Week_1

L T Stein & M van de Streek

2023-05-07

Contents

List of Figures

1 Introductie

In dit onderzoek wordt er gekeken naar een model die een evenwichtstoestand aanduid. Dit wordt gedaan met behulp van een praktijkvoorbeeld. In dit voorbeeld wordt een schaal gevuld met M&M's. Er wordt steeds een vast aantal M&M's toegevoegd en een vast percentage vanaf gehaald. Uiteindelijk komt de schaal in evenwicht. Om dit te experiment na te bootsen wordt een model gebruikt.

1.1 Doel

Het doel van dit onderzoek is om een model te maken/gebruiken die een verglijkbaar resultaat geeft als het reële verloop van het experiment. Dit doel willen we bereiken door het model in R uit te werken en die toe te kennen aan een variabele. Hiermee kunnen figuren gemaakt worden als visualisatie van de simulatie.

De verwachting van het onderzoek is dat aan de hand van het volgende model de resultaten gelijk zijn aan het reele verloop van het experiment.

Model:

$$dY = 10 - 0.1 * (Y + 10)$$

1.2 Theorie

Tijdens dit model wordt een zak M&M's gebruikt. Uit deze zak worden steeds een constant aantal toegevoegd aan een schaal. Vervolgens wordt er steeds weer 10% van dit aantal uit deze schaal gehaald. Vereenvoudigd is dit dus: voeg 10 stuks toe en haal vervolgens 10% eraf.

De variabeles in de formule veranderen niet, er komt steeds een absoluut aantal van 10 bij en er wordt een procentueel aantal van 10 afgehaald.

Biologisch model:

$$dY = 10 - 0.1 * (Y + 10)$$

Elementen

- dY = nieuwe volume na verandering in tijdseenheid
- Y = nieuwe volume
- minus 0.1; is de 10 % correctie
- 10 is het huidige volume

Transformaties

Hieronder worden de antwoorden op de vragen gegeven.

1. In de vergelijking zitten twee constanten: 10 en 0,1. Deze waardes veranderen niet en zijn dus niet afhankelijk van Y.
2. De variabele Y verandert steeds.
3. Variabele Y heeft als initiële waarde 9.
4. De tijdsframe van dit experiment begint bij t=0 tot t= variabele.
5. Als de 10% van het volume gelijk is aan een absoluut aantal wat er bij komt (=10) dan is de vergelijking in evenwicht.
6. Het evenwichtsmoment is af te lezen uit dY.

Dus het principe dat de variabelen hetzelfde blijven kan met de volgende citaat beargumenteerd worden: *"An equilibrium of a dynamical system is a value of the state variables where the state variables do not change."* [1]

2 Methode

2.1 Het software model

Om dit model uit te werken zal gebruik gemaakt worden van R. In R gebruiken we het pakket deSolve. deSolve zal de differentiaal vergelijking oplossen met een zelfgeschreven functie. Onze functie heeft als doel om het nieuwe volume te berekenen.

```r
# Het paket inladen
library(deSolve)
```

```r
# Het opzetten van de parameters
parameters <- c(addVolume = 10, pV = 0.1)
```

```r
# Het defineren van de functie
volume <- function(t, y, parameters) {
  with(as.list(c(parameters)),{
  dY <- addVolume - pV * (y+addVolume)
  return(list(c(dY)))
  }
  )
}
```

```r
# Initiële startwaarde
state <- c(Volume = 0)
```

```r
# Het defineren van de time sequentie
times <- seq(0, 100, by = 1)
```

```r
# voer simulatie uit met behulp van continue benadering
out <- ode(times = times, y = state, parms = parameters, func = volume, method = "euler")
```

Allereerst maken we dus onze functie. Vervolgens berekent deSolve de differentiaal verglijking. Hiervoor zijn een aantal parameters nodig: startwaarde en timeframe. Als de functie en parameters zijn gedefineerd kan ode functie van deSolve aangroepen worden. Ode staat voor ordinary differential equations.

DeSolve heeft zoals vermeld twee parameters nodig: startwaarde en timeframe. De startwaarde is 0, omdat de schaal natuurlijk leeg begint. Het timeframe loopt van 0 tot 100, want 10% van 100 is 10. 10 is de absolute waarde die er steeds bijkomt. Dit kunnen we defineren. De waardes worden opgeslagen in de variabele *out*.

