Week_1_ltstein

L T Stein

4/24/2023

Contents

List of Figures

List of Tables

1 Introduction

Er is een zak M & Ms en een schaal waar steeds tien stuks aan worden toegevoegd, maar er is ook een correctie wat er vanaf wordt getrokken. Wat gebeurt er met het volume per tijdseenheid van de schaal? De volgende formule gebruiken we hierbij dY = 10 - 0.1 * (Y + 10)

1.1 Goal

1. Kijken of op basis van een formule gelijke resultaten berekend kunnen worden als de uitkomsten van een experiment.
2. Door de formule in R uit te werken en die toe te kennen aan een variabele. Hiermee kunnen figuren gemaakt worden als visualisatie van de simulatie.
3. Op basis van het gebruik van de formule dY = 10 - 0.1 * (Y + 10) zullen de uitkomsten die voorspelt worden gelijk zijn aan dat van het experiment.

1.2 Theory

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.

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

- De initiele waarde is 9
- Variabelen 10, 0.1 blijven consant
- Variabele Y veranderd, namelijk nieuwe volume
- De tijdsframe van dit experiment begint bij t=0 tot t= variabele 10 gelijk is aan de procentuele afname. Dit is het evenwichtsmoment
- 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 Methods

2.1 The software model

- Used R for calculation and visualisation
- The used library is deSolve, which is used for Ordinary Differential Equations (ODE).

```
# loading in deSolve
library(deSolve)
```

```
## Warning: package 'deSolve' was built under R version 4.2.3
```

```
# setting parameters for the add volume and percentage_volume
parameters <- c(addVolume = 10, pV = 0.1)
```

```
volume <- function(t,y,parms){
with(as.list(c(parms)),{
# define model met correctie
dY <- addVolume - pV * (y+addVolume)
# define model zonder correctie
#dY <- addVolume - pV * (y)
return(list(c(dY)))
}
)
}
```

```
#initial state
state <- c(Volume = 0)
```

```
#define time sequence you want to run the model
times <- seq(0, 100, by = 1)
```

```
# run simulation using continuous approach
out <- ode(times = times, y = state,
parms = parameters, func = volume, method = "euler")
```

2.2 Model configuration

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 Results

```r
# visualise data
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
```

```r
plot(out, main = "Euler's M&M experiment",
     xlab = "Time", ylab = "Volume",
     col = "red")
# plotting the function at volume=100 as initial state with lines function
# this shows in the main curve plot where equilibrium reaches.
lines(ode(times = times, y = c(Volume= 100),
parms = parameters, func = volume, method = "euler"), col = "blue")
legend("right", legend= c("Curve with V.state = 0", "Curve with V.state = 100"),
       col = c("red", "blue"), lwd = 2)
```

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.

