TAI} + \text{LS}$$

donde TAI es la escala Internacional de Tiempo Atómica, y LS se refiere a los segundos intercalares (*leap seconds* en inglés). La TAI es en sí misma un reloj virtual generado de la ponderación de la información proporcionada por alrededor de 400 relojes atómicos en aproximadamente 80

²Tomado de la página oficial del CENAM.

laboratorios en el mundo. Los segundos intercalares son segundos que se suman a la TAI cada vez que lo indique el *International Earth Rotation and Reference Systems Service*, por lo que la UTC y la TAI comparten casi las mismas propiedades.

La calibración de los pesos con los que son ponderados los relojes participantes en la generación de la UTC, se realiza cada cinco días, por lo que la UTC tiene propiedades deseables en el largo plazo. Sin embargo, los laboratorios nacionales están encargados de garantizar estas propiedades en el corto y largo plazo, por lo que generan una UTC nacional, denotada como UTC(CNM) en el caso del CENAM, utilizando un ensamble de relojes atómicos ubicados en el país, la cual es comparada cada cinco días con la UTC. El procedimiento utilizado para su generación es una modificación de cierto algoritmo bien conocido en la literatura de metrología denominado AT1, el cual utiliza un promedio ponderado de las diferencias de horas entre los relojes del ensamble respecto a uno seleccionado como referencia. Este algoritmo será explicado brevemente en el Capítulo 2.

La medida de variación estándar en metrología de frecuencia y tiempo es la *varianza de Allan*, denotada por $\hat{\sigma}^2(\tau)$, que mide la variación de la frecuencia de un resonador utilizando otro como referencia, es la medida de variación recomendada por el *Institute of Electrical and Electronics Engineers*, IEEE y es ampliamente utilizada en la comunidad metrológica para cuantificar la inestabilidad de la frecuencia de osciladores. En la notación $\hat{\sigma}^2(\tau)$, τ se refiere a una ventana de tiempo considerada en la promediación de observaciones de la diferencia de tiempo entre dos relojes, pero los detalles serán reservados para el Capítulo 2. El peso que se utiliza para ponderar en el algoritmo en el CENAM, es el inverso de la desviación de Allan de cada reloj utilizando el reloj virtual como referencia. Sin embargo, esta elección de pesos ha sido polémica en la comunidad de metrología, pues se alega que el peso óptimo es el inverso de la varianza de Allan en lugar de su raíz cuadrada (ver [7] y [15]). En el Capítulo 3 se mostrará que esta afirmación es correcta bajo el supuesto de independencia entre las observaciones a ponderar; sin embargo, las observaciones ponderadas comparten al reloj de referencia, por lo

que no resulta evidente la afirmación relacionada con el peso óptimo. Parte del trabajo de esta tesis consistirá en entender las condiciones y el sentido preciso en que esta optimalidad se verifica, en virtud de que dicha propiedad se encuentra sólo sugerida en la bibliografía de metrología.

La carencia de una argumentación transparente para los pesos ha causado cierta controversia respecto a los resultados reportados por parte del CENAM. El problema primordial consiste de comparar dos relojes virtuales diferentes, de manera que sea posible determinar si dados los resultados observados en el CENAM el reloj virtual actual es mejor que el reloj virtual que utiliza el peso considerado en la literatura como óptimo.

El dilema podría abordarse por dos vertientes. La primera sería una de carácter totalmente teórico, en la cual de manera analítica se deduzcan propiedades de cada reloj virtual. Para ello, sería necesario conocer en primera instancia la representación matemática abstracta de un reloj atómico, incluyendo el ruido estocástico que se produce en su observación, así como manipular sus propiedades. Sin embargo, como parte de esta tesis, se concluye de la literatura consultada en el área de metrología que no existe un modelo matemático (particularmente, estocástico) con una génesis inequívoca, que describa de manera previsible el comportamiento de un reloj atómico arbitrario.

La segunda vertiente consiste de inferir propiedades mediante el análisis de datos experimentales obtenidos de la observación de ensambles en funcionamiento pleno. Actualmente, la comparación de dos o más relojes virtuales se basa en la comparación puntual de la *varianza absoluta*, la cual es una medida de variación en la frecuencia asociada únicamente al reloj de interés, es decir, sin involucrar al reloj de referencia, y en su cálculo se utiliza un método conocido coloquialmente como *sombrero de tres picos*, el cual requiere de la varianza de Allan. En lo anterior, debe resaltarse el hecho de que esta comparación no está dotada de metodología para cuantificar incertidumbre. En particular, inferencias estadísticas formales tales como intervalos de confianza o pruebas de hipótesis, acerca de igualdad de varianzas por ejemplo, no se

obtienen de inmediato. Esto sugiere que un paso fundamental hacia la consecución de inferencia es la modelación estadística del ensamble de relojes, sea paramétrica de ser posible, o no paramétrica. Esto abriría las puertas para realizar inferencia de manera general, no solamente en lo concerniente a la comparación de dos relojes virtuales, sino para cualquier otra característica que quisiera investigarse acerca de un ensamble. Cabe notar que con relación a la varianza $\hat{\sigma}(\tau)$, sí existen algunos trabajos (ver [1]). Sin embargo, es importante reconocer que el problema de inferencia es mucho más general, pues puede involucrar cantidades que son funciones complicadas de la varianza de Allan. Además, los objetivos de inferencia estadística son de carácter muy variado, (estimación puntual, pruebas de hipótesis, etc.)

El objetivo concreto de la tesis, por la carencia descrita respecto a cuantificación formal de incertidumbre en lo general, es abordar un planteamiento estocástico de un ensamble de relojes atómicos, con el fin de proporcionar una base para realizar inferencia estadística acerca de parámetros de interés. En particular, una aplicación muy concreta de lo anterior sería la comparación estadística de relojes virtuales con pesos $1/\hat{\sigma}(\tau)$ y $1/\hat{\sigma}^2(\tau)$. Para lo anterior, se recurrirá a la segunda vertiente descrita previamente, ya que la solución estará basada en observaciones empíricas de un ensamble de relojes, realizando análisis estadístico para discernir y proponer metodología general.

El objetivo planteado ayudará, de manera general, a determinar qué reloj virtual es mejor entre varios propuestos. También mejorará el entendimiento sobre el pesaje utilizado en el algoritmo AT1 al caracterizar los efectos de usar un peso contra otro y proporcionar una justificación estadística a la elección del mismo. De esta manera, se enriquecerá la argumentación técnica de los trabajos presentados por el CENAM. En el caso en el que el peso utilizado actualmente resultara ser el óptimo entre los dos propuestos, se propicia la identificación de otras áreas de oportunidad para el mejoramiento de los relojes virtuales, pudiendo ser estas otros elementos del algoritmo AT1, o bien, la implementación de un algoritmo alternativo.

Por razones que serán explicadas a lo largo de la tesis, la solución propuesta se basará en el método bootstrap, el cual consiste de un esquema apropiado de remuestreo. La metodología seleccionada para alcanzar el objetivo propuesto se concibió desde un principio como multivariada, a fin de considerar la naturaleza multivariada del ensamble y, aunque no caracteriza la estructura explícita de relación entre los elementos del ensamble, sí pretende tomarla en consideración.

El alcance de la tesis se encuentra en primera instancia limitado a los aspectos de modelación y aspectos generales de inferencia, sin incluir la implementación de inferencia estadística formal para comparar dos relojes virtuales, aunque sí se describirá la manera de realizarla. Tampoco visualiza la modificación de otros elementos del llamado algoritmo AT1, o bien la propuesta de metodologías alternativas. Estos elementos serían interesantes para investigar en trabajos hacia el futuro.

1.2. Datos

Aunque el CENAM cuenta con datos obtenidos en tiempo real desde agosto de 2009, para fines de la presente tesis se determinó restringirse a un periodo muy concreto para fines de investigar propiedades generales de la aleatoriedad involucrada. Los datos proporcionados por el CENAM para evaluar son mediciones de diferencias de tiempo, reportadas en nanosegundos, entre los cuatro relojes atómicos utilizados en la generación del reloj virtual UTC(CNM), respecto a un reloj de referencia, tomadas cada 10 segundos del 5 de septiembre al 5 de octubre de 2013.

1.3. Esquema de la tesis

El Capítulo 2 contiene la explicación básica de algunos conceptos de metrología necesarios para el entendimiento de la tesis, tales como la varianza de Allan, el algoritmo AT1 y el sombrero de tres picos; además se incluyen referencias a las que el lector puede remitirse si desea

profundizar más en el tema. Asimismo, se explicará la naturaleza de los datos proporcionados, así como la limitación que existe en la determinación exacta de la hora de cada reloj.

En el Capítulo 3 se justifica por qué la optimalidad del peso $1/\hat{\sigma}^2(\tau)$ no es evidente, y se expone el análisis exploratorio realizado para los datos descritos en la sección anterior, con el fin de identificar algunas propiedades generales que puedan poseer los ensambles de relojes atómicos, las cuales pudieran ser útiles para la identificación de métodos para cuantificar incertidumbre de inferencias realizadas. En este capítulo se exponen las razones por las que se decidió no trabajar con la base de datos completa, así como los argumentos por los que la primera diferencia de las series mostradas pueden ser consideradas procesos débilmente estacionarios y débilmente dependientes, lo cual conllevó al estudio de metodología bootstrap para procesos estacionarios débilmente dependientes.

El concepto de bootstrap y su adaptación a procesos estacionarios débilmente dependientes, así como los principales métodos de remuestreo considerados se discuten en el Capítulo 4. Adicionalmente se da una breve introducción a los métodos Bootstrap para construir intervalos de confianza y realizar pruebas de hipótesis.

En el Capítulo 5 se implementan los esquemas de remuestreo seleccionados, y se utiliza la varianza de Allan para determinar la calidad de las réplicas producidas. Además, se proporciona una descripción detallada de cómo el CENAM pudiera utilizar el esquema bootstrap para inferir acerca de la diferencia entre dos relojes virtuales.

Capítulo 2

Conceptos de metrología en el área de frecuencia y tiempo

Este capítulo tiene como finalidad preparar de manera breve al lector no familiarizado con algunos conceptos fundamentales utilizados en metrología que se requieren para entender mejor el desarrollo de la tesis. Un aspecto primordial será la medida de variación en la frecuencia que se utiliza para estudiar las características de estabilidad de los relojes, tanto físicos como virtuales.

El material en el capítulo es una compilación, basada principalmente en las referencias [7], [8], [13], [14] y [15]. Para discernir los elementos relevantes para el planteamiento estadístico deseado, fue necesario recurrir a una gran variedad de fuentes, en virtud de que el lenguaje, la notación y el enfoque no son comunes ni igualmente accesibles. Se ha procurado aquí limitarse a los elementos mínimos indispensables para argumentar la metodología adoptada en capítulos posteriores. En algunos casos se recurrió al recurso de parafrasear nociones, con el objetivo de producir una explicación más transparente. En otros, se complementó con comentarios cruzados para enlazar con conceptos convencionales de la disciplina de estadística.

2.1. Varianza de Allan

En estadística el concepto de varianza está asociado a la existencia del momento de segundo orden de una variable aleatoria, o bien, de un proceso estocástico. Cuando se tiene un conjunto X_1, X_2, \dots, X_n de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, el estimador de la varianza comúnmente propuesto es la varianza muestral $S^2 = 1/n \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$, el cual tiene la propiedad de ser un estimador consistente.

Como se explicará en la Sección 2.1.1, los osciladores suelen presentar ruido en la fase de la señal sinusoidal que producen. Con acuerdo en la literatura de metrología, este ruido suele clasificarse en 5 tipos principales según su estudio en el dominio de la frecuencia (ver [1]). Para algunos tipos de ruido, se ha demostrado que el estimador S^2 diverge conforme aumenta el tamaño muestral n [1], por lo que en materia de metrología se ha propuesto una medida que cuantificara la variación en la frecuencia del oscilador y que corrigiera la falta de convergencia del estimador S^2 . Aunque existen diversas medidas de esta naturaleza, la más utilizada y conocida es la varianza de Allan. Para entender mejor esta medida de variación se requiere conocer algunos hechos relacionados con los osciladores, los cuales se explican a continuación.

2.1.1. Conceptos previos

Como se comentó en el capítulo anterior, todo reloj cuenta entre sus componentes con un oscilador. En perfectas condiciones, el oscilador debería funcionar a una *frecuencia* determinada, ν_0 , la cual se define como el número de ciclos por unidad de tiempo. Los osciladores producen una señal de voltaje, el cual es una función sinusoidal del tiempo, dada por la expresión

$$V(t) = V_p \text{sen}(2\pi\nu_0 t) \quad (2.1)$$

donde V_p es el término que representa la amplitud de la onda sinusoidal.

Sin embargo, los osciladores están sujetos a variaciones en la frecuencia, por lo que la señal

que se registra en realidad es

$$V(t) = V_p \text{sen}(2\pi\nu_0 t + \phi(t)). \quad (2.2)$$

El objetivo de la varianza de Allan es proporcionar una medida de estabilidad en la frecuencia, pero la estabilidad en la frecuencia suele medirse en términos del período (inverso de la frecuencia), o a través de la inestabilidad en la fase, $\phi(t)$. Por lo tanto, el interés recae en estudiar el error en la fase.

Sea $\nu(t)$ la frecuencia al tiempo t definida como

$$\begin{aligned} \nu(t) &\equiv \frac{1}{2\pi} \frac{d}{dt}(2\pi\nu_0 t + \phi(t)) \\ &= \nu_0 + \frac{1}{2\pi} \frac{d}{dt}\phi(t). \end{aligned}$$

La *frecuencia fraccionaria* se define como

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{\nu(t) - \nu_0}{\nu_0} \\ &= \frac{1}{2\pi\nu_0} \frac{d}{dt}\phi(t), \end{aligned}$$

y representa la diferencia entre la función de frecuencia $\nu(t)$ y la frecuencia de referencia, ν_0 , normalizada con la frecuencia de referencia.

Si se contara con un oscilador (ideal) con las mismas características que el oscilador de interés, pero cuya función de voltaje es registrada sin ruido en la fase, y el objetivo fuese determinar una medida de la variación en la frecuencia registrada de uno respecto al otro, resultaría útil considerar la función

$$x(t) = \int_0^t y(u) du \quad (2.3)$$

$$= \frac{\phi(t)}{2\pi\nu_0}. \quad (2.4)$$

En particular, la diferencia

$$\begin{aligned} x(t + \tau) - x(t) &= \int_t^{t+\tau} y(u) du \\ &= \frac{\phi(t + \tau) - \phi(t)}{2\pi\nu_0} \end{aligned}$$

representa la variación de la fase después de un tiempo τ .

Supóngase que $t \in [\pi/2, 3\pi/2]$, entonces notar que de la ecuación (2.1) se obtiene que

$$t = \frac{1}{2\pi\nu_0} \arcsen\left(\frac{V(t)}{V_p}\right),$$

mientras que de la ecuación (2.2)

$$t = \frac{1}{2\pi\nu_0} \arcsen\left(\frac{V(t)}{V_p}\right) - \frac{\phi(t)}{2\pi\nu_0},$$

por lo que $x(t)$ es la diferencia del tiempo del oscilador ideal con el tiempo del oscilador sujeto a ruido y se le denomina *error en el tiempo*.

Con acuerdo en lo descrito en la sección anterior, un reloj atómico se puede modelar con una función de tensión pulsante de periodo un segundo (un escalón angosto en el tiempo de aproximadamente 1 microsegundo). Es un hecho que es físicamente imposible observar la hora exacta de cualquier reloj existente (ver [8]); sin embargo, es posible utilizar un instrumento llamado comparador de fases para observar con exactitud la diferencia de tiempo entre dos relojes cualesquiera del ensamble. Si uno de estos dos relojes es equiparado al reloj ideal, entonces esta diferencia en tiempo es identificable con el error en el tiempo, descrito previamente. Es por esta razón que los datos descritos en el Capítulo 1 corresponden a la diferencia de tiempo entre dos relojes y no a la hora registrada de cada reloj del ensamble.

En el CENAM, el ensamble de relojes consiste de cuatro relojes atómicos, tres de los cuales son de cesio y uno es un máser de hidrógeno. Los relojes de cesio son denotados con las iniciales

CsK, CsM y CsL, mientras que el máser de hidrógeno se denomina como M1. Las diferencias entre la hora de cualesquiera dos relojes del ensamble pueden ser obtenidas mediante el comparador de fase; sin embargo, para facilitar la obtención de estas diferencias se suele seleccionar el reloj más estable del ensamble como un reloj de referencia con el que se comparan todos los relojes restantes. El reloj de referencia en el CENAM es el CsK, como indican las flechas sólidas de la Figura 2.1, la cual esquematiza los componentes del ensamble y las diferencias susceptibles de ser medidas.

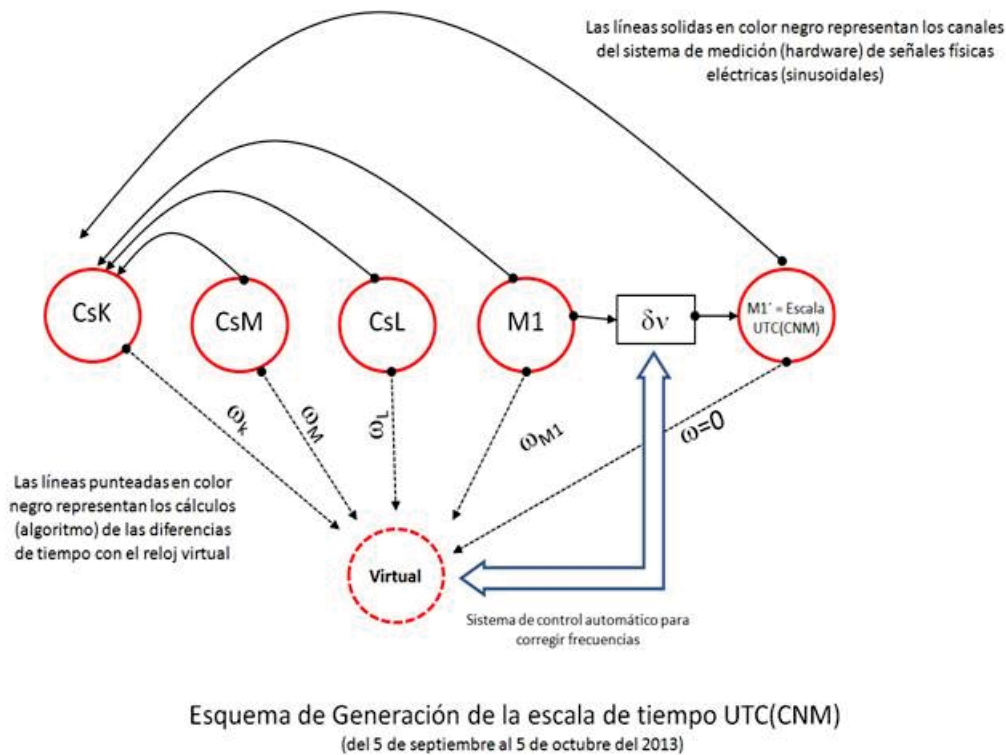


Figura 2.1: Esquema para la obtención de las diferencias de horas de los relojes del ensamble. Fuente: Dr. Mauricio López, CENAM.

2.1.2. Cálculo de la varianza de Allan

El error en el tiempo $x(t)$ sólo es observado en tiempos discretos t_1, t_2, \dots, t_n . Supóngase que los tiempos de medición se encuentran distanciados τ_0 unidades de tiempo, de manera que

se cuenta con observaciones $x(t_1), x(t_1 + \tau_0), \dots, x(t_1 + (n - 1)\tau_0)$, y que interesa cuantificar la variación de la frecuencia en una ventana de observación $\tau = m\tau_0$. Para este objetivo se recurre a la *frecuencia fraccionaria promedio* [1], la cual se define como

$$\bar{y}_{t+\tau} = \frac{x(t + \tau) - x(t)}{\tau}.$$

Considérese el caso sencillo en el que $m = 1$, es decir, en el que la ventana de interés y la de observación coinciden. En este caso se contará con $n - 1$ frecuencias fraccionarias promedio dadas por

$$\bar{y}_i \equiv \bar{y}(t_i + \tau_0) = \frac{x(t_i + \tau_0) - x(t_i)}{\tau_0}, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1.$$

La *varianza de Allan* para una ventana de observación $\tau = \tau_0$ se define como

$$\hat{\sigma}^2(\tau) = \frac{1}{2(N - 2)} \sum_{i=1}^{N-2} (\bar{y}_{i+1} - \bar{y}_i)^2, \quad (2.5)$$

donde $N = n$. Notar que en realidad, se trata de medir la discrepancia entre frecuencias fraccionarias promedio sucesivas.

Dado que

$$\begin{aligned} \bar{y}_{i+1} - \bar{y}_i &= \frac{x(t_i + 2\tau) - x(t_i + \tau) - x(t_i + \tau) - x(t_i)}{\tau} \\ &\equiv \frac{x_{i+2} - 2x_{i+1} - x_i}{\tau}, \end{aligned}$$

la ecuación (2.5) puede reescribirse en términos del error en el tiempo como

$$\frac{1}{2(N - 2)\tau^2} \sum_{i=1}^{N-2} (x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i)^2. \quad (2.6)$$

En general, las expresiones (2.5) y (2.6) no cambian cuando m es un valor mayor que 1. Lo que difiere son los subíndices del término \bar{y}_i y el valor de N . Para $m > 1$, se observa que $N = \lfloor (n - 1)/m \rfloor + 1$. Entonces para $\tau = m\tau_0$,

$$\bar{y}_i = \frac{x(t_{im+1}) - x(t_{(i-1)m+1})}{\tau}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N - 1.$$

En la Figura 2.2, lo anterior sería equivalente a observar únicamente los errores $x(T_1)$, $x(T_2), \dots, x(T_N)$, con $T_i = t_1 + (i - 1)m\tau_0$, $i = 1, 2, \dots, N$, por lo que la ecuación (2.6) se escribe de manera más general como

$$\hat{\sigma}^2(\tau) = \frac{1}{2(N-2)\tau^2} \sum_{i=1}^{N-2} (x_{(i+1)m+1} - 2x_{im+1} + x_{(i-1)m+1})^2.$$

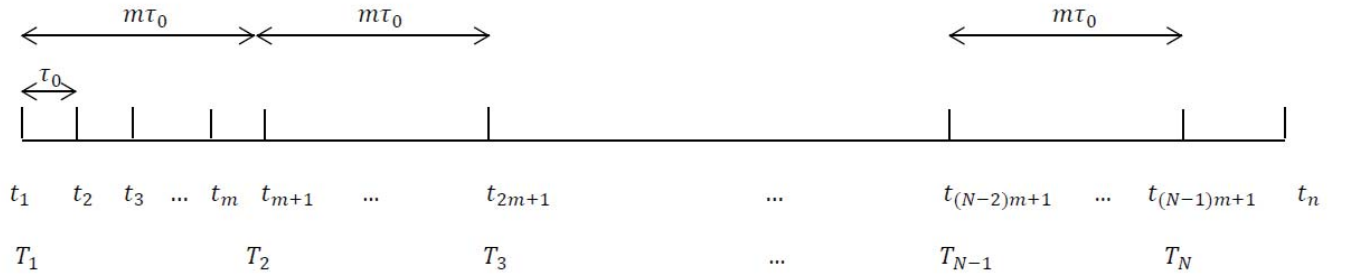


Figura 2.2: Esquema de la varianza de Allan sin traslape.

Este esquema se conoce como *varianza de Allan sin traslape*, debido a que no se toman en cuenta los términos que se encuentran entre los correspondientes a T_1, T_2, \dots, T_N . Sin embargo, el objeto de interés es la variación en la fase en un intervalo de tiempo de longitud τ , por lo que surge un esquema que hace uso de las observaciones ignoradas en el cálculo de la varianza de Allan sin traslape. Este esquema da lugar a la llamada *varianza de Allan con traslape*.

Como se aprecia en la Figura 2.2, en el esquema sin traslape sólo se consideran los tiempos distanciados τ unidades, tomando t_1 como tiempo inicial. No obstante, los tiempos $t_k, t_{k+m}, t_{k+2m}, \dots, t_{k+rm}$, $k = 2, 3, \dots, m$, $r = \lfloor (n - k)/m \rfloor$, también están distanciados τ unidades, de

manera que se generan $n - m$ frecuencias fraccionales promedio dadas por

$$\begin{aligned}\bar{y}_1 &= \frac{x(t_1 + \tau) - x(t_1)}{\tau} \\ \bar{y}_2 &= \frac{x(t_2 + \tau) - x(t_2)}{\tau} \\ \bar{y}_3 &= \frac{x(t_3 + \tau) - x(t_3)}{\tau} \\ &\vdots \\ \bar{y}_{n-m+1} &= \frac{x(t_{n-m+1} + \tau) - x(t_{n-m+1})}{\tau} \\ \bar{y}_{n-m} &= \frac{x(t_{n-m} + \tau) - x(t_{n-m})}{\tau}.\end{aligned}$$

Análogo al caso de la varianza de Allan sin traslape (ver Figura 2.3), se utilizan las $n - 2m$ diferencias de frecuencias fraccionales promedio, por lo que la varianza de Allan con traslape se define como

$$\hat{\sigma}^2(\tau) = \frac{1}{2(n - 2m)} \sum_{i=1}^{n-2m} (\bar{y}_{i+m} - \bar{y}_i)^2, \quad (2.7)$$

o bien, en términos del error como

$$\hat{\sigma}^2(\tau) = \frac{1}{2(n - 2m)\tau^2} \sum_{i=1}^{n-2m} (x_{i+2m} - 2x_{i+m} + x_i)^2. \quad (2.8)$$

Notar que bajo este segundo esquema, el valor máximo que puede tomar m es $n/2 - 1$, ya que de elegirse $m = n/2$ sólo se obtendrían frecuencias fraccionales promedio \bar{y}_i , $i = 1, 2, \dots, n/2 - 1$, por lo que no será posible calcular las diferencias $\bar{y}_{i+m} - \bar{y}_i$ para valor alguno de i .

Adicionalmente existe un tercer esquema conocido como *varianza de Allan modificada*, el cual puede ser consultado en [4]; este esquema permite distinguir entre dos tipos particulares de ruido presentes en la fase. En la literatura de metrología, y en particular en el CENAM, la varianza de Allan recomendada es aquella que considera un esquema con traslape, por lo que en lo sucesivo se hará referencia a este esquema cuando se mencione la varianza de Allan.

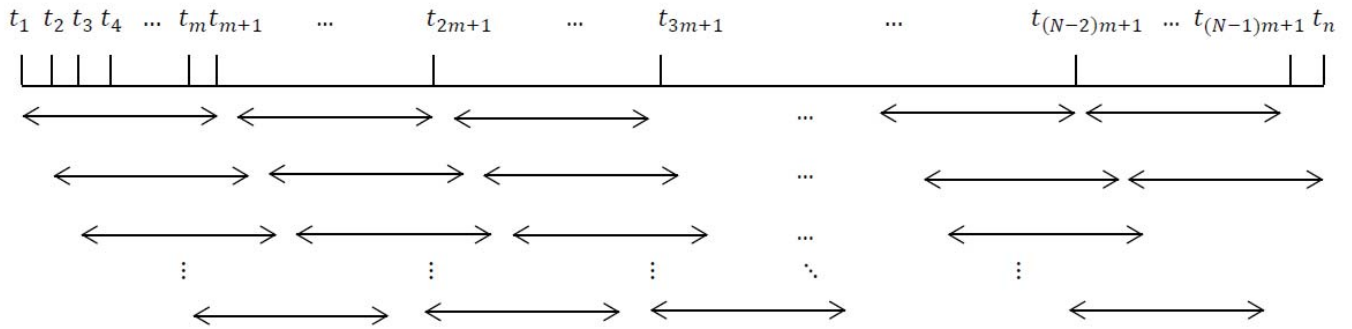


Figura 2.3: Esquema de la varianza de Allan con traslape.