2.2 Model configuratie

Table 1: Parameter Values

Parameter	**Value**	**Unit**
$parameters$	10,0.1	$V, percentage$
$state$	0	V
$times$	100	/1

Parameter 1, de steeds opgetelde volume is 10 met eenheid V, wat staat voor volume. Parameter 2, de percentage-volume is 0.1, wat 1 honderste is van 10 en dus honderd stappen nodig heeft om het equilibrium te bereiken. Omdat er sprake is van een percentage geldt dat ook voor zijn eenheid. State begint bij een volume van nul met eenheid V. Dit is een logische start met geen M&Ms in de schaal. Times begint bij 0 tot 100 keer, voor veel data punten om een curve te plotten. De eenheid gaat per stap, dus per $1 = /1$.

3 Resultaten

```
head(out)
```

```
##      time  Volume
## [1,]    0  0.0000
## [2,]    1  9.0000
## [3,]    2 17.1000
## [4,]    3 24.3900
## [5,]    4 30.9510
## [6,]    5 36.8559
```

```
plot(
  out,
  main = "Verloop van de volume van de vergelijking",
  xlab = "Tijdsframe (t=0 tot t=100)",
  ylab = "Volume (aantal M&M's)",
  col = "blue",
  lwd = 3,
  ylim = c(0, 200))

lines(ode(times = times, y = c(state=100), parms = parameters,
          func = volume, method = "euler"), col = "red", lwd = 3)

legend("topleft",
       legend = c("Originele model", "Initiële startwaarde van 100"),
       col = c("blue", "red"),
       lwd = 3)
```

De bovenstaande grafiek geeft het verloop van de vergelijking weer die bovenstaand is gedefineerd/uitgelegd. Ook is het verloop geplot bij een initiële startwaarde van 100. Dit verloop heeft een rode kleur.

Naar aanleiding van de bovenstaande figuur kan er verondersteld worden dat onze hypothese klopt. Namelijk er ontstaat een gelijke berg parabool als bij het experiment en bij de eerste 6 tijdseenheden vormen gelijke volumes. Echter is het wel goed om de verandering op te merken bij een startwaarde van 100 (zie model configuratie voor uitleg). Onderstaand wordt de uitleg hiervoor gegeven.

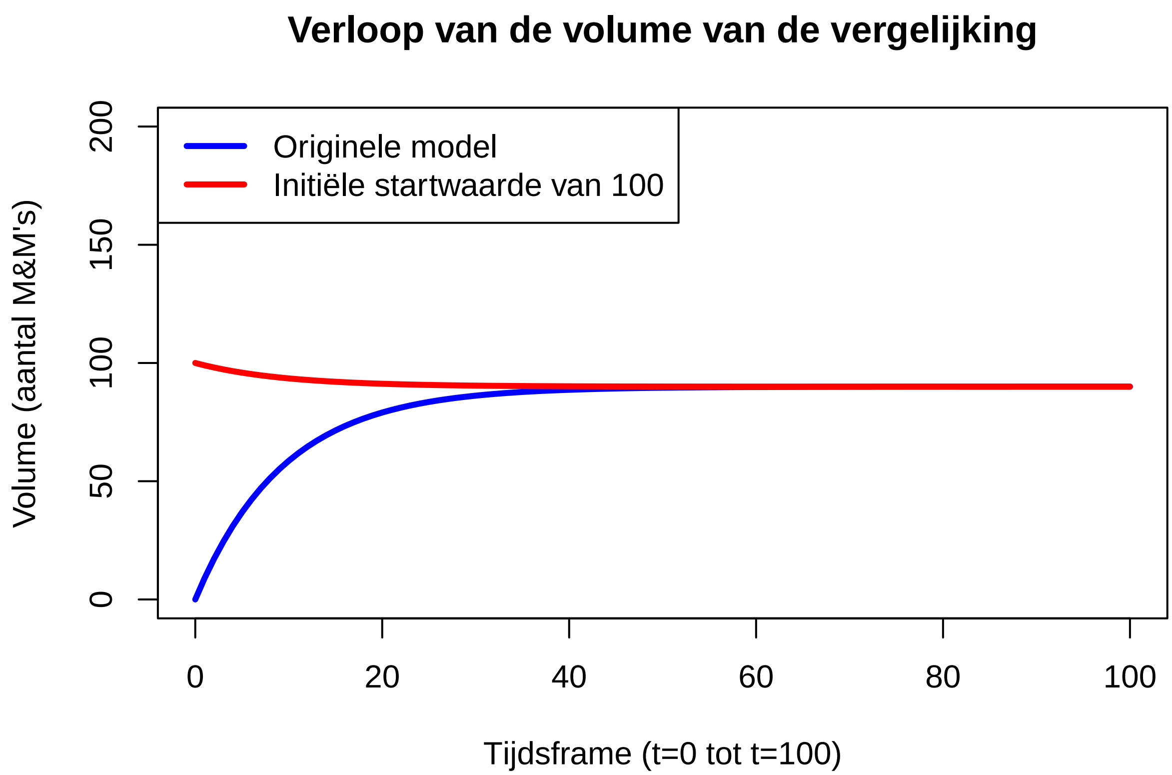

Figure 1: Verloop van de volume van het model

Observatie van de resultaten:

