1. Búsqueda de raíz

Cinética Química

En un sistema de reacción química, la concentración de un compuesto intermedio x se encuentra regulada por un mecanismo de retroalimentación que depende **logarítmicamente** de su propia concentración. Este tipo de comportamiento puede surgir, por ejemplo, en procesos enzimáticos o reacciones autocatalíticas con inhibición por producto.

$$x \approx \ln(x) \tag{1}$$

Sin embargo, este procedimiento depende de diversos parámetros relacionados a las propiedades del compuesto y el medio en el que se encuentra. Porr lo que considerando:

- x: como la concentración del compuesto intermedio.
- $k > 0$: una constante que representa la sensibilidad del sistema a la retroalimentación.
- $a > 0$, $b > 0$: parámetros que modelan la cinética y el punto de referencia de la retroalimentación.

Se puede llegar a una ecuación más general:

$$x \approx \frac{1}{k}\ln(ax+b) \tag{2}$$

En la que si se cumple la equivalencia significa que el sistema ha alcanzado el equilibrio. Sin embargo, esto no ocurre de forma inmediata por lo que una versión de la ecuación de mayor utilidad practica es aquella que modela el error o desfase del punto de equilibrio a partir de:

$$x \approx \frac{1}{k}\ln(ax+b) \tag{3}$$

$$x = \frac{1}{k}\ln(ax+b) + \Delta \tag{4}$$

$$\Delta = x - \frac{1}{k}\ln(ax+b) \tag{5}$$

A partir de esto, se modela el desequilibrio del sistema con la siguiente función de error:

$$f(x) = \left(x - \frac{1}{k}\ln(ax+b)\right)^2 \tag{6}$$

Este tipo de ecuación no puede resolverse de forma analítica en general, por lo que una alternativa es utilizar métodos numéricos para su resolución. Por esto, el departamento de química le solicita a usted un software que calcule de forma rápida, segura y lo más exácta posible el punto de equilíbrio de un sistema con valores de k, a y b dados.

Preguntas

(a) Describa y programe un algorítmo basado en el método de Newton que reciba los valores de x_0, k, a y b y encuentre el punto de equilibrio del sistema químico.

(b) Usted termina su algoritmo y decide probarlo utilizando $x_0 = 2.5$, $k = 1$, $a = 1$ y $b = 2$. Con lo que obtiene los resultados de la Tabla 1. Determine si su algorítmo es la mejor alternativa entre la que ha estudiado en Computación Científica y de no ser así, desarrolle una solución que garantice que es la mejor.

Iteración	x_i	$x_i - x_{i-1}$	$f(x_i)$
1	2.13090	–	5.08e-01
2	1.66093	-0.46997	1.32e-01
3	1.41107	-0.24985	3.39e-02
4	1.28088	-0.13019	8.61e-03
5	1.21416	-0.06672	2.17e-03
6	1.18034	-0.03382	5.45e-04
7	1.16331	-0.01703	1.37e-04
8	1.15476	-0.00855	3.42e-05
9	1.15048	-0.00428	8.56e-06
10	1.14834	-0.00214	2.14e-06

Tabla 1: Resultados del sistema para $x_0 = 2.5$, $k = 1$, $a = 1$ y $b = 2$ utilizando el método de Newton-Raphson.

2. Pérdida de importancia

Formato FPS(m)

Se propone una variante del formato de double precision del estándar de punto flotante de la IEEE754, en la cual, si bien, aún se consideran 64 bits en total, se representa a traves del formato FPS(m), donde m denota la cantidad de bits utilizados para el exponente. En específico , FPS(m) se describe de la siguiente forma:

- Número de bits utilizados para el signo: 1
- Número de bits utilizados para el exponente: m
- Número de bits utilizados para la mantisa: $63 - m$

En particular se considera que $m \in \{2, ..., 62\}$, así se asegura que se pueden considerar los mismos casos especiales que en la versión tradicional del formato double precision, que en esta representación corresponde a FPS(11). En esta variante, el bias se obtiene como $2^{m-1} - 1$.

(a) Determine el Machine Epsilon en el formato FPS(m) para todo m. Justifique su resultado.

(b) Determine el menor número positivo representable en el formato FPS(m) para todo m. Justifique su resultado.

(c) Determine el primer entero no representable para cualquier m.

(d) Determine el m más pequeño para el cual existe al menos un entero no representable dentro del intervalo que es capaz de representar.