

ESTIMACIÓN DEL ERROR EN SISTEMAS DE ECUACIONES ALGEBRAICOS DIFERENCIALES PERTURBADAS

Gustavo Boroni^a, Pablo Lotito^a y Alejandro Clausse^{a,b}

^aCONICET y Universidad Nacional del Centro, 7000 Tandil, Argentina

^bComisión Nacional de Energía Atómica, 1429 Ciudad de Buenos Aires, Argentina
{gboroni, clausse, plotito}@exa.unicen.edu.ar

Palabras clave: Simulación, Análisis numérico, Modelización.

Resumen. En este trabajo se propone la aplicación de un nuevo método para la estimación del error inducido por perturbaciones en las condiciones iniciales, basado en la teoría de sistemas adjuntos. A partir de dicha técnica se obtiene una aproximación del error independientemente de las perturbaciones iniciales, lo cual facilita la estimación del error para sistemas de ecuaciones con gran cantidad de parámetros. Además se propone una extensión al método de estimación basada en la utilización de funciones estimadoras, que permiten transformar el sistema adjunto original en un sistema puramente algebraico, para el cual es posible aplicar una gran variedad de métodos numéricos eficientes.

1 INTRODUCCIÓN

La cuantificación del error es una de las preocupaciones principales en análisis numérico. Hay diversas fuentes de errores, incluyendo error de redondeo, error en los datos, y en la incertidumbre propia del modelo. La mayoría de estos errores no se pueden determinar a priori, pero es posible calcular cotas en base a métodos perturbativos. Un aspecto importante del análisis numérico es construir algoritmos confiables y eficientes, que permitan estimar o controlar el error en la solución final dentro de una tolerancia adecuada cuando se soluciona un problema.

Desde los primeros análisis numéricos de ODEs se dedicaron muchos esfuerzos al estudio de los errores, ya que una estimación del error puede ayudar a determinar si es posible confiar o no en la solución o aún en el modelo mismo (Dahlquist 1981, Hairer 1987, Henrici 1962 y Shampine 1976). La mayoría de los métodos propuestos para estimar errores globales se basan en métodos a priori y el análisis asintótico para pequeños paso de tiempo (Shampine 1976, Skeel 1986 y Stetter 1978). Un método simple es estimar el error global calculando la solución con diversas fórmulas o pasos de tiempo. La diferencia sirve como estimación del error global. Sin embargo este tipo de estimación no es confiable desde el punto de vista numérico.

Un aspecto importante en problemas de ingeniería es el impacto de una respuesta del modelo funcional a cambios inducidos en los parámetros; lo que usualmente se conoce como sensibilidad. Por ejemplo, en los pronósticos climatológicos se desea encontrar qué perturbaciones en las condiciones iniciales pueden producir el cambio más grande de la exactitud del pronóstico, lo cual ayuda a identificar las localizaciones en donde la adquisición de datos adicionales puede ser necesaria (Faucher 2002 y Koruda 2004). Para este tipo de problemas sólo puede obtenerse una aproximación de la medida de cambio, y a partir del estudio de perturbaciones se ha creado toda una teoría que encierra dicha problemática.

El aporte de este trabajo es presentar la aplicación de un nuevo método para la estimación del error inducido por perturbaciones en las condiciones iniciales basado en sistemas adjuntos, cuya teoría fue recientemente propuesta para ecuaciones algebraicas diferenciales (Cao 2004). Apoyándose en dicha técnica se obtiene que la estimación del error es independiente de las perturbaciones iniciales, con lo cual es posible estimar el error inducido para cualquier perturbación. En este trabajo se propone una extensión de la técnica a esquemas de resolución por medio de funciones estimadoras, que permiten transformar el sistema adjunto original en un sistema puramente algebraico, para el cual es posible aplicar una gran variedad de métodos numéricos eficientes.

2 EVALUACIÓN DE ERRORES INDUCIDOS POR PERTURBACIÓN

En esta sección se presenta un método para la estimación del error inducido por perturbaciones en las condiciones iniciales de un sistema dinámico gobernado por combinaciones de ecuaciones diferenciales y algebraicas (DAE). Esta aproximación se basa en el análisis de la sensibilidad por el método adjunto y en la estimación condicional estadística (SCE) (Kenney 1994).