1. Er vindt geen verandering plaats bij het aanpassen van de parameters. Het blijven constante variabelen en dus verandert het verloop niet.
2. Als je de initiële waarde aanpast, geeft deze pas een ander effect bij 100. Er zal een dal grafiek ontstaan in plaats van een berg grafiek. Dit is omdat het percentage hier velen malen hoger is dan het aantal wat er bijkomt.
3. Bij het veranderen van de time frame zal de visualisatie uitstrekken of krimpen, echter veranderd er niets in dY.
4. De evenwichts toestand blijft bij honderd, echter zal het gedrag bij de evenwichts toestand anders zijn, omdat er geen volume bij toegevoegd wordt, zal het volume door de niet stijgende volume_percent niet afnemen.

4 Discussie en Conclusie

4.1 Discussie

De output van head(out) geeft voor de eerste 6 volumes per tijdseenheid dezelfde volumes als uit week1.pdf. Verder curved de berg parabool ook gelijk als uit de pdf.

Omdat bij dit onderzoek de hypothese uitkwam, waren er niet veel verrassende resultaten. Echter was het wel duidelijk om te zien dat de grafiek een ander verloop toonde bij een initiële startwaarde van 100.

Een verbeterplan voor het volgende onderzoek is om de parameters beter af te stemmen. Bij een initiële startwaarde van 100 werd duidelijk dat de grafiek een ander verloop had. Dit soort verlopen kunnen wellicht nog meer worden opgespoord door meer met de parameters te schuiven.

4.2 Algemene conclusie en perspectief

Discuss what your goal was, what the end result is and how you could continue working from here.

Het doel was het bevestigen van de hypothese, namelijk *De toename van de volume zal afnemen door een toenemende correctie; op basis van het toenemende volume wordt de correctie bepaald. Dit principe is de evenwicht status.*.

Tevens kwamen de eerste 6 volumes overeen met die van het experiment. Bovendien ontstond dezelfde berg parabool als in het experiment, dat aantoont dat alle resultaten inderdaad hetzelfde zijn als bij het experiment. Als eindresultaat is er dus een grafiek geplot dat bij volume is gelijk aan honderd, een evenwicht plaats vindt. Echter zal de curve pas gaan afnemen als er een volume steeds wordt toegevoegd bij de correctie.

Vanaf dit punt kunnen we interpreteren welke correcties en factoren belangrijk zijn om een dataset te simuleren die gelijk is aan een uit experiment gevormde data set.

References

[1] Nykamp DQ, “Equilibrium definition.” From Math Insight: *Equilibrium definition*, 4-24, 2023.

5 Oefenen met de tutorial

Onderstaand volgen nog een aantal scripts met modellen. Deze scripts zijn afkomstig van de deSolve documentatie. Voor elke case worden de volgende vragen beantwoord:

1. Welke parameters (constantes) zitten er in de vergelijking(en)?
2. Wat is/zijn de initiële waarde(s)?
3. Wat is het tijdsframe van dit experiment?
4. Beschrijf in je eigen woorden wat de plots laten zien (indien van toepassing).

Ook wordt er per plot beschreven wat de grafiek allemaal laat zien.

5.1 Lorenz model

```
parameters <- c(a = -8/3, b = -10, c = 28)
# initiele waarde
state <- c(X = 1, Y = 1, Z = 1)
```

```
Lorenz<-function(t, state, parameters) {
 with(as.list(c(state, parameters)),{
   # rate of change
   dX <- a*X + Y*Z
   dY <- b * (Y-Z)
   dZ <- -X*Y + c*Y - Z

   # return the rate of change
   list(c(dX, dY, dZ))
   }) # end with(as.list ...
   }
```

```
# Time units zero to one hundred
times <- seq(0, 100, by = 0.01)
```

```
# loading in deSolve
library(deSolve)
out <- ode(y = state, times = times, func = Lorenz, parms = parameters)
```

```
head(out)
```

```
##      time         X        Y        Z
## [1,] 0.00 1.0000000 1.000000 1.000000
## [2,] 0.01 0.9848912 1.012567 1.259918
## [3,] 0.02 0.9731148 1.048823 1.523999
## [4,] 0.03 0.9651593 1.107207 1.798314
## [5,] 0.04 0.9617377 1.186866 2.088545
## [6,] 0.05 0.9638068 1.287555 2.400161
```

```r
par(oma = c(0, 0, 3, 0))
plot(out, xlab = "time", ylab = "-")
plot(out[, "X"], out[, "Z"], pch = ".")
mtext(outer = TRUE, side = 3, "Lorenz model", cex = 1.5)
```