2.1.3. Comentarios sobre la varianza de Allan

Las explicaciones correspondientes a la varianza de Allan expuestas en esta sección serán utilizadas como parte de los argumentos expuestos en la Sección 3.2. Estos comentarios resaltan la relación entre la varianza de Allan como estimación de la varianza cuando determinados escenarios se presentan.

Respecto a la notación utilizada en la sección anterior, cabe resaltar que la definición de varianza de Allan, cuando se concibe como calculada con base en una muestra de observaciones estocásticas, es de facto una variable aleatoria. Sin embargo, en la literatura consultada no es usual referirse a esta cantidad como "varianza de Allan estimada" o similar, y tampoco hacer referencia al concepto poblacional que pretende estimar. Para entender esta analogía, puede hacerse la comparación entre varianza muestral, y varianza. Más detalles al respecto serán ofrecidos en el Capítulo 5.

Recordando, para un par de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, X_1, X_2 , con varianza finita denotada por σ^2 , se cumple que

$$\frac{1}{2}E(X_1 - X_2)^2 = \sigma^2. \tag{2.9}$$

Aún más, esta igualdad se preserva si X_1 y X_2 cumplen que sus primeros dos momentos existen

y son iguales, y la covarianza entre ellas es cero. Por otro lado, de la ecuación (2.7) se observa que el término

$$\frac{1}{n-2m} \sum_{i=1}^{n-2m} (\bar{y}_{i+1} - \bar{y}_i)^2$$

converge al doble de la varianza de \bar{y}_i si las variables \bar{y}_{i+1} y \bar{y}_i , $i = 1, 2, \dots, N - 2m$, cumplen las mismas propiedades que X_1 y X_2 . Por lo tanto, la varianza de Allan se aproxima a la varianza de \bar{y}_i bajo las condiciones establecidas y cuando el tamaño muestral $N - 2m$ es lo suficientemente grande.

Sea $Z_1 = aX_1 + b$ y $Z_2 = aX_2 + b$. Notar que la varianza de Z_1 y Z_2 es igual a $a^2\sigma^2$. Análogamente a la ecuación (2.9) se tiene que

$$\frac{1}{2}E(Z_1 - Z_2)^2 = a^2\sigma^2.$$

Supóngase que se tiene un conjunto de n diferencias en el tiempo, x_1, x_2, \dots, x_n y que se desea conocer la varianza de Allan de las transformaciones $z_i = ax_i + b$, $i = 1, \dots, n$. Sin pérdida de generalidad, considérese el caso en el que $\tau = \tau_0$. Las frecuencias fraccionales promedio de las variables z_1, z_2, \dots, z_n están dadas por

$$\begin{aligned} \bar{y}_i &= \frac{z_{i+1} - z_i}{\tau_0} \\ &= \frac{a(x_{i+1} - x_i) + b - b}{\tau_0} \end{aligned}$$

para $i = 1, 2, 3, \dots, n$. Entonces, la varianza de Allan es

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z^2(\tau) &= \frac{1}{2(n-2m)\tau^2} \sum_{i=1}^{n-2m} [a^2(x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i)^2] \\ &= a^2\hat{\sigma}_x^2(\tau). \end{aligned}$$

Por el mismo argumento previamente proporcionado, la varianza de Allan aplicada a transformaciones afines también converge a la varianza correspondiente cuando se tienen condiciones ideales. Es decir, la varianza de Allan, al igual que la varianza en el caso de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, cumple la siguiente propiedad:

$$\text{AVAR}(aX + b) = a^2\text{AVAR}(X),$$

donde $\text{AVAR}()$ denota el límite de la versión empírica de la varianza de Allan.

2.1.4. Gráfica log-log

Como se mencionó previamente, la literatura de metrología tiene caracterizado el ruido en la fase mediante la función de densidad espectral de la fase. Las densidades reportadas se conocen como *power law densities* debido a que son de la forma f^k , siendo k el valor de interés que indica qué tipo de ruido está presente en la fase.

Una herramienta muy utilizada para la estimación de k es la *gráfica log-log*. Dado un conjunto de valores de τ y sus correspondientes varianzas de Allan, esta gráfica representa en el eje x el $\log_{10}(\tau)$ y en el eje y el $\log_{10}(\hat{\sigma}(\tau))$. Notar que $\hat{\sigma}(\tau)$ denota la raíz cuadrada de la varianza de Allan.

El principal interés de la gráfica log-log reside en estimar la pendiente. Ésta varía como función de τ y está relacionada con el valor de k (ver [4]), por lo que de ella se puede identificar el tipo de ruido presente en la fase. Como se aprecia en la Figura 2.4, un mismo oscilador puede presentar diversos tipos de ruido según la ventana de tiempo en la que se haya observado el error en la fase. En la presente tesis, la descripción del ensamble es abordada en el dominio del tiempo y no de la frecuencia, por lo que no se comentará sobre el tipo de ruido que se observa en los relojes del ensamble. Adicionalmente, esta gráfica resulta ser una herramienta intuitiva para los expertos en metrología, ya que se conoce el rango de valores en el que debe encontrarse la representación gráfica para diferentes tipos de osciladores.

2.2. Reloj virtual: AT1

Supóngase que un ensamble se compone de $N + 1$ relojes atómicos, de los cuales el r -ésimo es seleccionado como el reloj de referencia. Sea $h_i(t)$ la hora del i -ésimo reloj del ensamble en un tiempo t , la cual no puede ser observada. El error en el tiempo entre el i -ésimo reloj del

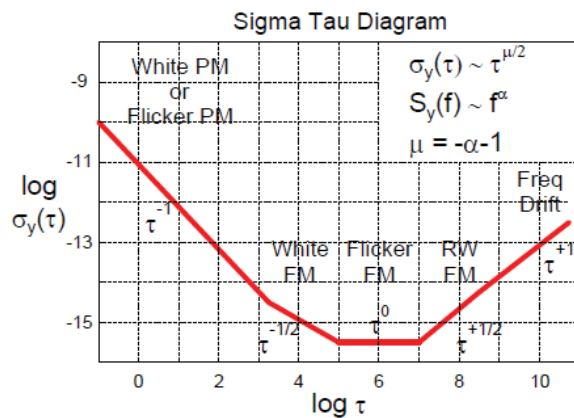


Figura 2.4: Gráfica log-log ilustrativa tomada de [4].

ensamble y el de referencia es la diferencia entre las horas, es decir,

$$x_{ri}(t) \equiv h_r(t) - h_i(t). \quad (2.10)$$

Una escala de tiempo resulta de una combinación matemática de las observaciones $x_{ri}(t)$, $i = 1, 2, \dots, n$. Esta combinación puede realizarse de diferentes maneras, por lo que existen muchas escalas de tiempo. En particular, la escala de tiempo atómica está basada en el algoritmo AT1. Existen modificaciones a este algoritmo, como lo son los algoritmos AT2 y el ALGOS, siendo el último el utilizado para calcular la UTC en el BIPM ([15], [14]). Debido a la relevancia del AT1, y a que los algoritmos AT2 y ALGOS son modificaciones de éste, estos dos últimos no serán detallados en la presente tesis. A continuación se presenta la idea básica detrás de este algoritmo.

2.2.1. AT1

El AT1 es un algoritmo para la combinación de los relojes atómicos de un ensamble con el fin de generar un reloj virtual [7]. Este algoritmo es aceptado en metrología y es el utilizado actualmente en el National Institute of Standards and Technology ubicado en Estados Unidos, y con algunas variantes, también en el CENAM.

Para la definición del algoritmo AT1 se utiliza un modelo para relojes relacionado con las ecuaciones del filtro de Kalman (ver [15], [7], [11]), utilizado en series de tiempo y procesamiento de señales. Este modelo está dado por las siguientes ecuaciones:

$$x_{ri}(t) = x_{ri}(t - \tau) + y_{ri}(t - \tau)\tau + \frac{1}{2}d_i(t - \tau)\tau^2 + \xi_t, \quad (2.11)$$

$$y_{ri}(t) = y_{ri}(t - \tau) + d_i(t - \tau)\tau + \eta_t, \quad (2.12)$$

$$d_i(t) = d_i(t - \tau) + \zeta_t \quad (2.13)$$

donde $y_{ri}(t)$ es la diferencia fraccional de frecuencias correspondiente a la comparación del i -ésimo reloj y el de referencia y $d_{ri}(t)$ se refiere a los cambios en el tiempo de la frecuencia entre los relojes al mantener constantes los factores ambientales. Este término se conoce como envejecimiento en la frecuencia. Adicionalmente, se supone que los procesos ξ_t , η_t y ζ_t son no correlacionados entre ellos, tienen media cero y su varianza no depende del tiempo. Los modelos ARMA son casos particulares de este modelo, lo cual resulta útil en la identificación de modelos bajo el enfoque de series de tiempo.

Sea $h_i(t)$ la hora del i -ésimo reloj de un ensamble de N relojes atómicos y $TA(t)$ el valor de la escala atómica en el tiempo t . Con acuerdo con lo descrito en la Sección 2.1.1 en los laboratorios de metrología es posible obtener con gran exactitud la diferencia entre cualesquiera dos relojes físicos, por lo que resulta conveniente obtener expresiones de la forma

$$x_k(t) \equiv h_k(t) - TA(t). \quad (2.14)$$

La relevancia de la expresión (2.14) recae en el hecho de que es posible modificar físicamente la frecuencia de un reloj externo a los del ensamble, de tal manera que ${}^1x_{k(N+1)}(t) = x_k(t)$, garantizando la réplica de los pulsos del reloj virtual. Este ajuste involucra físicamente al k -ésimo reloj del ensamble. Notar que la ecuación (2.14) es válida para cualquier reloj del ensamble,

¹En este caso $x_{k(N+1)}(t) \equiv h_k(t) - h_{N+1}(t)$, donde el subíndice $(N + 1)$ representa un reloj adicional a los N del ensamble, mientras que $x_k(t) \equiv h_k(t) - TA(t)$.

pero usualmente se selecciona al reloj de referencia para obtener $x_r(t)$ y aplicar la corrección correspondiente al nuevo reloj. Sin embargo, una vez obtenida la diferencia $x_k(t)$, $k \neq r$, es posible obtener $x_r(t)$ si se conoce $x_{kr}(t)$, a través de la relación

$$x_r(t) = x_k(t) - x_{kr}(t). \quad (2.15)$$

De manera análoga a $x_k(t)$, se utilizará la notación $y_k(t)$ y D_k para referenciar la frecuencia fraccional promedio y la degradación de la frecuencia del k -ésimo reloj del ensamble respecto al reloj virtual.

Es un hecho que no se conoce el valor $x_k(t)$ para valor alguno de k , pero éste puede ser predicho una vez conocido $x_k(t - \tau)$. La predicción se realiza a través de la ecuación (2.11), la cual es conocida como ecuación de predicción ([7], [8]) por lo que se utiliza la notación

$$\hat{x}_k(t + \tau) = x_k(t) + y_k(t)\tau + \frac{D_k\tau^2}{2}. \quad (2.16)$$

Esta relación tiene su origen en una expansión de Taylor, y es conveniente debido la interpretación física muy clara que poseen los términos $x_k(t)$, $y_k(t)$ y D_k . El término D_k en la mayoría de los casos es tomado como 0 en razón de que los osciladores modernos son relativamente estables para valores moderados de τ .

La ecuación (2.16) es válida para cualquier reloj del ensamble, lo que da lugar a N diferentes ecuaciones para predecir $x_r(t)$ al tenerse la relación (2.15). Estas ecuaciones son

$$\hat{x}_r^k(t) = \hat{x}_k(t) - x_{rk}(t), \quad k = 1, \dots, N. \quad (2.17)$$

Para obtener una única predicción de $x_r(t)$, estas ecuaciones son promediadas de manera ponderada mediante la siguiente ecuación

$$\hat{x}_r(t) = \sum_{k=1}^N w_k(t) \hat{x}_r^k(t), \quad (2.18)$$

la cual proporciona la corrección que es aplicada para que un reloj físico replique los pulsos del reloj virtual.

Las ecuaciones (2.17) y (2.18) son importantes en el algoritmo AT1 porque son utilizadas para detectar si algún reloj del ensamble ha perdido su estabilidad, mediante una comparación de las predicciones esperadas de cada reloj respecto al ensamble. Para ello, el algoritmo incluye un método para penalizar la participación de algunos relojes a través de los pesos utilizados en el mismo. Para los detalles de la calibración se puede consultar la referencia [7].

La ecuación de predicción, específicamente y_k y x_k , y los pesos utilizados son actualizados de manera recursiva cada τ unidades de tiempo, dando lugar a un monitoreo constante del ensamble. En general, el algoritmo AT1 involucra ecuaciones más complicadas relacionadas con filtros exponenciales, pero por la falta de relevancia en esta tesis no serán expuestos. Los detalles matemáticos pueden ser consultados en [7], [14] o [15].

Los pesos óptimos utilizados en el AT1, (ver [7], [14]) corresponden al inverso de términos relacionados con el error de predicción de cada reloj respecto al ensamble, calculados durante las τ unidades de tiempo previas. Sin embargo, en el CENAM los pesos son la raíz cuadrada de la varianza de Allan calculada de las diferencias $x_k(t)$. En ambos casos los pesos son estandarizados para sumar uno.

2.3. Sombrero de tres picos

Como se mencionó previamente, una característica inherente y ubicua en el análisis de relojes atómicos, es que sólo se puede tener acceso a las diferencias de tiempo entre dos relojes, y no a la medición de la hora de un reloj individual. Esto introduce una dificultad adicional para la estimación de varianzas absolutas, es decir, de un reloj individual, ya que debe formularse en términos de las varianzas de diferencias entre relojes.

El llamado sombrero de tres picos [13], es un algoritmo conocido en la literatura de metro-

logía, que permite realizar lo anterior. Notar que se cumple la relación

$$\begin{pmatrix} h_1 - h_r \\ h_2 - h_r \\ \vdots \\ h_N - h_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_r \\ \vdots \\ h_N \end{pmatrix},$$

para cada tiempo de medición t_1, \dots, t_m . Es decir, se tiene una expresión del tipo $Y = AX$ para relacionar las diferencias entre las horas de un par de relojes con la hora de cada reloj. Por lo tanto, se cumple que $\text{Cov}(Y) = A\text{Cov}(X)A^T = A\Sigma A^T$. Suponiendo que $\text{Cov}(Y)$ ha sido estimada mediante una matriz de covarianzas empírica, se puede proceder a resolver un sistema de ecuaciones para obtener una estimación de $\text{Cov}(X)$.

Sea $\bar{x}_{ir} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m x_{ir}(t_k)$, $i = 1, 2, \dots, N$. La estimación más conocida de $\text{Var}(Y)$ está dada por la matriz que tiene

$$S_{ij} = \frac{1}{m-1} \sum_{k=1}^m (x_{ir}(t_k) - \bar{x}_{ir})(x_{jr}(t_k) - \bar{x}_{jr}) \quad (2.19)$$

en la entrada (i, j) , $i, j = 1, 2, \dots, N$. Sin embargo, la estimación de interés para los osciladores sería la correspondiente a la varianza de Allan. La ecuación (2.19) sirve también para obtener las expresiones de la varianza de Allan cuando la i -ésima entrada del vector Y se compone de las diferencias $x_{ir}(t_i+2\tau) - 2x_{ir}(t_i+\tau) + x_{ir}(t_i)$, es decir, de la i -ésima frecuencia fraccionaria promedio.

El artículo [13] da condiciones para que la matriz resultante sea positiva definida para el caso en el que se tienen tres relojes, y propone una manera de comparar todos los relojes cuando el ensamble tiene más de tres relojes. Las varianzas halladas se conocen como la *varianza absoluta* de cada reloj y constituyen los parámetros con los cuales pueden hacerse comparaciones entre

varios relojes, tanto virtuales como físicos.

Capítulo 3

Análisis exploratorio de datos y optimalidad

3.1. Análisis exploratorio de datos

Bajo la premisa de que existen disponibles observaciones empíricas de un ensamble de relojes para un periodo determinado (ver Sección 1.2), se procede a examinarlos para fines de comenzar a discernir su naturaleza estocástica y para establecer métodos para su tratamiento estadístico. En esta sección se examinan los datos correspondientes a la diferencia entre el reloj de referencia respecto a los demás relojes del ensamble. Para proseguir con el análisis, es necesario recordar algunos conceptos preliminares con los que el lector debe estar familiarizado para facilitar el entendimiento de los elementos involucrados así como las conclusiones obtenidas.

3.1.1. Procesos estacionarios y algunas de sus propiedades

El material contenido en esta sección es una compilación de términos usuales de teoría de series de tiempo, basado en [11]. Estos términos son introducidos porque serán relevantes para caracterizar el comportamiento aleatorio de ensambles, así como para definir instrumentos de diagnóstico.

Definición 3.1.1 Sea $\{X_t\}_{t \in T}$ un proceso aleatorio. X_t es *estacionario* si $\forall n \in \mathbb{N}$ y $\forall h \in \mathbb{Z}$ tal que $t_1, t_2, \dots, t_n, t_1 + h, \dots, t_n + h \in T$ se cumple que

$$P(X_{t_1} \leq x_1, \dots, X_{t_n} \leq x_n) = P(X_{t_1+h} \leq x_1, \dots, X_{t_n+h} \leq x_n).$$

En la práctica resulta difícil, incluso imposible en la mayoría de los casos, determinar si un proceso es estacionario; en cambio, es más accesible el tratar de determinar si el proceso es débilmente estacionario. La siguiente sección presenta algunas definiciones necesarias para realizar un análisis más profundo de las series presentadas.

Definición 3.1.2 Sea X_t un proceso tal que $E[|X_t|^2] < \infty$. X_t es *débilmente estacionario*, o estacionario en covarianza, si

- (a) $\mu_t = E[X_t]$ no depende de t ,
- (b) $\gamma(h) = E[(X_t - \mu_t)(X_{t+h} - \mu_{t+h})]$ sólo depende de $|h|$.

Los procesos estacionarios en covarianza incluyen a los procesos *autorregresivos de promedio móvil*, ARMA por su abreviatura en inglés. Notar que un proceso estacionario es débilmente estacionario si tiene segundo momento finito, pero un proceso estacionario en covarianza no necesariamente es un proceso estacionario.

Definición 3.1.3 Sea W_t ruido blanco con media 0 y varianza $\sigma^2 > 0$. El proceso $\{X_t\}_{t \in T}$ es ARMA(p,q) si es estacionario y

$$X_t = \phi_1 X_{t-1} + \phi_2 X_{t-2} + \dots + \phi_p X_{t-p} + W_t + \theta_1 W_{t-1} + \theta_2 W_{t-2} + \dots + \theta_{t-q} W_{t-q},$$

donde $\phi_k \neq 0$, $k = 1, \dots, p$, y $\theta_j \neq 0$, $j = 1, \dots, q$.

Para la determinación de la estacionariedad (débil) de una serie de tiempo se recurre a elementos gráficos; por ejemplo, en la gráfica de la serie se aprecian elementos como tendencia o

cambios en la varianza, lo cual es un indicador que la serie no es estacionaria. En particular para ajustar un modelo ARMA, se utilizan herramientas conocidas como *función de autocorrelación* y *función de correlación parcial*, ACF y PACF por sus siglas en inglés, respectivamente. Adicionalmente, estas funciones muestran con mayor claridad la presencia de un componente estacional en la serie, el cual se observa a través de la relación fuerte entre los retardos múltiplos de s (ver [11]).

Definición 3.1.4 Sea $\{X_t\}_{t \in T}$ un proceso estacionario con media μ . La *función de autocovarianza* para un retardo h , denotada por $\gamma(h)$, se define como $E[(X_{t+h} - \mu)(X_t - \mu)]$. Asimismo, la *función de autocorrelación* para un retardo h , denotada por $\rho(h)$, se define como el cociente $\gamma(h)/\gamma(0)$.

La función de autocovarianza para un retardo h mide la relación lineal entre las observaciones X_{t+h} y X_t , por lo que un coeficiente de autocorrelación cercano a ± 1 indica una fuerte relación lineal entre las observaciones de la serie que se encuentran distanciadas h unidades. Las funciones anteriores son útiles para desarrollar resultados teóricos relacionados con X_t ; sin embargo, análogo al caso de un conjunto de variables aleatorias independientes, es necesario estimar las funciones de autocovarianza y autocorrelación a partir de una muestra del proceso.

Definición 3.1.5 Sea $\{X_t\}_{t=1}^n$ una realización del proceso estacionario. La *media muestral* del proceso se estima a través de la estadística

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_t.$$

Asimismo, la *función de autocovarianza muestral* está dada por

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (X_{t+h} - \bar{X})(X_t - \bar{X}),$$

y la *función de autocorrelación muestral* está dada por

$$\hat{\rho}(h) = \frac{\hat{\gamma}(h)}{\hat{\gamma}(0)}.$$

Definición 3.1.6 La *función de autocorrelación parcial*, PACF, del proceso estacionario X_t , denotada por ϕ_{hh} se define como

$$\phi_{hh} = \begin{cases} \text{Corr}(X_{t+1}, X_t), & h=1; \\ \text{Corr}(X_{t+h} - \widehat{X}_{t+h}, X_t - \widehat{X}_t), & h \geq 2, \end{cases}$$

donde \widehat{X}_{t+h} y \widehat{X}_t denotan la regresión lineal de X_{t+h} y X_t en $\{X_{t+1}, \dots, X_{t+h-1}\}$, respectivamente. Como se indica en [11], el término regresión se refiere a que X_{t+h}^{h-1} es la combinación lineal de $\{X_{t+1}, X_{t+2}, \dots, X_{t+h-1}\}$ que minimiza $E[X_{t+h} - \sum_{j=1}^{h-1} \beta_j X_{t+j}]^2$.

El coeficiente de autocorrelación parcial representa la correlación real entre las observaciones X_t y X_{t+h} , es decir, la correlación una vez removida la influencia de las observaciones intermedias.

En los procesos ARMA, la ACF y la PACF presentan idiosincrasias que ayudan a identificar el proceso. El Cuadro 3.1 resume las características de los principales procesos.

Proceso	ACF	PACF
MA(q)	Igual a cero a partir de $h > q$	Decrece a cero conforme $h \rightarrow \infty$
AR(p)	Decrece a cero conforme $h \rightarrow \infty$	Igual a cero a partir de $h > p$
ARMA(p,q)	Decrece a cero conforme $h \rightarrow \infty$	Decrece a cero conforme $h \rightarrow \infty$

Cuadro 3.1: Comportamiento de las funciones ACF y PACF.

Los procesos pueden presentar tendencia, las cuales pueden ser deterministas o estocásticas. Las *tendencias deterministas* son aquellas tendencias que son totalmente predecibles, mientras que las *tendencias estocásticas* no lo son. Por ejemplo, sea W_t un proceso estacionario; entonces $X_t = f(t) + W_t$ tiene una tendencia determinista. Un proceso con tendencia no es estacionario; el método para volver el proceso estacionario depende del tipo de tendencia que presenta. En general, los procesos con tendencia determinista recurren a modelos de regresión, mientras que aquellos con tendencia estocástica utilizan diferenciación. La idea de diferenciar constituye el

fundamento de los procesos *autorregresivos integrados de promedio móvil*, conocidos como procesos ARIMA por sus siglas en inglés.

Definición 3.1.7 Sea B el operador definido por $B^k X_t = X_{t-k}$. El proceso X_t es ARIMA(p, d, q) si

$$\nabla^d X_t := (1 - B)^d X_t$$

es un proceso ARMA(p, q).

Supóngase que se tiene un proceso AR(1) dado por

$$X_t = \phi X_{t-1} + W_t.$$

Si $\phi = 1$, entonces X_t tiene tendencia y es un proceso integrado de orden 1, ya que ∇X_t es estacionario. Para auxiliar en la determinación del tipo de tendencia presente en un proceso, existen diversas pruebas para determinar la presencia de raíces unitarias, como las pruebas de *Dickey-Fuller*, *Kwiatkowski-Phillips-Schmidt-Shin* y *Phillips-Perron* (ver [9]).

3.1.2. Análisis de los datos del ensamble

Previamente se mencionó que los datos proporcionados por el CENAM son mediciones de las diferencias de tiempo entre los relojes del ensamble respecto al de referencia, tomadas cada diez segundos, por lo que en las gráficas presentadas en este capítulo, el eje x corresponde al tiempo, expresado en decenas de segundos. Es decir, la unidad de tiempo utilizada es de diez segundos.

La Figura 3.1, que simplemente presenta los datos originales en orden temporal, muestra que en general, las tres diferencias tienen una tendencia que puede ser creciente o decreciente. Una tendencia creciente es resultado de que el reloj de referencia está, por lo general, más adelantado que el reloj con el que se compara, mientras que una tendencia decreciente es resultado de que

el reloj de referencia está más atrasado. A simple vista no se observa ningún comportamiento singular respecto a las diferencias correspondientes a los relojes CsL y CsM, pero hay dos valores que sobresalen en el caso del Maser de Hidrógeno. En especial resaltan las magnitudes que tienen estos saltos.

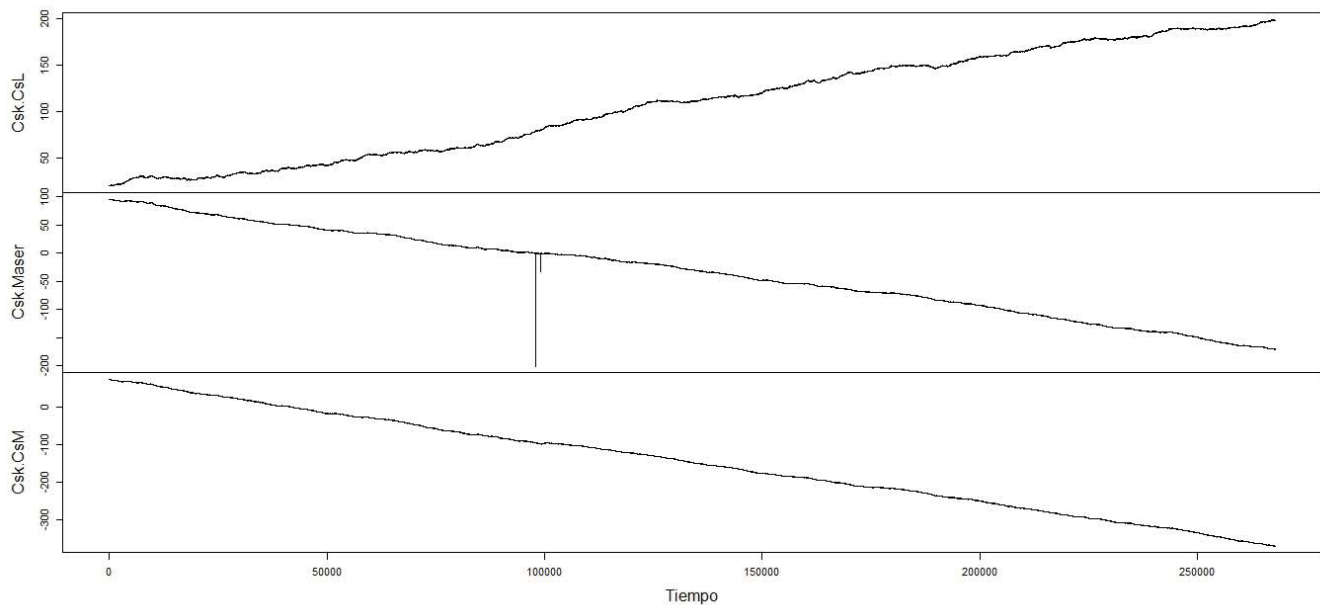


Figura 3.1: Gráfica de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos.