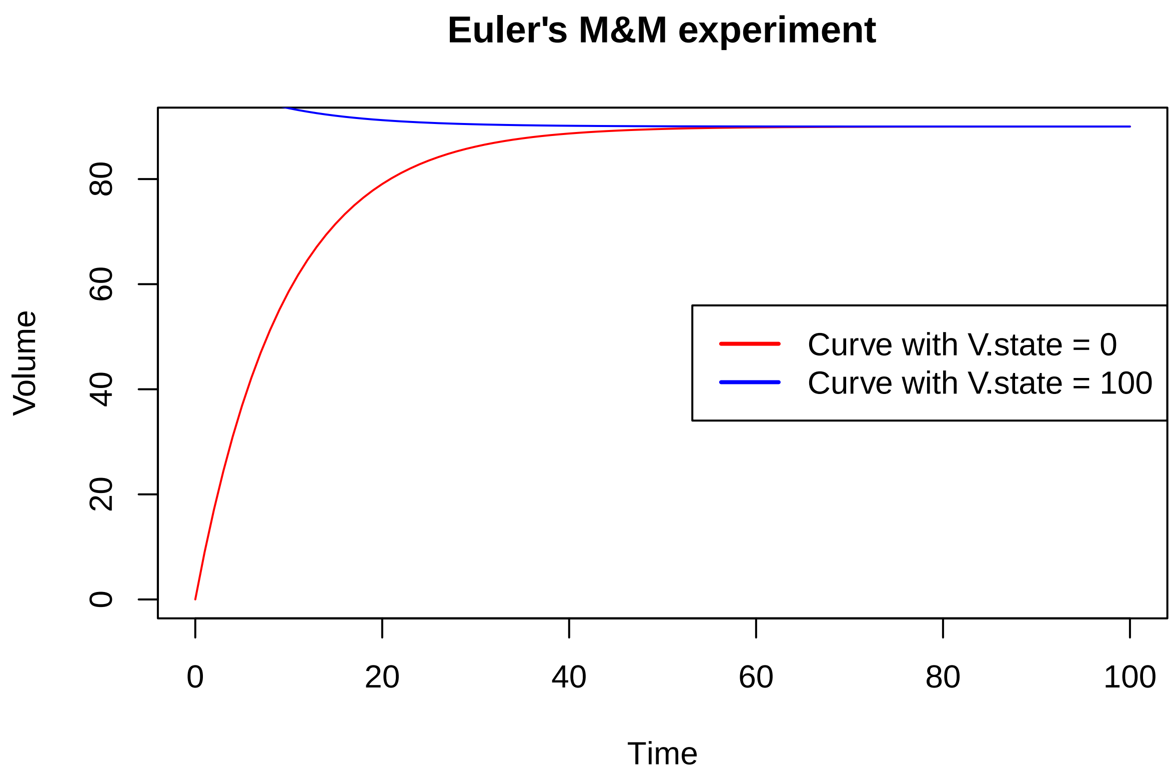

Figure 1: Curve of volume against time until it reaches equilibrium

Observatie van de resultaten:

1.

- Bij het veranderen van add volume, komt steeds hetzelfde bij, dus geen verandering in het gedrag van de grafiek.
- Hetzelfde geldt voor de percentage_volume. Er vindt geen verandering plaats, omdat dit constante waarden zijn.

2. Bij het veranderen van de initial state vanaf honderd, zal er een dal grafiek ontstaan in plaats van een berg grafiek.
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 Discussion and Conclusion

4.1 Discussion

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 de resultaten hetzelfde waren, waren er geen verrassende resultaten. Echter gaf het plotten van de initiele waarde dat gelijk aan honderd is, wel een beter beeld over wanneer het evenwicht bereikt wordt.

Als minpunt voor benadering van de methoden hadden er meerdere functies uitgevoerd kunnen worden, om toeval uit te sluiten.

4.2 General conclusion and perspective

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 data set 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

Onder de volgende kopjes worden verschillende experimenten nagebootst, hierop worden per kopje vier vragen gesteld.

5.1 Model specification

```
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)
```

5.1.1 Resultaten

```
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
```

```
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)
```