Sin perder generalidad se puede expresar un sistema DAE como:

$$\begin{aligned} F(x, \dot{x}, p, t) &= 0 \\ x(t_0) &= x_0(p) \end{aligned} \quad (1)$$

Se desea encontrar un estimador del error $e(t) = X(t) - x(t)$ para un tiempo $t > t_0$, donde $X(t)$ es la solución del sistema perturbado:

$$\begin{aligned} F(X, \dot{X}, p + \delta_p, t) &= 0 \\ X(t_0) &= x_0(p + \delta_p) \end{aligned} \quad (2)$$

A partir de (1) y (2) se genera la siguiente ecuación para el error $e(t)$:

$$F_{\dot{x}}(t)\dot{e}(t) + F_x(t)e(t) + F_p(t)\delta_p + O(\|e(t)\|^2) = 0 \quad (3)$$

Donde $F_{\dot{x}} = \frac{\partial F}{\partial \dot{x}}$, $F_x = \frac{\partial F}{\partial x}$, y $F_p = \frac{\partial F}{\partial p}$ son las derivadas parciales de F respecto de \dot{x} , x y p , evaluados en $(x(t), \dot{x}(t), p, t)$.

Si la matriz $F_{\dot{x}}$ no es singular, a primer orden $e(t)$ satisface:

$$\begin{aligned} F_{\dot{x}}(t)\dot{e}(t) + F_x(t)e(t) + F_p(t)\delta_p &= 0 \\ e(t_0) &= x_{0,p}(p)\delta_p \end{aligned} \quad (4)$$

De esta manera, queda en evidencia que el problema estimación del error para perturbaciones en las condiciones iniciales es el caso particular de sensibilidad, donde el parámetro es la condición inicial x_0 . Para una perturbación δ_p , el sistema (4) puede resolverse a través de un estudio de sensibilidad hacia adelante, obteniendo la evolución temporal de $e(t)$ para cualquier tiempo $t > t_0$. Sin embargo, este cálculo puede ser demasiado caro si se desea estimar el error para diferentes perturbaciones, ya que debería resolverse el problema para cada perturbación.

3 MÉTODO ESTADÍSTICO PARA LA ESTIMACIÓN CONDICIONAL

Antes de proceder a describir el método se establecerán algunas notaciones respecto de las normas. La primera de ellas es que:

$$\|v\| = \|v\|_2 = \left(\sum v_i^2 \right)^{1/2} \quad (5)$$

Donde el vector $v \in \mathbb{R}^n$. Para la norma de una función $f \in C([0, T])$, las normas L_1 -norm, L_2 -norm, y ∞ -norm son:

$$\begin{aligned} \|f\|_{L_1} &= \int_0^T \|f(t)\| dt \\ \|f\|_{L_2} &= \left(\int_0^T \|f(t)\|^2 dt \right)^{1/2} \\ \|f\|_{\infty} &= \max_{0 \leq t \leq T} \|f(t)\| \end{aligned} \quad (6)$$

El método estadístico para la estimación condicional (SCE) ofrece una alternativa interesante y eficiente para la estimación condicional de funciones no lineales, con un costo moderado en cuanto al error en la estimación.

Una medida del error puede construirse por medio del producto escalar del vector de error $e(t)$ y un vector u constante unitario. Seleccionado vectores u de manera aleatoria y

uniforme de la esfera unitaria S_{n-1} , se verifica que la media de $u e(t)$ es proporcional a la norma de $e(t)$ (Gudmundsson 1995 y Kenney 1994), es decir:

$$\langle u e(t) \rangle = W_n \|e(t)\| \quad (7)$$

Donde $\langle X \rangle$ representa el valor medio de la variable estocástica X , y W_n es un coeficiente llamado factor de Wallis (Abramowitz 1972) definido por:

$$W_n = \begin{cases} 1, & \text{si } n = 1 \\ \frac{1.3\dots(n-2)}{2.4\dots(n-1)}, & \text{si } n = \text{impar} \\ \frac{2.2.4\dots(n-2)}{\pi.1.3\dots(n-1)}, & \text{si } n = \text{par} \end{cases} \quad (8)$$