Asimismo, resulta de interés observar la primera diferencia de los datos considerados, ya que ésta representa el aumento/disminución de la diferencia entre los relojes, de un tiempo a otro. La gráfica de la primera diferencia, presentada en la Figura 3.2, muestra que los incrementos oscilan alrededor de un valor muy cercano a cero, lo cual es natural debido a la alta estabilidad de los osciladores atómicos. Por otra parte, se hace evidente la presencia de valores atípicos en las series. Nuevamente se observan los valores correspondientes a los atípicos de la serie original para el caso del Maser de Hidrógeno, y además se aprecian saltos de mayor magnitud respecto a los demás tanto para el CsL como para el CsM.

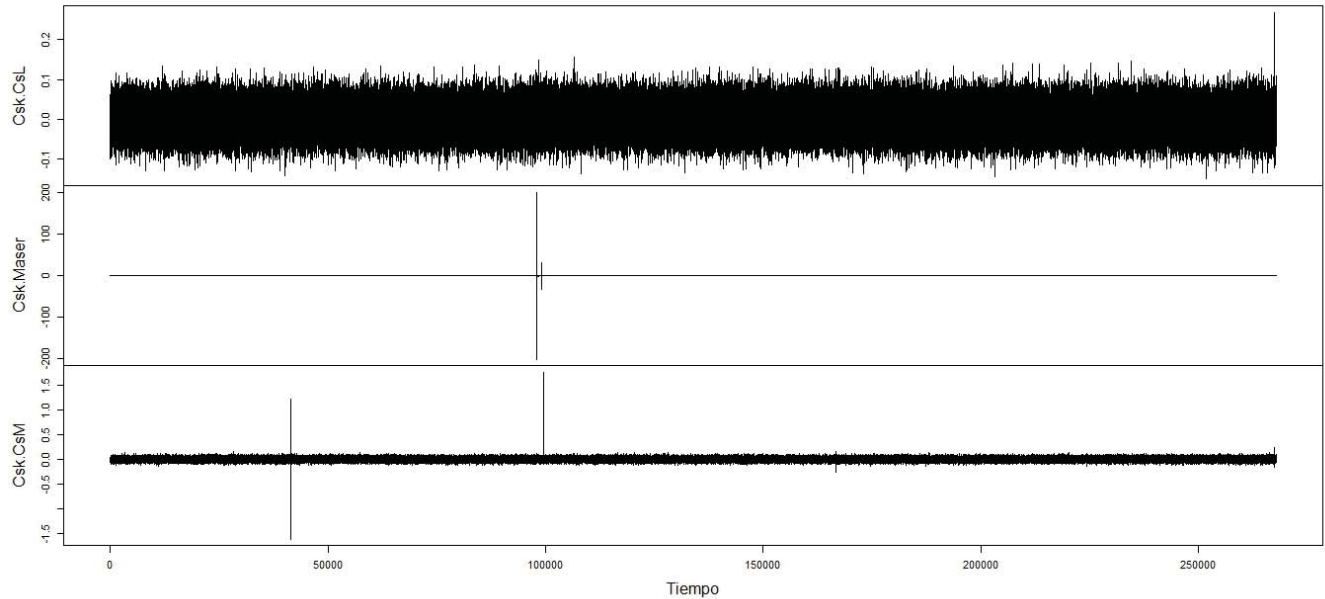


Figura 3.2: Gráfica de la primera diferencia de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos.

Debido a la gran magnitud de los saltos en la serie diferenciada de $CsK(t) - Maser(t)$ (de ± 200), no es posible apreciar el comportamiento de las demás observaciones, por lo que se determinó omitir el efecto de tales valores con el fin de analizar el resto de la serie, sustituyéndolos por la media muestral de la serie calculada en su ausencia. La omisión de estos dos valores no resultó suficiente debido a que nuevamente sobresalen dos valores que, aunque de menor magnitud que los anteriores, no permiten observar con mayor detalle el resto de la serie. Por lo tanto se sustituyó nuevamente por la media muestral tal como se hizo previamente. Este proceso se repitió varias veces, hasta que el comportamiento de las demás observaciones pudo ser apreciado. En total, se identificaron 98 valores atípicos para esta serie, y una vez etiquetados se descubrió que 96 de ellos corresponden al mismo día entre las 7 y las 11 horas. De igual manera, 16 de los 19 valores atípicos detectados para la diferencia $CsK(t) - CsL(t)$ corresponden al mismo día entre las 19 y 20 horas. Las fechas y horas de estos valores no parecen ser resultado de una

característica propia del proceso estocástico asociado a cada reloj; al consultarse con el CENAM se determinó que estos valores no son inherentes de los relojes atómicos, sino que se deben a causas externas, tales como factores humanos o ambientales, por lo que sus valores deben ser, en efecto, omitidos.

Los valores atípicos detectados podrían ser imputados por un estimador apropiado, tanto en la serie diferenciada como en la original con el fin de evitar su influencia en los siguientes elementos de la tesis. Sin embargo, se cuenta con 267 840 observaciones para cada serie, y en dos de ellas las observaciones en el rango 100 000 a 167 445 están libres de atípicos, siendo la serie diferenciada de $CsK(t) - CsM(t)$ la que presenta un único salto durante ese período, por lo que se ha optado utilizar ésta partición de la serie, para fines de estudiar el ensamble libre de fenómenos atípicos y no acarrear posibles efectos adicionales debidos a algún procedimiento de imputación.

En la Figura 3.4 se aprecia que las primeras diferencias no presentan tendencia y oscilan con valores muy cercanos a cero. Debido a la gran cantidad de observaciones, no es posible determinar si la primera diferencia es constante en varianza, pero particionando la serie en subseries de tamaño 1000 se percibe que la primera diferencia parece ser estacionaria en varianza. Aunque la primera diferencia parezca ser estacionaria y no poseer tendencia, es posible que la tendencia presente en la serie original sea determinista. Para analizar el supuesto de tendencia determinista se realiza la regresión lineal

$$X_t = \beta_0 + \beta_1 t + Z_t, \quad (3.1)$$

donde X_t representa la diferencia entre el tiempo del i -ésimo reloj del ensamble respecto al de referencia. Si la tendencia es determinista se espera que los residuos sean un proceso estacionario.

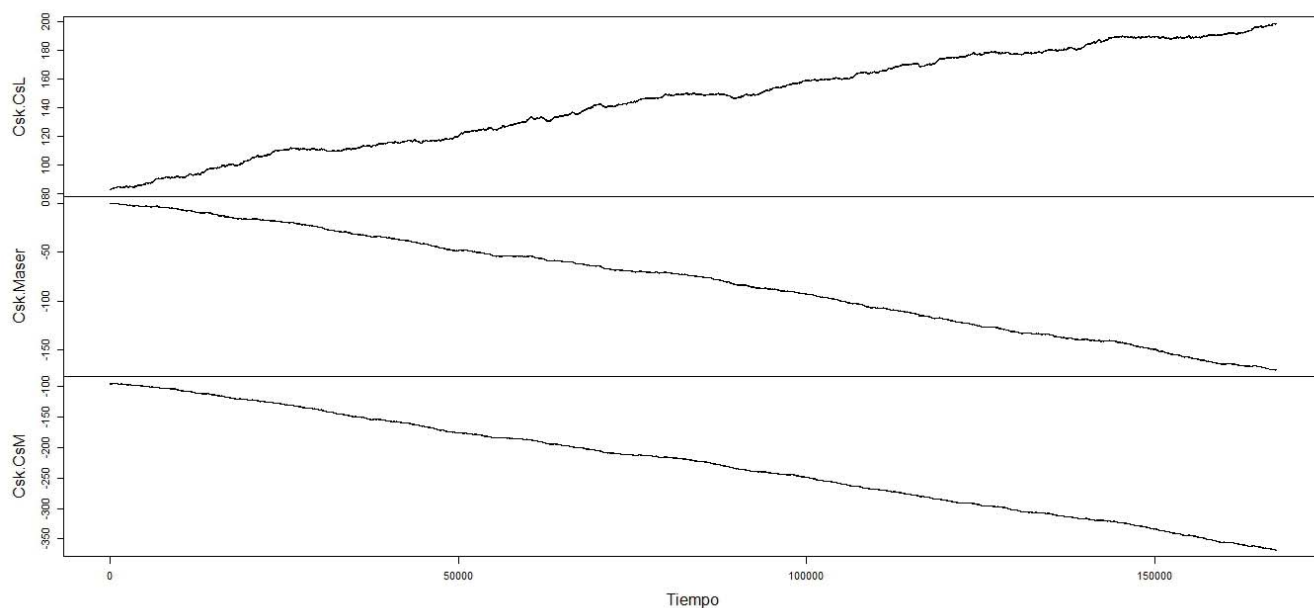


Figura 3.3: Gráfica de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos para la partición seleccionada de la serie.

La gráfica de los residuos se encuentra en la Figura 3.5, y de ella se observa que la tendencia creciente — o decreciente — de las series originales ha sido removida. Sin embargo, los coeficientes de autocorrelación y autocorrelación parcial proporcionan información más valiosa.

A pesar de que los coeficientes de autocorrelación parcial tienen el comportamiento que se esperaría de un proceso AR, los coeficientes de autocorrelación decrecen de manera más lenta de lo que decrecen teóricamente los coeficientes cuando el proceso es ARMA. En la Figura 3.6 se aprecia que para un retardo de 300, el coeficiente para cualquiera de las tres series es cercano a 1. Así, no parece que la tendencia presente en la serie original sea determinista.

Analizando las gráficas de la ACF y PACF de la primera diferencia, mostradas en las Figuras 3.8 y 3.9, se observa que ambas decrecen conforme el retardo aumenta, lo que se espera

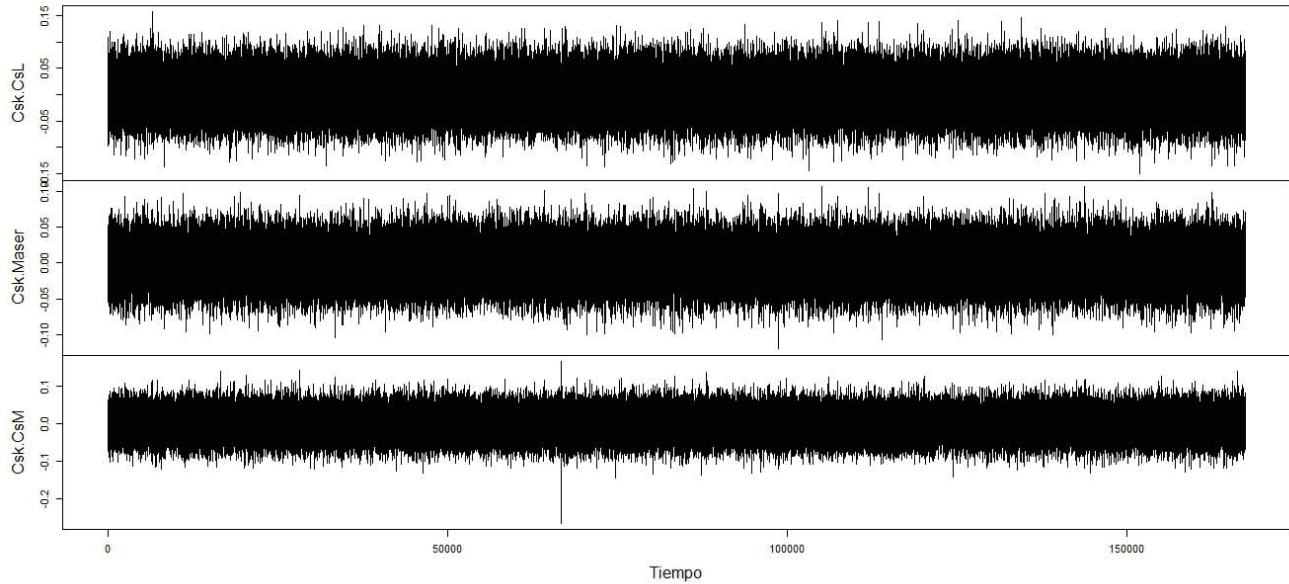


Figura 3.4: Gráfica de la primera diferencia de las diferencias entre los relojes del ensamble con el de referencia expresadas en nanosegundos para la partición seleccionada de la serie.

de los procesos ARMA. Sin embargo, es posible que la primera diferencia no sea necesaria y se esté cometiendo una sobrediferenciación. Por ello, se optó por realizar pruebas de estacionaridad.

La prueba de Dickey-Fuller aumentada, contrasta la hipótesis nula $H_0 : \rho = 1$ contra la alternativa $H_a : \rho \neq 1$ en el modelo

$$Y_t = \beta_0 + \beta_1 t + \rho Y_{t-1} + \varepsilon_t,$$

de manera que si la hipótesis nula es verdadera, el proceso contiene una raíz unitaria y no es estacionario. Por el contrario, la prueba *Kwiatkowski-Phillips-Schmidt-Shin* tiene como hipótesis nula la estacionariedad de la serie alrededor de una tendencia, y como hipótesis alternativa la

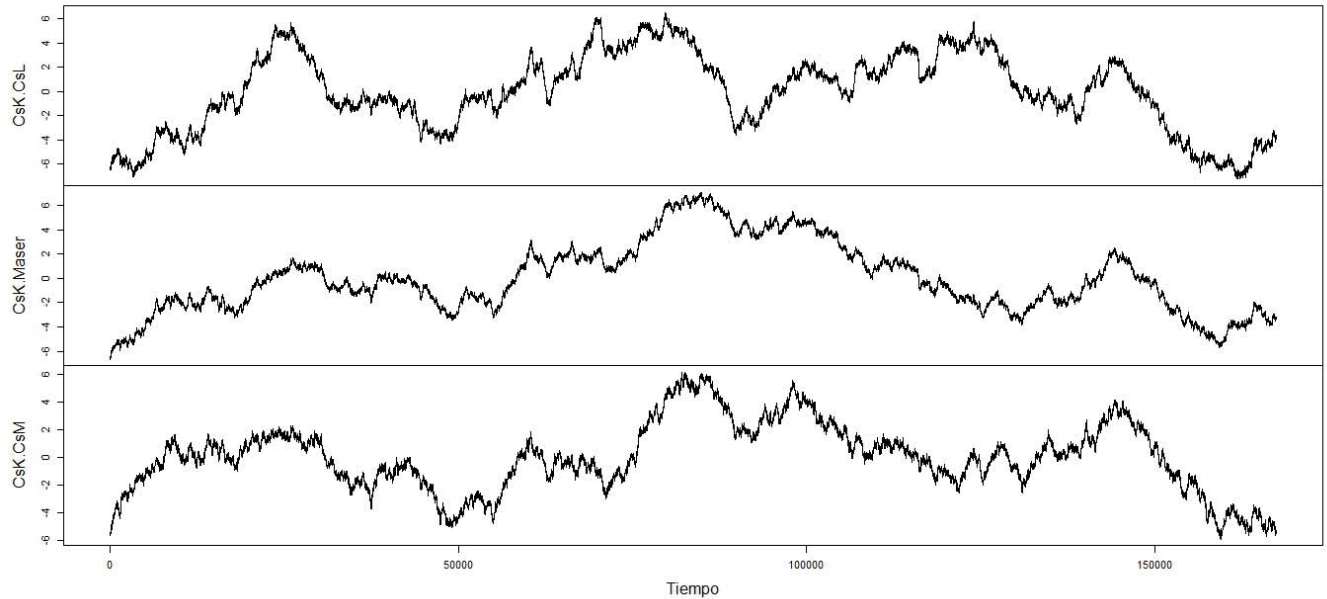


Figura 3.5: Gráfica de los residuos de la regresión (3.1).

presencia de una raíz unitaria. Realizando las pruebas para la partición de los datos originales se obtiene que, con un nivel de significancia del 0.05, no existe evidencia para rechazar la hipótesis nula en la prueba de Dickey-Fuller aumentada, y se rechaza la hipótesis nula en el caso de la prueba KPSS. Por lo tanto, existe evidencia que apoya la suposición de que las diferencias entre los relojes del ensamble son procesos integrados de orden uno. Discernir entre el tipo de tendencia presente en las series es relevante para determinar un método de estimación estadística que considere esta característica, y que no haga uso de un supuesto que no es factible a la luz de los datos.

Es importante notar que las diferencias entre las horas de los relojes del ensamble respecto al de referencia no son independientes y están altamente correlacionados debido a que comparten el mismo reloj de referencia, es decir, $X_{kr}(t)$ no es independiente de $X_{jr}(t)$, $k, j = 1, \dots, N$.

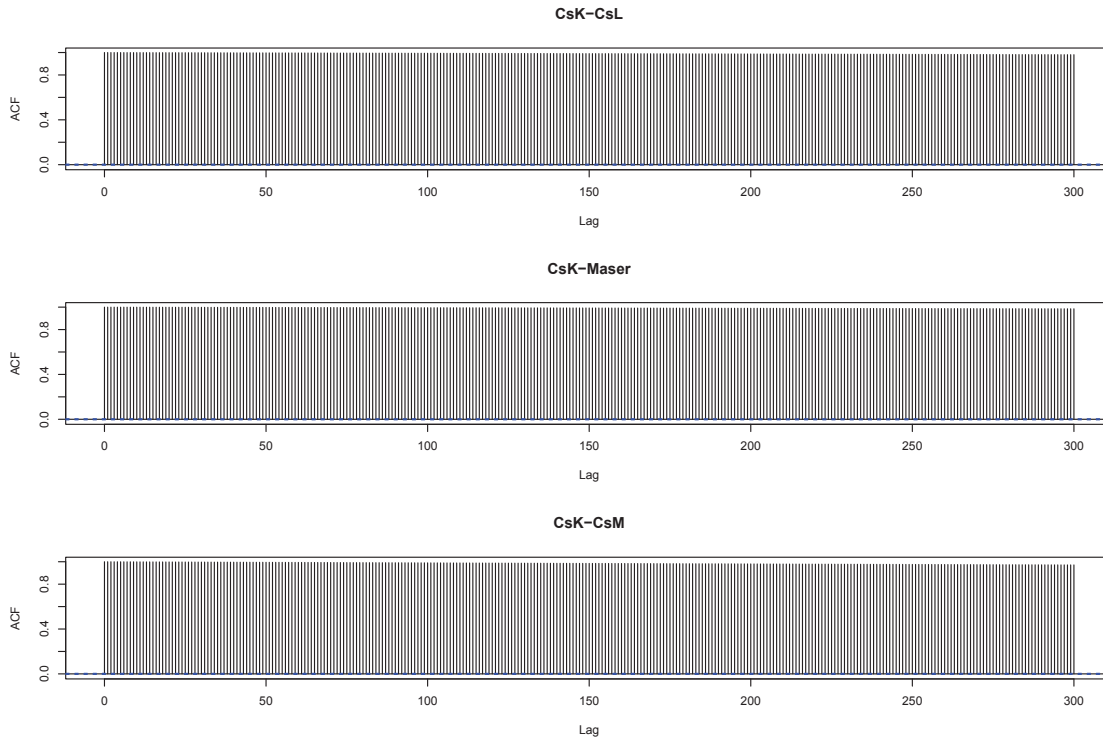


Figura 3.6: ACF de los residuos de la regresión (3.1).

Asimismo, las primeras diferencias, que como se mencionó previamente representan el aumento/disminución en el tiempo de las diferencias de tiempo entre los relojes, también tiene una correlación diferente de cero debido al efecto del reloj de referencia, aunque no tiene por qué tener la misma correlación que la serie original. Sin embargo, este efecto introducido por el reloj de referencia afecta simultáneamente a las $N - 1$ diferencias correspondientes a cada reloj del ensamble. Por estas razones se debe concebir el análisis estadístico del ensamble completo y no de cada una de las diferencias entre relojes sin tomar en cuenta las demás. Los coeficientes de correlación entre las diferencias $CsK(t) - CsL(t)$, $CsK(t) - Maser(t)$ y $CsK(t) - CsM(t)$ se muestran en la Figura 3.10, y los coeficientes de correlación de las primeras diferencias de estas series se presentan en la Figura 3.11.

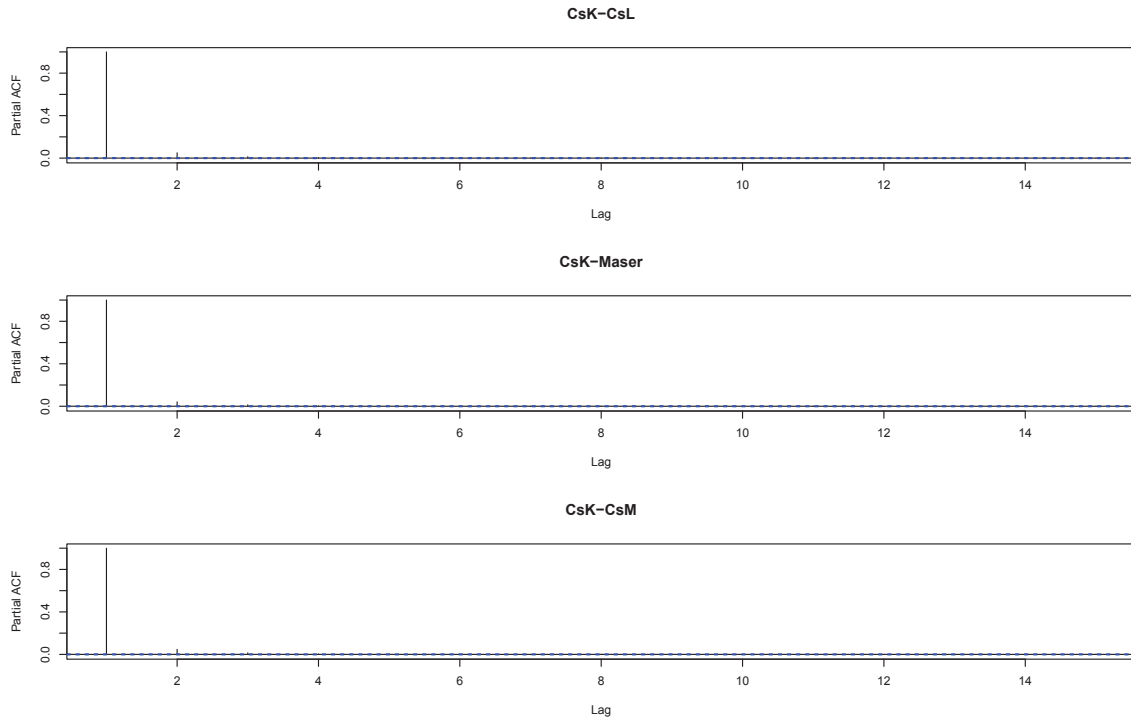


Figura 3.7: PACF de los residuos de la regresión (3.1).

Los principales resultados expuestos en esta sección pueden ser resumidos de la siguiente manera:

- Las diferencias entre las horas de los relojes del ensamble respecto al reloj de referencia, X_{kr} , $k = 1, \dots, N$, presentan valores atípicos con causas atribuibles. Aunque pueden estudiarse métodos para imputar estos valores sin perder más datos, se optó por estudiar un período de tiempo en el que las series son libres de atípicos, excepto por el outlier que se presenta en la diferencia CsK–CsM. A partir de este capítulo, las series que se utilizarán son las particiones libres del efecto de estos valores. Una vez removido su efecto, las series $X_{kr}(t)$ parecen ser procesos integrados de orden 1, es decir, su primera diferencia es un proceso estacionario.
- La dificultad para obtener resultados analíticos para algunas estadísticas, como se mencio-

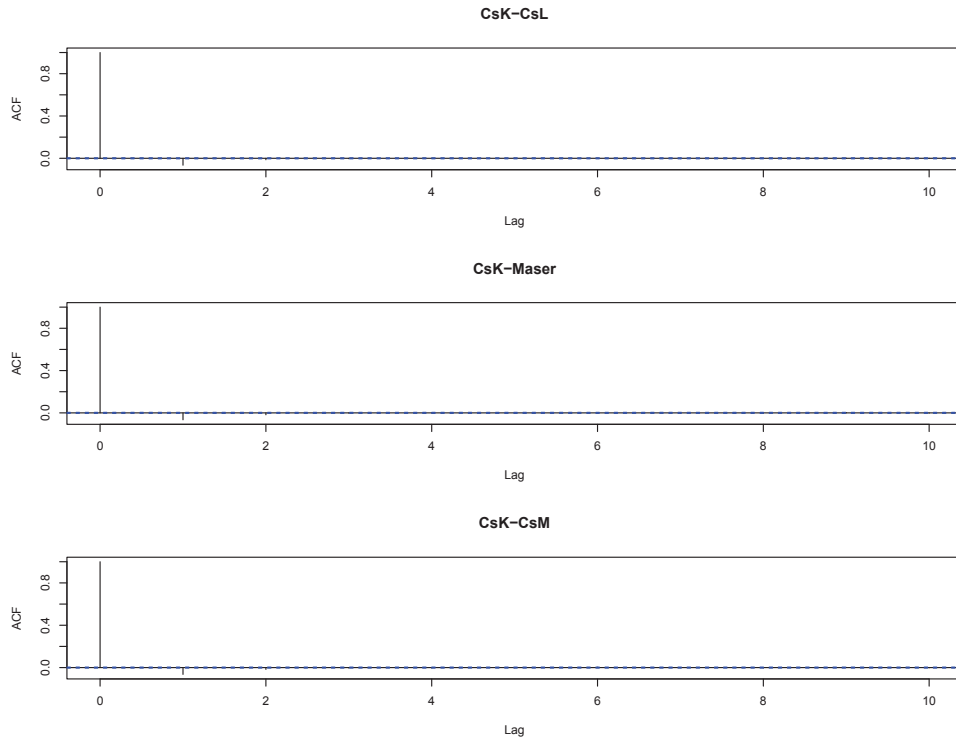


Figura 3.8: ACF de los residuos de la primera diferencia de la serie original.

nará en la siguiente sección, motiva la implementación de métodos apropiados que hacen uso de la propiedad de que las primeras diferencias de las series originales son verificablemente estacionarias. Estos métodos, basados en el concepto muy general de *bootstrap*, serán presentados en el Capítulo 4.

- El ensamble es un concepto multivariado, por lo que para su análisis estadístico se debe tomar en cuenta las relaciones de dependencia lineal que presentan las series $X_{kr}(t)$.

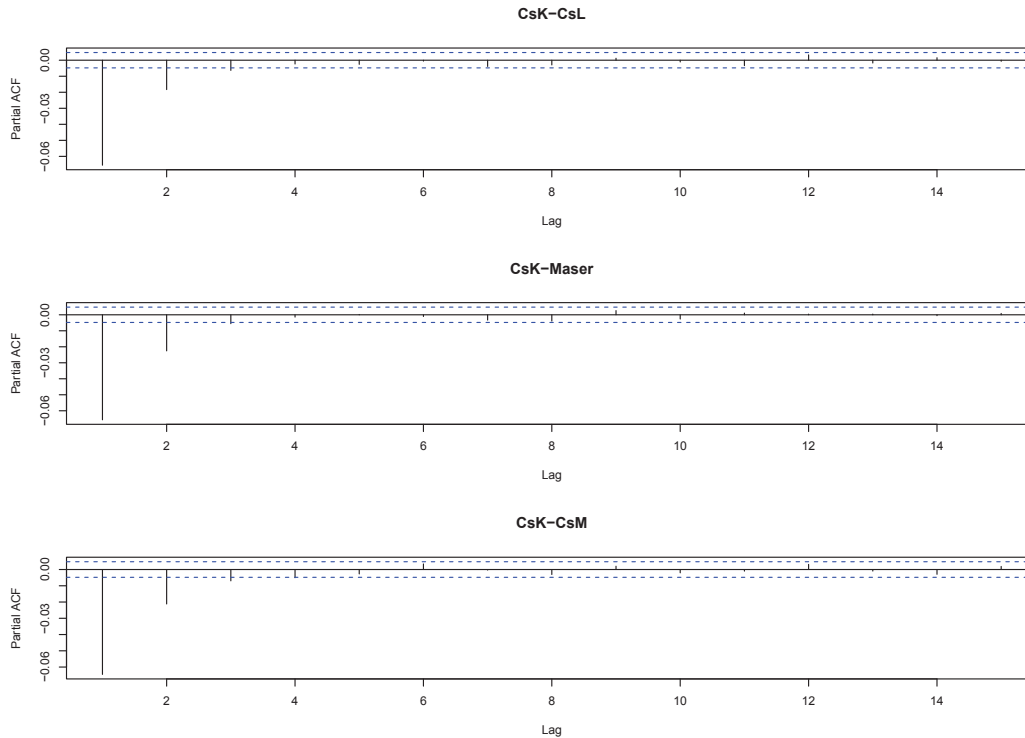


Figura 3.9: PACF de los residuos de la primera diferencia de la serie original.

