Texto que sistematiza o trabalho científico do candidato

Prof. Roberto Nicolau Onody

para a obtenção do título de Livre Docente

Departamento de Física e Ciência dos Materiais
Instituto de Física e Química de São Carlos
Universidade de São Paulo

1992

OK
USP / IFQSC / SBI
[redacted]
8-2-000007

INDICE

I- **Prefácio**

II- **Modelos exatamente solúveis**

1. Introdução
2. Uma nova relação funcional para modelo de vértices
3. A relação triângulo-estrela duplicada
4. Um modelo de dímeros, vértices e spin

III- **Percolação: um estudo através de séries**

1. Introdução
2. Percolação por ligação
3. Percolação por sítio

IV- **Pesquisas em andamento**

1. Percolação por invasão
2. Colapso em polímeros
3. Multifractais

V- **Conclusões**

Referências

Agradecimentos

Artigos

Prefácio

"O poeta é um fingidor
Finge tão completamente
Que chega a fingir que é dor
A dor que deveras sente".
Fernando Pessoa

No texto que se segue tentarei dar uma visão crítica e sistemática dos trabalhos científicos desenvolvidos após a obtenção do meu doutoramento em dezembro de 1984. Preferi a forma de texto em vez da tradicional tese por duas razões: no formato de texto o candidato se apresenta de maneira mais abrangente, de corpo inteiro ; os meus trabalhos indicam, no período que se seguiu ao meu doutorado, duas fases bastante distintas comprometendo, dessa maneira, a unicidade necessária a uma tese.

Procurarei apresentar êsses trabalhos no cenário mais amplo possível, revendo o estado da arte na época da realização do trabalho. Claro está que esta revisão padece, infelizmente, das inseparáveis perspectivas e óticas pessoais.

Esta revisão acabou se tornando um exercício bastante interessante já que permitiu avaliar com serenidade o conteúdo desses trabalhos. Só o distanciamento no tempo é capaz de produzir tal efeito. Um dos requisitos básicos da investigação científica é o grande envolvimento emocional do pesquisador com sua obra em gestação. Há que se provê-la diariamente com atenção, trabalho e dedicação. Tal esforço, porém, é amplamente recompensado pelo prazer de solucionar um problema, ou muitas vezes, de nos aproximarmos um pouco mais da sua solução.

Durante o mestrado e o doutorado nós somos aprendizes de feiticeiro: procuramos os ingredientes para a sopa no caldeirão, aprendemos onde buscá-los

mas não somos responsáveis pelo cardápio. Segue-se a emancipação, que em ciência significa ter os "nossos" próprios problemas, buscarmos a "nossa" própria solução afim de galgarmos à posição de feiticeiro, fechando-se o ciclo.

Olhando em retrospectiva ao período de 8 anos que se seguiu ao meu doutorado, percebo claramente duas etapas.

A primeira que vai de 1985-1988, e que está umbilicalmente ligada aos temas do meu doutoramento, referem-se a soluções analíticas exatas de modelos bidimensionais da mecânica estatística. São em geral, modelos de spin, vértices ou dímeros definidos em redes regulares e que têm em comum o fato de exibirem soluções não triviais das equações de Yang-Baxter[1]. Isto permite a obtenção das funções termodinâmicas exatas no limite de uma rede infinita e/ou a determinação dos pontos críticos de transição de fase. Ressalte-se ainda que, devido à utilização da mesma técnica, houve uma grande simbiose entre pesquisadores da área de mecânica estatística e de matriz S. Nomes como os de Baxter e de Zamolodchikov se tornaram referências obrigatórias e campeões de índices de citação. A partir de 1984, com o trabalho de Belavin, Polyakov e Zamolodchikov[2], assume papel de destaque a invariância conforme desses modelos, permitindo resolver alguns modelos fora da criticalidade ou na presença de campo. No âmbito da mecânica estatística o resultado recente mais importante talvez tenha sido a solução (num sub-espaço do espaço de parâmetros) do modelo de Potts quiral[3].

Nessa área publiquei três trabalhos. No primeito [4] proponho uma nova relação funcional para modelos de vértices. Esta equação funcional somada à relação de inversão nos permite determinar a função de partição por vértice do sistema. Aplicamos, com sucesso, esses resultados para um modelo de oito vértices não simétrico.

No segundo trabalho [5], determinamos a linha crítica do modelo de Potts definido na rede triangular com interação de 2 spins primeiros vizinhos e interação

de 3 spins em triângulos alternados. Graças à introdução de uma nova relação triângulo-estrela duplicada e à utilização de uma transformação de dualidade foi possível obter a linha de transição do modelo.