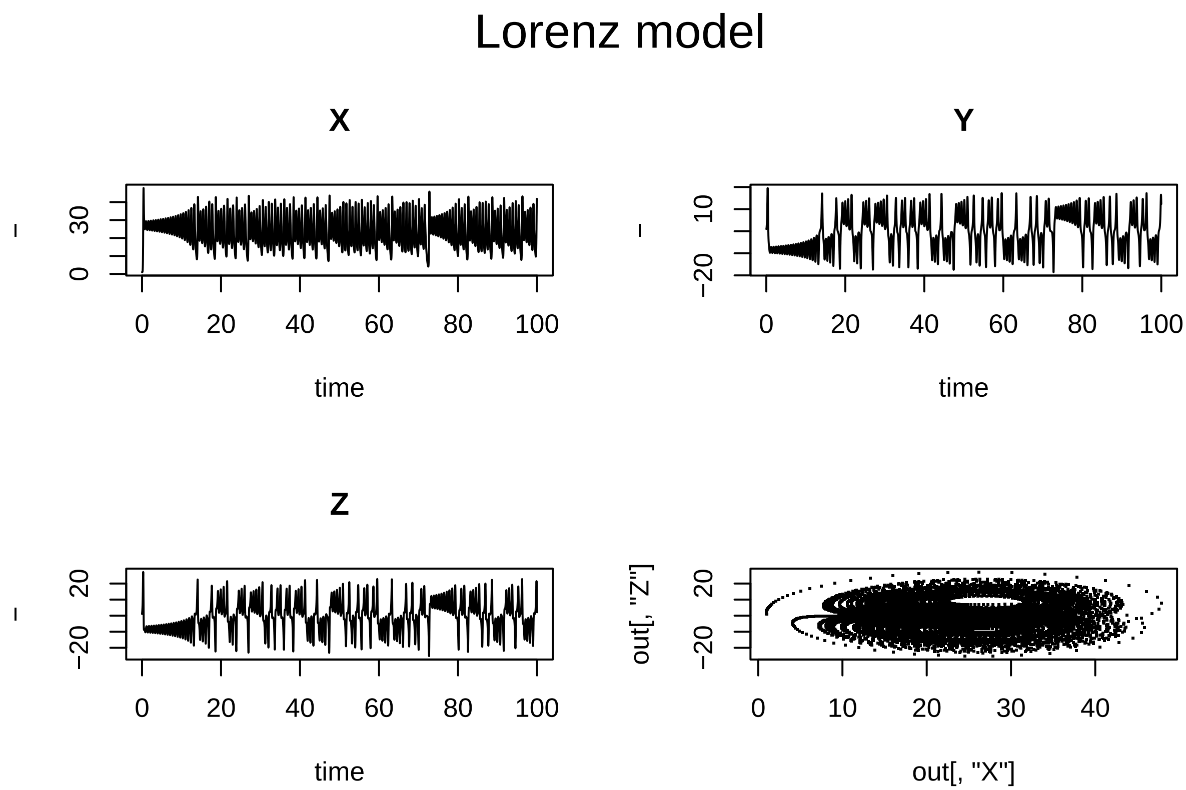

Figure 2: Dynamiek van drie verschillende state waarden bij ideaal gedrag van aardse atmosfeer

1. Welke parameters (constantes) zitten er in de vergelijking(en)?

Table 2: Parameter Values

Parameter	Value	Variables
parameters	8/3, -10, 28	a, b, c

In de bovenstaande tabel zijn de parameters die in de vergelijkingen gebruikt worden.

2. Wat is/zijn de initiële waarde(s)?

Table 3: Parameter Values

Parameter	**Value**	**Variables**
state	1, 1, 1	X, Y, Z

Zoals in de tabel hierboven te zien, zijn de intiële waardes steeds 1.

3. Wat is het tijdsframe van dit experiment?

Table 4: Parameter Values

Parameter	**Value**	**Variables**
times	100	/0.01

De tijdsframe uit de bovenstaande tabel bestaat uit 100 tijdseenheden per 0.01.

4. Beschrijf in je eigen woorden wat de plots laten zien (indien van toepassing)

Er zijn drie plots X, Y, Z met allemaal dezelfde initiële waarden, maar verschillende formules die de dynamiek van het gedrag van de aardse atmosfeer beschrijven.

Vervolgens is er een extra plot dat de data van X en Z combineerd, dit vormt het eind model. Want X en Z kunnen we zien, maar Y gaat de diepte in en wordt daarom hier dus niet in de eindplot meegenomen.

