

## 1. vaja: Naključna števila

### 1. naloga

S trapezno in Simpsonovo metodo ter Monte Carlo integracijo ocenite vrednosti naslednjih določenih integralov

$$I_1 = \int_0^1 \frac{x^3 \sin 5x}{1 + x^2} dx$$
$$I_2 = \int_0^1 \int_0^1 e^{-(x^2+y^2)} \cos(4\pi xy) dx dy$$

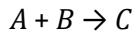
Kako se natančnost integralov spreminja z številom delilnih točk in s številom naključnih točk pri MC? Določite še čas računanja integrala s pythonom in fortranom ali c++-om za različne vrednosti parametrov.

### D1. naloga

Napišite program, ki na daljico (1D), v kvadrat (2D) in kocko (3D) naključno postavi N trdih kroglic (v 1D je to daljica z dolžino premera, v 2D pa krog) s premerom 1 tako, da se ne prekrivajo. Velikost škatle določite iz podane gostote, ki je vhodni parameter. Končne koordinate kroglic naj program izpiše v datoteko in to narišite z Gnuplotom. Določite, do katere gostote lahko naključno porazdelite diske. Premislite, kakšne so možne kristalne strukture in kakšne so tu gostote? Določite še zasedenost prostora in poroznost! Upoštevajte periodične robne pogoje!

### D2. naloga

Simulirajte naključno gibanje molekul v 2D kvadratnem reaktorju, ki lahko reagirajo po naslednji reakciji



Štartate iz naključne porazdelitve molekul A in B. Molekule so točkaste in se naključno premikajo ter reagirajo, če se približajo na manj kot neka mejna razdalja. Sledite koncentracijam A, B in C kot funkcija časa. Določite hitrost reakcije. Kako se ta spreminja od koncentracij A in B ter od mejne razdalje. Kako se spremeni hitrost reakcije, če začetni koncentraciji A in B nista enaki ali če se nahaja v poroznem mediju?