Las Ecs. (7) y (8) se pueden usar para estimar la norma $\|e(t)\|$. Seleccionando q vectores ortogonales u_1, u_2, \dots, u_q de manera aleatoria y uniforme de la esfera unitaria S_{n-1} , la estimación de $\|e(t)\|$ viene entonces dada por la proyección de $e(t)$ en el espacio generado por u_1, u_2, \dots, u_q , es decir (Gudmundsson 1995 y Kenney 1994):

$$\|e(t)\| \approx \frac{W_q}{W_n} \sqrt{\sum_{i=1}^q |u_i e|^2} \quad (9)$$

Omitiendo la variable tiempo para facilitar la legibilidad de la expresiones, la Ec. (4) puede escribirse como:

$$e(t) = \Phi(t) \left(x_{0,p} - \int_{t_0}^t \Phi^{-1}(r) F_x^{-1} F_p dr \right) \delta_p \quad (10)$$

Donde $\Phi \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la matriz fundamental correspondiente a:

$$\begin{aligned} F_x \dot{\Phi} + F_x \Phi &= 0 \\ \Phi(t_0) &= I \end{aligned} \quad (11)$$

Se puede verificar que la solución λ del sistema adjunto:

$$(F_x \dot{\lambda}) - F_x \lambda = 0 \quad (12)$$

con la condición final $\lambda(t) = z$, satisface:

$$\begin{aligned} \lambda(r) &= z \Phi(t) \Phi^{-1}(r) F_x^{-1}(r), \quad \forall r \in [t_0, t] \\ \lambda(t_0) F_x(t_0) &= z \Phi(t) \end{aligned} \quad (13)$$

Por consiguiente:

$$ze(t) = \left(\lambda(t_0) F_x(t_0) x_{0,p} - \int_{t_0}^t \lambda(r) F_p dr \right) \delta_p \quad (14)$$

El caso de perturbaciones en la condiciones iniciales se obtienen definiendo $F_p(t) = 0, \forall t$ y $x_{0,p} = I$. Si se consideran q vectores ortogonales z_j , con $1 \leq j \leq q$, seleccionados de forma uniforme y aleatoria de una esfera unitaria S_{n-1} , se obtiene el estimador SCE:

$$\begin{aligned} \|e(t)\| &\approx \frac{W_q}{W_n} \left(\sum_{j=1}^q |z_j e(t)|^2 \right)^{1/2} \\ &= \frac{W_q}{W_n} \left(\sum_{j=1}^q \left| \left(\lambda(t_0) F_{\dot{x}}(t_0) x_{0,p} - \int_{t_0}^t \lambda(r) F_p dr \right) \delta_p \right|^2 \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (15)$$

Donde λ es la solución del sistema adjunto (12) con condiciones finales $\lambda(t) = z_j$.

Una propiedad importante en esta estimación del error es que el sistema adjunto (12) es independiente de la perturbación δ_p . Así las mismas soluciones adjuntas λ pueden ser usadas para estimar el error producido por cualquier otra perturbación (evitando recalcular). Por otra parte, puede verificarse que con sólo 4 vectores z_j se puede aplicar la técnica SCE obteniendo resultados aceptables (Cao 2004).

4 OTRAS TÉCNICAS DE ESTIMACIÓN DEL ERROR

Una técnica ampliamente usada en el análisis de sensibilidad es la aproximación por diferencias finitas. Se resuelve numéricamente el sistema DAE con las condiciones iniciales $x(t_0) = x_0(p)$ y $X(t_0) = x_0(p + \delta_p)$, con lo cual se calcula $e(t) \approx X(t) - x(t)$. La ventaja de este método es la simpleza y la rapidez de implementación, mientras que la principal desventaja es que el error en la estimación es significativo.

Otra técnica que se puede aplicar para la estimación de $\|e(t)\|$ proviene del cálculo de la sensibilidad por el método adjunto. Actualmente los modelos matemáticos que se están utilizando para investigar fenómenos físicos, utilizan a menudo parámetros cuyos valores no pueden ser conocidos exactamente. A raíz de esto hay una necesidad de realizar análisis de sensibilidad paramétrica de los modelos algebraicos diferenciados. Recientemente en Cao (2003) se propuso una nueva técnica denominada método de sensibilidad adjunta, en el cual es posible calcular la sensibilidad de parámetros utilizando sistemas lineales adjuntos asociados sin necesidad de extender el sistema original, lo cual permite mejorar sustancialmente la eficiencia en el cálculo.

En este sentido el interés es calcular la sensibilidad $\frac{dG}{dp}$ de una función objetivo $G(x, p)$ definida como:

$$G(x, p) = \int_0^T g(x, t, p) dt \quad (16)$$

O en su defecto la sensibilidad $\frac{dg}{dp}$ de una función $g(x, T, p)$ definida solamente en el tiempo T .

