

Responsable :
Martine Logé
■ 01 69 08 51 67

SEMINAIRE



Service de Recherches de Métallurgie Physique

DEN/DANS/DMN

Bibliothèque du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

First-passage Monte Carlo : Diffusion without all the hops

Vasily V. Bulatov

Lawrence Livermore National Laboratory, USA

I will describe a novel Monte Carlo approach for simulations of diffusion and collisions in the system of N diffusing particles.

Based on the theory of first-passage processes and a time-dependent Green's function formalism, the method is exact and extremely efficient for a range of physical models describing various diffusion-controlled processes. This presentation will cover:

- (1) The main ideas and mathematical underpinnings of the first-passage kinetic Monte Carlo (FPKMC).
- (2) Simulations demonstrating the method's accuracy and efficiency.
- (3) First simulations of microstructure evolution at the dose rates and to the doses of the reactor lifetimes.

Mardi 6 Novembre 2007 à 10h30

N.B : *Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance - les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire - le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre :
Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67*