5.2 Combustion model

In deze sectie worden vier scenarios genomen van dezelfde data met verschillende intiële waarden.

```
library(deSolve)
combustion <- function (t, y, parms)

list(y^2 * (1-y) )
yini <- 0.01
times <- 0 : 200

out <- ode(times = times, y = yini, parms = 0, func = combustion)
out2 <- ode(times = times, y = yini*2, parms = 0, func = combustion)
out3 <- ode(times = times, y = yini*3, parms = 0, func = combustion)
out4 <- ode(times = times, y = yini*4, parms = 0, func = combustion)
```

```
# The different scenarios are plotted at once, and a suitable legend is written.
plot(out, out2, out3, out4, main = "combustion")
legend("bottomright", lty = 1:4, col = 1:4, legend = 1:4, title = "yini*i")
```

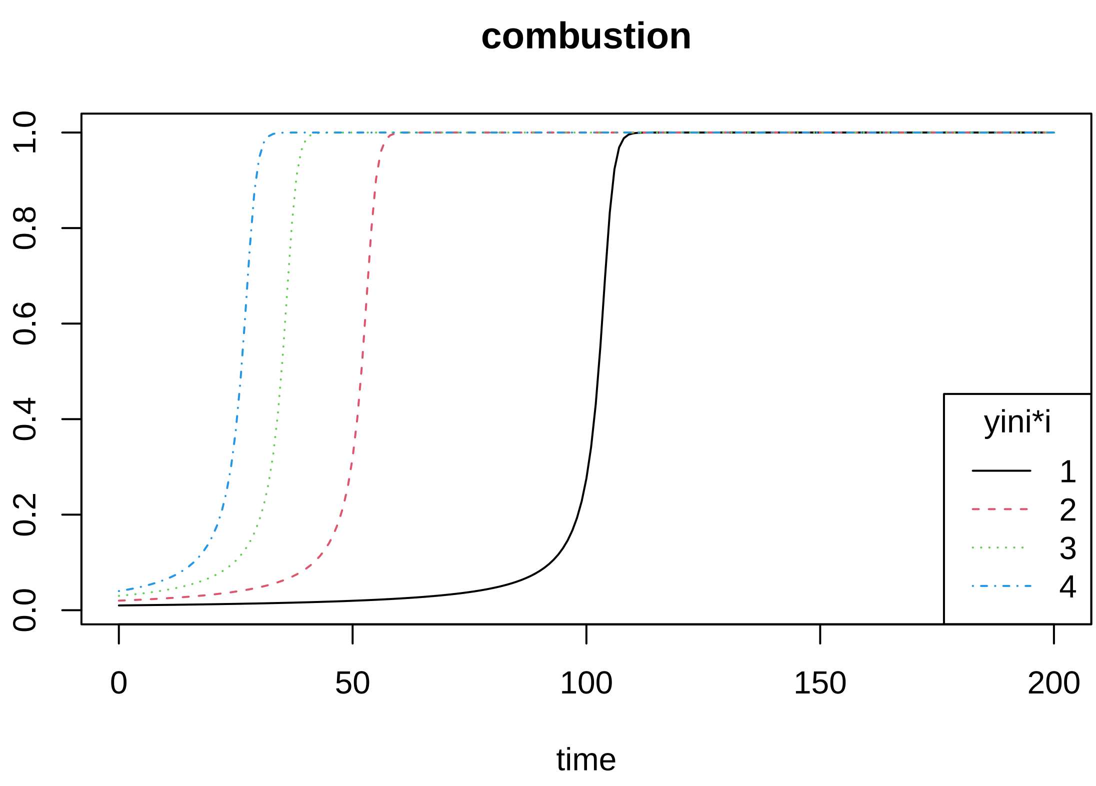

Figure 3: Combustion graph of four different scenarios

1. Welke parameters (constantes) zitten er in de vergelijking(en)?

Table 5: Parameter Values

Parameter	Value	Variables
parameters	0	*parms*

Alle drie parameters zijn nul.

2. Wat is/zijn de initiële waarde(s)?

Table 6: Parameter Values

Parameter	Value	Variables
state	0.01, yini*2, yini*3, yini*4	*yini*

Er zijn vier initiële waarden, wat begint bij 0.01=yini, vervolgens per waarde * 2, * 3 en * 4.

3. Wat is het tijdsframe van dit experiment?

Table 7: Parameter Values

Parameter	Value	Variables
times	200	/1

Er zijn 200 tijdseenheden stappen per 1 neemt.

4. Beschrijf in je eigen woorden wat de plots laten zien (indien van toepassing).

In de plot zijn vier scenarios te zien van verbranding gezet tegen tijd. Waar per scenario een andere initiële waarde is. Er is eerst een snelle stijging in een korte tijd, maar deze stopt bij een verbrandings waarde van 1.