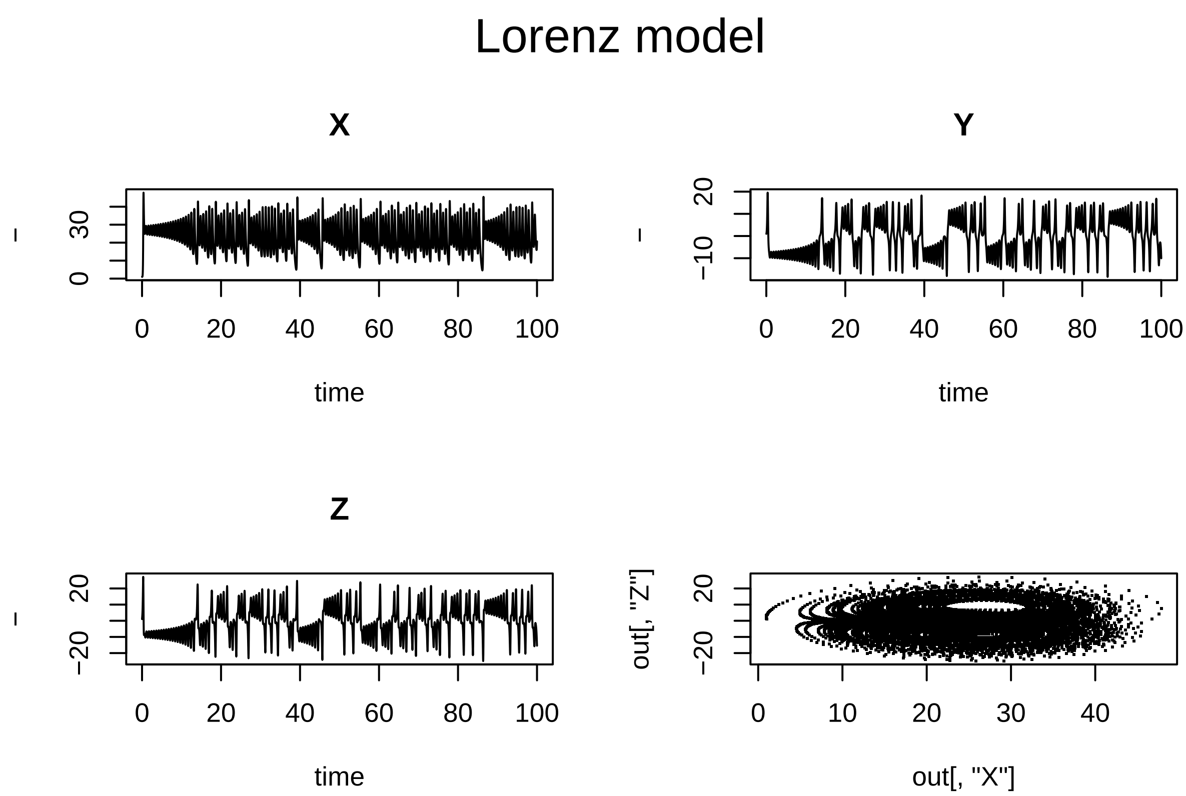

Figure 2: Dynamiek van drie verschillende state waarden bij ideaal gedrag van aardse atmosfeer

