

Tenta i matematisk modellering, MMG510, MVE160

OBS! Du behöver inte lösa problem av den typ för vilken du har fått bonuspoäng.

1. Lyapunovs funktioner och stabilitet hos stationära punkter.

a) Formulera ett criterium för asymptotiskt stabil stationär punkt till en ODE med hjälp av en Lyapunovs funktion som inte är stark Lyapunovs funktion. **(2p)**

b) Betrakta ekvationssystemet:
$$\begin{aligned} x' &= -y/3 - x(3x^2 + y^2) \\ y' &= x - y(3x^2 + y^2) \end{aligned}$$

Hitta en stark Lyapunovs funktion $V(x, y)$ för att visa att stationära punkten i origo är asymptotiskt stabil. **(2p)**

Tips. Använd $V(x, y)$ på formen $V(x, y) = ax^2 + y^2$ och välj parametern a så att $V(x, y)$ blir en stark Lyapunovs funktion.

$V(x, y)$ kan väljas som $V(x, y) = 3x^2 + y^2$.

2. Periodiska lösningar till ODE

Formulera Poincaré - Bendixsons sats. Använd Poincaré - Bendixsons sats för att visa att ekvationssystemet

$$x' = -4y + x(1 - x^2 - y^2); \quad y' = 4x + y(1 - x^2 - y^2)$$

har minst en periodisk lösning i en ring: $\rho^2 < x^2 + y^2 < R^2$.

Tips. Använd polära koordinater och betrakta ekvationen för radien. **(4p)**

Lösning:

Multiplitera första ekvationen med x och andra ekvationen med y och addera dem. Detta medför ekvationen för $r^2 = x^2 + y^2$

$$1/2(x^2 + y^2)' = (x^2 + y^2)(1 - x^2 - y^2)$$

eller: $1/2(r^2)' = r^2(1 - r^2)$. Ekvationen för radien är

$$r' = r(1 - r^2).$$

Det är lätt att se från sista ekvationen att radien r växer för $r = 0.5$ eftersom $r' > 0$ i det fallet och att radien minskar för $r = 2$ eftersom $r' < 0$ i det fallet. Det betyder att ringen $0.5 < r < 2$ är en invariant mängd som banor till givna ekvationen aldrig lämnar. $r' = 0$ bara för $r = 1$ i den ringen. Detta medför att stationära punkter kan finnas bara på cirkeln $r = 1$. Men ursprungliga ekvationerna medför att hastigheten är alldrig noll på den cirkeln. Detta medför att ringen $0.5 < r < 2$ innehåller inga stationära punkter Enligt Poincaré Bendixsons sats skall ringen innehålla minst en periodisk lösning.

3. Asymptotiska metoder för ODE.

a) Betrakta idén med direkt asymptotisk utveckling i ODE. Vad menas med sekulära termer i en utveckling? Betrakta ekvationen: $u'' + u = \epsilon(1 - u^2)u'$.

Bestäm termer av ordning noll och ett i en direkt asymptotisk utveckling av lösningar till ekvationen för små ϵ . **You do not need to solve equations completely here!**

Använd formler

$$\sin^3(t) = -1/4 \sin(3t) + 3/4 \sin(t)$$

(2p)

b) Berätta om idén av metoden med "averaging" för att få en utveckling av lösningar utan

Lösning:

a) Vi framställer lösningen som $u = u_0 + \epsilon u_1 + o(\epsilon)$. Med att sätta den ansatsen i ekvationen och behålla termer av ordning t.o.m. ϵ vi får:

$$u_0'' + u_0 + \epsilon(u_1'' + u_1) = \epsilon(1 - u_0^2)u_0' + o(\epsilon)$$

Ekvationen skall gälla för alla ϵ . Vi skriver separata ekvationer för koefficienter vid olika potenser av ϵ .

$$\begin{aligned} \epsilon^0 : & \quad u_0'' + u_0 = 0, \\ \epsilon^1 : & \quad (u_1'' + u_1) = (1 - u_0^2)u_0'. \end{aligned}$$

Dessa ekvationer medför:

$$u_0 = A \times \cos(t), \quad A = u(0)$$

$$\begin{aligned} (u_1'' + u_1) &= -A \sin(t) + A \sin(t) A \cos^2(t) = -A \sin(t) + A^2 \sin(t)(1 - \sin^2(t)) = A(A-1) \sin(t) - A^2 \sin^3(t) \\ \sin^3(t) &= -1/4 \sin(3t) + 3/4 \sin(t) \end{aligned}$$

Detta medför att lösningen kan skrivas som summa av partikulära lösningar och en homogena lösningar:

$$u_1(t) = C_0 \sin(t) + C_1 t \cos(t) + C_2 \sin(3t)$$

med konstanter som definieras med instättning till ekvationen. Vi lägger märke till att andra termen växer oändligt.