5.3 Ccl4model

In dit model zijn ratten gedrugged met CCL4 in een kamer met toxische concentraties.

```
# data set
head(ccl4data)
```

```
##    time initconc animal ChamberConc
## 1 0.083     1000      A    828.4376
## 2 0.167     1000      A    779.6795
## 3 0.333     1000      A    713.8045
## 4 0.500     1000      A    672.0502
## 5 0.667     1000      A    631.9522
## 6 0.833     1000      A    600.6975
```

```
# data of animal A
obs <- subset (ccl4data, animal == "A", c(time, ChamberConc))
names(obs) <- c("time", "CP")
head(obs)
```

```
##    time       CP
## 1 0.083 828.4376
## 2 0.167 779.6795
## 3 0.333 713.8045
## 4 0.500 672.0502
## 5 0.667 631.9522
## 6 0.833 600.6975
```

```
# output written to matrices from out, out2 and out3
parms <- c(0.182, 4.0, 4.0, 0.08, 0.04, 0.74, 0.05, 0.15, 0.32, 16.17,
   281.48, 13.3, 16.17, 5.487, 153.8, 0.04321671,
   0.40272550, 951.46, 0.02, 1.0, 3.80000000)
   yini <- c(AI = 21, AAM = 0, AT = 0, AF = 0, AL = 0, CLT = 0, AM = 0)
   out <- ccl4model(times = seq(0, 6, by = 0.05), y = yini, parms = parms)
   par2 <- parms
   par2[1] <- 0.1
   out2 <- ccl4model(times = seq(0, 6, by = 0.05), y = yini, parms = par2)
   par3 <- parms
   par3[1] <- 0.05
   out3 <- ccl4model(times = seq(0, 6, by = 0.05), y = yini, parms = par3)
```

```
plot(out, out2, out3, which = c("AI", "MASS", "CP"),
   col = c("black", "red", "green"), lwd = 2,
   obs = obs, obspar = list(pch = 18, col = "blue", cex = 1.2))
   legend("topright", lty = c(1,2,3,NA), pch = c(NA, NA, NA, 18),
   col = c("black", "red", "green", "blue"), lwd = 2,
   legend = c("par1", "par2", "par3", "obs"))
```

```
# assumption that the total mass has been measured at day 6's end
obs2 <- data.frame(time = 6, MASS = 12)
obs2
```

```
##   time MASS
## 1    6   12
```

```
# plot with obs2
plot(out, out2, out3, lwd = 2,
 obs = list(obs, obs2),
 obspar = list(pch = c(16, 18), col = c("blue", "black"),
 cex = c(1.2 , 2)))
```

```
hist(out, col = grey(seq(0, 1, by = 0.1)), mfrow = c(3, 4))
```

De histogrammen AI, CP en MASS verlopen op dezelfde curve als de parabool grafieken van hierboven. Er is te zien dat de massa CCL4 en de toxische concentraties afnemen over tijd, bij een steeds zwaardere rat. Dus hoe hogere massa hoe sneller de giftige stoffen worden gemetaboliseerd.

1. Welke parameters (constantes) zitten er in de vergelijking(en)?

- Er zijn drie verschillende omstandigheden met ieder eigen parameters.

