WISB134

# Modellen & Simulatie

***Lecture 9 - Niet-lineaire differentiaalvergelijkingen in meerdere dimensies***

Universiteit Utrecht

# Overzicht van ModSim

Meeste aandacht (t/m 1 apr.)

- Basisbegrippen dynamische modellen
  - Definities recursies, DVs, numerieke methoden
  - Oplossingen DVs
  - Convergentie numerieke methoden
- Dynamica
  - Scalaire dynamica
  - ➡ Dynamica op $\mathbf{R}^d$
  - Lineaire dynamica op $\mathbf{R}^2$
- Bijzondere gevallen
  - Lineaire kansmodellen (Markovketens)
  - Niet-autonome systemen (Resonantie)
  - Hogere orde numerieke methoden

# Dynamica op $\boldsymbol{R}^d$

- Tijdsreeks en fase ruimte
- Lineaire dynamica:
  - Lineaire recursies
  - Lineaire DVs
- Niet-lineaire recursies
- Niet-lineaire DVs (vandaag)
- Stabiliteit van numerieke methoden

# Dynamica op $\boldsymbol{R}^d$

- Tijdsreeks en fase ruimte
- Lineaire dynamica:
  - Lineaire recursies
  - Lineaire DVs
- Niet-lineaire recursies

vandaag

- Niet-lineaire DVs
  - Evenwichten
  - Stabiliteit
  - Het geval d=2
  - Voorbeelden
  - Reactievergelijkingen
- Stabiliteit van numerieke methoden

# Stabiliteit: scalair, lineair

| | Recursie | Diff. Vgl. |
|---|---|---|
| Vorm | $x_{n+1} = Ax_n$ | $\frac{dx}{dt} = a\,x$ |
| Eigenprobleem | | |
| Oplossing | $x_n = A^n x_0$ | $x(t) = e^{at} x_0$ |
| Evenwicht | $x = 0$ | $x = 0$ |
| Asympt. stabiel als | $\lvert A \rvert < 1$ | $e^{at} < 1, \ \forall t > 0$ <br> $\Rightarrow a < 0$ |
| Instabiel als | $\lvert A \rvert > 1$ | $a > 0$ |

# Stabiliteit: scalair, niet-lineair

| | Recursie | Diff. Vgl. |
|---|---|---|
| Vorm | $x_{n+1} = F(x_n)$ | $\frac{dx}{dt} = f(x)$ |
| Eigenprobleem | | |
| Oplossing | | |
| Evenwicht | $F(\alpha) = \alpha$ | $f(\alpha) = 0$ |
| Asympt. stabiel als | $\lvert F'(\alpha)\rvert < 1$ | $f'(\alpha) < 0$ |
| Instabiel als | $\lvert F'(\alpha)\rvert > 1$ | $f'(\alpha) > 0$ |

# Stabiliteit: lineair, meerdere dimensies

| | Recursie | Diff. Vgl. |
|---|---|---|
| **Vorm** | $x_{n+1} = Ax_n$ | $\frac{dx}{dt} = Ax$ |
| **Eigenprobleem** | $Av_i = \lambda_i v_i, \ i = 1, \ldots, d, \quad v_i$ lin. onafh. | |
| **Oplossing** | $x_n = \sum_{i=1}^{d} \gamma_i \lambda_i^n v_i$ | $x(t) = \sum_{i=1}^{d} \gamma_i e^{\lambda_i t} v_i$ |
| **Evenwicht** | $x = 0$ | $x = 0$ |
| **Asympt. stabiel als** | $\sigma(A) \subset \mathcal{B}_1$ | $\sigma(A) \subset \mathbb{C}^-$ |
| **Instabiel als** | $\exists \lambda \in \sigma(A) : \lvert\lambda\rvert > 1$ | $\exists \lambda \in \sigma(A) : \operatorname{Re} \lambda > 0$ |