b) Metoden med averaging använder framställningen $u(t, \epsilon) = a(t) \cos(t + \beta(t))$ med två nya okända funktioner $a(t)$ och $\beta(t)$. Den framställning med konstanta a och β gäller i fall $\epsilon = 0$. Man förutsätter att för $u'(t)$ gäller samma formeln som i fall med konstanta $a(t)$ och $\beta(t)$ nämligen: $u'(t, \epsilon) = -a(t) \sin(t + \beta(t))$. Man deriverar dessa två uttryck (med variabla $a(t)$ och $\beta(t)$) med avseende på t och får två nya uttryck för $u'(t)$ och $u''(t)$:

$$u'(t) = -a \sin(t + \beta) + a' \cos(t + \beta) - a\beta' \sin(t + \beta)$$

$$u''(t) = -a \cos(t + \beta) - a' \sin(t + \beta) - a\beta' \cos(t + \beta)$$

Dessa uttryck medför att

$$a' \cos(t + \beta) - a\beta' \sin(t + \beta) = 0$$

$$a'' \sin(t + \beta) + a\beta'' \cos(t + \beta) = \epsilon a \sin(t + \beta) - 1/3 \epsilon a^3 \sin^3(t + \beta)$$

Med att lösa ut a' och β' vi får ekvationer

$$a' = \epsilon [a \sin(t + \beta) - 1/3 a^3 \sin^3(t + \beta)] \sin(t + \beta)$$

$$a\beta' = \epsilon [a \sin(t + \beta) - 1/3 a^3 \sin^3(t + \beta)] \cos(t + \beta)$$

som visar att $a(t)$ och $\beta(t)$ varierar långsamt med tiden. Man använder lite trigonometriska formler och behåller i högerled bara termer som varierar långsamt (utan periodiska funktioner). Detta medför enkla ekvationer för a och β som kan lösas explicit och ger approximationen av lösningar utan sekulära termer.

4. Kemiska reaktioner och Gillespies metod

Betrakta följande reaktioner: $X + Z \xrightleftharpoons[c_2]{c_1} W, \quad W \xrightarrow{c_3} P$ där $c_i dt$ är sannolikheten att

under tiden dt reaktionen med index i skall äga rum. $i = 1, 2, 3$.

a) Ange differentialekvationer för antalet partiklar för dessa reaktioner. **(2p)**

b) Ange formler för algoritmen som skulle stokastiskt modellera dessa reaktioner enligt Gillespie.

Lösning: a)

$$X' = -c_1 XZ + c_2 W$$

$$Z' = -c_1 XZ + c_2 W$$

$$W' = c_1 XZ - (c_2 + c_3)W$$

$$P' = c_3 W$$

b) **Gillespies metod.**

$P(\tau, \mu)d\tau$ är sannolikheten att ha en reaktion av typ μ under ett tidsintervall $d\tau$ efter tiden τ då inga andra reaktioner ägde rum.

$$P(\tau, \mu) = P_0(\tau)h_\mu c_\mu d\tau.$$

Här $P_0(\tau)$ är sannolikheten att inga reaktioner skall äga rum under tiden τ .

$h_\mu c_\mu d\tau$ är sannolikheten att just reaktionen μ skall gå under tidsintervall $d\tau$.

h_μ är antalet olika kombinationer av partiklar för aktuella X, Z, W, P som kan delta i reaktionen μ . För reaktion 1 i exemplet är det $h_1 = X \cdot Z$, för reaktion 2 är det $h_2 = W$, för reaktion 3 är det $h_3 = W$.

$$P_0(\tau) = \exp(-a\tau) \text{ med } a = \sum_{\mu=1}^3 h_\mu c_\mu.$$

Algoritmen för att stokastiskt modellera givna reaktioner.

0) inicialisera variabler X, Z, W, P och tiden $t = 0$.

1) Beräkna h_i, a .

2) Generera två slumpstal r och p jämt fördelade över intervallet $(0, 1)$.

Tag tiden τ före nästa reaktion som $\tau = 1/a \ln(1/r)$.

Välj nästa reaktion μ så att $\sum_{i=1}^{\mu-1} h_i c_i \leq p a \leq \sum_{i=1}^{\mu} h_i c_i$.

3) Tillägg τ till tidsvariabeln t . Ändra antalet partiklar enligt valjad reaktion:

$$\mu = 1 \rightarrow X = X - 1, Z = Z - 1, W = W + 1.$$

$$\mu = 2 \rightarrow X = X + 1, Z = Z + 1, W = W - 1.$$

$$\mu = 3 \rightarrow P = P + 1, W = W - 1.$$

3) Om tiden är större änd den maximala tiden vi är intresserade av, sluta beräkningar, annars gå till steg 1.

Max. 16 points;

For GU: **VG:** 13 points; **G:** 8 points;

For Chalmers: **5:** 14 points; **4:** 11 points; **3:** 8 points;