Para la estimación del error es posible utilizar esta técnica considerando el estudio de la

sensibilidad $\frac{dg}{dp}$ sobre la función escalar $g(x, T, p)$ (Cao 2003), el cual esta dado por:

$$\frac{dg}{dp} = (g_p - \lambda(t, T)^* F_p) \Big|_{t=T} - \int_0^T (\lambda_T(t, T)^* F_p) dt + \lambda_T(t, T)^* F_x x_p \Big|_{t=0} \quad (17)$$

Donde la variable adjunta $\lambda(t, T)$ depende de los parámetros t y T , y donde $\lambda_T(t, T)$ es $\frac{d\lambda(t, T)}{dT}$. A partir de (17) se obtiene que el sistema adjunto es:

$$\begin{cases} \dot{\alpha}(t)^* - \lambda_T(t, T)^* F_x = 0 \\ \alpha(t) - \lambda_T(t, T)^* F_x = 0 \end{cases} \quad (18)$$

Por ejemplo para δ_p escalar puede verse que si $g(x, t, p) = x(t, p)$ entonces:

$$\frac{dg}{dp} = \frac{dx}{dp} \approx \frac{x(t, p + \delta_p) - x(t, p)}{\delta_p} = \frac{e(t)}{\delta_p} \quad (19)$$

No obstante en el estudio de sensibilidad por el método adjunto, se necesitan los valores de las perturbaciones de los parámetros δ_p en el cálculo de las condiciones iniciales de la variable adjunta $\lambda_T(t, T)$ (Cao 2003), con lo cual la estimación de la norma del error no puede independizarse de dichas perturbaciones.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Para la solución numérica del sistema (12) (problemas de condiciones iniciales) actualmente se dispone de una variedad de métodos numéricos que pueden clasificarse en tres categorías: métodos de un paso, multipaso y de extrapolación. La eficiencia de cada tipo de aproximación depende del problema particular.

En este trabajo se resuelve el sistema (12) transformándolo en un sistema puramente algebraico mediante aproximaciones numéricas. Para ello se define una transformación reemplazando λ y $\dot{\lambda}$ por funciones $\Lambda(\lambda_n, \lambda_{n-1}, \lambda_{n-2}, \dots)$ y $D\Lambda(\lambda_n, \lambda_{n-1}, \lambda_{n-2}, \dots)$, que representan estimadores multipaso de las variables adjuntas y sus derivadas, es decir:

$$\begin{aligned} \lambda(t) &\rightarrow \sum_{i=0}^k a_i \lambda(t - i\Delta t) \\ \dot{\lambda}(t) &\rightarrow \sum_{i=0}^k b_i \lambda(t - i\Delta t) \end{aligned} \quad (20)$$

Específicamente en este trabajo se empleó un estimador implícito para las variables adjuntas y un estimador multipaso lineal clásico (Jackson 1980) en las derivadas, es decir:

$$\lambda = \lambda(t), \quad \dot{\lambda} = \sum_{i=0}^k \frac{\alpha_i \lambda(t - i\Delta t)}{\Delta t} \quad (21)$$

Para analizar la aplicación del método SCE en la estimación de $\|e(t)\|$ se propusieron 3 casos de prueba:

- Un sistema lineal: el objetivo en este caso fue estudiar el error entre la solución

numérica y la solución explícita;

- Péndulo elástico: en este ejemplo se analizó la aproximación de la norma del error variando la cantidad q de vectores ortogonales (ver (15));
- Sistema atractor de Rossler: para estudiar un caso con inestabilidad intrínseca.

5.1 Sistema lineal

Una ecuación diferencial muy simple que puede servir de base para el análisis de sensibilidad es el sistema de primer orden dado por:

$$\begin{aligned} F(\dot{x}, x, p, t) &= \dot{x} + px = 0 \\ x(0) &= p \end{aligned} \quad (22)$$

El cual posee un único parámetro p , y donde la solución explícita es:

$$x(t, p) = pe^{-tp} \quad (23)$$

El objetivo de trabajar con este sistema lineal es obtener una medida del error entre la solución explícita y la solución estimada de los términos $\beta|_{t=t_0} = -\int_{t_0}^T \lambda(r)F_p dr$ y $\lambda(t_0)F_x(t_0)x_{0,p}$, siendo β una variable de cuadratura utilizada para calcular el término integral de la ecuación (15).