# Stabiliteit: niet-lineair, meedere-dim

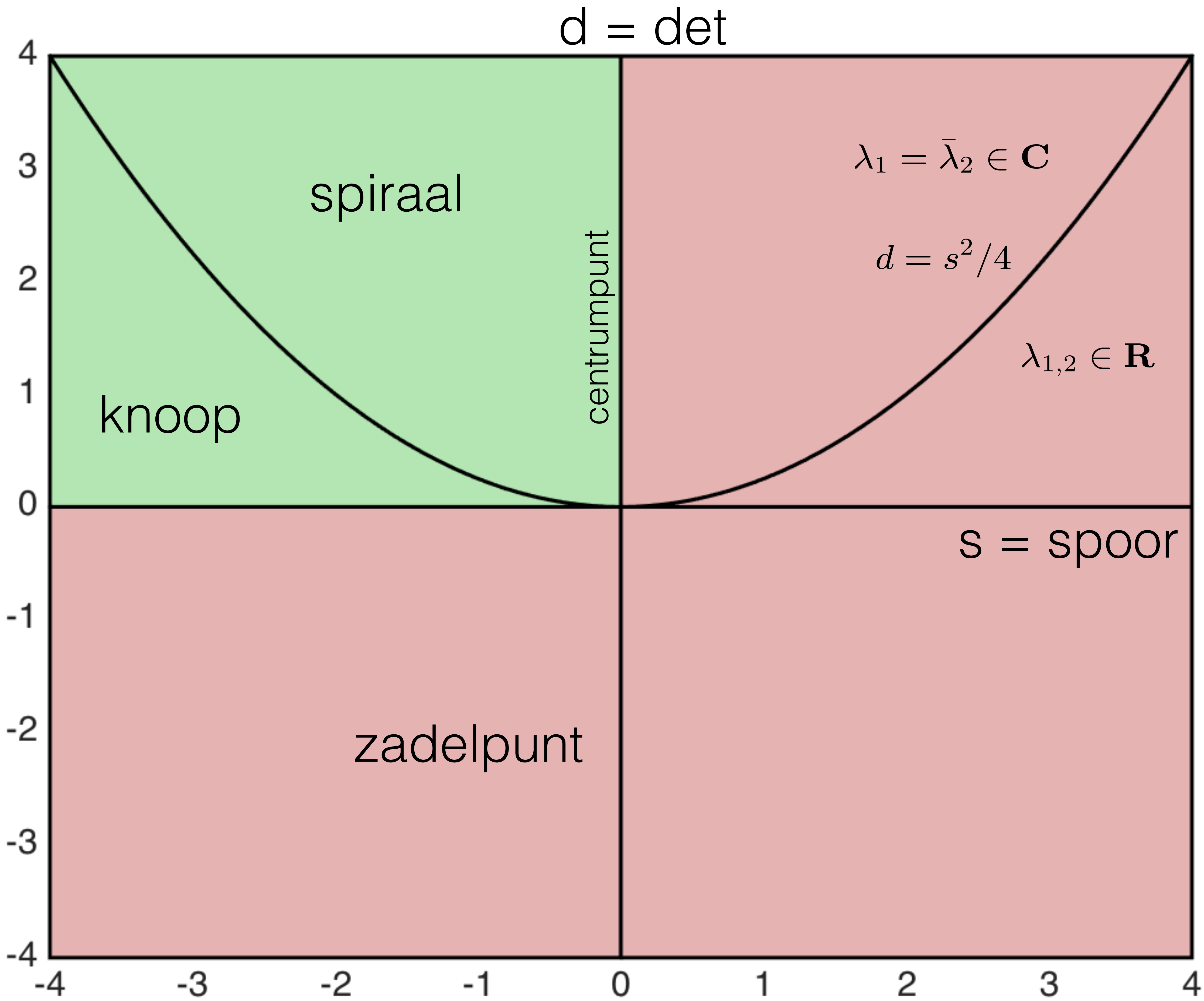
| | Recursie | Diff. Vgl. |
|---|---|---|
| **Vorm** | $x_{n+1} = F(x_n)$ | $\frac{dx}{dt} = f(x)$ |
| **Eigenprobleem** | | |
| **Oplossing** | | |
| **Evenwicht** | $F(\alpha) = \alpha$ | $f(\alpha) = 0$ |
| **Asympt. stabiel als** | $\sigma(DF(\alpha)) \subset \mathcal{B}_1$ | $\sigma(Df(\alpha)) \subset \mathbb{C}^-$ |
| **Instabiel als** | $\exists \lambda \in \sigma(DF(\alpha)) : \lvert\lambda\rvert > 1$ | $\exists \lambda \in \sigma(Df(\alpha)) : \mathrm{Re}\,\lambda > 0$ |