3.2. Optimalidad

El objetivo de esta sección es proporcionar la argumentación de que, bajo condiciones de independencia de las observaciones $x_{rk}(t)$, los pesos $w_i(k)$ que minimizan la varianza de $\sum_{k=1}^N w_k(t)x_{rk}(t)$ son $1/\hat{\sigma}_k^2(\tau)$, $k = 1, \dots, N$, donde $\hat{\sigma}_k^2(\tau)$ denota $\text{AVAR}(x_k)$ (ver Sección 2.1). Estos pesos son mencionados en los artículos [7], [15] y usualmente son presentados de manera estandarizada, es decir, que su suma sea igual a uno.

Considérese primero el caso más simple donde X_1, X_2, \dots, X_N son variables aleatorias independientes tales que $E|X_k|^2 < \infty$, $k = 1, 2, \dots, N$, de manera que $\sigma_k^2 = \text{Var}(X_k)$. Con acuerdo a las propiedades de la varianza se cumple la siguiente igualdad:

$$\text{Var} \left(\sum_{k=1}^N w_k X_k \right) = \sum_{k=1}^N w_k^2 \sigma_k^2. \quad (3.2)$$

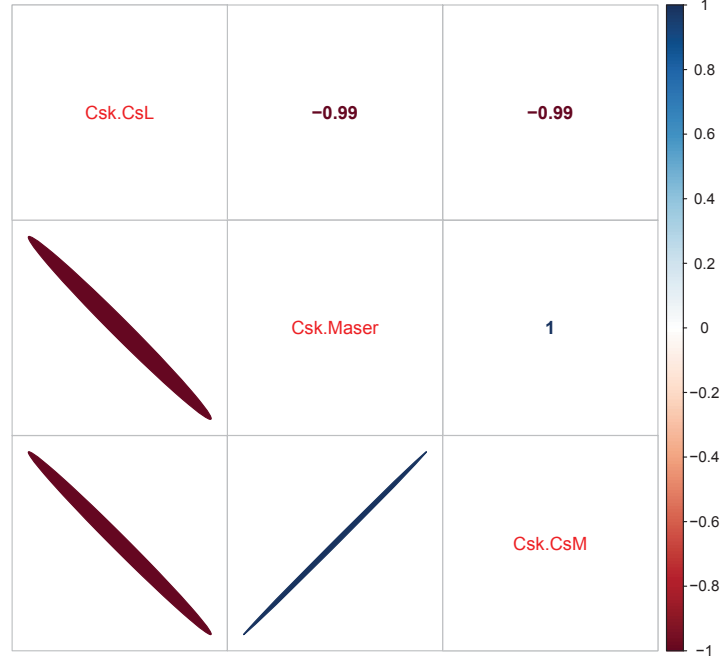


Figura 3.10: Coeficientes de correlación entre las diferencias $CsK(t) - CsL(t)$, $CsK(t) - Maser(t)$ y $CsK(t) - CsM(t)$.

Se pretende encontrar los pesos que minimizan la expresión (3.2) sujeto a la condición $\sum_{k=1}^N w_k = 1$. Esto puede ser resuelto utilizando el método de multiplicadores de Lagrange, en donde el lagrangiano es

$$\sum_{k=1}^N w_k^2 \sigma_k^2 - \lambda \left(\sum_{k=1}^N w_k - 1 \right).$$

Por lo tanto, el sistema de ecuaciones a resolver es

$$2w_k \sigma_k^2 - \lambda = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (3.3)$$

$$\sum_{k=1}^N w_k = 1. \quad (3.4)$$

De la ecuación (3.3) se obtiene que $w_k = \lambda / (2\sigma_k^2)$, y por la condición (3.4) se cumple que $\lambda / 2 \sum_{k=1}^N 1/\sigma_k^2 = 1$. Entonces, $\lambda = 2 / \sum_{k=1}^n (1/\sigma_k^2)$. Por lo tanto, se concluye que los pesos que

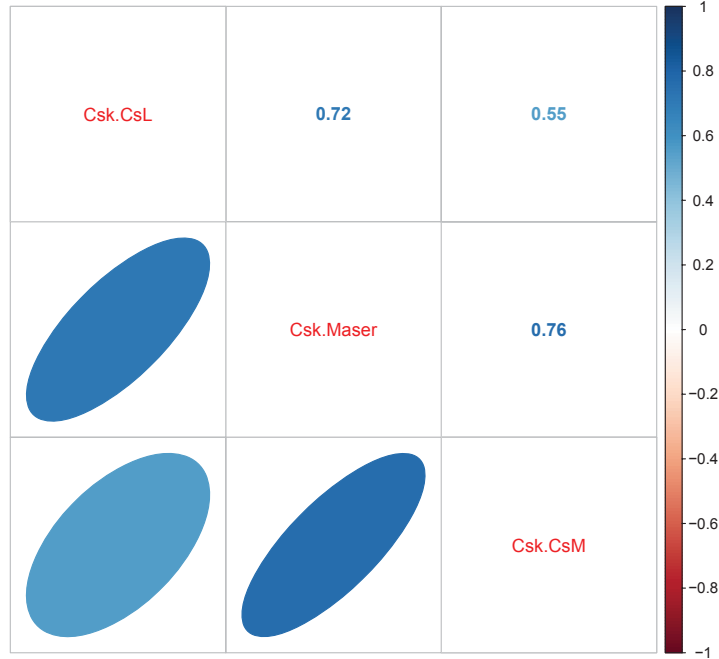


Figura 3.11: Coeficientes de correlación entre las primeras diferencias de las series que representan las diferencias $CsK(t)-CsL(t)$, $CsK(t)-Maser(t)$ y $CsK(t)-CsM(t)$.

minimizan (3.2) son

$$w_k = \frac{1/\sigma_k^2}{\sum_{k=1}^N (1/\sigma_k^2)}, \quad k = 1, \dots, N.$$

En el contexto de la tesis, tomando el reloj virtual más simple, las variables aleatorias a considerar son los errores en la hora entre dos relojes en un tiempo t . En la sección anterior se concluyó que la primera diferencia de los errores es débilmente estacionaria, por lo que éstas cumplen que la media y la varianza de estas diferencias son iguales, pero la Figura 3.8 muestra que no cumplen el supuesto de no correlación. Por lo tanto, no es clara la convergencia de la varianza de Allan a la varianza, y como consecuencia, tampoco lo es la aseveración

$$w_k(t) = \frac{1/\hat{\sigma}_k^2(\tau)}{\sum_{k=1}^N (1/\hat{\sigma}_k^2(\tau))}, \quad k = 1, \dots, N.$$

Además, en la Figura 3.10 se muestra que los coeficientes de correlación no son nulos, lo

que arroja más duda respecto a condiciones para justificar la conclusión correspondiente a los pesos. Asimismo, debido al hecho de que las diferencias participantes en la construcción del reloj virtual comparten un reloj de referencia, y es posible que por encontrarse en un mismo lugar físico sean afectadas por las mismas condiciones ambientales, es natural que el supuesto de independencia entre las diferencias en la hora entre los relojes respecto al de referencia no se cumpla. Lo anterior se aplica al caso de un reloj virtual simple. Según lo descrito en el algoritmo AT1, la ponderación no es únicamente de los errores en la hora, sino también de las ecuaciones de predicción, lo que dificulta aún más la justificación analítica de los pesos óptimos.

Considérese ahora el caso en el que las variables X_1, \dots, X_N no son independientes. Denotando $\sigma_{ij} = \text{Cov}(X_i, X_j)$, $i, j = 1, \dots, N$, se cumple que

$$\text{Var} \left(\sum_{k=1}^N w_k X_k \right) = \sum_{k=1}^N w_k^2 \sigma_k^2 + 2 \sum_{k < j} w_k w_j \sigma_{k,j}. \quad (3.5)$$

De esta manera, el lagrangiano es

$$\sum_{k=1}^N w_k^2 \sigma_k^2 + 2 \sum_{k < j} w_k w_j \sigma_{k,j} - \lambda \left(\sum_{k=1}^N w_k - 1 \right), \quad (3.6)$$

y el sistema de ecuaciones a resolver es

$$2w_k \sigma_k^2 + 2 \sum_{k \neq j} w_j \sigma_{k,j} - \lambda = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

$$\sum_{k=1}^N w_k = 1.$$

Este sistema puede ser representado de manera matricial como

$$\begin{pmatrix} 2\Sigma & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 1 \end{pmatrix}$$

donde Σ es la matriz de covarianzas de X_1, \dots, X_N , y \mathbf{w} y $\mathbf{0}$ son los vectores de dimensión $N \times 1$ dados por $(w_1, w_2, \dots, w_N)^T$ y $(0, \dots, 0)^T$ respectivamente. Suponiendo que la matriz Σ es invertible, se tiene que

$$\Sigma \mathbf{w} = \frac{\lambda}{2} \mathbf{1},$$

lo que implica que

$$\mathbf{w} = \frac{\lambda}{2} \Sigma^{-1} \mathbf{1}.$$

Dado que

$$\mathbf{1}^T \mathbf{w} = \frac{\lambda}{2} \mathbf{1}^T \Sigma^{-1} \mathbf{1} = 1,$$

se observa que

$$\lambda = \frac{2}{\mathbf{1}^T \Sigma^{-1} \mathbf{1}},$$

de donde se concluye que los pesos óptimos están dados por el vector

$$\mathbf{w} = \frac{\Sigma^{-1} \mathbf{1}}{\mathbf{1}^T \Sigma^{-1} \mathbf{1}}.$$

Hacer una analogía de los pesos encontrados en el caso de variables no independientes para la estimación utilizando la varianza de Allan no es sencillo, ya que se requiere una medida de covarianza que no está reportada en la literatura. Lo que sí es claro, es el hecho de que las condiciones de independencia entre observaciones en el mismo tiempo t , y la no correlación entre las primeras diferencias de las observaciones, justificados tanto por contexto como empíricamente, no permiten visualizar una justificación clara de por qué los pesos reportados son óptimos. Por lo tanto, los llamados pesos óptimos no necesariamente lo son.

Capítulo 4

Nociones básicas de bootstrap

El método numérico de aproximación *bootstrap* es útil para cuantificar la incertidumbre de un parámetro de interés cuando la distribución muestral de una estadística utilizada para estimarlo no es conocida o resulta difícil de deducir. Para el caso de estudio de la presente tesis, el parámetro de interés involucrado en la comparación de relojes virtuales es la *varianza absoluta*, y bootstrap resulta una metodología general apropiada debido a la necesidad de cuantificar la incertidumbre asociada bajo un escenario en el que no hay conocimiento de su distribución muestral. Este método, que recurre de manera fundamental a la posibilidad de cómputo intensivo, fue propuesto por Efron en 1979 [3] para el caso de variables independientes e idénticamente distribuidas, pero como se comentó en el Capítulo 3, los datos del ensamble son dependientes en el tiempo y (por lo menos para la colección de datos estudiada) pueden ser modelados con procesos ARIMA(p,d,q), por lo que el método original no puede ser aplicado. Sin embargo, como veremos, han surgido adaptaciones para diversos tipos de procesos; en particular, para los procesos estacionarios débilmente dependientes. Esto permite adaptar la metodología bootstrap para los datos del ensamble de relojes del CENAM, y más generalmente para ensambles de relojes similares.

En este capítulo se expone brevemente el método bootstrap para el caso de variables i.i.d., se comenta la dificultad que surge en el caso de datos dependientes, y se resumen los principales

métodos bootstrap no paramétricos que se han propuesto en la literatura para el caso en el que la dependencia es débil. El que el énfasis vaya a ser de entrada metodología no paramétrica obedecerá a que la naturaleza del problema de ensambles es esencialmente multivariado y muy general. La especificación de un modelo paramétrico — o semiparamétrico — concreto no es práctica ni sensata cuando lo que se desea es enfrentar cualquier ensamble en periodos de tiempo arbitrarios.

El material incluido en este capítulo no pretende ser autocontenido respecto a metodología bootstrap. Se actúa bajo la premisa de que dicho método sí podría ser ampliamente conocido en sus principios básicos. El objetivo principal aquí será mostrar cómo puede transportarse ese principio básico al caso de observaciones que no son independientes e idénticamente distribuidas, y que además, son multivariadas con covariación. También, se hace un repaso acerca de cómo el método bootstrap es empleado a la postre para realizar inferencia formal por vía de intervalos de confianza y pruebas de hipótesis. Todas estas ideas serán instrumentadas en el Capítulo 5 para el caso de ensambles de relojes atómicos.

Para una introducción a la idea básica de bootstrap visto como esquema de remuestreo, ver [3]. Para leer acerca de la metodología bootstrap en lo general, incluyendo ejemplos de su aplicación en muy diversos contextos de estadística, puede consultarse [2]. Los detalles de los diferentes esquemas que han sido propuestos para albergar casos de observaciones estacionarias débilmente dependientes, pueden consultarse en [2], [6] y [10]. El siguiente material resume las ideas principales de estas referencias, y se complementan con ejemplos ilustrativos y diagramas diversos para reforzar su entendimiento.

4.1. Bootstrap para variables independientes e idénticamente distribuidas

Sea $\mathbf{X}_n = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ una sucesión de variables aleatorias con distribución conjunta F , la cual suele ser desconocida en la práctica. Para simplificar, supóngase que $X_1, X_2, \dots, X_n \sim F$

son variables aleatorias independientes.

Definición 4.1.1 Un *funcional estadístico* es una función $f : \mathfrak{F} \rightarrow \mathbb{R}$, donde \mathfrak{F} es el conjunto de funciones de distribución.

Un ejemplo de funcional estadístico es la función $g(H) = \int x dH(x)$, $H \in \mathfrak{F}$. Si F es la función de distribución común de las variables aleatorias X_i , $i = 1, 2, \dots, n$, con primer momento finito, entonces $g(F)$ es el valor esperado de X_i , mientras que si F_n es la *función de distribución empírica*, f.d.e., definida como $F_n(x) = 1/n \sum_{i=1}^n \mathbb{I}(X_i \leq x)$, entonces $g(F_n) = \bar{X}$. Notar que $g(F)$ es un valor, mientras que $g(F_n)$ es una estadística.

Definición 4.1.2 El *estimador bootstrap de $g(F)$* está definido por $g(F_n)$, donde F_n es la f.d.e.

Con acuerdo en esta definición, \bar{X} es el estimador bootstrap de la media de una variable aleatoria. En este caso se tiene una expresión analítica para $g(F_n)$ dada por $1/n \sum_{i=1}^n X_i$, pero no siempre es posible obtenerla. Es precisamente para los casos en los que no se cuenta con tal expresión que el método bootstrap resulta útil. El principal fundamento de este método es el principio bootstrap, el cual está basado en el muestreo de la muestra, es decir, en la noción de remuestreo.

Supóngase que $\mathbf{X}_n = \{X_1, X_2, \dots, X_n\} \sim F$ (no necesariamente independientes), y que el interés recae en una característica de la distribución de $G = G(\mathbf{X}_n; F) \sim H$, dada por $t(H)$. Un ejemplo sería, $G = \bar{X} - \mu$ y $t(H) = \int dH$, si el interés fuese la distribución muestral de $\bar{X} - \mu$. El *principio bootstrap* puede ser resumido de la siguiente manera:

1. Aproximar F a través de una función F_n que sea conocida.
2. Simular $X_1^*, X_2^*, \dots, X_n^* \sim F_n$ M veces.
3. Obtener $G_i^* = G(X_{i,1}^*, \dots, X_{i,n}^*; F_n)$, $i = 1, 2, \dots, M$, para obtener el estimador bootstrap $T = t(H_M)$, donde $H_M(x) = 1/M \sum_{i=1}^M \mathbb{I}(G_i^* \leq x)$.

Notar que si $F_n = F$, entonces $G(\mathbf{X}_n^*; F)$ es igual en distribución a $G(\mathbf{X}_n; F)$, es decir, $G_i^* \stackrel{d}{=} G$. Como se tiene una muestra aleatoria G_1^*, \dots, G_M^* , la f.d.e. $H_M(x)$ convergerá a H si $M \rightarrow \infty$, por el teorema de Glivenko-Cantelli. Por lo tanto, la aproximación del estimador bootstrap a la característica verdadera depende principalmente de la aproximación F_n que se proponga y no únicamente del tamaño muestral M .

Un caso sencillo es cuando X_1, X_2, \dots, X_n son variables aleatorias independientes. Dada una muestra aleatoria \mathbf{X}_n , el teorema de Glivenko-Cantelli establece que

$$\sup_t |F_n(t) - F(t)| \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{c.s.} 0,$$

donde $F_n(x) = 1/n \sum_{j=1}^n \mathbb{I}(X_j \leq x)$; es decir, la función de distribución de la que proviene la muestra, F , puede ser aproximada a través de la función de distribución empírica, F_n . Entonces, se puede proceder a muestrear con probabilidad $1/n$ las observaciones de la muestra original \mathbf{X}_n para obtener una muestra aleatoria de ella, lo que implica que la muestra es tomada con reemplazo. Es decir, se simulan n variables aleatorias I_k , $k = 1, 2, \dots, n$ con distribución uniforme discreta en $\{1, 2, \dots, n\}$, de manera que

$$\begin{aligned} P(X_{I_k}^* = X_i | \mathbf{X}_n) &= P(I_k = i) \\ &= \frac{1}{n}. \end{aligned}$$

Ejemplo 4.1.1 Sean X_1, X_2, \dots, X_n una muestra aleatoria con función de distribución común F tales que $E[|X_i|^2] < \infty$. Supóngase que $G = \bar{X}$, y que la característica que se desea estimar es la varianza de G , por lo que $T = t(H) = \int (x - \int udH)^2 dH$. El esquema bootstrap para estimar T es

1. Generar $I_{i,k} \sim U\{1, 2, \dots, n\}$, $k = 1, \dots, n$, $i = 1, 2, \dots, M$, para obtener las M muestras $\mathbf{X}_{i,n}^* = (X_{i,1}^*, X_{i,2}^*, \dots, X_{i,n}^*)$, donde $X_{i,k}^* = X_{I_{i,k}}$.
2. Calcular $G_i^* = 1/n \sum_{k=1}^n X_{i,k}^*$, $i = 1, \dots, M$.
3. Proporcionar el estimador bootstrap de T dado por $1/n \sum_{i=1}^n (G_i^* - \bar{G}_i^*)^2$.

En este ejemplo, la convergencia del estimador bootstrap depende parcialmente de M , pero si $n \rightarrow \infty$ ésta no se presentará.

El esquema de bootstrap previamente presentado es un esquema *no paramétrico*, debido a que no se realizó ningún supuesto respecto a F . Sin embargo, cuando se conoce la función F pero el problema recae en que no está totalmente especificada, se puede recurrir a un esquema *paramétrico* para aproximar F a través de F_n .

Ejemplo 4.1.2 *En el Ejemplo 4.1.1, supóngase que $X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$, donde μ y σ^2 son desconocidos. Contando con estimadores $\hat{\mu}$ y $\hat{\sigma}^2$, la aproximación F_n se toma como la función de distribución de una variable con distribución $N(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2)$ en vez de la función de distribución empírica. En este caso, la convergencia del estimador bootstrap dependerá de los estimadores de los parámetros y de la correcta especificación del modelo.*

4.2. Bootstrap para procesos estacionarios débilmente dependientes

Sean X_1, X_2, \dots, X_n variables aleatorias i.i.d. tales que $\text{Var}(X_i) = \sigma^2 < \infty$, de tal manera que

$$\text{Var}(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}. \quad (4.1)$$

Esto implica que la única función de distribución involucrada es la marginal de cada X_i , F ; sin embargo, cuando las variables X_1, \dots, X_n no son independientes

$$\text{Var}(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n} + 2 \sum_{i < j} \text{Cov}(X_i, X_j). \quad (4.2)$$

Esta ecuación involucra ahora las funciones de distribución del vector (X_i, X_j) , $i, j = 1, 2, \dots, n$, por lo que no es válida la aproximación F_n propuesta en el caso i.i.d.

Por lo general, los fenómenos indexados en el tiempo no cumplen que los elementos de \mathbf{X}_n sean variables aleatorias independientes o idénticamente distribuidas. No obstante, se han desarrollado métodos bootstrap para los *procesos estacionarios débilmente dependientes*, los cuales se describen a continuación.

En la Sección 3.1.1 se definió que un proceso estacionario, X_t , cumple que se preservan las distribuciones finito-dimensionales del proceso; este proceso es además *débilmente dependiente* si X_t es aproximadamente independiente de X_{t+h} conforme h aumenta. Así, X_t debe satisfacer al menos que $\gamma(h) = \text{Cov}(X_t, X_{t+h}) \rightarrow 0$ si $h \rightarrow \infty$ y se considerarán procesos tales que $\sum |\gamma(h)| < \infty$. La propiedad de estacionariedad junto con la de dependencia débil permiten derivar diversos métodos de remuestreo basados en el concepto de *bloques*, con el fin de habilitar el principio bootstrap.

4.2.1. Métodos no paramétricos

Al igual que en el caso de variables i.i.d., los siguientes métodos de remuestreo no involucran modelos para los procesos ni funciones de distribución explícitas asociadas a ellos, por lo que se trata de métodos no paramétricos. Esta característica hace más flexibles los supuestos necesarios para la correcta aproximación distribucional involucrada en el remuestreo.

Bootstrap por bloques sin traslape

Sea \mathbf{X}_n una serie de tiempo estacionaria débilmente dependiente. Considérese la partición de la serie en b bloques de longitud ℓ , dada por

$$\begin{aligned} Y_1 &= \{X_1, \dots, X_\ell\} \\ Y_2 &= \{X_{\ell+1}, \dots, X_{2\ell}\} \\ &\vdots \\ Y_b &= \{X_{n-\ell+1}, \dots, X_n\}. \end{aligned}$$

Por el momento se supondrá que $b = n/\ell$ es un número entero. Se observa que:

1. $Y_1 \stackrel{d}{=} Y_2 \stackrel{d}{=} \dots \stackrel{d}{=} Y_b$, por el supuesto de estacionariedad,
2. Y_1, \dots, Y_b son series aproximadamente independientes por el supuesto de dependencia débil, cuando ℓ es lo suficientemente grande.

Entonces, se cuenta con un conjunto de b bloques que son aproximadamente independientes e idénticamente distribuidos. Heurísticamente, esto sugiere que la f.d.e. de los bloques es una aproximación a F ; por lo tanto, la manera de remuestrear en el principio bootstrap para este caso se reduce a muestrear de manera uniforme y con reemplazo los subíndices $1, 2, \dots, b$ para obtener la muestra

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_n^* &\equiv Y_1^*, \dots, Y_b^* \\ &= X_1^*, X_2^*, \dots, X_n^*. \end{aligned}$$

Lo anterior es equivalente a obtener una muestra aleatoria de los bloques ya que

$$\begin{aligned} P(Y_i^* = Y_k | \mathbf{X}_n) &= P(I_i = k | \mathbf{X}_n) \\ &= \frac{1}{b}. \end{aligned}$$

Esto permite hacer una analogía con el caso de variables i.i.d., la cual se resume en el Cuadro 4.1.

V.a.i.i.d.	Bloques \approx i.i.d.
X_1, X_2, \dots, X_n	Y_1, Y_2, \dots, Y_b
$F_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}(X_i \leq x)$	$F_n(A) = \frac{1}{b} \sum_{i=1}^b \mathbb{I}(Y_i \in A)$
$P(X_i^* = X_k \mathbf{X}_n) = P(I_i = k \mathbf{X}_n)$ $= \frac{1}{n}$	$P(Y_i^* = Y_k \mathbf{Y}_b) = P(I_i = k \mathbf{Y}_b)$ $= \frac{1}{b}$

Cuadro 4.1: Puntos claves en el remuestreo utilizado en el principio bootstrap.

Para que el supuesto de dependencia débil sea válido se necesita que $l \rightarrow \infty$ y $l/n \rightarrow 0$, por lo que suele proponerse que $l = \lfloor n^\delta \rfloor$, $\delta \in (0, 1)$. En el caso en el que n no es un múltiplo de ℓ , b será el entero más grande que satisfaga que $b\ell \leq n$, y el i -ésimo bloque estará dado por

$$Y_i = (X_{(i-1)\ell+1}, \dots, X_{i\ell}).$$

Las observaciones $(X_{ib+1}, X_{ib+2}, \dots, X_n)$ no son tomadas en cuenta cuando se realiza el remuestreo. En la literatura, el método bootstrap con esta elección de bloques se conoce como *Non-Overlapping Blocks Bootstrap*, NOBB.

Ejemplo 4.2.1 *Supóngase que se tienen 15 observaciones del proceso estacionario débilmente dependiente X_t . Sea $\ell = 4$, de manera que la serie es particionada en tres bloques, tal como se muestra en la Figura 4.1. Para obtener $\mathbf{X}_{i,15}^*$, se requiere generar cuatro variables aleatorias con distribución uniforme discreta en el conjunto $\{1, 2, 3, 4\}$; si éstas fueron $I_{i,1} = 2$, $I_{i,2} = 3$, $I_{i,3} = 3$, $I_{i,4} = 1$, entonces*

$$\mathbf{X}_{i,15}^* = (X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_1, X_2, X_3).$$

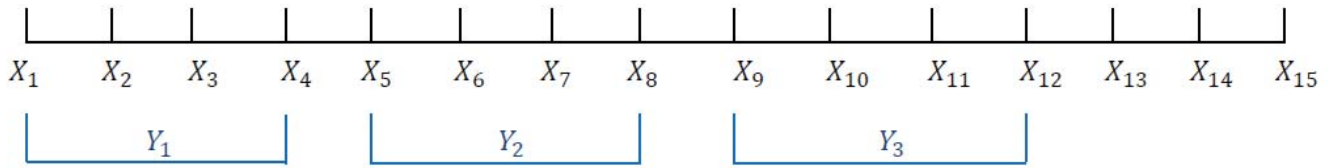


Figura 4.1: Esquema de bloques sin traslape.