Para estimar $\|e(T)\|$ utilizando (12) hallamos la solución del siguiente sistema adjunto (Cao 2003 y Cao 2004):

$$\begin{cases} \dot{\alpha}(t) - \lambda(t)F_x = 0 \\ \alpha(t) - \lambda(t)F_x = 0 \\ \dot{\beta} - (\lambda(t)F_p) = 0 \end{cases} \quad (24)$$

donde $F_x = p$, $F_x = 1$, $F_p = x$ son las derivadas parciales de F . Dado que $\lambda(T) = z_j$ y $t_0 = 0$, se obtiene que la variable adjunta está dada por:

$$\lambda(t) = z_j e^{p(t-T)} \quad (25)$$

Mientras que el término integral esta dado por:

$$\beta|_{t=0} = -\int_0^T \lambda(s)x(s)ds = -\int_0^T z_j p e^{-pT} ds = -z_j p T e^{-pT} \quad (26)$$

A partir de (15), (25) y (26) se obtiene que:

$$\begin{aligned} \|e(T)\| &\approx \frac{W_q}{W_n} \left(\sum_{j=1}^q \left| \left(\lambda(0)F_x(0)x_{0,p} - \int_0^T \lambda(r)F_p dr \right) \delta_p \right|^2 \right)^{1/2} \\ &= \frac{W_q}{W_n} \left(\sum_{j=1}^q \left| \left(z_j \delta_p e^{-pT} (1-pT) \right) \right|^2 \right)^{1/2} = |\delta_p| e^{-pT} (1-pT) \end{aligned} \quad (27)$$

La evolución temporal de la estimación de la norma del error $\|e(T)\|$ puede verse en la

figura 1.

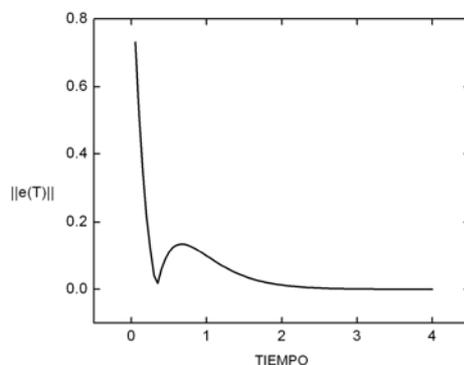


Figura 1. Evolución temporal de la estimación de $\|e(T)\|$ para $p = 3$.

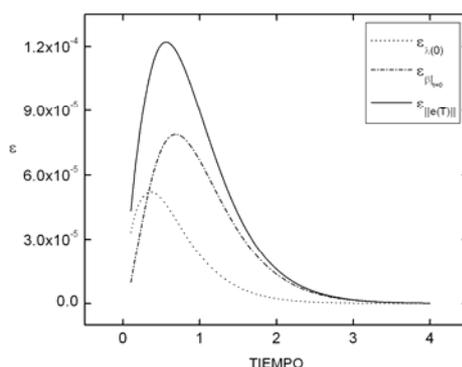


Figura 2. Cálculo del error absoluto para los términos $\beta|_{t=0}$, $\lambda(0)$ y $\|e(T)\|$.

En la figura 2 se observa el error absoluto ε para los términos $\beta|_{t=0}$, $\lambda(0)$ y $\|e(T)\|$ con respecto a la solución explícita (por ejemplo $\varepsilon_{\lambda(0)}$ es la diferencia absoluta entre la solución explícita y la solución numérica para $\lambda(0)$). En la misma se puede ver que dicha medida tiene forma de campana sesgada a izquierda, producto de que en la estimación del error para T entre 0 y 1 existen cambios abruptos en la derivadas, con lo cual se genera una pequeña imprecisión numérica. El error absoluto asociado al término integral es el de mayor orden, no obstante es relativamente pequeño comparado con el paso de tiempo $dt = 1.0 \times 10^{-3}$ utilizado para el cálculo numérico.

5.2 Péndulo elástico

El péndulo elástico es un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales de cuarto orden, cuyas variables de estado natural son la longitud del brazo elástico, el ángulo de inclinación respecto a la vertical, y sus respectivas derivadas temporales:

$$\begin{aligned}
 z &= \dot{r} \\
 w &= \dot{\theta} \\
 \dot{z} - rw^2 &= -\frac{k}{m}(r-L) + g \cos(\theta) \\
 r\dot{w} + 2zw &= -g \operatorname{sen}(\theta)
 \end{aligned}
 \tag{28}$$

En este caso no existe solución explícita analítica. En la figura 3 se muestra la evolución numérica de la posición de la masa para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $k = 7$, $L = 1$, $m = 0.1$, $g = 9.8$, $r(0) = 1$, $\theta(0) = \pi/2$, $\dot{r}(0) = 0$ y $\dot{\theta}(0) = 0$.

