



**João
Inácio**

**Exploração do modelo de Ising por Flat Scan
Sampling**

Exploring the Ising model via Flat Scan Sampling



João
Inácio

Exploração do modelo de Ising por Flat Scan Sampling

Exploring the Ising model via Flat Scan Sampling

“Before I came here I was confused about the subject. Having listened to your lecture I am still confused but on a higher level.”

— Enrico Fermi



**João
Inácio**

Exploração do modelo de Ising por Flat Scan Sampling

Exploring the Ising model via Flat Scan Sampling

Dissertação de Projeto apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção de aprovação à unidade curricular Projeto, realizada sob a orientação científica do Doutor João Amaral, Investigador Auxiliar do Departamento de Física da Universidade de Aveiro.

À minha família.

o júri / the jury

presidente / president

vogais / examiners committee

Doutor João Cunha de Sequeira Amaral

investigador auxiliar do Departamento de Física da Universidade de Aveiro

Prof. Doutor António Luís Campos de Sousa Ferreira

professor associado do Departamento de Física da Universidade de Aveiro

**agradecimentos /
acknowledgements**

My acknowledgements to Dr. João Amaral for his supervision, insightful conversations and for trusting in me with a high performance computing project. I thank Julia Dias for her patience in listening to me talk about the topic and for supporting me in worse times. I would also like to thank all of my family members, especially my mother for having supported me these last three years.

Palavras Chave

modelo de Ising, métodos de Monte Carlo, Flat Scan Sampling, densidade de estados conjunta, escalabilidade paralela

Resumo

Um método Monte Carlo para estimar a densidade de estados conjunta do modelo de Ising, Flat Scan Sampling (FSS), é introduzido assim como a sua validação. A sua convergência é discutida assim como a adição de um parâmetro para reduzir a correlação estatística. O método foi implementado em C++, numa versão single core e noutra paralela com recurso ao Message Passing Interface (MPI) com ganhos significantes de performance. O escalonamento paralelo do algoritmo é discutido em detalhe.

Os resultados das simulações do método Flat Scan Sampling são usados para demonstrar duas maneiras diferentes de obter quantidades termodinâmicas a partir da densidade de estados conjunta. Por fim, três formas diferentes de estimar a temperatura crítica para a rede infinita são apresentadas.

Keywords

Ising model, Monte Carlo methods, Flat Scan Sampling, joint density of states, parallel scalability

Abstract

A Monte Carlo method to estimate the joint density of states of the Ising model, Flat Scan Sampling (FSS), is presented along with its validation. The convergence of the method is discussed and the introduction of a new parameter to reduce statistical correlation between samples is proposed. The method was implemented in C++ in a single core version and another using Message Passing Interface (MPI) with significant performance gains. The parallel scalability of FSS implementation is discussed in detail.

Results from simulations with Flat Scan Sampling were used to show two different ways of obtaining thermodynamic variables from JDoS results. Finally, it is shown how to estimate the critical temperature of the Ising model for the infinite lattice in three different ways.