Bootstrap por bloques con traslape

Para que la f.d.e. de los bloques converja a la función de distribución F es necesario que $b \rightarrow \infty$, pero tomar los bloques sin traslape proporciona un valor de b que depende tanto de n como de ℓ a través de un cociente. Por esta razón, ha sido desarrollado un esquema de partición de la serie en el que, para una longitud de bloque ℓ fija, se pretende obtener un mayor número de bloques sin tener que aumentar el tamaño de la muestra ([6]). Tal esquema consiste en tomar bloques que estén traslapados, los cuales son

$$Y_i = \{X_i, X_{i+1}, \dots, X_{i+\ell-1}\}, \quad i = 1, 2, \dots, n - \ell + 1. \quad (4.3)$$

Notar que en este caso $b = n - \ell + 1$. El esquema de remuestreo bajo esta modificación es el mismo, es decir, tomar una muestra de $Y_1, \dots, Y_{n-\ell+1}$ con probabilidad $1/b$, o bien, generar $I_1, \dots, I_b \sim U\{1, 2, \dots, b\}$ para obtener las M muestras

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{i,n} &= (Y_{I_1}, Y_{I_2}, \dots, Y_{I_b}) \\ &= (X_{i,1}^*, X_{i,2}^*, \dots, X_{i,n}^*). \end{aligned}$$

El método bootstrap basado en este esquema de creación de bloques se conoce como *Moving Block Bootstrap*, MBB. Los bloques con traslape son más dependientes entre ellos que los tomados sin traslape, por lo que la longitud de bloque a tomar en cada método es diferente. Asimismo, el estimador bootstrap T resultante de utilizar NOBB es diferente al obtenido a través de MBB; sin embargo, para algunos funcionales T , como la media muestral del proceso, la diferencia entre los dos métodos es despreciable cuando el tamaño de muestra es grande [6].

Ejemplo 4.2.2 Retomando el ejemplo 4.2.1, los 12 bloques en los que se divide la serie se muestran en la Figura 4.2, por lo que ahora se requiere generar cuatro variables aleatorias uniformes discretas sobre el conjunto $\{1, 2, \dots, 12\}$. Observando los mismos valores de $I_{i,1}, I_{i,2}, I_{i,3}, I_{i,4}$, se obtiene que

$$\mathbf{X}_{i,15}^* = (X_2, X_3, X_4, X_5, X_3, X_4, X_5, X_6, X_3, X_4, X_5, X_6, X_1, X_2, X_3).$$

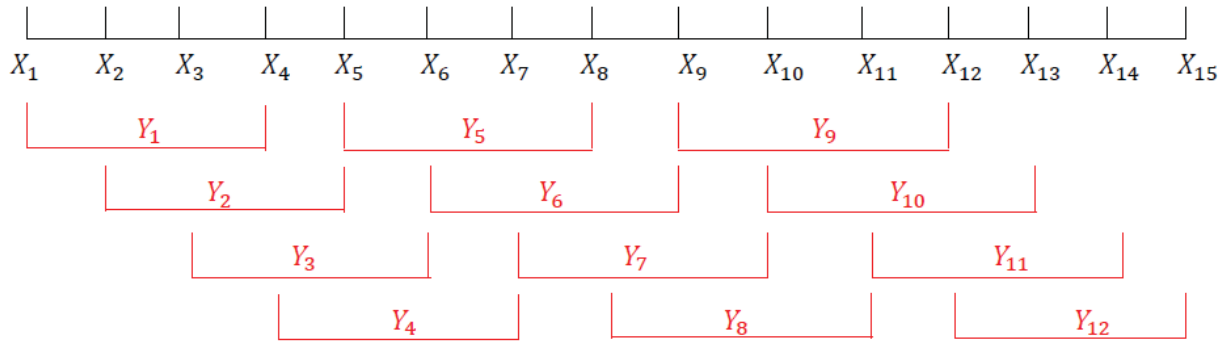


Figura 4.2: Esquema de bloques con traslape.

Método por bloques circulares

En el esquema utilizado en MBB, existe una desventaja para las primeras y las últimas $\ell - 1$ observaciones de la serie, ya que éstas forman parte de un menor número de bloques que las demás observaciones, las cuales aparecen en ℓ bloques. Esto implica que las observaciones no tienen la misma probabilidad de aparecer en la muestra para generar $\mathbf{X}_{i,n}^*$, $i = 1, 2, \dots, M$. Por ejemplo, en la Figura 4.2, las observaciones X_t , $t \in \{4, 5, \dots, 11, 12\}$, aparecen en cuatro bloques diferentes, mientras que X_t , $t \in \{1, 2, 3, 13, 14, 15\}$ sólo se encuentran en tres o menos bloques.

Para garantizar que todas las observaciones aparezcan en la misma proporción de bloques, ℓ/n , se propuso añadir $\ell - 1$ bloques dados por

$$\begin{aligned}
Y_{n-\ell} &= (X_{n-\ell+1}, \dots, X_{n-1}, X_n, X_1) \\
Y_{n-\ell+1} &= (X_{n-\ell+2}, \dots, X_n, X_1, X_2) \\
&\vdots \\
Y_n &= (X_n, \dots, X_{\ell-3}, X_{\ell-2}, X_{\ell-1}).
\end{aligned}$$

Notar que ahora $b = n$, y por lo tanto

$$P(Y_i^* = Y_k | \mathbf{X}_n) = P(I_i = k) = \frac{1}{n}.$$

Este método se denomina *Circular Block Bootstrap* en la literatura ([2], [6]), y también puede ser adaptado a bloques sin traslape, en donde el último bloque incluye a las observaciones que no son tomadas en cuenta cuando n/ℓ no es un valor entero. Este esquema para bloques con y sin traslape, se encuentra ejemplificado en las Figuras 4.3 y 4.4, respectivamente.

Ejemplo 4.2.3 *Bajo el esquema de bloques circulares, la misma serie del ejemplo 4.2.2 se particiona ahora en 15 bloques, tal como se muestra en la Figura 4.3. Al igual que en los casos anteriores, es necesario generar cuatro variables aleatorias independientes con distribución uniforme discreta sobre el conjunto $\{1, 2, \dots, 14, 15\}$. Si los valores obtenidos fueran los mismos que en el ejemplo 4.2.2, la serie remuestreada $\mathbf{X}_{i,15}^*$ sería la misma que la presentada previamente. Sin embargo, para la longitud de bloque seleccionada ahora se puede obtener la serie*

$$\mathbf{X}_{i,15}^* = (X_1, X_2, X_3, X_4, X_{15}, X_1, X_2, X_3, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_1, X_7, X_8, X_9),$$

lo cual no era posible bajo el esquema anterior. Retomando los bloques sin traslape, el esquema circular añade un cuarto bloque dado por $Y_4 = (X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_1)$, como se observa en la Figura 4.4; así, todas las observaciones son utilizadas, y b en este caso tomará el valor $\lfloor n/\ell \rfloor + 1$, el cual para este ejemplo es igual a 4.

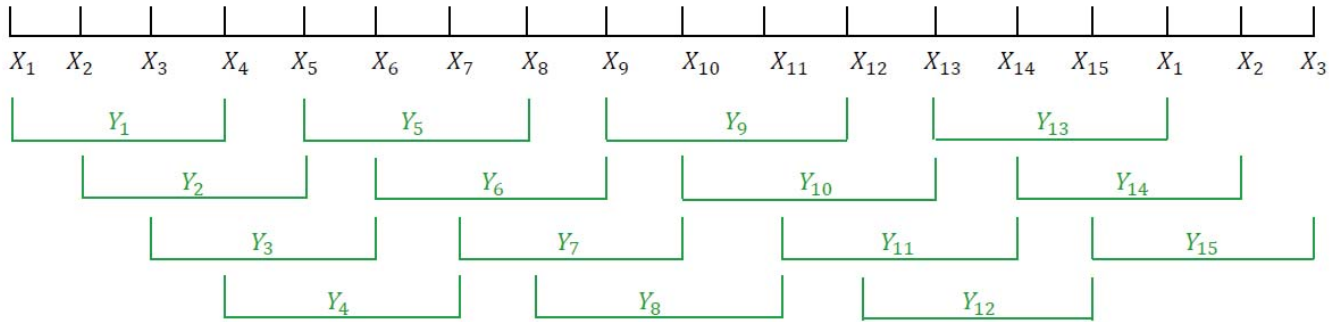


Figura 4.3: Esquema de bloques circulares con traslape.

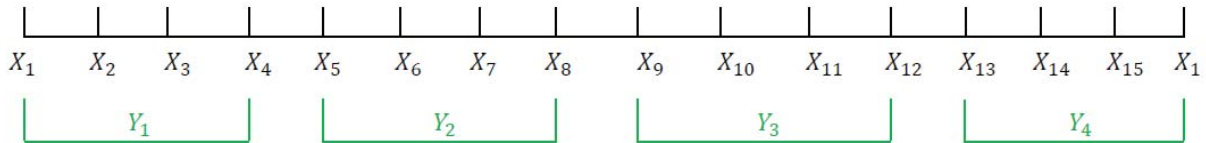


Figura 4.4: Esquema de bloques circulares sin traslape.

Bootstrap estacionario

En los métodos presentados previamente, la longitud de bloque ℓ permanece como un valor fijo, y las series remuestreadas $\mathbf{X}_{i,n}^*$ no son estacionarias, a pesar de que la serie original sí lo es. Esto se aprecia en el Ejemplo 4.2.1, ya que no obstante $(X_1^*, X_2^*, X_3^*, X_4^*) = (X_5, X_6, X_7, X_8)$ es igual en distribución que $(X_5^*, X_6^*, X_7^*, X_8^*) = (X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12})$, no lo es respecto del bloque $(X_{11}^*, X_{12}^*, X_{13}^*, X_{14}^*) = (X_{11}, X_{12}, X_1, X_2)$. El método de bootstrap estacionario, mejor conocido en inglés como *Stationary Block Bootstrap*, SBB, [10], tiene la propiedad de que la serie remuestreada preserva la propiedad de estacionariedad de la original. La idea básica es definir la longitud de bloque, L , como una variable aleatoria con distribución geométrica de parámetro p , de manera que

$$P(L = k) = p(1 - p)^{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

El índice de la observación en la que comienza el r -ésimo bloque se elige de manera aleatoria, y tendrá la longitud de la r -ésima variable aleatoria geométrica generada. Además, la variable aleatoria L es independiente del índice en el que comienza el bloque. Notar que un valor p muy

pequeño conllevará a una media de longitud de bloque muy grande, pero al igual que en el caso de la longitud de bloque fija, se requiere un número grande de bloques; es por ello que se propone que p dependa de n y cumpla que $p \rightarrow 0$ y $np \rightarrow \infty$ cuando $n \rightarrow \infty$ (ver [6]), como por ejemplo $p = n^{-\delta}$ tomando $\delta \in (0, 1)$.

Ejemplo 4.2.4 *A diferencia de los esquemas de remuestreo presentados previamente, la longitud de bloques no es fija por lo que el número de bloques, b , es también una variable aleatoria. Ahora es necesario generar b variables aleatorias uniformes en $\{1, 2, \dots, n\}$ y b variables aleatorias con distribución geométrica de parámetro p . Supóngase que los valores obtenidos al generarse las variables con distribución geométrica son 6, 4, 1, 4, y las cuatro variables aleatorias uniformes generadas resultaron en los valores 9, 1, 6, 13, lo cual puede ser observado en la Figura 4.5. Entonces,*

$$\mathbf{X}_n^* = (X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_1, X_2, X_3, X_4, X_6, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_1).$$

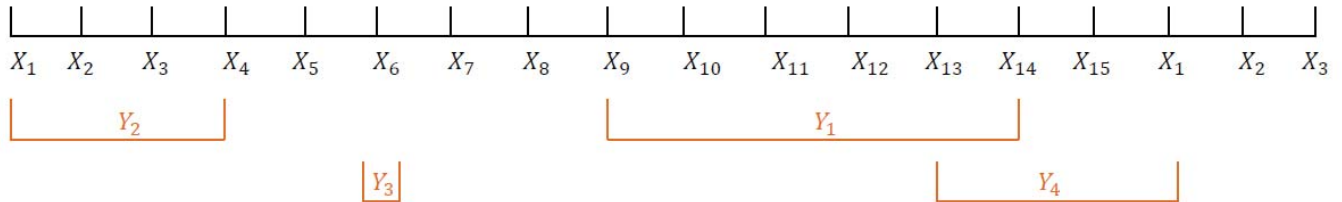


Figura 4.5: Esquema de bloques circulares cuya longitud tiene una distribución geométrica.

Para la implementación computacional de este método se puede recurrir a la génesis de una variable aleatoria geométrica, la cual se refiere al número de ensayos Bernoulli independientes necesarios hasta obtener un éxito. De esta manera, el remuestreo puede ser resumido en los siguientes pasos:

1. Generar una variable aleatoria con distribución uniforme discreta en $\{1, 2, \dots, n\}$, R_1 , de manera que $X_1^* = X_{R_1}$.

2. Generar una variable aleatoria Bernoulli de parámetro p . Si ésta vale 0, entonces X_2^* será igual a X_{R_1+1} . En caso contrario, se genera una nueva variable aleatoria uniforme discreta, R_2 , y X_{R_2} es el nuevo valor de X_2^* .
3. El paso anterior se repite nuevamente, para determinar el valor X_3^* . En general, dado un valor $X_i^* = X_R$, se genera una variable aleatoria Bernoulli; si el valor generado resulta uno, X_{i+1}^* será igual a X_{R+1} . De lo contrario, se genera una variable aleatoria uniforme en $\{1, 2, \dots, n\}$, B , y X_{i+1}^* será X_B . Esto se repite hasta que $i = n$.

Bloques de bloques

Propiamente establecido, el esquema de bloques de bloques es una manera de preservar ciertas propiedades deseables para estadísticas que tienen una estructura en particular y no propone un esquema nuevo de remuestreo. Sea $S(k)$ una estadística que involucra observaciones con una estructura dependiente de k ; por ejemplo, la función de autocovarianza muestral, $\hat{\gamma}(k)$. Este estimador involucra observaciones k espaciadas en los términos $(X_{t+k} - \bar{X})(X_t - \bar{X})$; sin embargo, las observaciones X_{t+k}^* y X_t^* pueden estar espaciadas por valores considerablemente diferentes a k , lo que afecta las características de $\hat{\gamma}^*(t)$. Para reducir este inconveniente se propone (ver [2], [6]) estructurar la serie como el bloque

$$\begin{pmatrix} Z_{1,1} & Z_{1,2} & \dots & Z_{1,n-k} \\ Z_{2,1} & Z_{2,2} & \dots & Z_{2,n-k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & \dots & X_{n-k} \\ X_{k+1} & X_{k+2} & \dots & X_n \end{pmatrix}.$$

El método requiere remuestrear la serie \mathbf{Z}_1 con cualquiera de los métodos previamente expuestos, pero se forma la muestra bivariada $(Z_{j,1}^*, Z_{j,2}^*) = (Z_{1,r}, Z_{2,r})$, $j = 1, 2, \dots, M$, $i = 1, 2, \dots, n - k$. Así,

$$\hat{\gamma}_j^*(k) = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^{n-k} (Z_{j,1,i}^* - \bar{Z}_{j,1}^*) (Z_{j,2,i}^* - \bar{Z}_{j,2}^*).$$

Ejemplo 4.2.5 Retomando la serie $\mathbf{X}_{i,15}^*$ del ejemplo 4.2.1, para $k = 1$,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Z}_{j,1}^* \\ \mathbf{Z}_{j,2}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_1, X_2, X_3 \\ X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_2, X_3, X_4 \end{pmatrix}.$$

Este método puede ser adaptado directamente para rescatar la estructura de observaciones τ espaciadas de la varianza de Allan; sin embargo, debido a que la serie \mathbf{X}_t es un proceso integrado, es incorrecto obtener réplicas utilizando los métodos para procesos estacionarios, como son los métodos basados en bloques. Aunque más adelante se comentará cómo llevar al cabo el remuestreo en este escenario, rescatar la estructura para formar los bloques de bloques no es tan natural como lo sería si se tratara de un proceso estacionario.

4.2.2. Método paramétrico

Como se mencionó previamente, los métodos anteriores no requieren del conocimiento explícito de la distribución finito dimensional asociada a cada bloque, por lo que todos son métodos no paramétricos. Sin embargo, cuando se conoce explícitamente el modelo que rige al proceso, es posible obtener mejores estimaciones utilizando este modelo en la técnica de remuestreo en lugar del enfoque no paramétrico. Por ejemplo, sea X_t un proceso autorregresivo de orden uno; en particular,

$$X_t = \phi X_{t-1} + \varepsilon_t \quad (4.4)$$

donde ε_t es ruido blanco con observaciones independientes. Supóngase que se tienen observaciones para $t = 1, 2, \dots, n$. En este caso, basta identificar X_1 y remuestrear $\varepsilon_t = X_t - X_{t-1}$, $t = 2, 3, \dots, n$ para poder obtener una réplica del proceso X_t a través de la ecuación (4.4). Bajo el supuesto de que las variables $\varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ son idénticamente distribuidas, el remuestreo del proceso ε_t puede realizarse de la manera que se comentó en la Sección 4.1 con el fin de obtener la serie ε_t^* ; notar que $X_1^* = X_1$. Por lo general, el parámetro ϕ es desconocido y se requiere un estimador para el mismo, pero dado un estimador adecuado, se espera que los errores de estimación dados por $e_t = X_t - \hat{\phi}X_{t-1}$, $t = 2, \dots, n$, sean una buena aproximación de ε_t ; los errores e_t suelen ser centrados $e_t - \bar{e}$ para preservar la media de ε_t . Entonces se realiza el remuestreo de $e_t - \bar{e}$, $t = 2, \dots, n$ como se ha especificado, y se obtienen las réplicas por medio de $X_t^* = \phi X_{t-1}^* + \varepsilon_t^*$.

El método de remuestreo paramétrico puede ser resumido en los siguientes pasos:

1. Identificar un modelo adecuado para los datos.
2. Estimar los parámetros del modelo.
3. Remuestrear los residuos centrados como se indica en la Sección 4.1.
4. Simular del modelo estimado utilizando los residuos remuestreados.

Es importante mencionar que en la práctica no es simple tener la certeza de que el modelo está correctamente especificado. Un modelo mal especificado y/o estimado, produce residuos que no son ruido blanco e incluso que no son un proceso estacionario, lo que provoca que el remuestreo de los residuos como se menciona, sea incorrecto y los resultados no sean confiables. En el Capítulo 5 se mostrará con un ejemplo cómo un modelo mal especificado afecta los resultados mostrados.

4.2.3. Método semiparamétrico

El método semiparamétrico es una alternativa más flexible que el método paramétrico, ya que considera la estructura de dependencia que pudiera estar presente en los errores e_t . El remuestreo bajo este método se resume de la siguiente manera:

1. Identificar un modelo adecuado para los datos.
2. Estimar los parámetros del modelo.
3. Remuestrear los residuos centrados utilizando un método basado en bloques.
4. Simular del modelo estimado utilizando los residuos remuestreados.

Este método, aunque reduce el efecto de ruido agregado que presentan los métodos no paramétricos, presenta la misma dificultad para la determinación de la longitud de bloque que los métodos basados en bloques. Asimismo, aunque la especificación del modelo es menos rigurosa que en el método paramétrico, no se permite tener un modelo completamente erróneo, como por ejemplo proponer un modelo estacionario para una serie integrada.

4.3. Comentarios sobre la longitud de bloque y extensión al caso multivariado

El principal problema de los métodos basados en bloques es la determinación del parámetro que determina la longitud del bloque, sea ℓ ó p . En referencias como [6] y [2] se propone minimizar el Error Cuadrático Medio de la estadística de interés G , la cual tiene una expresión conocida pero no totalmente determinada gracias a un resultado asintótico. La determinación completa de esta expresión depende de unas constantes, las cuales son determinadas de acuerdo con el tipo de estadística con la que se trabaje. Estas constantes son conocidas para casos como el sesgo y la varianza; sin embargo, el objetivo de este trabajo no es desarrollar tal resultado para la varianza de Allan, ni para la varianza absoluta. En el Capítulo 5 se abordará la determinación experimental de los parámetros correspondientes a la longitud de bloque con la que se realiza el remuestreo.

Por otro lado, el problema que sí aborda la tesis es habilitar un enfoque multivariado para el estudio del ensamble de relojes del CENAM. Para ello no sólo se quiere considerar la estructura de dependencia del proceso $\mathbf{X}_{ki}(t)$ asociado a cada diferencia de relojes, se quiere además rescatar la posible correlación que tengan estas diferencias. Para abordar el problema de manera paramétrica, se requeriría el estudio de modelos multivariados de series de tiempo, lo que dificulta la implementación futura por parte del CENAM de la metodología propuesta. Es por ello que en el siguiente capítulo se le dará relevancia a los métodos basados en bloques. Para la serie de cada reloj existe una longitud de bloque óptima; lo que se desarrollará en el Capítulo 5 es la determinación empírica de una longitud de bloque común a todas las series \mathbf{X}_{kr} , $k = 1, 2, 3$ a través de una medida que será propuesta más adelante.

4.4. Bootstrap para procesos integrados de orden uno

En el análisis exploratorio realizado en el Capítulo 3, se determinó que las series \mathbf{X}_{kr} son procesos integrados de orden uno, es decir, la primera diferencia de estos procesos es una serie

débilmente estacionaria. Como se comentó previamente, es erróneo aplicar métodos de remuestreo de procesos estacionarios a procesos que no lo son, pues no se cumplen las propiedades que se utilizaron para garantizar la convergencia del estimador tipo bootstrap. No obstante, la propiedad de la primera diferencia permite que ésta pueda ser remuestreada con cualquiera de los métodos de la Sección 4.2 (sin especificar de manera explícita distribución finito dimensional alguna).

Sea Y_t la primera diferencia del proceso integrado de orden uno, X_t , lo cual se representa en la siguiente ecuación:

$$Y_t = X_{t+1} - X_t, \quad t = 1, 2, \dots, n - 1.$$

Entonces, se cumple la relación

$$X_{t+1} = Y_t + X_t. \quad (4.5)$$

El siguiente algoritmo contiene los pasos para obtener una réplica del proceso X_t :

1. Obtener M réplicas del proceso $\{Y_t\}_{t=1}^{n-1}$ utilizando un método de la Sección 4.2.
2. Definir $X_{i,1}^* = X_1$, $i = 1, 2, \dots, M$.
3. Utilizar la relación (4.5) para obtener $X_{i,t}^*$, $t = 2, 3, \dots, n$ a través de la ecuación $X_{i,t}^* = Y_{i,t-1}^* + X_{i,t-1}^*$.

Este método de remuestreo puede ser extendido a procesos integrados de orden d . Los detalles de la generalización, así como pruebas bootstrap no paramétricas para estacionariedad, pueden encontrarse en [12].

4.5. Intervalos de confianza y pruebas de hipótesis vía bootstrap

Esta sección servirá para el desarrollo del ejemplo base de la presente tesis, el cual corresponde a la comparación de dos relojes virtuales. Dado un parámetro $\theta = t(\theta)$ desconocido, resulta de

interés no sólo obtener un estimador puntual, como por ejemplo $T = t(F)$, sino también asignar un nivel de incertidumbre asociado a esta estimación. Usualmente este nivel se reporta a través de un intervalo de confianza; sin embargo, existen preguntas que por su naturaleza sugieren el uso de pruebas de hipótesis. En la comparación de dos relojes virtuales, dado que se requiere tomar una decisión respecto a qué reloj utilizar, lo apropiado es recurrir a una prueba de hipótesis. No obstante, debido a la dificultad que se presenta en la resolución de pruebas de hipótesis bajo ciertas metodologías, como se verá más adelante, es posible recurrir al *teorema de inversión* para responder la pregunta a través del uso de intervalos de confianza.

Teorema 4.5.1 Sea $H : \theta = \theta_0$ la hipótesis a probar, D la estadística de prueba y \mathcal{C} una región crítica tal que $\alpha = P(D \in \mathcal{C} | H)$. Entonces $I = \{\theta_0 | D \notin \mathcal{C}\}$ es un conjunto de confianza $1 - \alpha$ para θ . Asimismo, si I es un conjunto de confianza $1 - \alpha$ para θ , entonces la prueba que rechaza la hipótesis $H : \theta = \theta_0$ si y sólo si $\theta_0 \notin I$ es una prueba de nivel α .

Para ambos escenarios, intervalos de confianza y pruebas de hipótesis, se suele requerir una cantidad pivotal o una estadística de prueba de la que se conozca su distribución, incluso si sólo es un resultado asintótico. Por ejemplo, para obtener un intervalo de confianza para el parámetro μ , en presencia de condiciones de regularidad, se utiliza la distribución asintótica del pivote $(\bar{X} - \mu)/\sigma$, la cual se justifica por medio del teorema central del límite. Sin embargo, existen funcionales más complicados para los que se desconoce un resultado explícito, como es el caso de la varianza absoluta. Por esta razón, se han desarrollado métodos bootstrap para abordar tales problemáticas. A continuación se presenta un resumen sobre las ideas detrás de estos métodos.

4.5.1. Intervalos de confianza

Sea $G = G(X_t; F)$ un estimador para el parámetro desconocido θ , tal que se desconoce su distribución muestral. La manera intuitiva de obtener un intervalo de confianza $1 - \alpha$ para θ utilizando el método bootstrap, es a través de los cuantiles empíricos de G . Para estimar los cuantiles de G en el caso de variables aleatorias i.i.d. se prosigue según los pasos planteados en

la Sección 4.1 definiendo $T = 1/M \sum_{i=1}^M \mathbb{I}(G_i^* \leq x)$; como T se aproxima a $F_G(x)$, se espera que los cuantiles obtenidos de T se aproximen también a los cuantiles de G . Si $(G - L_S, G - L_I)$ es un intervalo de confianza $1 - \alpha$ para θ , entonces se cumple que

$$P(L_I \leq G - \theta \leq L_S) = 1 - \alpha.$$

La estimación de L_I y L_S se puede abordar por medio del principio bootstrap aplicado para la distribución, o bien, los cuantiles, de $G - \theta$. Notar que G es una aproximación a θ , por lo que la distribución de $G - \theta$ es aproximada a través de $G_M^* - G$. Se puede demostrar que los percentiles $\alpha/2\%$ de $G_M^* - G$ son iguales a $T_{(\alpha/2M)}^* - G$, donde $T_{(\alpha/2M)}^*$ denota los cuantiles obtenidos de T , previamente definido. Por lo tanto, $L_I = T_{(\alpha/2M)}^* - G$ y $L_S = T_{((1-\alpha/2)M)}^* - G$, y la aproximación del intervalo de confianza $1 - \alpha$ para θ es

$$(2G - T_{((1-\alpha/2)M)}^*, 2G - T_{(\alpha/2M)}^*).$$

Este intervalo se conoce como el *intervalo bootstrap básico*. La aproximación de los cuantiles depende de qué tan cerca está $G - \theta$ de ser una cantidad pivotal. En ocasiones $G - \theta$ no es una cantidad pivotal, pero $(G - \theta)/\sqrt{\nu}$ sí lo es para algún valor ν , como por ejemplo la varianza, por lo que los cuantiles de interés son los correspondientes a esta cantidad. El intervalo a determinar tendrá la estructura

$$(G - \sqrt{\nu}L_S, G - \sqrt{\nu}L_I).$$

Este tipo de intervalo se conoce como *intervalo bootstrap estudentizado*. Para el remuestreo de este cociente no es suficiente tomar la aproximación $G_M^* - G$ ya que para cada valor G_M^* se requiere un valor de ν^* . Este valor puede ser obtenido mediante la implementación de bootstraps anidados, lo cual resulta computacionalmente ineficiente. Una manera alternativa consiste en estimar $\text{Var}(G|F_n)$ y requiere la noción de la curva de influencia empírica. Los detalles teóricos no serán cubiertos en el presente trabajo, pero pueden ser consultados en [2]. De manera más general, si P es una cantidad (aproximadamente) pivotal, el objetivo es aproximar su distribución para a su vez aproximar los cuantiles requeridos en el intervalo resultante.

4.5.2. Pruebas de hipótesis

Para la realización de pruebas de hipótesis existen metodologías paramétricas y no paramétricas. Por razones discutidas en el capítulo siguiente, se hará énfasis en los métodos no paramétricos; sin embargo, el lector interesado en estudiar los métodos paramétricos puede referirse a [2].