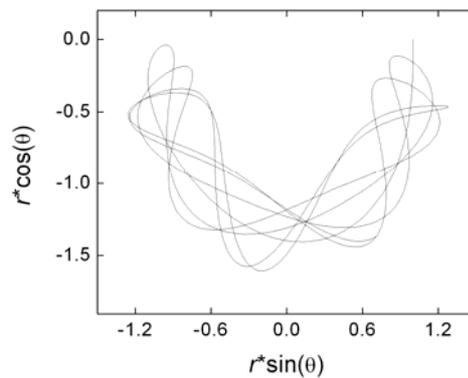


Figura 3. Posición de la masa.

Donde $y = -r \cos(\theta)$ y $x = r \sin(\theta)$. En la figura 4 se grafica la estimación de $\|e(T)\|$ en función de q (cantidad de vectores ortogonales) según (15), en la cual se puede ver que a medida que q se acerca a 4 la diferencia entre las aproximaciones de $\|e(T)\|$ va disminuyendo, obteniendo los mejores casos para $q = 3, 4$. Por otro lado en la figura 5 se representa la estimación de $\|e(T)\|$ para distintos órdenes del estimador multipaso (21). En dicha figura se puede observar que para ordenes $k \geq 2$ los resultados se aproximan entre si, obteniendo una diferencia para $k = 1$ de aproximadamente el 50%.

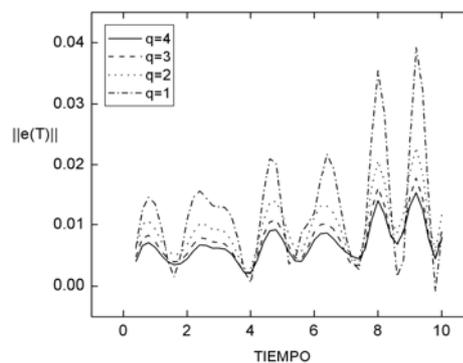


Figura 4. Estimación de $\|e(T)\|$ en función de q .

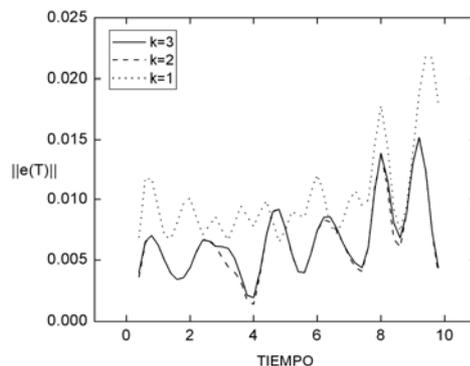


Figura 5. Estimación de $\|e(T)\|$ en función de k (multipaso).

5.3 Sistema de Rossler

El último caso de prueba es un sistema no lineal caótico conocido como sistema de Rossler (Thompson 1987). El sistema de ecuaciones es:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -y - z \\ \dot{y} &= x + ay \\ \dot{z} &= b + z(x - c)\end{aligned}\quad (29)$$

Donde x, y, z son las variables de estado y a, b, c son los parámetros.

Este sistema tiene propiedades oscilatorias (autovalores complejos) y presenta caos para algunos valores de los parámetros (por ejemplo $a = 0.398$, $b = 2$ y $c = 4$, figura 6). Este comportamiento caótico es interesante porque naturalmente se presentan inestabilidades que amplifican cualquier perturbación.

Usando los parámetros de la figura 6, se compararon los errores estimados con los métodos SCE, adjunto y diferencias finitas. Los resultados se muestran en la figura 7. En la misma se puede observar que el logaritmo de la estimación del error crece de manera lineal, lo cual es característico de los sistemas caóticos (sensibilidad a las condiciones iniciales (Thompson 1987)). Puede observarse que para los 3 métodos aplicados los resultados son similares, aunque levemente mejores para los métodos SCE y adjunto.

