



**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**

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



**agradecimentos /  
acknowledgements**

My acknowledgements Dr. João Amaral for his supervision, insightful conversations and for trusting in me to lead an advanced 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, specially 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 para estimar a densidade de estados conjunta do modelo de Ising, Flat Scan Sampling (FSS), é apresentado juntamente com a sua validação. A convergência do método é discutida e a adição de um novo parâmetro com função de reduzir erro estatístico é sugerido. O FSS foi implementado em C++ numa versão single core e noutra usando o Message Passing Interface (MPI) com ganhos significantes de performance. A escalabilidade paralela da implementação MPI do FSS é discutida em detalhe.

Resultados das simulações de FSS são usados para demonstrar duas maneiras de obter quantidades termodinâmicas a partir da densidade de estados conjunta. Uma estima tais quantidades com recurso à média de ensemble, usada extensivamente na literatura. Outra usa o mínimo da energia livre de Helmholtz para calcular as variáveis termodinâmicas exatas. Por fim, três maneiras de encontrar a temperatura crítica para a rede de Ising infinita são apresentadas. Duas através da extração da temperatura crítica obtida através das variáveis termodinâmicas médias e exatas e outra com recurso ao parâmetro de Binder.



**Keywords**

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

**Abstract**

A 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. One uses the ensemble average, used extensively in the literature. Another uses the minimum of the Helmholtz free energy to compute the exact thermodynamic variables. Finally, it is shown how we can estimate the critical temperature of the Ising model for the infinite lattice in three different ways. By extracting the critical temperature from the thermodynamic variables from the ensemble average and exact quantities and by the Binder Cumulant.