Vragen

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 | Sectie 10.1

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")
```

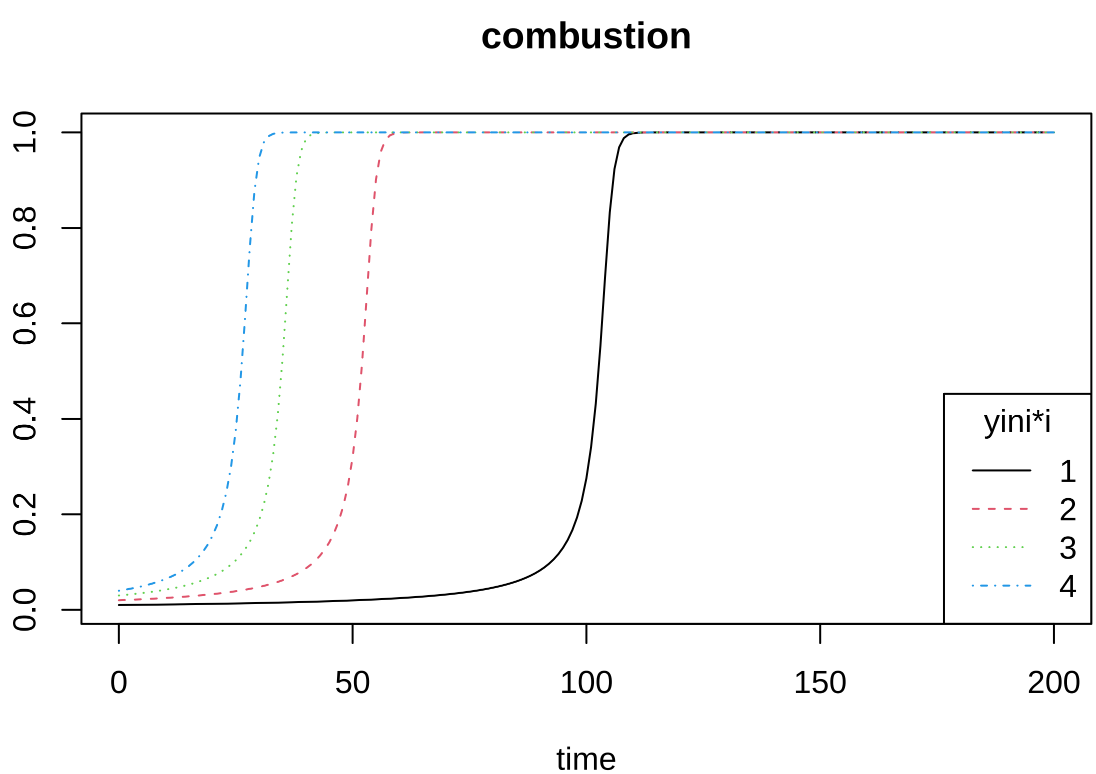

Figure 3: Combustion graph of four different scenarios

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 | Sectie 10.2

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.

