



Curso de Simulación por Computadoras aplicando el Método Monte Carlo

Las características del curso son:

Título: **El Método Monte Carlo Aplicado en la Física**

Docente Responsable: Profesor Dr. Edgardo Bonzi.
FaMAF – UNC. Oficina 261. e-mail: bonzie@famaf.unc.edu.ar

Área: Física del Estado Sólido y de las Radiaciones

Cuatrimestre: Segundo

Carga Horaria: 60 horas total. 30 horas de teórico y 30 horas de práctico, distribuidos en quince semanas con una carga semanal de 4 horas.

Requerimientos para alumnos: Ser alumno avanzado o poseer título de grado, en el área de las ciencias naturales.

Dictado previo: En el segundo cuatrimestre del 2008 y primer cuatrimestre del 2009.

Examen: Evaluación oral y presentación de carpeta de trabajos prácticos, al cual solamente podrán acceder aquellos alumnos que hayan asistido a clase al menos un 80 % y realizado todos los trabajos prácticos con sus respectivos informes aprobados.

Objetivos: En este curso el alumno adquirirá conocimientos y destreza en la programación en el lenguaje estructurado Fortran 77 y Fortran 90. Tomará conocimientos de la simulación Monte Carlo con aplicaciones variadas, para comprender la filosofía de la misma. Finalmente alcanzará dominio en el desarrollo de programas de simulación para computadoras con aplicación de simulaciones en el crecimiento de granos en sólidos, en el transporte de radiación en materiales y dosimetría de radiaciones, ahondando conocimientos en algunos de estos tópicos mencionados en el final del curso.

Contenido:

1. Elementos básicos de la Programación con Fortran
Introducción al Fortran 77 y al Fortran 90
Tipos de números
Implicit None
Comando PRINT
Comando READ, FORMAT
Descriptores del Comando FORMAT
Comando WRITE
Tipo COMPLEJO
Uso del Parámetro KIND
Declaración de FUNCTION
Declaración de SUBROUTINE
FUNCTION y SUBROUTINE externas
Variables IN, OUT
Definición de Módulos 'MODULE'
Uso de IF, THEN, ELSE IF, ELSE, END IF.
Uso de SELECT CASE, CASE, CASE DEFAULT
Uso de Variables Lógicas



- Uso del Ciclo DO, END DO y CYCLE
- COMMON block
- Vectores y Matrices
- Siete Reglas de Oro

- 2. Elementos de Estadística
 - Funciones distribución de probabilidad.
 - Funciones densidad de probabilidad.
 - Distribución de variables discretas
 - Binomial
 - Binomial Negativa
 - Poisson
 - Geométrica
 - Hipergeométrica
 - Distribución de variables continuas
 - Exponencial
 - Normal
 - Uniforme Cartesiana
 - Uniforme Esférica
 - Números aleatorios.
 - Generación de números aleatorios.
 - Método de rechazo
 - Método de inversión
 - Prueba de aleatoriedad.

- 3. Método Monte Carlo
 - Principios Básicos
 - Rutinas de Geometría
 - Camino Libre Medio y Transmisión
 - Rutinas de colisión o de escape
 - Consideraciones estadísticas
 - Integración Monte Carlo

- 4. Simulación en el estado sólido
 - Consideraciones iniciales.
 - Programación de la geometría.
 - Algoritmos de Crecimiento de granos
 - Hamiltoniano para crecimiento de granos
 - Crecimiento de granos en materiales con dos fases.
 - Crecimiento de granos en estructuras orientadas
 - Crecimiento de granos en estructuras anisótropas
 - Crecimiento de granos en bicristales 2D y 3D
 - Propiedades Magnéticas
 - Modelo de Ising en 2D
 - Ejemplos de simulación
 - Análisis de Resultados.

- 5. Programa de Simulación "Penelope"
 - Consideraciones iniciales.
 - Subrutinas
 - PEINIT
 - CLEANS
 - START
 - JUMP
 - KNOCK
 - SECPAR



STORES

Programación de la geométrica.
Surfaces
Body
Programa GView
Desarrollo de Materiales.
Programa Material
Definición de Fuentes de Partículas.
Puntual
Volumétrica
Monoenergética
Polienergética
Distribución de Kramer
Programación de Detectores.
Dosímetros
Contadores
Detectores
Análisis de Resultados.
Programas
PenSLAB
PenCYL
PenDOSES

Bibliografía:

1. Fortran 90 Programming, Autores: T. Ellis, I. Philips, T. Lahey. Addison Wesley.
2. Programmer's Guide, version 4, Autor Brian Hahn. Microsoft.
3. Fortran 90 for Scientists and Engineers, version 4, Autor Brian Hahn. Microsoft.
4. Computer Simulation in Materials Science. Editores: M. Meyer, V. Pontikis. Kluwer Academic Publishers. NATO. Serie E: Applied Sciences. Vol. 205.
5. Monte Carlo simulation of grain growth in 2D and 3D bicrystals with mobile and immobile impurities. Materials Chemistry and Physics 109 (2008) p 325-333.
6. Monte Carlo simulation of grain growth in polycrystalline materials. Cryst. Res. Technol. 35, (2000) 1 p 117-128.
7. Magnetic properties of dipolar interacting single-domain particles. Physical Review B 58 (1998) p 12169-12177.
8. Grain Boundary Structure and Properties. G. Chadwick, D. Smith. Academic Press Inc.
9. A practical manual on the Monte Carlo method. E. D. Cashwell and C. J. Everett - Pergamon Press.
10. J. Baro, J. Sempau, J.M. Fernandez-Varea and F. Salvat, 'PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter'. Nucl. Instrum. and Meth. B100 (1995) 31-46.
11. J. Sempau, E. Acosta, J. Baro, J.M. Fernandez-Varea and F. Salvat, 'An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron-photon transport'. Nucl. Instrum. and Meth. B132 (1997) 377-390.
12. F. Salvat, J.M. Fernandez-Varea, E. Acosta and J. Sempau, 'PENELOPE, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport'. Proceedings of a Workshop/Training Course, OECD/NEA 5-7 November 2001. NEA/NSC/DOC(2001)19, ISBN:92-64-18475-9.
13. MCNP Manual, Oak Ridge National Laboratory.