# Dynamica op $\boldsymbol{R}^d$

- Tijdsreeks en fase ruimte
- Lineaire dynamica:
  - Lineaire recursies
  - Lineaire DVs
- Niet-lineaire recursies

vandaag

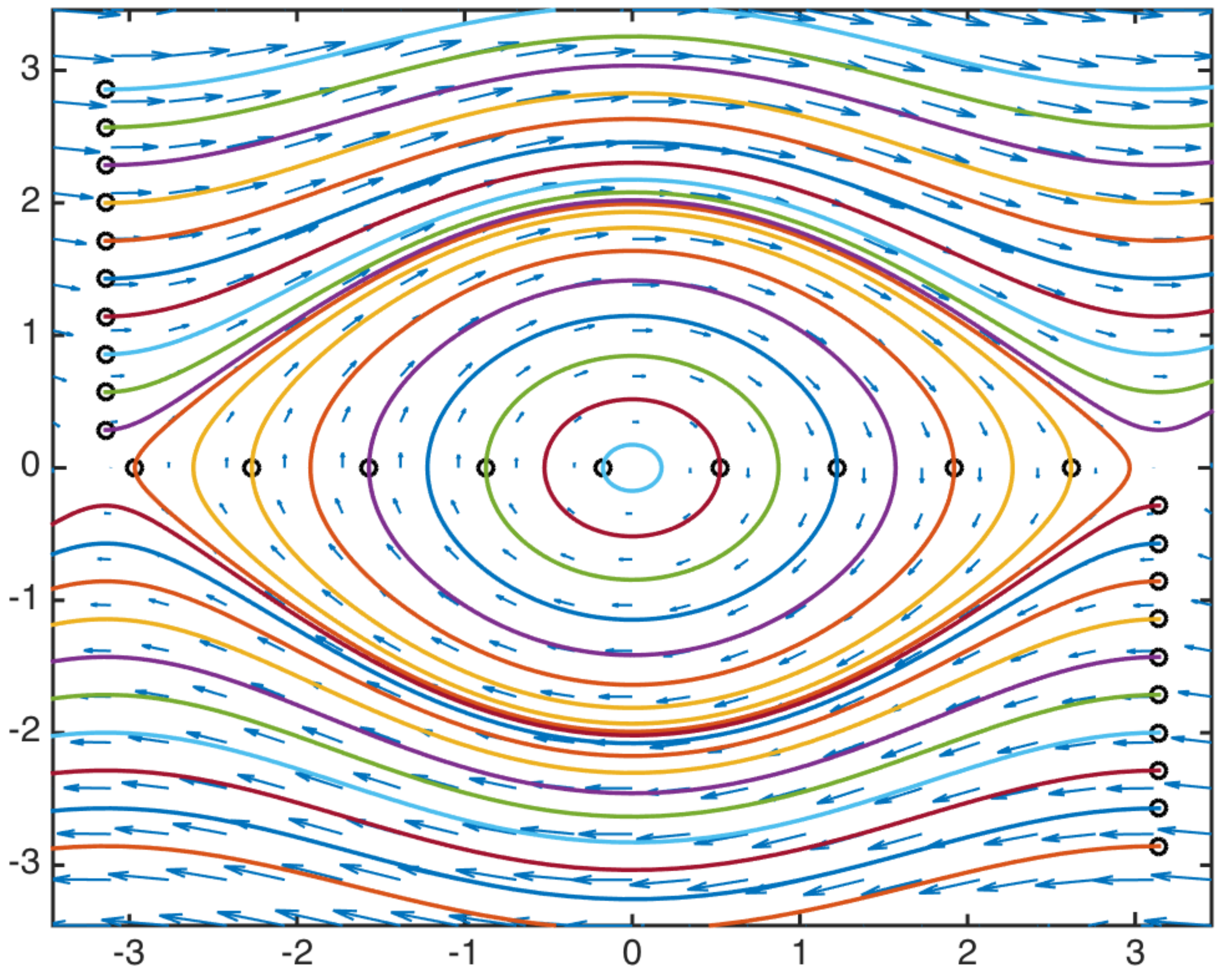
- Niet-lineaire DVs
  - Evenwichten
  - Stabiliteit
  - Het geval d=2
  - Voorbeelden
  - Reactievergelijkingen
- Stabiliteit van numerieke methoden


d = det
spiraal
knoop
centrumpunt
$\lambda_1 = \bar{\lambda}_2 \in \mathbf{C}$
$d = s^2/4$
$\lambda_{1,2} \in \mathbf{R}$
zadelpunt
s = spoor
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4