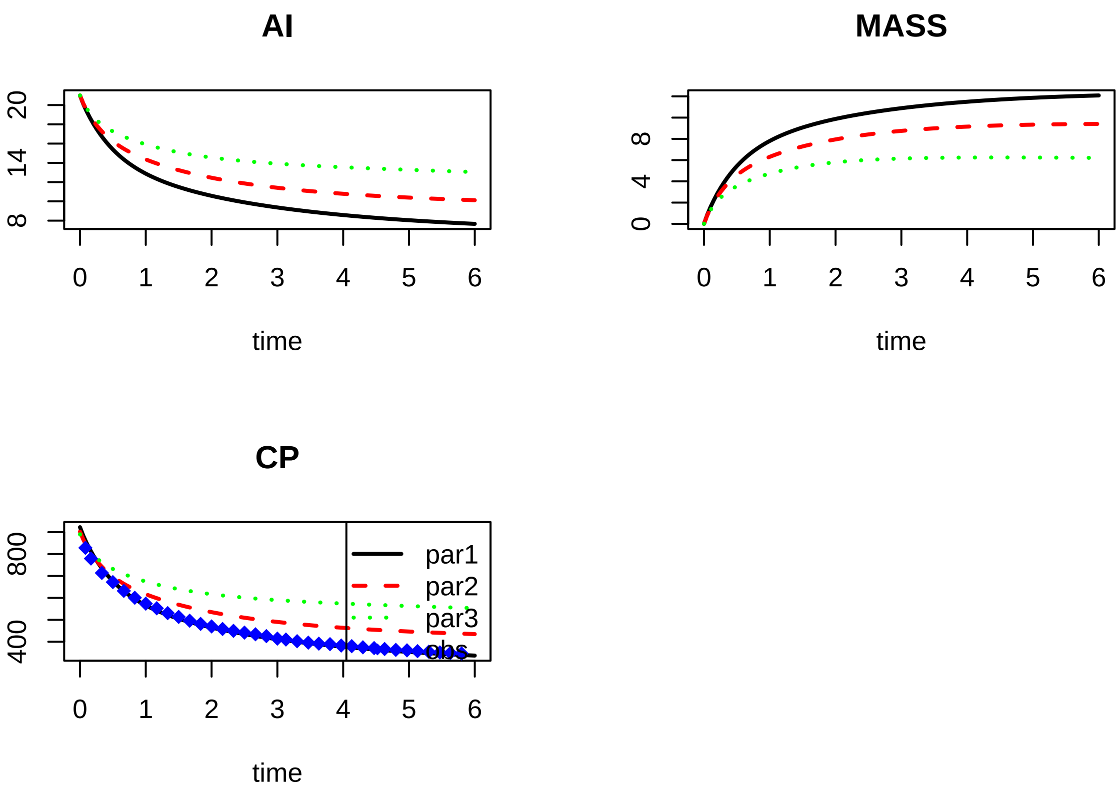

Figure 4: Hoeveelheid CCL4, toxische concentraties en gewichten van rat over tijd

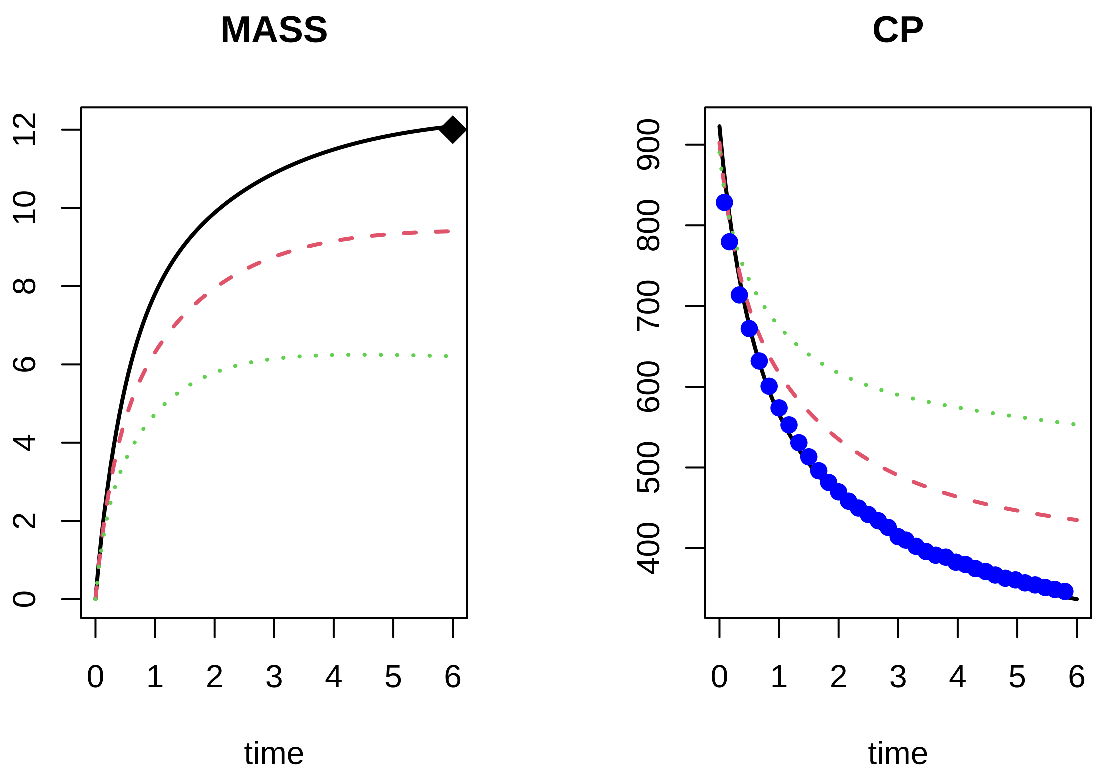

Figure 5: Totale massa en giftige concetraties van rat bij eind dag 6

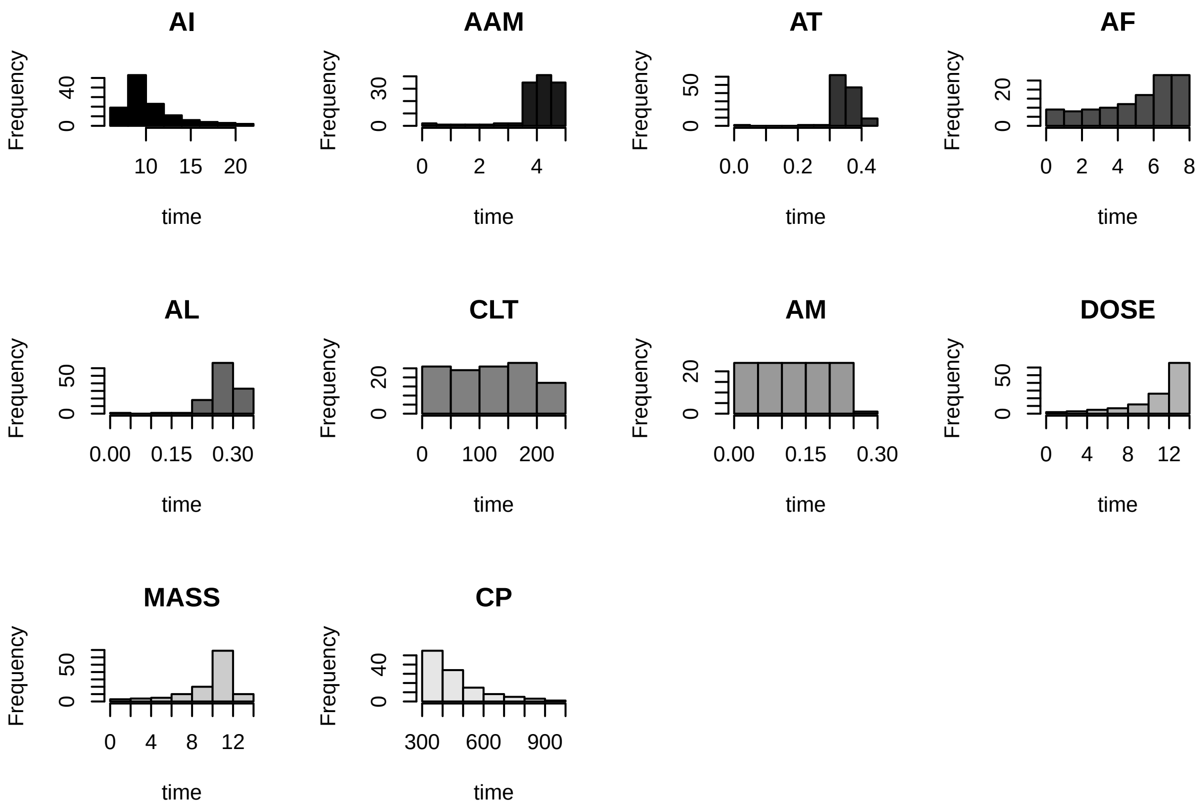

Figure 6: Histogrammen van parameters tegen tijd uitgezet

- 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.