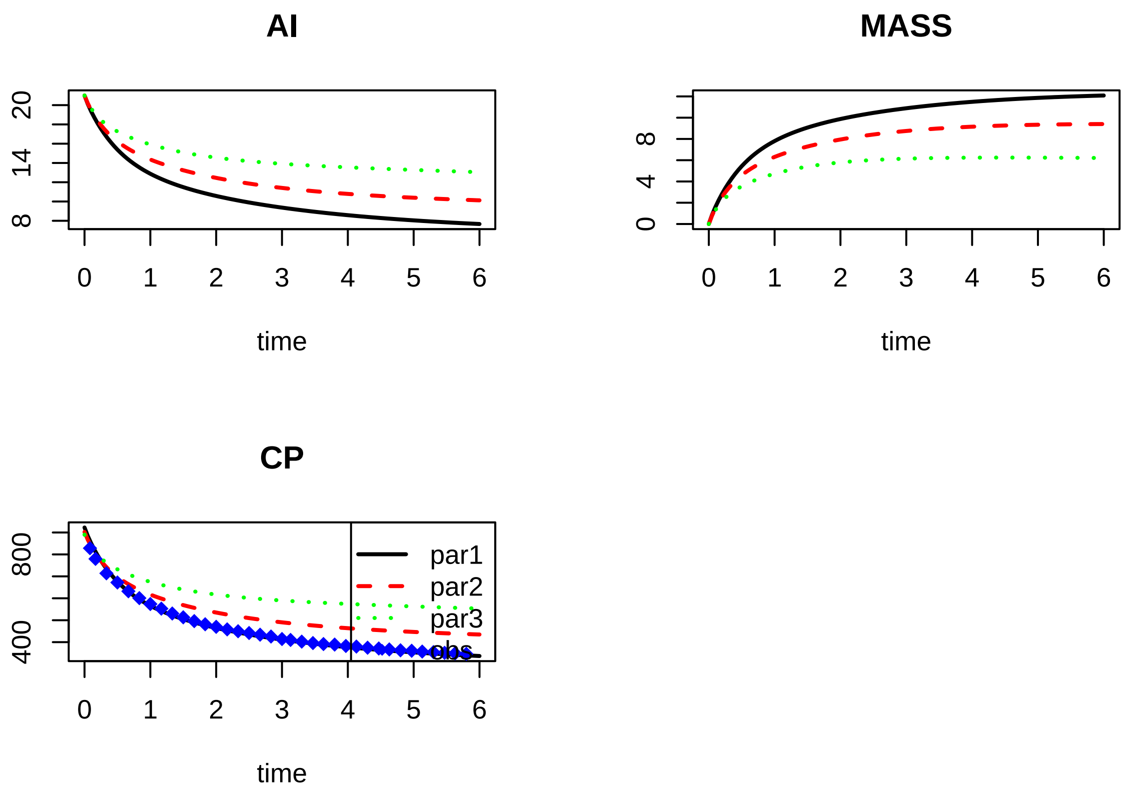

Figure 4: Hoeveelheid CCL4, toxische concentraties en gewichten van rat over tijd