Sea H la hipótesis tal que, dadas k distribuciones, impone una restricción del tipo $H : t(F_1, F_2, \dots, F_k) = 0$, como por ejemplo $\sigma_1 = \sigma_2$. El objetivo es encontrar la distribución conocida \hat{F}_i que sea el máximo verosímil de F sujeto a H ; sin la restricción H , el máximo verosímil de F es la f.d.e. El problema se convierte entonces en minimizar la distancia entre la función F_i y la función \hat{F}_i , la cual tiene como soporte las observaciones de la muestra, $x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,n_i}$, $i = 1, 2, \dots, k$, y $\hat{p}_i = (p_{i,1}, p_{i,2}, \dots, p_{i,n_i})$ como vector de probabilidades asociado. Es importante también establecer la medida de discrepancia que se utilizará; una propuesta es la divergencia Kullback-Leibler, dada por

$$d(F_i, \hat{F}_i) = \sum_{j=1}^{n_i} p_{i,j} \log \left(\frac{p_{i,j}}{\hat{p}_{ij}} \right). \quad (4.6)$$

Sujeto a H , se necesita minimizar

$$\sum_{i=1}^k d(F_i, \hat{F}_i) - \lambda t(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_k) - \sum_{i=1}^k \alpha_i \left(\sum_{j=1}^{n_i} p_{i,j} - 1 \right).$$

Una vez determinados los valores de \hat{p}_i , $i = 1, 2, \dots, k$, éstos se utilizan para obtener las réplicas $\mathbf{X}_{i,l}^*$, $i = 1, 2, \dots, k$, $l = 1, 2, \dots, M$, de los cuales se calculan las M estadísticas de prueba $D_1^*, D_2^*, \dots, D_M^*$. El p -valor obtenido con este método está dado por

$$p = \frac{\#(D^* > D) + 1}{M + 1}$$

donde D es la estadística de prueba calculada con la muestra original. Este p -valor no cumple necesariamente la propiedad de distribución uniforme que se espera de un p -valor; por ello surge una manera de ajustar éste valor para que se aproxime más a la distribución uniforme. La idea reside nuevamente en bootstraps anidados, lo cual es computacionalmente poco eficiente. El p -valor resultante de este ajuste se conoce como p -valor ajustado. Los detalles teóricos y

algorítmicos pueden ser consultados en [2].

Con acuerdo en lo comentado sobre intervalos de confianza y pruebas de hipótesis, se presenta una dificultad en las pruebas de hipótesis, ya que la varianza absoluta es resultado de un proceso computacional que complica la minimización de la ecuación (4.6). Además la función F_i correspondería ahora a la de un proceso estacionario y no a un conjunto de variables independientes e idénticamente distribuidas. Por lo tanto, establecer intervalos de confianza es un enfoque más directo de abordar y, aunque se cuenta con el teorema de inversión, éste no permite determinar el p -valor asociado a la prueba, lo cual sugiere que un problema abierto será desarrollar la forma de aprovechar el bootstrap para calcular esta cantidad en primera instancia.

Capítulo 5

Bootstrap no paramétrico para ensambles

En el capítulo anterior se expusieron diferentes métodos para el remuestreo de procesos estacionarios débilmente dependientes, todos ellos con la finalidad de propiciar la implementación del principio bootstrap para este tipo de procesos. Tras haber establecido lo anterior, el objetivo de este capítulo es adaptar este método para realizar inferencia estadística sobre parámetros del ensamble de relojes del CENAM.

Para cuantificar el desempeño del bootstrap propuesto, se necesita convenir en una manera de evaluar la fidelidad del remuestreo con relación a los datos originales del ensamble. El concepto adoptado para tal fin en esta tesis es la varianza de Allan correspondiente al error en el tiempo de cada reloj del ensamble respecto al reloj de referencia. La justificación para asumir este instrumento como referencia radica en su relación directa con la varianza absoluta, utilizada en la comparación de dos relojes virtuales, así como la interpretabilidad bien conocida que tiene en metrología. Una vez establecido que la estadística de interés es la varianza de Allan, un instrumento natural para comparar el desempeño del método bootstrap es la gráfica log-log (ver Sección 2.1.4), ya que es de fácil interpretación para el CENAM y permite estudiar los efectos de modificar la ventana de observación, τ , en la varianza de Allan. Es decir, permite analizar la

estabilidad de los relojes tanto en el corto como en el largo plazo.

Recordando lo expuesto en el Capítulo 4, una de las principales desventajas de un enfoque paramétrico recae en la posibilidad de identificar incorrectamente el modelo que describe apropiadamente a los datos. De la misma manera, los métodos basados en bloques tampoco están exentos de defectos, presentando una desventaja al tener que especificar los parámetros que establecen la longitud de bloque, sea ésta fija o aleatoria. Existen pruebas para establecer qué conjunto de modelos, o modelo, proporcionan un mejor ajuste para un conjunto de datos, por lo que un enfoque que se podría abordar en la presente tesis, es la determinación de un modelo adecuado para el ensamble. Sin embargo, debido a que una de las finalidades de este trabajo es promover una solución general al problema planteado por el CENAM, es pertinente considerar las limitaciones que puedan surgir en caso de realizar un cambio en el ensamble, como la incorporación de un reloj o el reemplazo de otro por uno nuevo. Por ello, aunque en primera instancia, la identificación de un proceso débilmente estacionario y débilmente dependiente — o bien, de un proceso integrado — es necesaria e inevitable, es preferible proponer un método que sea flexible en sus supuestos y permita su fácil implementación con conocimiento estadístico básico. Como se mencionó en el capítulo previo, el enfoque paramétrico es capaz en general de proporcionar mejores resultados, a cambio de suposiciones más restringidas y mayor trabajo en los temas de identificación de modelos y estimación de parámetros. Los métodos basados en bloques no precisan de tales suposiciones y por ende son de aplicabilidad más general. Por esta razón se decidió enfocar la metodología en los métodos no paramétricos para este problema en particular.

Previamente se han expuesto diversos métodos basados en la noción de bloques, pero debido a la gran cantidad de datos con los que se trabaja y el tiempo de cómputo que requiere remuestrearlos, no se implementarán exhaustivamente todos ellos en este proyecto. Esta tesis se concentrará sólo en dos de los métodos con más viabilidad de éxito a la luz del contexto y los resultados del análisis exploratorio de datos. Incluirá la implementación de un método con longitud de bloque fijo, y el *Stationary Bootstrap*, SB. De entre los métodos de longitud de

bloque fija, se ha seleccionado el método *Circular Moving Block Bootstrap*, CMBB, debido a que proporciona el mayor número de bloques y todas las observaciones son parte del mismo número de bloques. Sin embargo, un detalle será la determinación de los parámetros que influyen en la longitud de bloque, los cuales son ℓ y b . Debido a las complicaciones que conlleva la deducción de una expresión analítica para la determinación de estos parámetros, se opta por un enfoque experimental. Se pretende estudiar los efectos de variar ℓ y b , sobre la gráfica log-log, que como se ha explicado, será la manera de juzgar la precisión del remuestreo. Visualmente puede resultar difícil apreciar qué longitud de bloque reproduce mejor el comportamiento de esta gráfica, por lo que más adelante se introducirá una medida de discrepancia entre las réplicas bootstrap y la gráfica log-log observada de los datos originales, ello con el fin de determinar qué parámetro es óptimo para replicar el comportamiento de la varianza de Allan observada. Es pertinente comentar que este estudio a realizar a través de programación computacional, no involucrará el cálculo de la varianza absoluta, sino que será simplificado al estudio de la varianza de Allan, es decir, un paso previo a la varianza absoluta.

5.1. Caso de estudio: Gráfica log-log

La primera parte de esta sección pretende mostrar cómo la gráfica log-log es sensible, aún visualmente, a un modelo mal especificado, como parte de las consecuencias de realizar un remuestreo incorrectamente. La segunda parte ejemplificará el esquema de remuestreo del ensamble para los dos métodos propuestos, experimentando con diferentes valores de los parámetros ℓ y p .

5.1.1. Remuestreo utilizando un modelo erróneo.

Supóngase que el modelo propuesto para la diferencia entre los errores en el tiempo entre los relojes es

$$X_t = \beta_0 + \beta_1 t + \varepsilon_t,$$

donde ε_t son variables aleatorias independientes. Este modelo de regresión es el mismo de la ecuación (3.1), por lo que de la Figura 3.6 se aprecia que los residuos no son independientes y el modelo especificado es incorrecto, no obstante da lugar a un esquema semiparamétrico sencillo y conocido. Ahora se procede a realizar el remuestreo de la serie X_t , la cual por simplicidad será la serie CsK(t)–CsL(t), de la siguiente manera:

1. Ajustar por mínimos cuadrados ordinarios el modelo (3.1) para obtener estimadores de los parámetros β_0 y β_1 .
2. Remuestrear los residuos centrados $\hat{e}_t - \bar{\hat{e}}_t$ como se especificó en la Sección 4.1, donde $e_t = X_t - \hat{X}_t$.
3. Obtener las réplicas mediante $\mathbf{X}_t^* = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 t + \mathbf{e}_t^*$.

Una vez obtenidas las M réplicas \mathbf{X}_t^* , en este caso 1000, se procedió a calcular la varianza de Allan para $\tau \in \{10, 600, 3600, 223\ 870, 400\ 000, 630\ 950, 691\ 010, 765\ 010, 837\ 220\}$, por lo que se obtuvo un vector de dimensión 9×1 de varianzas estimadas $\hat{\sigma}^*(\tau)$ para diferentes valores de τ . Con estos valores es posible realizar la gráfica log-log para las réplicas y compararla con la gráfica log-log observada, tal como se muestra en la Figura 5.1. Cabe mencionar que conceptualmente, el valor de τ realmente ocurre sobre un continuo de valores; el hecho de que se haya limitado sólo a nueve valores obedece simplemente a un asunto de factibilidad computacional, en virtud de que el objetivo es examinar la tendencia como función de τ .

En esta figura, la línea roja muestra las varianzas de Allan calculadas de la serie original, mientras que las líneas turquesas representan las varianzas de Allan obtenidas para cada una de las 1000 réplicas realizadas. Se aprecia que la nube de líneas turquesa no tiene la misma pendiente que la línea roja, y en particular para valores de τ menores a 223 870, los valores replicados no se acercan a los valores observados. Notar que, aunque para los demás valores de τ , los valores entre réplicas y observaciones son cercanos, la nube turquesa no cubre la línea

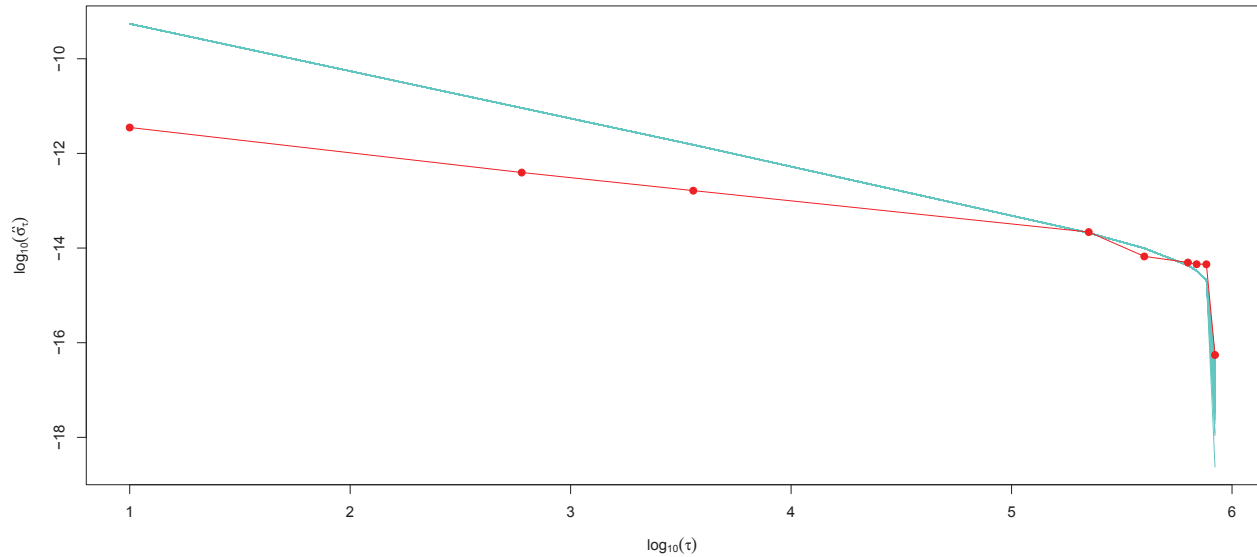


Figura 5.1: Gráfica log-log obtenida mediante remuestreo i.i.d.

roja, por lo que en promedio, las réplicas no reproducen la línea observada. Esto ejemplifica que ante un modelo totalmente errado, la gráfica log-log no es correctamente reproducida, lo cual es visualmente apreciable.

5.1.2. Remuestreo del ensamble mediante CMBB

Como se estableció previamente, uno de los objetivos de esta sección es implementar el método CMBB con una longitud de bloque ℓ utilizando los datos del ensamble, a través de un enfoque multivariado de fácil aplicación. Sea $X_t^{ri} \equiv h_r(t) - h_i(t)$, donde r es el reloj CsK e $i = 1, 2, 3$ representan a los relojes a CsL, Maser y CsM, respectivamente; sea ℓ un valor establecido. Notando que para la base de datos proporcionada, $n = 167\,446$, el esquema a seguir para obtener una réplica del ensamble, se describe a continuación:

1. Obtener la primera diferencia de $Z_t^{ri} \equiv X_{t+1}^{ri} - X_t^{ri}$, $i = 1, 2, 3$, $t = 1, 2, \dots, n - 1$.

2. Construir las series $\mathbf{Z}'_{n+\ell-1}$, $i = 1, 2, 3$, en las cuales

$$Z'_t{}^{ri} = \begin{cases} Z_t^{ri}, & \text{si } t \leq n; \\ Z_{t-n}^{ri}, & \text{si } t > n. \end{cases}$$

3. Generar $k = \lceil n/\ell \rceil$ variables $I_1, I_2, \dots, I_k \sim U\{1, 2, \dots, n\}$ para construir los bloques $Y_j^{ri} \equiv \{Z'_{I_j}{}^{ri}, Z'_{I_j+1}{}^{ri}, \dots, Z'_{I_j+\ell}{}^{ri}\}$, $j = 1, 2, \dots, k$, $i = 1, 2, 3$.
4. Construir las series $\mathbf{Z}^{*ri}_{n-1} \equiv \{Y_1^{ri}, Y_2^{ri}, \dots, Y_k^{ri}\}$, utilizando únicamente las observaciones necesarias de Y_k^{ri} para que la serie \mathbf{Z}^{*ri}_{n-1} esté conformada exactamente por $n - 1$ réplicas.
5. Definir $X_1^{*ri} = X_1$ y $X_t^{*ri} = X_{t-1}^{*ri} + Z_{t-1}^{*ri}$, $t = 2, 3, \dots, n$, $i = 1, 2, 3$.

Para cada réplica \mathbf{X}_n^{*ri} obtenida se calcula la correspondiente varianza de Allan $\hat{\sigma}_{ri}^*(\tau)$, considerando $\tau = 10, 600, 3600, 223\ 870, 400\ 000, 630\ 950, 691\ 010, 765\ 010, 837\ 220$, y se presenta la gráfica log-log. En esta ejemplificación se escogió $M = 1000$. Asimismo, para estudiar los efectos del valor de ℓ tanto en la varianza de Allan como en la gráfica log-log, se implementó el algoritmo anterior para diferentes valores de ℓ , dados por 5, 10, 100, 500, 1000, 2500, 10 000, 100 000.

En las Figuras 5.2, 5.3 y 5.4 se muestran las réplicas log-log para $\ell = 5$ y $\ell = 100\ 000$, correspondientes a cada diferencia de hora entre relojes. Las gráficas para los demás valores de ℓ han sido omitidas en esta sección debido a que el comportamiento observado en ellas puede ser descrito en general de la siguiente manera: Cuando ℓ es un valor pequeño, las réplicas tienden a ser mayores a la observada cuando el valor de τ es pequeño, mientras que valores de moderados a grandes de ℓ proporcionan réplicas muy cercanas a la observada, con poca variación. Sin embargo, para valores grandes de τ la variación en las réplicas aumenta sin importar ℓ , aunque si ℓ es grande ésta es menor. Se aprecia entonces, que la varianza de la estadística varianza de Allan se incrementa conforme aumenta la ventana de observación τ , lo cual es congruente dado que el número de observaciones involucradas en su cálculo disminuye, de manera tal que para $\tau = n/2 - 1$ sólo se utilizan dos observaciones.

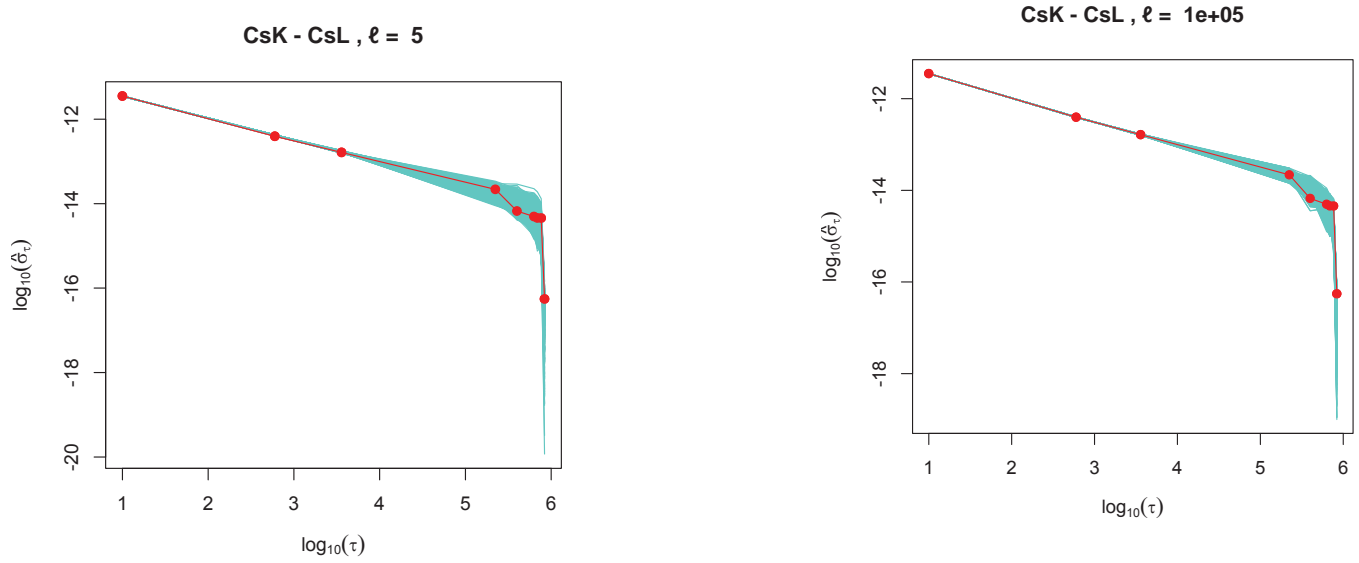


Figura 5.2: Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia CsK–CsL utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\,000$.

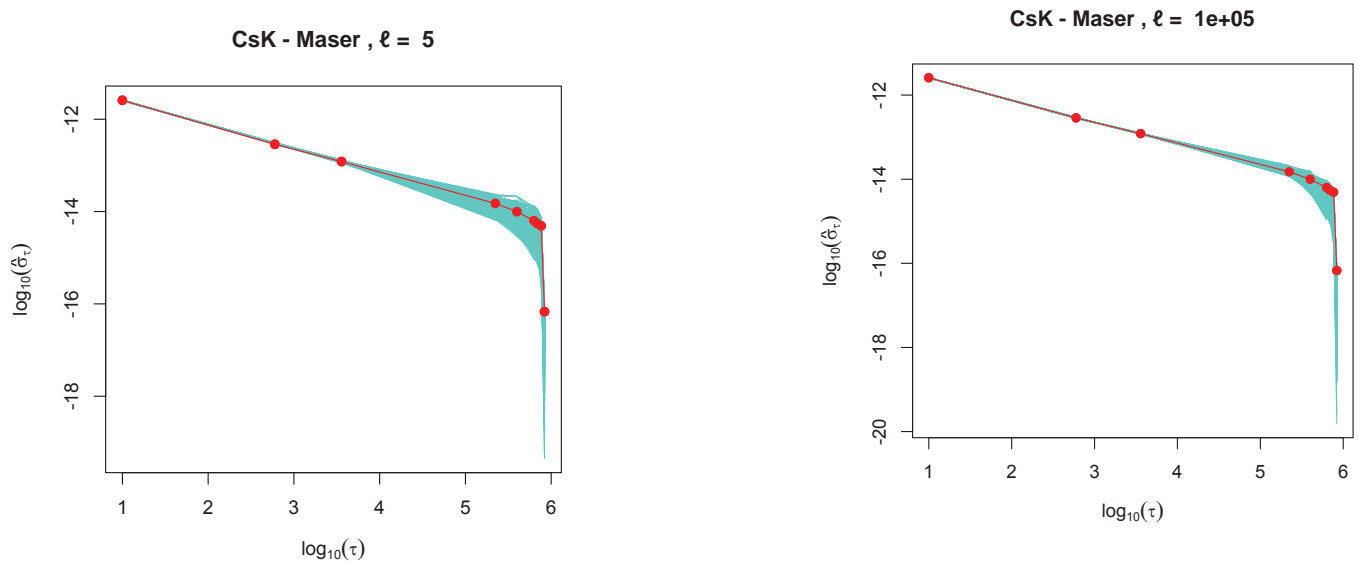


Figura 5.3: Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia CsK–Maser utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\,000$.

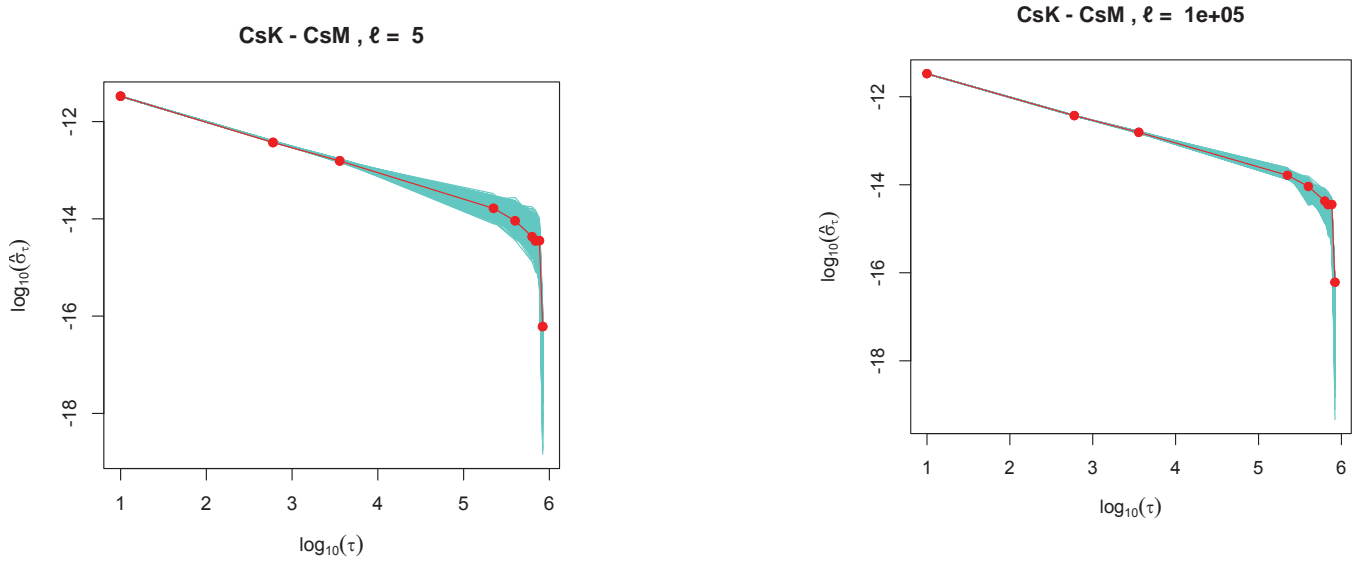


Figura 5.4: Gráfica log-log de las réplicas CMBB de la diferencia CsK–CsM utilizando $\ell = 5$ y $\ell = 100\,000$.

En el Capítulo 2 se comentaron algunos detalles de la varianza de Allan, la cual suele concebirse como una estadística; no obstante, ésta es un estimador de su valor esperado, el cual a su vez se reporta en algunas referencias como la varianza de Allan. Esto constituye un problema notacional y conceptual, ya que por un lado la varianza de Allan es un estimador, y por otro es un parámetro poblacional. La convención que se adoptó en esta tesis, es denominar al estimador muestral como la varianza de Allan, pero representándola como $\hat{\sigma}^2(\tau)$ para denotar su naturaleza muestral. Entonces, la media muestral de las réplicas debe aproximarse a la varianza de Allan observada, la cual a su vez debe aproximarse a su valor esperado. Por lo tanto, resulta más interesante comparar la gráfica log-log de la media muestral de las réplicas con la observada. Esta comparación gráfica se representa en las Figuras 5.5, 5.6 y 5.7, en donde la recta roja es la gráfica log-log obtenida de la serie original y las rectas de diferente color representan el logaritmo base 10 de la media muestral de las réplicas generadas con una longitud de bloque diferente. Para ventanas de observación τ correspondientes a 10 segundos, 10 minutos y 1 hora, cualquier valor de longitud ℓ produce un valor cercano al observado, por lo que la pendiente

de la gráfica se preserva; mientras que para ventanas de observación de más de 62 horas, los valores promedio de las réplicas difieren más para longitudes de bloque distintas, lo que produce cambios considerables en las pendientes de esa sección de la gráfica. En el caso de la diferencia CsK–CsL, los cambios en la pendiente que se aprecia en la gráfica, observados en los puntos $\tau = 400\ 000, 630\ 950, 691\ 010, 765\ 010$, no son reproducidos por ninguna de las réplicas. Lo mismo sucede en dicho intervalo en el caso de la diferencia CsK–Maser, en donde los valores de las réplicas están siempre por debajo de los observados, y en el caso de la diferencia CsK–CsM. Notar que en la Figura 5.1, correspondiente al remuestreo erróneo, las réplicas calculadas para valores grandes de τ no aumentan en varianza y son similares en magnitud a las réplicas obtenidas con el CMBB. Se plantea entonces la interrogante natural: ¿Cómo decidir qué longitud de bloque produce una media muestral mejor? Esta pregunta será respondida en la Sección 5.1.4.

Debido a que la convergencia de la varianza de Allan a su valor esperado requiere de una gran cantidad de elementos promediados, lo que no sucede cuando τ aumenta, esta parte de la gráfica debe ser tomada con precaución y no debe ser interpretada de manera literal, pues la aproximación del método bootstrap no es confiable.