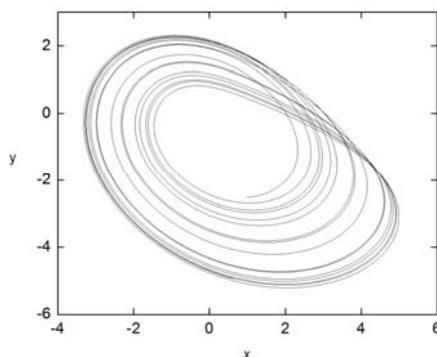


Figura 6. Espacio de las fases (x e y).

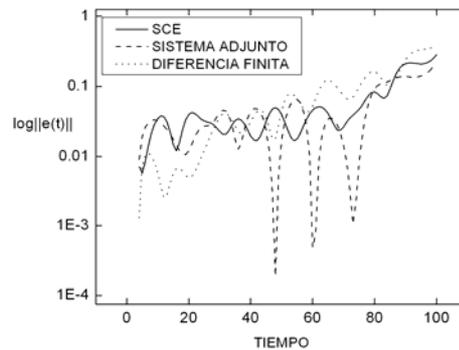


Figura 7. Estimación del error los métodos SCE, sistema adjunto y diferencias finitas.

6 CONCLUSIONES

De los ejemplos anteriores, se puede ver que la estimación de $\|e(t)\|$ como medida del error, es obtenida casi siempre con errores de precisión bastante pequeños. Para el sistema lineal (5.1), el método SCE permite obtener una solución mucho más aproximada. Cuando el sistema es no lineal (5.2 y 5.3), la estimación del error por el método SCE produce una solución bastante aceptable. Se puede discutir incluso, que se presentan casos con imprecisión en los resultados, pero para los métodos comparados, claramente el método propuesto permite mejorar el resultado final.

No obstante, la propiedad más importante en la estimación del error usando el método SCE, es que el cálculo del sistema adjunto asociado es independiente del parámetro perturbado, por lo tanto las soluciones adjuntas, obtenidas para un parámetro particular, pueden ser usadas para estimar el error producido por cualquier otra perturbación, evitando de esta manera tener que recalcular.

REFERENCIAS

- G. Dahlquist, On the control of the global error in stiff initial value problems, in *Numerical Analysis*, Dundee, 1981, Lecture Notes in Math. 912, Springer-Verlag, pp. 38–49.
- E. Hairer, S. Norsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, Springer-Verlag, New York, 1987.
- P. Henrici, *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, New York, 1962.
- L. F. Shampine and H. A. Watts, Global error estimation for ordinary differential equations, *ACM Trans. Math. Software*, 2 (1976), pp. 172–186.
- R. D. Skeel, Thirteen ways to estimate global error, *Numer. Math.*, 48 (1986), pp. 1–20.
- H. J. Stetter, Global error estimation in ODE-solvers, in *Numerical Analysis*, Lecture Notes in Math. 630, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978, pp. 179–189.
- P. Faucher, M. Gavart, and P. D. Mey, Isopycnal empirical orthogonal functions (EOFs) in the North and tropical Atlantic and their use in estimation problems, *J. Geophys. Res-Oceans*, 107 (2002), p. 3107.
- H. Kuroda and M. Kishi, A data assimilation technique applied to estimate parameters for the NEMURO marine ecosystem model, *Ecological Modelling*, 172(1) (2004), pp. 69–85.
- Y. Cao and L. Petzold, A Posteriori Error Estimation and Global Error Control for Ordinary Differential Equations by the Adjoint Method, *SIAM J. Scientific Computing* 26(2), 359-

374, 2004.

- C. S. Kenney and A. J. Laub, Small-sample statistical condition estimates for general matrix functions, *SIAM J. Sci. Comput.*, 15 (1994), pp. 36–61.
- T. Gudmundsson, C. Kenney, and A. Laub, Small-sample statistical estimates for matrix norms, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16(3) (1995), pp. 776–792.
- Y. Cao, S. Li, L. R. Petzold, and R. Serban, Adjoint Sensitivity Analysis for Differential-Algebraic Equations: The Adjoint DAE System and its Numerical Solution, *SIAM J. Sci. Comput.* 24(3) (2003), 1076-1089.
- J. Thompson and H. Stewart, *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Wiley. 1987.
- Jackson R. and Sacks-Davis R. 1980. An Alternative Implementation of Variable Step-Size Multistep Formulas for Stiff ODEs. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 6, 295–318.
- Abramowitz, M. and Stegun, I. A. 1972. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 9th printing. New York: Dover, p. 258.