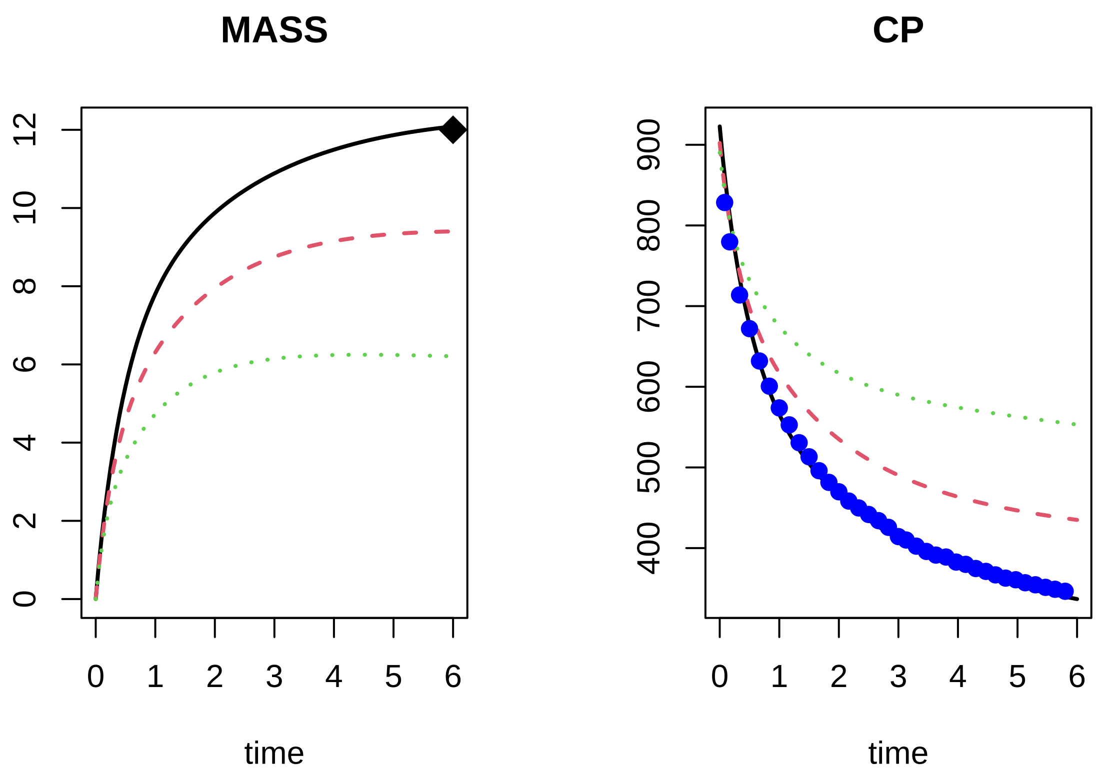

Figure 5: Totale massa en giftige concetraties van rat bij eind dag 6

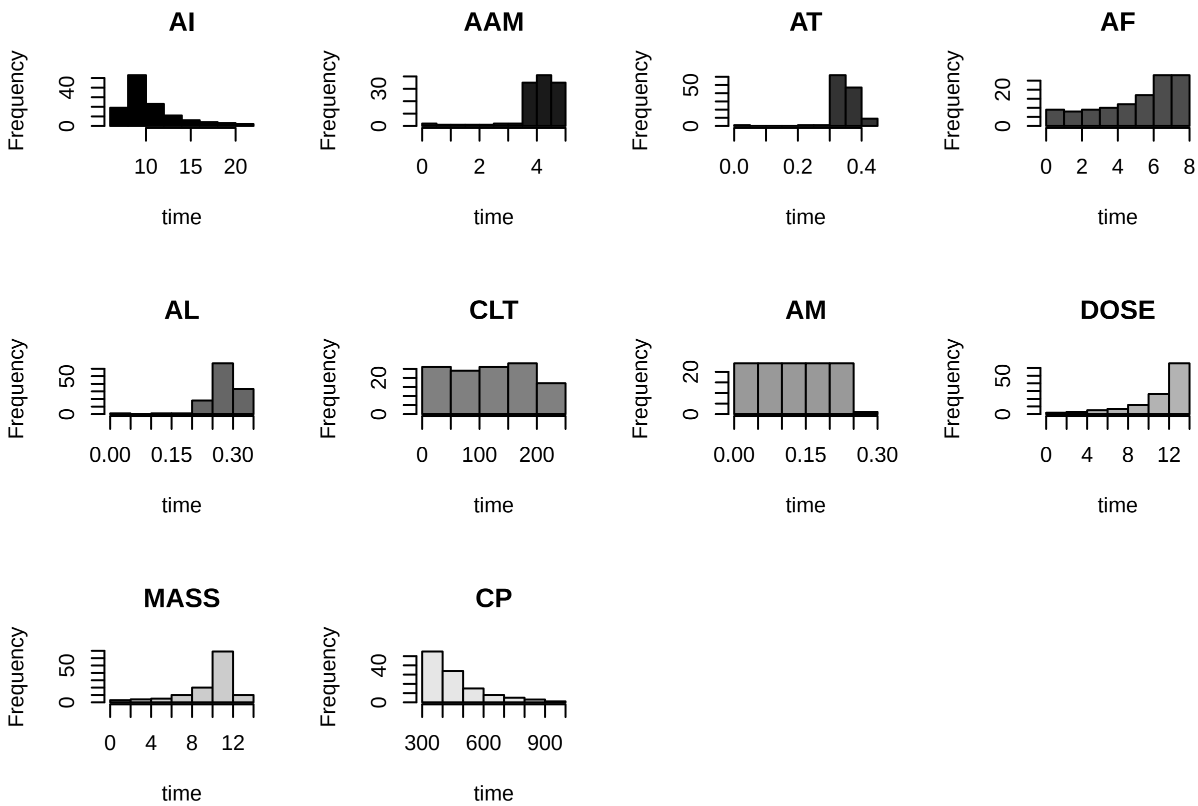

Figure 6: Histogrammen van parameters tegen tijd uitgezet

- Per omstandigheid is er 1 parameter anders, namelijk de massa van de rat.
- De volgende parameters zitten er in de vergelijkingen:

out:

- c(0.182, 4.0, 4.0, 0.08, 0.04, 0.74, 0.05, 0.15, 0.32, 16.17, 281.48, 13.3, 16.17, 5.487, 153.8, 0.04321671, 0.40272550, 951.46, 0.02, 1.0, 3.80000000)

out2:

- op plek 1 in plaats van 0.182: 0.1

out3:

- op plek 1 in plaats van 0.182: 0.05

2. Wat is/zijn de initiële waarde(s)

Er zijn verschillende initiële waardes, die hieronder te zien zijn: c(AI = 21, AAM = 0, AT = 0, AF = 0, AL = 0, CLT = 0, AM = 0) AI, de intiële totale massa van CCL4.

3. Wat is het tijdsframe van dit experiment?

- seq(0, 6, by = 0.05)
- De tijdsframe gaat van 0 tot 6 dagen en neemt per stap 0.05

4. Beschrijf in je eigen woorden wat de plots laten zien (indien van toepassing).

De plots veranderen door het hebben van een andere constante. De plots zijn drie verschillende waardes in de kamer:

1. waar CP, de toxische concentraties zijn in de kamer. Die hier dalen naarmate tijd.
2. MASS is de massa van het dier, dat hier dus groter wordt
3. AI, de intiële totale massa van CCL4.

In de plots is te zien dat hoe hoger de massa van de rat is hoe sneller de massa CCL4 en toxische concentratie gemetaboliseerd worden (afnemen).

Bij de laatste twee parabool plots wordt het verloop alleen bij dag zes getoond. Voor de massa en toxische concentraties.