5.1.3. Remuestreo del ensamble mediante SB

El segundo método de remuestreo a implementar es el *Stationary Bootstrap*. Empleando la misma notación que en la sección anterior, el esquema de remuestreo puede ser resumido de la siguiente manera:

1. Obtener la primera diferencia de $Z_t^{ri} \equiv X_{t+1}^{ri} - X_t^{ri}$, $i = 1, 2, 3$, $t = 1, 2, \dots, n - 1$.
2. Construir las series $Z_{n+\ell+1}^{\prime ir}$, $i = 1, 2, 3$, en las cuales

$$Z_t^{\prime ri} = \begin{cases} Z_t^{ri}, & \text{si } t \leq n; \\ Z_{t-n}^{ri}, & \text{si } t > n. \end{cases}$$

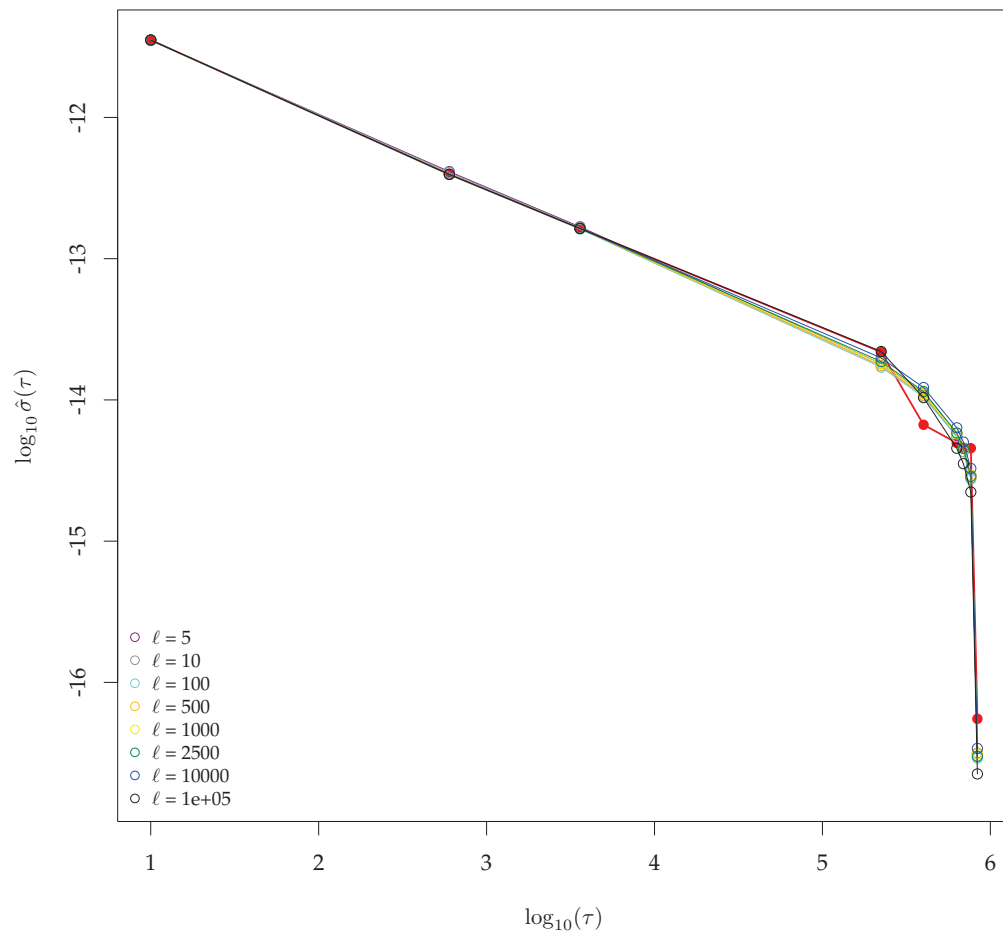


Figura 5.5: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK-CsL.

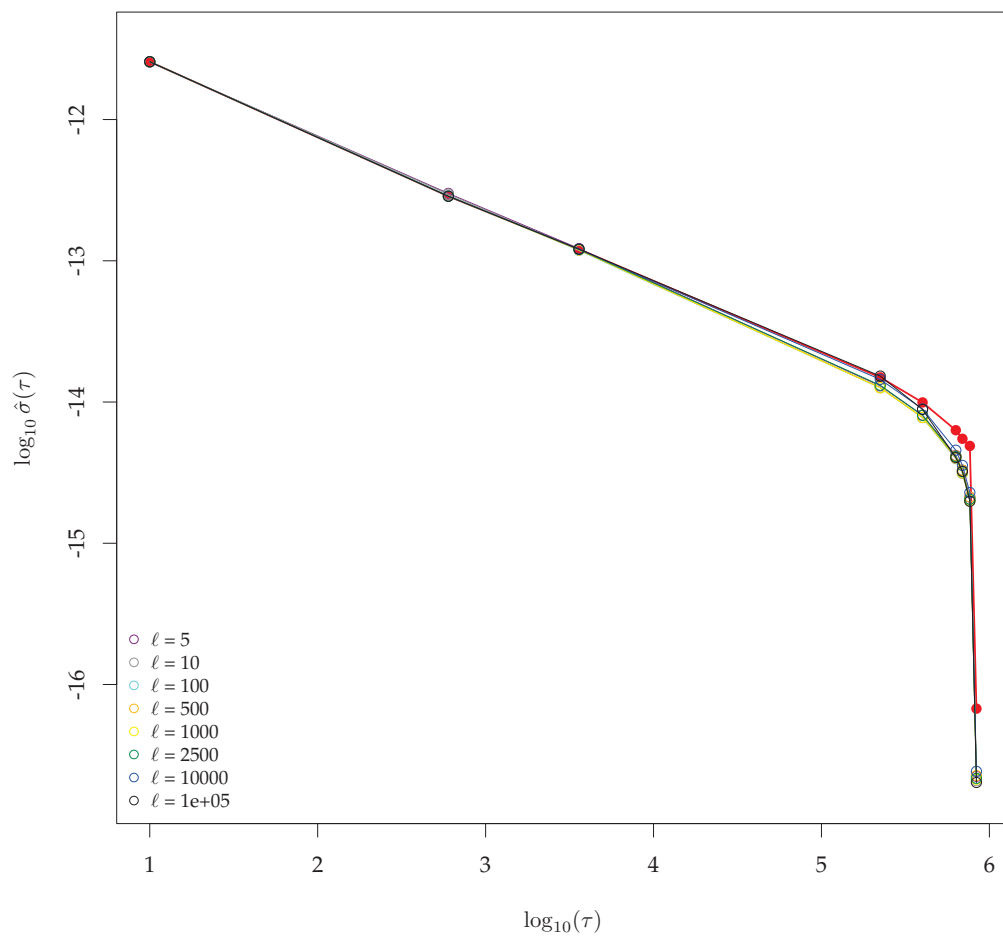


Figura 5.6: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK–Maser.

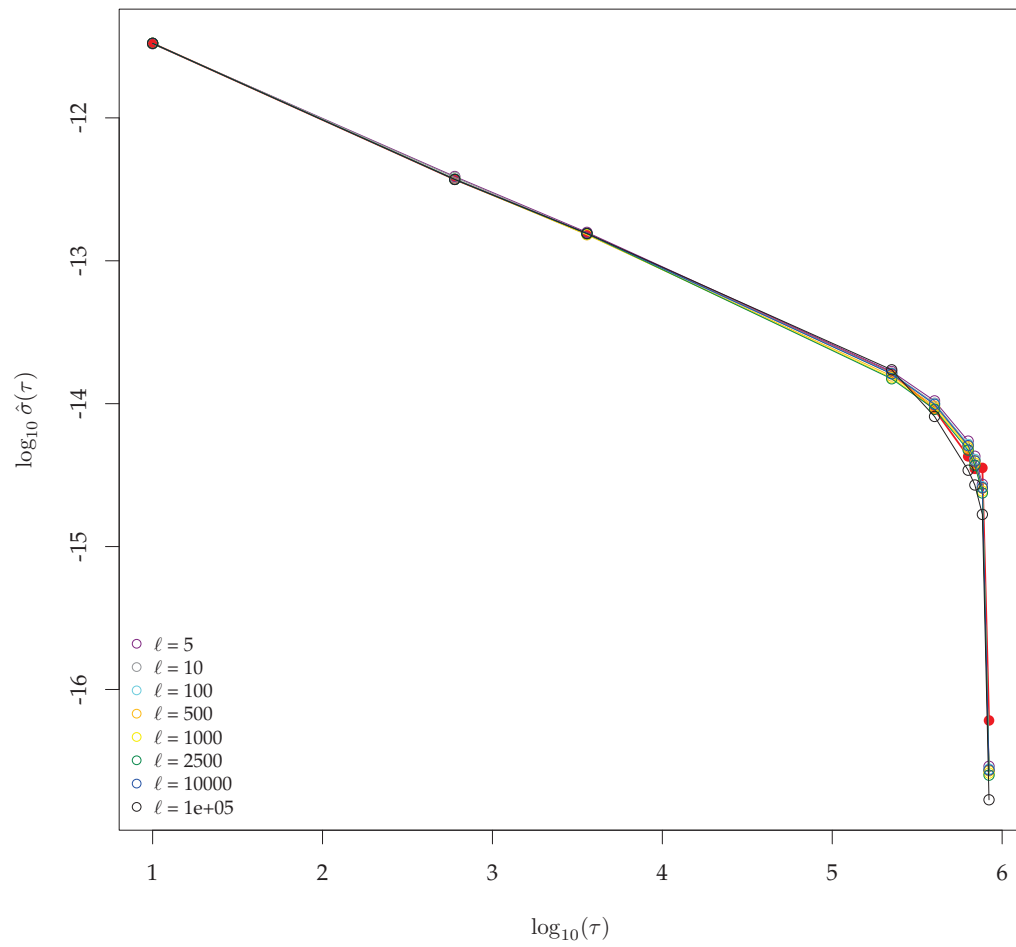


Figura 5.7: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK-CsM.

3. Generar una variable $I_1 \sim U\{1, 2, \dots, n\}$, la cual indica el punto de inicio del primer bloque de las tres series consideradas, es decir, $Z_1^{*ri} = Z_{I_1}^{ri}$, $i = 1, 2, 3$.
4. Generar una variable aleatoria $B_1 \sim \text{Ber}(p)$, independiente de I_1 . Si $B_1 = 0$, entonces $Z_2^{*ri} = Z_{I_1+1}^{ri}$; en caso contrario se genera una variable $I_2 \sim U\{1, 2, \dots, n\}$ y $Z_2^{*ri} = Z_{I_2}^{ri}$. Este procedimiento continua hasta obtenerse Z_{n-1}^{*ri} .
5. Construir las series \mathbf{X}_n^{*ri} , definiendo $X_1^{*ri} = X_1^{ri}$ y $X_t^{*ri} = X_{t-1}^{*ri} + Z_{t-1}^{*ri}$, $t = 2, 3, \dots, n$, $i = 1, 2, 3$.

Siguiendo este procedimiento, se generaron 1000 réplicas bootstrap para distintos valores de p , con el fin de analizar los efectos de este parámetro en la gráfica log-log. Los valores considerados fueron $p = 1/5, 1/10, 1/100, 1/500, 1/1000, 1/1500, 1/10\ 000, 1/100\ 000$. De manera análoga al caso CMBB, para cada p se obtiene la nube de las 1000 réplicas $\hat{\sigma}^*(\tau)$ calculadas para los mismos valores de la sección anterior para τ . Las gráficas obtenidas utilizando parámetros $p = 1/5$ y $p = 1/100\ 000$, para cada serie, se encuentran representadas en las Figuras 5.8, 5.9 y 5.10. Los efectos visualmente apreciables son los mismos que en el caso anterior: Para ventanas τ pequeñas la varianza apreciada es menor a la observada en ventanas τ grandes, para todos los valores de p propuestos; asimismo, la varianza en los intervalos en los que τ es grande, es menor cuando el parámetro p es más pequeño. Resulta pertinente resaltar que valores pequeños de p representan una longitud promedio de bloque grande.

Se procede a analizar ahora las Figuras 5.11, 5.12 y 5.13, las cuales representan la aproximación bootstrap de la gráfica log-log, dada por $\log_{10} \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)}$, para cada diferencia de relojes considerada. Al igual que en las gráficas anteriores y en el esquema de remuestreo CMBB, se observa que en general, las aproximaciones en ventanas τ menores a una hora son muy cercanas al valor observado para todo valor de p , mientras que para valores mayores se hace evidente la discrepancia tanto entre valores de p como entre las réplicas y lo observado. En la 5.11 se puede notar que ningún valor de p logra reproducir la naturaleza de la gráfica observada para $\tau \in (223\ 870, 400\ 000)$ y, aunque la réplica correspondiente a $p = 1/100\ 000$ se aproxima mucho

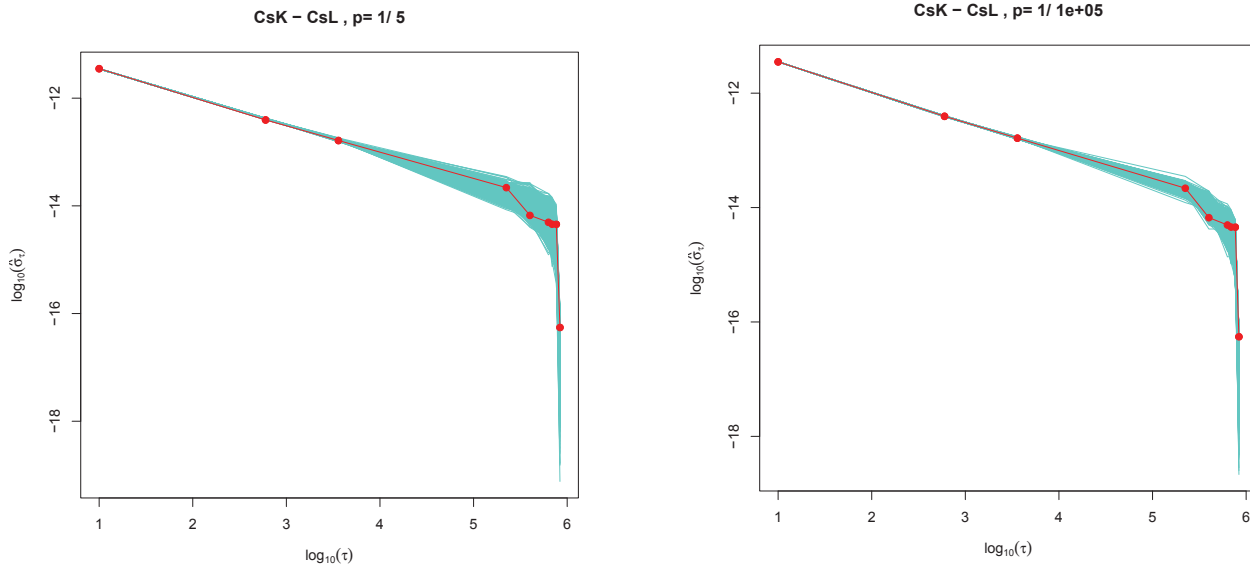


Figura 5.8: Gráfica log-log de las réplicas BS de la diferencia CsK–CsL utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\,000$.

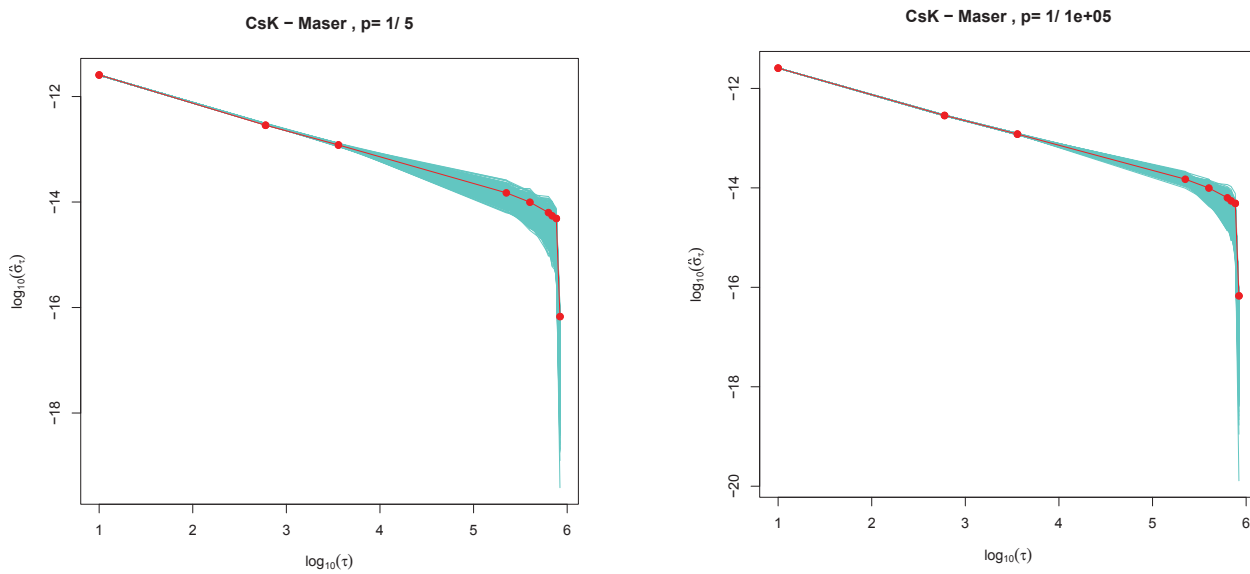


Figura 5.9: Gráfica log-log de las réplicas SB de la diferencia CsK–Maser utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\,000$.

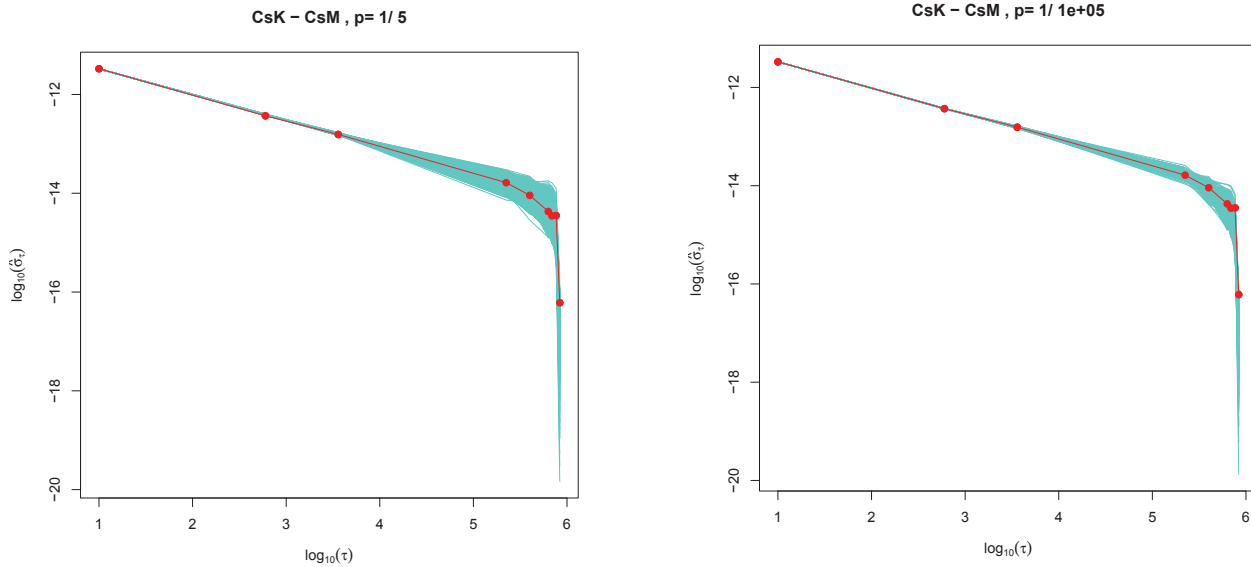


Figura 5.10: Gráfica log-log de las réplicas SB de la diferencia CsK–CsM utilizando $p = 1/5$ y $p = 1/100\,000$.

cuando $\tau = 223\,870$, para valores mayores es la réplica que más se aleja de los valores observados. Asimismo, en la Figura 5.12 se aprecia que si τ es mayor a una hora, aunque los valores obtenidos mediante las réplicas no discrepan mucho entre sí, fallan en aproximarse al valor observado. Por último, en la Figura 5.13 se muestra que la réplica obtenida con un parámetro $p = 1/100\,000$ es la que más se aleja conforme τ aumenta, y aunque las demás réplicas se aproximan menos a los valores observados cuando τ es más grande, éstas no se alejan tanto como en el caso de la Figura 5.12. Por lo tanto, al igual que en el caso del remuestreo CMBB, de manera individual, ninguna réplica reproduce las mismas pendientes que la gráfica original al considerar ventanas τ grandes. No obstante, la justificación de este comportamiento es la misma previamente explicada, es decir, que la aproximación correcta de las réplicas en estos valores de τ no es segura. La incógnita correspondiente a qué parámetro p seleccionar permanece vigente; una propuesta a considerar para contestarla se desarrolla en la siguiente sección.

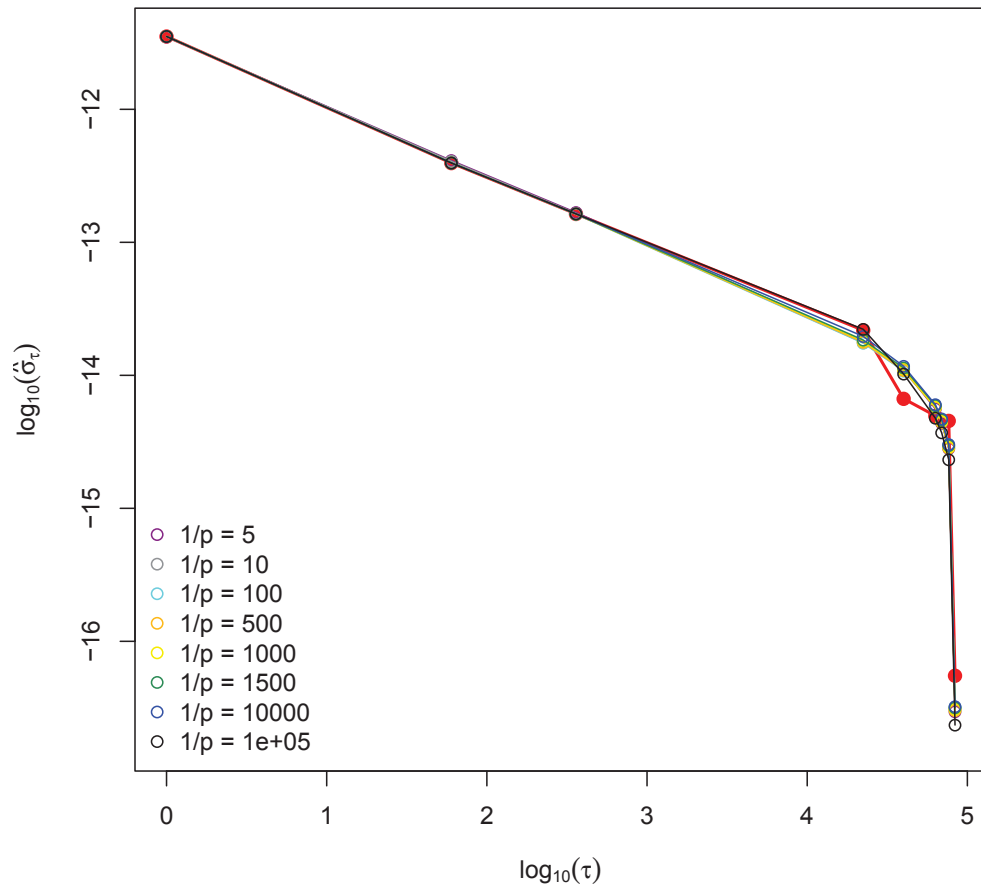


Figura 5.11: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK-CsL.

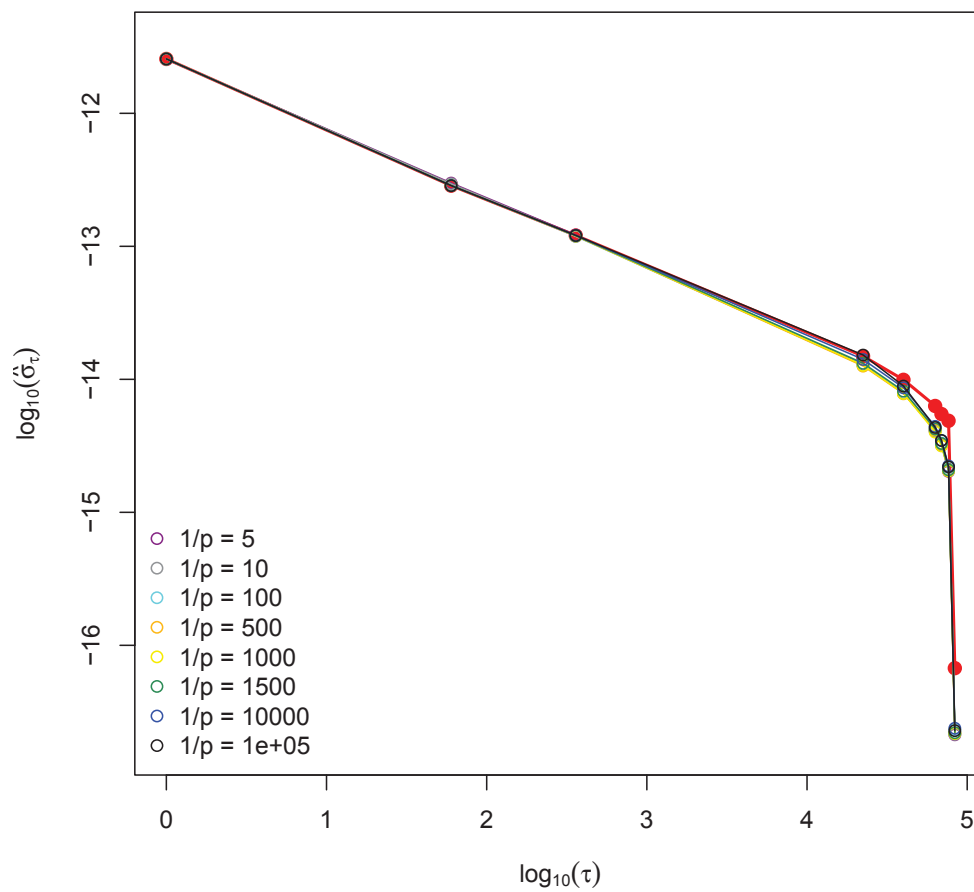


Figura 5.12: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK–Maser.

5.1.4. Métrica para la gráfica log-log

Las gráficas observadas previamente muestran que la media muestral de las réplicas son más cercanas a la observada en ciertos valores de τ , y más lejanas en otros, para cualquier longitud de bloque propuesta. Sin embargo aún no se ha mencionado un criterio para determinar qué longitud de bloque es mejor que las demás. Este criterio debe ser global (para toda τ) y debe medir la magnitud del error entre la varianza de Allan y el promedio de las réplicas, considerando que un error grande para ventanas de observación pequeñas debe ser más penalizado que un error grande cuando la ventana de observación es grande, ya que la varianza de Allan (observada) presenta mayor variación conforme la ventana de observación τ aumenta. Sean $\sigma_1^*(\tau), \sigma_2^*(\tau), \sigma_3^*(\tau), \dots, \sigma_M^*(\tau)$ réplicas bootstrap de $\hat{\sigma}(\tau)$, observada en $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k$. Una medida natural a considerar es:

$$D = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k w_i \left(\log_{10} \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)} - \log_{10} \hat{\sigma}(\tau_i) \right)^2,$$

donde

$$\begin{aligned} \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)} &= \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \hat{\sigma}_j^*(\tau_i), \\ w_i &= \frac{1/S_{\tau_i}^2}{\sum_{i=1}^k 1/S_{\tau_i}^2}, \text{ y} \\ S_{\tau_i}^2 &= \frac{1}{M-1} \sum_{j=1}^M \left(\hat{\sigma}_j^*(\tau_i) - \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)} \right)^2. \end{aligned}$$

La razón para utilizar $\log_{10} \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)}$ en vez de $\log_{10} \overline{\hat{\sigma}^*(\tau_i)}$, está motivada por el siguiente razonamiento: Supóngase que $\hat{\sigma}(\tau) \xrightarrow{p} \sigma(\tau)$, donde $\sigma(\tau) = E[\hat{\sigma}(\tau)]$. Entonces, $\log_{10} \hat{\sigma}(\tau) \xrightarrow{p} \log_{10} \sigma(\tau)$, por continuidad de la función \log_{10} . De esta manera, el interés recae en estimar $\log_{10} E[\hat{\sigma}(\tau)]$, no $E[\log_{10} \hat{\sigma}(\tau)]$.