Slinger $\dot{\theta} = v$

$$\dot{v} = -\sin\theta$$

Phase plot $(\theta(t), v(t))$



# Dynamica op $\boldsymbol{R}^d$

- Tijdsreeks en fase ruimte
- Lineaire dynamica:
  - Lineaire recursies
  - Lineaire DVs
- Niet-lineaire recursies

vandaag

- Niet-lineaire DVs
  - Evenwichten
  - Stabiliteit
  - Het geval d=2
  - Voorbeelden
  - Reactievergelijkingen
- Stabiliteit van numerieke methoden

# Reactievergelijkingen

$$A + B \rightarrow C$$

$$\frac{dA}{dt} = \frac{dB}{dt} = -\frac{dC}{dt}$$

$$\frac{dA}{dt} = -r,$$
$$\frac{dB}{dt} = -r,$$
$$\frac{dC}{dt} = r,$$

We are therefore assuming that $r = r(A, B)$, where $r(A, 0) = r(0, B) = 0$. To obtain a first term approximation of this function we use Taylor's theorem to obtain

$$r = r_{00} + r_{10}A + r_{01}B + r_{20}A^2 + r_{11}AB + r_{02}B^2 + \cdots .$$

In this expression

$$\begin{aligned} r_{00} &= r(0,0), \\ r_{10} &= \frac{\partial r}{\partial A}(0,0), \qquad & r_{01} &= \frac{\partial r}{\partial B}(0,0), \\ r_{20} &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2 r}{\partial A^2}(0,0), & r_{02} &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2 r}{\partial B^2}(0,0). \end{aligned}$$

All of these terms are zero. For example, because $r(A, 0) = 0$ it follows that

$$\frac{\partial r}{\partial A}(A,0) = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial^2 r}{\partial A^2}(A,0) = 0.$$

Similarly, because $r(0, B) = 0$, it follows that $r_{01} = r_{02} = 0$. What is not necessarily zero is the mixed derivative term

$$r_{11} = \frac{\partial^2 r}{\partial A \partial B}(0,0).$$

M. Holmes, *Introduction to the Fundamentals of Applied Mathematics*, Springer, 2009

# Reactievergelijkingen

$$\alpha A + \beta B \to \gamma C + \delta D$$

**Definition 3.1.** The Law of Mass Action consists of the following three assumptions:

1. The rate, $r$, of the reaction is proportional to the product of the reactant concentrations, with each concentration raised to the power equal to its respective stoichiometric coefficient.
2. The rate of change of the concentration of each species in the reaction is the product of its stoichiometric coefficient with the rate of the reaction, adjusted for sign ($+$ if product and $-$ if reactant).
3. For a system of reactions, the rates add.

$$r = kA^\alpha B^\beta$$

$$\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= -\alpha r \\
&= -\alpha k A^\alpha B^\beta, \\
\frac{dB}{dt} &= -\beta k A^\alpha B^\beta, \\
\frac{dC}{dt} &= \gamma k A^\alpha B^\beta, \\
\frac{dD}{dt} &= \delta k A^\alpha B^\beta.
\end{aligned}$$

M. Holmes, *Introduction to the Fundamentals of Applied Mathematics*, Springer, 2009

# Reactievergelijkingen

$$A \rightleftharpoons C + D,$$
$$A + B \rightarrow 2A + C$$

**Ziekteverspreiding**

S = susceptible, I = Infected, R = Recovered

$$\begin{aligned} S + I &\rightarrow 2I \\ I &\rightarrow R \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -k_1 S I, \\ \frac{dI}{dt} &= -k_2 I + k_1 S I \\ \frac{dR}{dt} &= k_2 I, \end{aligned}$$

M. Holmes, *Introduction to the Fundamentals of Applied Mathematics*, Springer, 2009

# Werkcollege voor vandaag

- **Probleem 4.11** eenvoudige sommetjes.
- **Probleem 4.12** een belangrijke wet van de ecologie.
- **Probleem 4.14** meer ingewikkeld.
- Deadlines voor verslagen 2 en 3 zijn aangepast.