Question 1

a)

There is a type of bimolecular chemical reaction known as the "Brusselator" which is governed by the following ordinary differential equations:

$$\frac{\partial}{\partial t}X(t) = A + X(t)^{2}Y(t) - BX(t) - X(t)$$
(1)

$$\frac{\partial}{\partial t}Y(t) = BX(t) - X(t)^{2}Y(t) \tag{2}$$

Experimental data measuring the values of X and Y over time is shown in Table 1. Using these data points and least squares regression, find the values of A and B from equations 1 and 2 which fit the data the best.

b)

Plot the solution to the differential equations with error bars calculated by Gaussian error propagation from the values of the parameters and their standard errors.

Question 2

Assuming that A = 2 and B = 5 and that X[0] = Y[0] = 1 find the average value of X and Y from time t=0 to t=30

Table 1: Brusselator data

0 0.82 0.85 1 0.53 1.78 2 0.52 2.32 3 0.59 2.62 4 0.66 2.58 5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22		X	Y
1 0.53 1.78 2 0.52 2.32 3 0.59 2.62 4 0.66 2.58 5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01			
2 0.52 2.32 3 0.59 2.62 4 0.66 2.58 5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 <td></td> <td></td> <td></td>			
3 0.59 2.62 4 0.66 2.58 5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 <td></td> <td></td> <td></td>			
4 0.66 2.58 5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
5 1.42 2.16 6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
6 1.56 1.26 7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
7 0.92 1.39 8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
8 0.81 1.91 9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
9 0.8 2.34 10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27			
10 0.75 2.5 11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	8	0.81	
11 1 2.13 12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	9	0.8	
12 1.35 1.65 13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	10	0.75	2.5
13 1.03 1.54 14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	11	1	2.13
14 0.87 1.83 15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	12	1.35	1.65
15 0.84 2.18 16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	13	1.03	1.54
16 0.71 2.34 17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	14	0.87	1.83
17 1.04 2.29 18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	15	0.84	2.18
18 1.27 1.85 19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	16	0.71	2.34
19 1.09 1.68 20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	17	1.04	2.29
20 0.96 1.86 21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	18	1.27	1.85
21 0.88 2.09 22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	19	1.09	1.68
22 0.72 2.21 23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	20	0.96	1.86
23 0.81 2.23 24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	21	0.88	2.09
24 1.11 2.09 25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	22	0.72	2.21
25 1.17 1.73 26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	23	0.81	2.23
26 1.22 1.81 27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	24	1.11	2.09
27 1.01 2.17 28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	25	1.17	1.73
28 0.79 2.22 29 0.78 2.27	26	1.22	1.81
29 0.78 2.27	27	1.01	2.17
	28	0.79	2.22
	29	0.78	2.27
	30		2.01