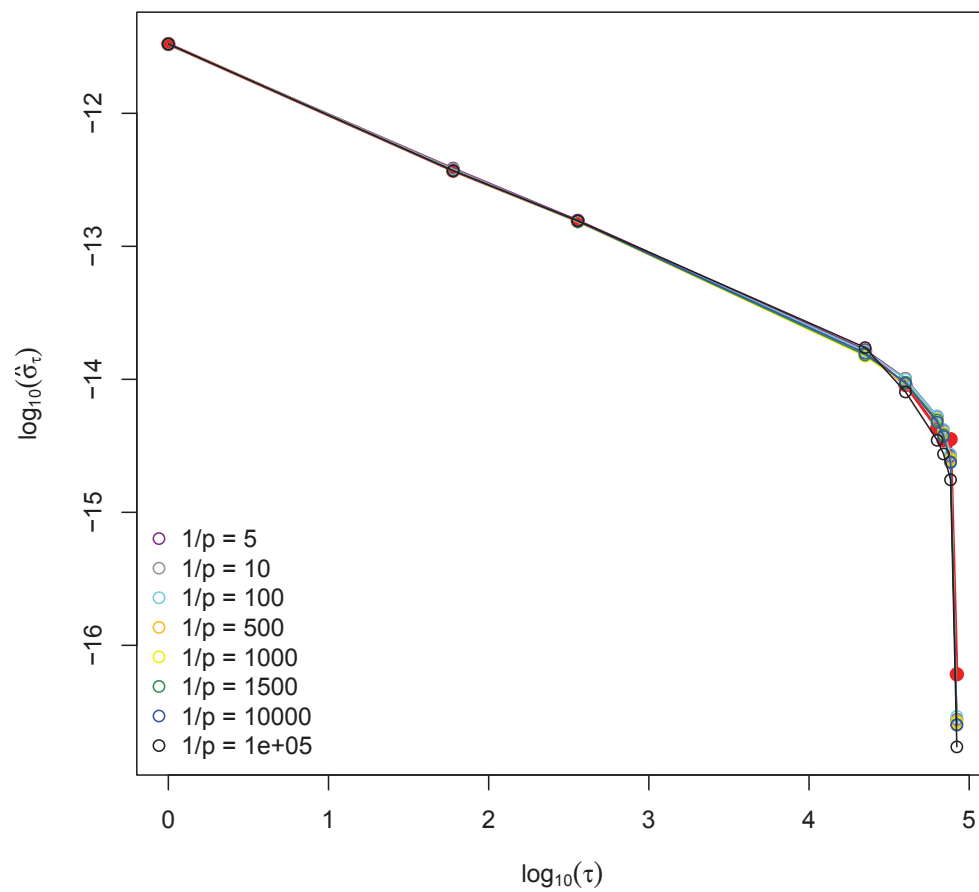


Figura 5.13: Gráfica log-log para la media de las réplicas de la diferencia CsK-CsM.

En la Figura 5.1, a pesar de que la varianza de las réplicas no aumenta considerablemente conforme aumenta el valor de τ , la media muestral de la nube azul es visiblemente mayor a la varianza de Allan observada, por lo que implementando esta métrica, el valor D correspondiente a este tipo de remuestreo será mayor a cualquiera de aquellas basadas en bloques. Asimismo, debido a que la variación en ventanas de observación de hasta una hora es pequeña, la distancia D servirá para discernir qué longitud de bloque fue la más acertada en ese rango de τ . Lo anterior es relevante debido a que en el CENAM el algoritmo implementado se recalibra cada hora, por lo que la varianza de Allan utilizada es calculada con la ventana $\tau = 3600$ segundos.

La Figura 5.14 muestra las distancias calculadas para cada valor de ℓ y p , para cada par de relojes, en donde las réplicas fueron generadas con los esquemas CMBB y SB, respectivamente. El punto rojo señala la distancia mínima entre las obtenidas, para cada diferencia $X_t^{r_i}$. En la primera gráfica, se observa que para las diferencias CsK–CsL y CsK–Maser, el valor de ℓ entre los propuestos, que minimiza la distancia, es $\ell = 10\,000$, mientras que para la diferencia CsK–CsM, la distancia mínima se obtuvo cuando $\ell = 5$. Se esperaría que las distancias disminuyesen conforme ℓ aumente, hasta alcanzar un mínimo en cierto valor de ℓ , y aumentar nuevamente después de dicho valor; es decir, que la gráfica fuera cóncava, en forma de U, aunque no necesariamente simétrica. Sin embargo, lo observado no corresponderá de manera literal con este comportamiento, debido a que se ilustra sólo una instancia aleatoria de una función. Ésta debe ser interpretada como una versión ruidosa de la función en forma de U. Por ejemplo, algunos valores de ℓ producen resultados más deficientes que los obtenidos con valores menores de ℓ . En particular, resalta el hecho de que la longitud de bloque óptima entre las consideradas en el caso CsK–CsM, sea $\ell = 5$, siendo que ésta es una longitud de bloque pequeña y la teoría dicta que se requiere una longitud de bloque considerablemente grande para garantizar la convergencia. En la segunda gráfica, que corresponde al esquema SB, la distancia mínima de las diferencias CsK–CsL y CsK–Maser se obtuvo cuando $p = 1/10\,000$, mientras que para la diferencia CsK–CsM, se obtiene cuando $p = 1/100$. A diferencia de lo reportado bajo el esquema CMBB, la gráfica de las distancias no tiene como punto mínimo el correspondiente a la media de longitud de bloque

más pequeña, $1/p = 5$, por lo que el comportamiento de la gráfica se aleja menos del comportamiento esperado. Por lo tanto, estas gráficas se interpretan en la medida que nos indican un comportamiento genérico en forma de U, en lugar de un comportamiento literal. Para obtener mejores aproximaciones de esta función, no fueron implementados en esta tesis métodos más demandantes computacionalmente. El objetivo fue realizar una exploración inicial o tentativa, y en este sentido sí se reproduce la forma genérica esperada, esperando con ello poder identificar el orden de magnitud que deben poseer ℓ y p para ser óptimos.

En cualquiera de los dos casos, es necesario encontrar un valor del parámetro común para el remuestreo de las tres series, por lo que se debe seleccionar un punto intermedio entre los óptimos. Por ejemplo, en el caso del esquema CMBB, debido a que el valor de ℓ que proporciona la cuarta distancia más pequeña es $\ell = 1/10\ 000$, la cual es la óptima de entre las propuestas para las demás diferencias, podría proponerse ésta como la común. En el caso del SB, la segunda distancia más pequeña de las diferencias CsK–CsL y CsK–Maser, se obtiene en el mismo valor de p en el que se minimiza la distancia correspondiente a la serie CsK–CsM, por lo que éste valor podría adoptarse como el común. Otro criterio podría involucrar el hecho de que las distancias de las diferencias CsK–Maser son siempre mayores que las distancias de las demás diferencias consideradas; dado que $p = 1/10\ 000$ minimiza las primeras, éste valor sería adoptado como el parámetro común. Por otro lado, realizar una comparación entre los métodos de remuestreo CMBB y SB a través de la distancia propuesta, no es inmediata, ya que las distancias de un método no son uniformemente mayores; sin embargo, la distancia mínima generada con el método CMBB es menor a la mínima generada mediante el SB, para todas las diferencias presentadas en el análisis.

5.2. Comentarios y consideraciones

Este capítulo realizó la implementación de los métodos *Circular Moving Block Bootstrap* y *Stationary bootstrap* al ensamble de relojes, teniendo como interés adicional observar la correcta

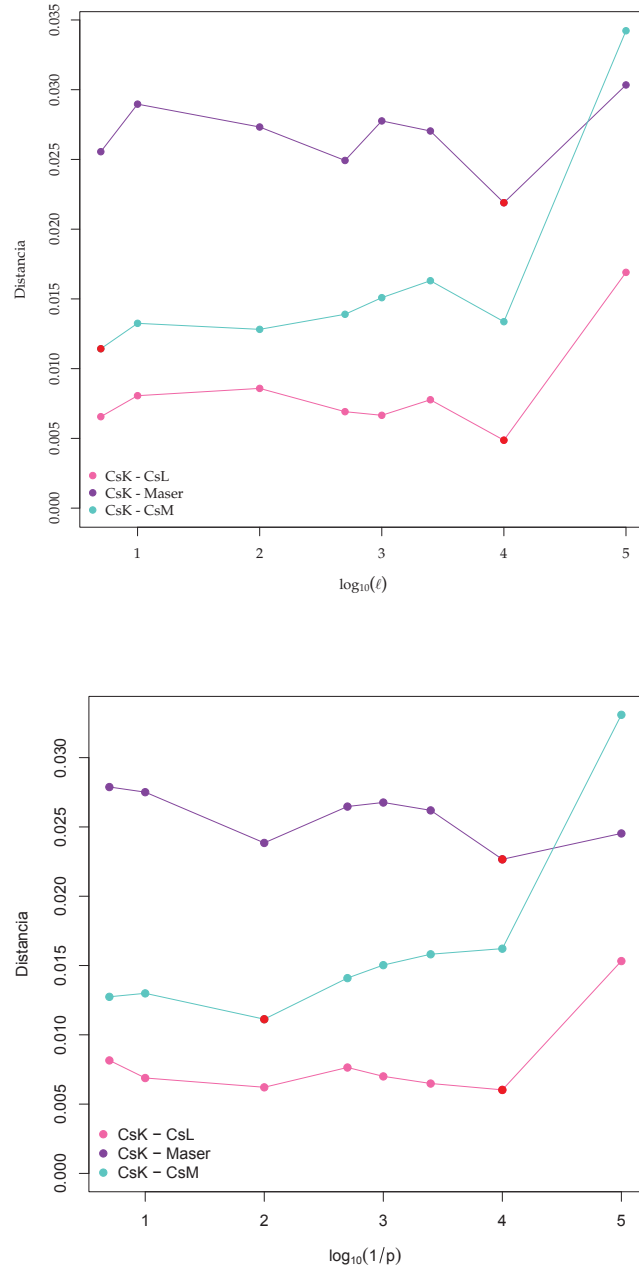


Figura 5.14: Gráfica de las distancias calculadas para cada diferencia de tiempo, con el método CMBB y SB, considerando los diferentes valores de los parámetros ℓ y p .

aproximación del método, así como la determinación de los parámetros a utilizar en el remuestreo. Para establecer qué parámetro es el óptimo se recurrió a una métrica propuesta, basada en la gráfica log-log. Esta métrica prueba ser empíricamente sensata pues en primera instancia discrimina apropiadamente cuando una pseudo-muestra bootstrap es totalmente errónea.

Los resultados y comentarios hechos a lo largo de esta sección, se resumen a continuación:

- Debido a que el valor de la varianza de Allan cuando τ es grande implica que el número de diferencias frecuencias fraccionarias promedio promediadas en el cálculo de esta estadística es pequeño, es poco factible que se obtenga la convergencia a su valor esperado. Por esta razón, la convergencia apropiada del método bootstrap en tales valores de τ no está garantizada, lo que implica que las varianzas de Allan replicadas deben ser consideradas con precaución y con menor importancia en zonas donde τ es grande. Esta precaución se ve reflejada en la ponderación involucrada en la métrica implementada, ya que el área con mayor variación es precisamente la correspondiente a valores grandes de τ .
- Respecto a los valores pequeños de τ , en los que la convergencia del estimador a su valor esperado es más segura, se aprecia gráficamente que las réplicas bootstrap son una buena aproximación a los valores observados, preservando en general la pendiente que se observó. Esta característica se presenta en general sin importar el valor de ℓ , aunque existen diferencias numéricas entre los valores obtenidos para cada longitud de bloque experimentada; estas diferencias son rescatadas en la métrica.
- Cabe aclarar que las gráficas mostradas en la Figura 5.14 sólo representan una realización posible del comportamiento de la métrica. Es decir, cada punto de las curvas está dotada de una varianza (no cuantificada en este proyecto), por lo que de contarse con otro grupo de M réplicas bootstrap de gráficas log-log obtenidas con una longitud de bloque determinada, la distancia calculada variará en un rango aún no determinado. Esto implica que, si bien la curva obtenida no es totalmente cóncava, aún no se puede deducir que esto sólo se deba a la variación asociada a cada punto, siendo que en promedio la curva si es cóncava.

Para corroborar lo anterior es necesario realizar bootstrap de manera anidada, pues para cada réplica de las M es necesario obtener R muestras generadas a partir de ella, lo cual constituiría un estudio adicional que requiere de un gran trabajo computacional.

- En esta etapa del proyecto, en el que la variabilidad de cada distancia calculada para cada diferencia de tiempo de los relojes del ensamble no se encuentra cuantificada, de ser necesaria una longitud de bloque ℓ se propondría $\ell = 10\,000$, por ser la que minimiza dos de las tres diferencias, y ser una distancia sensata para la diferencia CsK–CsM. Similarmente, para el esquema SB se seleccionaría $p = 100$ por ser un punto razonable para las tres diferencias presentadas. En este caso se cuenta con flexibilidad, al parecer la gráfica log-log robusta a cambios en los parámetros ℓ y p , por lo que las propuestas previas no conllevan a consecuencias graves en la aproximación al logaritmo base 10 de la varianza de Allan, en los valores pequeños de τ . Adicionalmente, estos valores podrían ser utilizados como valores iniciales de otros métodos empíricos que optimizan la longitud de bloque a elegir.
- Es factible que incluso después de cuantificar la varianza asociada a cada distancia, el valor que minimiza la distancia para un par de relojes, no sea el mismo que el que minimice otro par, es decir, no se garantiza la uniformidad del valor en el que el mínimo es alcanzado. Esto conlleva a la necesidad de establecer un criterio formal para seleccionar el parámetro común a utilizar en el método de réplica.
- La comparación entre los dos métodos implementados no da lugar a un claro ganador, pero debido a que el SB garantiza la estacionariedad de la réplica proveniente de un proceso estacionario, se opta por éste en el caso en que se requiera tomar una decisión sobre qué método implementar en el CENAM.
- Algunos métodos descritos en el capítulo anterior, no fueron implementados. Es probable que los esquemas *Non-Overlapping Block Bootstrap* y *Moving Block Bootstrap* produzcan resultados similares a los reportados por el CMBB; sin embargo, el esquema *Blocks of Blocks* ciertamente podría rescatar de manera más apropiada la estructura necesaria en

las diferencias de frecuencias fraccionarias promedio. Por lo tanto, una adaptación de este esquema a un proceso integrado de primer orden es un tema futuro que resulta de interés.

- Actualmente, la recalibración del reloj virtual del CENAM se realiza cada hora, periodo en el cual las varianzas de Allan replicadas son una buena aproximación a las teóricas. Esto implica que para efectos de la recalibración del reloj virtual, así como la comparación de los relojes virtuales que utilizan pesos asociados a $1/\hat{\sigma}(\tau)$ y $1/\hat{\sigma}^2(\tau)$, la metodología propuesta e implementada en esta tesis es una herramienta útil y capaz de reproducir los resultados esperados.

5.3. Ejemplo base: Comparación de dos relojes virtuales

Esta sección describe el algoritmo a implementar para realizar la comparación de dos relojes virtuales. Supóngase que se cuenta con un juego de datos proveniente de un ensamble de relojes, en los que cada reloj es un proceso integrado de orden uno, y que se ha determinado un método de remuestreo apropiado. El procedimiento general a seguir es:

1. Obtener M réplicas del ensamble de la manera especificada en la sección anterior.
2. Para cada réplica del ensamble, obtener las diferencias del reloj de referencia con los relojes virtuales de interés, mediante los algoritmos correspondientes. De esta manera se generarán $\mathbf{X}_{i,n}^{*rv_1}$ y $\mathbf{X}_{i,n}^{*rv_2}$, $i = 1, 2, \dots, M$, donde v_1 y v_2 hacen referencia a los relojes virtuales a implementar.
3. Calcular las varianzas de Allan $\hat{\sigma}_{i,rv_1}^{2*}(\tau)$, $\hat{\sigma}_{i,rv_2}^{2*}(\tau)$ y $\hat{\sigma}_{i,rj}^{2*}(\tau)$, $i = 1, 2, \dots, M$, donde j representa cualquier reloj del ensamble diferente del de referencia, y τ es determinada previamente.
4. Realizar el sombrero de tres picos para obtener las varianzas absolutas de cada reloj virtual, denotadas por $\hat{\sigma}_{i,v_1}^*(\tau)$ y $\hat{\sigma}_{i,v_2}^*(\tau)$, $i = 1, 2, \dots, M$.

5. Calcular las M diferencias $\hat{\sigma}_{i,v_1}^*(\tau) - \hat{\sigma}_{i,v_2}^*(\tau)$, $i = 1, 2, \dots, M$, para obtener los α -ésimo y $(1 - \alpha)$ -ésimo cuantiles, para un valor α determinado, a través de la función de distribución empírica de las diferencias $[\hat{\sigma}_{i,v_1}^*(\tau) - \hat{\sigma}_{i,v_2}^*(\tau)] - [\hat{\sigma}_{v_1}(\tau) - \hat{\sigma}_{v_2}(\tau)]$, $i = 1, 2, \dots, M$. La notación $\hat{\sigma}_{v_k}(\tau)$ representa la varianza absoluta obtenida de los relojes virtuales generados de los datos originales del ensamble.
6. Obtener alguno de los intervalos de confianza expuestos en la Sección 4.5.

En caso de que el intervalo de confianza encontrado no contenga al cero, será posible concluir que la diferencia entre varianzas absolutas es significativa con probabilidad $1 - \alpha$, por lo que un reloj virtual tiene un mejor desempeño que otro, en términos de su frecuencia y de la ventana τ . Es importante resaltar que la buena aproximación de este intervalo dependerá en parte de lo cerca que $[\hat{\sigma}_{v_1}(\tau) - \hat{\sigma}_{v_2}(\tau)] - [\sigma_{i,v_1}(\tau) - \sigma_{i,v_2}(\tau)]$ se encuentre de ser aproximadamente una cantidad pivotal. El estudio teórico para garantizar el cumplimiento de todas las aproximaciones involucradas en la obtención del intervalo de confianza propuesto permanece como un asunto que pudiera ser objeto de estudio en el futuro.

Capítulo 6

Comentarios generales y conclusiones de la tesis

Esta tesis se situó y tuvo su motivación en un contexto de metrología de frecuencia y tiempo, específicamente en torno a ensambles de relojes atómicos para su medición. Bajo la premisa de que se cuenta con un juego de observaciones experimentales de tal ensamble, la tesis tuvo como objetivo general afrontar el análisis de tales datos bajo un enfoque de estadística formal, previamente inexplorado por el CENAM.

Las contribuciones del trabajo se pueden puntualizar como sigue:

1. *Traducción de conceptos y problemática al lenguaje de estadística.* Requirió de una revisión de literatura de metrología, el entendimiento de nociones fundamentales, así como la identificación y el planteamiento de una pregunta esencial de interés proveniente de una disciplina ajena a la estadística. Parte del objetivo de esta aportación es facilitar la inmersión metrológica de quien esté interesado en continuar y mejorar la propuesta realizada en este proyecto.
2. *Propuesta concreta para abordar inferencia estadística, incluyendo la justificación correspondiente.* Con fundamentación en metodología bootstrap aplicada a series de tiempo multivariadas, tras un trabajo de modelación estadística y análisis de evidencia empírica,

la tesis desarrolló esquemas para el remuestreo de ensambles de relojes atómicos. Con ello, se posibilitó el empleo de esta técnica para abordar preguntas muy generales de inferencia, incluyendo asuntos de estimación y de pruebas de hipótesis.

3. *Algoritmo para afrontar la comparación de dos relojes virtuales.* Aunque la metodología concebida es de empleo general, se describió el detalle de su aplicación a la situación especial de comparar dos diferentes maneras de promediar las lecturas del ensamble (reloj virtual). Esta situación fue planteada en primera instancia por la División de Frecuencia y Tiempo del Centro Nacional de Metrología.

Para lograr lo anterior, la tesis consistió de las siguientes tareas y componentes:

1. *Reseña de conceptos de metrología.* Consistió de una revisión de términos fundamentales referenciados en la literatura de metrología de tiempo y frecuencias. Éstos fueron necesarios para el entendimiento preciso de la problemática, y también fueron cruciales para la caracterización de datos y pseudo-datos generados por bootstrap, así como para proponer formas para cuantificar la bondad de los esquemas bootstrap propuestos.
2. *Análisis exploratorio de datos.* Para fines de diagnóstico e identificación de modelos y propiedades probabilísticas inherentes de los datos, se implementaron técnicas gráficas y numéricas de series de tiempo. Una conclusión de extrema importancia fue establecer que las mediciones de diferencias entre relojes atómicos se comportan como un proceso integrado de primer orden. De manera implícita, esto también involucró el estudio de conceptos y propiedades teóricas de series de tiempo.
3. *Revisión y reseña de métodos bootstrap para series de tiempo.* Consistió de examinar y evaluar muy diversos esquemas que han sido propuestos en la literatura de estadística para remuestrear series de tiempo estacionarias, así como su empleo para la construcción de intervalos de confianza. Lo anterior derivó en la identificación de dos esquemas en particular (*Circular Moving Block Bootstrap* y *Stationary Bootstrap*), que pudieran tener éxito para ser aplicados al caso del ensamble de relojes atómicos del CENAM.

4. *Propuesta concreta de metodología bootstrap.* Con base en datos provenientes de un ensamble, se implementaron y probaron los dos grandes tipos de bootstrap recomendados. Se concluyó que el bootstrap para series de tiempo es una posibilidad viable conceptual y computacionalmente, para producir pseudo-muestras de ensambles de relojes atómicos útiles para contestar preguntas de inferencia.

5. *Estudio para identificar parámetros óptimos de esquemas bootstrap.* Debido a que los esquemas propuestos dependen de la especificación de ciertos parámetros (longitud de bloque, parámetro de la distribución geométrica), se desarrolló un estudio empírico para determinarlos. Para ello, hubo que discernir un instrumento para realizar comparaciones (la gráfica log-log), así como proponer una métrica para cuantificar el efecto de variar los parámetros. Con base en este estudio empírico, se estableció que un valor sensato para la longitud de bloque es 10 000, y para el parámetro de la variable aleatoria geométrica, 100.

Para finalizar, se mencionan algunos comentarios adicionales, incluyendo aspectos identificados que plantean preguntas para el futuro:

1. *Precaución al adoptar parámetros del bootstrap.* Cambios en los componentes de los ensambles son factibles de ocurrir, como la inclusión de un nuevo reloj o el reemplazamiento de otro, por lo que es necesario considerar con cuidado los resultados presentados previamente. Si bien la tesis presenta una propuesta de longitud de bloque para los dos esquemas implementados, aún es necesario adaptar el método bootstrap al nuevo ensamble. En primer lugar, es necesario verificar que los datos correspondientes al nuevo reloj sean también un proceso integrado de primer orden, para después analizar si el parámetro propuesto reproduce satisfactoriamente el comportamiento esperado de la gráfica log-log. En caso de que alguno de estos puntos no se cumpla se requerirá de un análisis más profundo, que incluya un esquema de remuestreo y/o la determinación de un parámetro más adecuados. Estas consideraciones son necesarias incluso cuando el ensamble físico no cambia, pero sí lo hace el periodo de observación de las diferencias de tiempo.

2. *Identificación de parámetros de bootstrap para situaciones más generales.* Como se mencionó previamente, los parámetros óptimos relativos a la longitud de bloque en los métodos no paramétricos dependen de la característica que se desea conocer de la estadística de interés. En el Capítulo 5 esta característica fue el valor esperado de la varianza de Allan estimada, por lo que los valores propuestos para los parámetros no son necesariamente heredables como óptimos para otras características, y requieren un estudio adicional.
3. *Revisión de la métrica.* El Capítulo 5 muestra que aún no es posible determinar valores definitivos que minimicen la métrica propuesta, pues se requiere aún cuantificar la incertidumbre asociada a las curvas mostradas en la Figura 5.14, así como el comportamiento promedio de estas distancias. Sin embargo, también es necesario considerar la dependencia presente entre la métrica y los resultados producidos, ya que diferentes métricas conllevan a diferentes gráficas. La métrica propuesta en esta tesis es natural, pero puede no ser la más apropiada, por lo que el estudio de diferentes métricas y sus efectos es un tema pendiente. En general, se espera que la acertada elección de la métrica a utilizar, junto con la correcta cuantificación de incertidumbre, conlleve a que la curva utilizada para determinar el parámetro de longitud de bloque que minimiza la métrica sea cóncava.
4. *Análisis de pivotalidad.* En el ejemplo base referente a la comparación de dos relojes virtuales se detallan los pasos a seguir para obtener un intervalo de confianza para la diferencia de varianzas absolutas. Como en muchas aplicaciones de bootstrap, los intervalos obtenidos por sí mismos resultarán ser aproximadamente correctos. Sin embargo, en esta tesis no se hizo un estudio ad hoc para examinar que su probabilidad de cobertura, en efecto, es correcta. Esto se podría realizar empíricamente, por medio de un estudio extenso de simulación (implicaría simular un gran número de veces el bootstrap mismo), o teóricamente. Para abordarlo teóricamente, el asunto primordial radica en verificar que el bootstrap está basado en alguna cantidad aproximadamente pivotal (ver Sección 4.5).

Bibliografía

- [1] Allan, D., Howe, D. & Barnes, J. Properties of signals sources and measurement methods. *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Frequency Control* (1981).
- [2] Davison, A. & Hinkley, D. Bootstrap methods and their applications. Cambridge University Press (1997).
- [3] Efron, B. Bootstrap methods: Another look at the jackknife. *The Annals of Statistics* 7 (1979)
- [4] Friederichs, T. Analysis of geodetic time series using Allan variances. (2010). Disponible en: http://www.ifcs-efrf2011.org/sites/ifcs-efrf2011.org/files/editor-files/Slides_Vernotte.pdf
- [5] Jespersen, J. & Fitz-Randolph, J. From Sundials to Atomic Clocks: Understanding time and frequency. *National Institute of Standards and Technology Monograph 155* (1999).
- [6] Lahiri, S.N. Resampling Methods for Dependent Data. Springer (2003).
- [7] Levine, J. The statistical modeling of atomic clocks and the design of time scales. *Review of Scientific Instruments* 83 (2012).
- [8] López, J.M. & Díaz, N. Progress in the generation of UTC(CNM) in terms of a virtual clock. *Metrologia* 45 (2008).
- [9] Maddala, G.S. & Kim, I. Unit Roots, Cointegration and Structural Change. Cambridge University Press (1998).

-
- [10] Politis, D. & Romano, P. The Stationary Bootstrap. *Journal of the American Statistical Association* 89 (1994).
- [11] Shumway, R. & Stoffer, D. Time Series and Its Applications with R examples. Springer (2006).
- [12] Smeekes, S. Bootstrapping Nonstationary Time Series. Tesis doctoral, Universitaire Pers Maastricht (2009).
- [13] Tavella, P. & Premolli, A. A revisited three-cornered hat method for estimating frequency standard instability. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* 42 (1993).
- [14] Tavella, P. & Thomas, C. Comparative study of time scale algorithms. *Metrologia* 2 (1991).
- [15] Weiss, M. & Weisser, T. AT2, a new time scale algorithm: AT1 plus frequency variance. *Metrologia* 28 (1991).