No terceiro trabalho[6], juntamente com o Prof. Valério Kurak, estabelecemos uma equivalência entre um modelo de dímeros no regime compactado, definido na rede 4-8 e alternado nas duas direções (staggered) com um modelo de seis vértices que obedece à condição de férmions livres. Mostramos também sua equivalência com um sistema Ising com interações ferro e antiferromagnéticas.

Todos esses trabalhos foram executados no âmbito estritamente analítico, sem auxílio de computador. A partir de 1989, entretanto, meu interesse científico passa a ganhar novos rumos graças à conjunção de dois fatos: a compra de microcomputadores pela USP e a leitura de um trabalho do Baxter de 1988[7]. Um desses micros acabou indo parar na minha sala, e sua presença e utilização diária acabaram se tornando um hábito. Com a conexão desse micro aos computadores de porte como o Vax e o Convex, estava aberta uma trilha natural para o envolvimento dessas máquinas na minha pesquisa. Some-se ainda, que nesta mesma época, iniciou-se a explosão da computação algébrica no país com a realização da primeira escola brasileira de computação algébrica no Rio de Janeiro, da qual participei, e que, indubitavelmente, teve o mérito de atrair até os cientistas mais refratários à utilização dessas máquinas. Na mesma época eu tinha lido um trabalho do Baxter em parceria com o Guttmann[7] sobre um desenvolvimento em série da probabilidade de percolação direcionada, através de ligações, na rede quadrada. De início, fiquei surpreso vendo o expoente máximo das soluções analíticas (Baxter) se envolvendo em trabalho que lançava mão, à exaustão, de programas numéricos. Aprendi depois que do seu parceito Guttmann, sabe-se que é melhor ser evitado: só se deve tentar melhorar os resultados numéricos obtidos por êle numa outra geração de computa-

dores.

Dessa maneira e inspirado por esse trabalho, completei meu primeiro trabalho [8] em percolação direcionada por ligação. Nele eu adaptei, para a rede hexagonal, a técnica desenvolvida por Baxter e Guttmann. Usei o REDUCE para obter uma expansão em série da probabilidade de percolação e a análise usual dos aproximantes de Padé para estimar o expoente crítico β e o valor da percolação crítica. Este trabalho teve boa receptividade e eu acredito que foi êle que motivou a revista Physics Letters A a ter me convidado para árbitro.

O segundo trabalho[9] nessa área, foi desenvolvido juntamente com Ubiraci P.C. Neves, meu estudante de mestrado. Nele apresentamos uma técnica de matriz de transferência para obter uma expansão em série da percolação direcionada por sítio na rede quadrada. Surpreendentemente tal técnica permite também calcular a série do segundo momento, isto é, a série do tamanho médio do aglomerado. Estabelecemos ainda, uma conexão entre os coeficientes da série da probabilidade de percolação direcionada por sítio e o número de maneiras de dissecar uma bola. Através dos aproximantes de Padé, estimamos a probabilidade de ocupação crítica e o expoente crítico β do sistema.

Todos esses trabalhos são discutidos de maneira mais ampla nos capítulos II e III. No capítulo IV apresento minhas novas linhas de trabalho, isto é, para onde se direciona meu interesse científico atual e no capítulo V as conclusões.

II - Modelos Exatamente Solúveis

"Só duas coisas são infinitas: o universo e a ignorância humana, da primeira não tenho certeza "

Albert Einstein

1 - Introdução

É bastante pequena a possibilidade de se encontrar sistemas em duas e três dimensões que sejam exatamente solúveis e que tenham algum interesse. Os mais radicais até dizem que se o encontramos então ele deve ser patológico. Felizmente, algumas soluções obtidas desde a célebre solução do modelo de Ising sem campo magnético por Onsager em 1944[10], reverteu um pouco esse quadro não auspicioso. É claro que apontar conquistas nessa área tem caráter um tanto quanto idiossincrásico. Tentarei no entanto não me sensibilizar pelas minhas preferências pessoais. A solução do modelo de oito vértices simétrico[11] ,através das equações de fatorização, certamente oxigenou fortemente a área, não só pela riqueza do diagrama de fases do modelo mas também pela técnica revolucionária empregada. A solução do modelo de hexágonos duros[12], um modelo de adsorção de gases numa rede (substrato) triangular com repulsão de primeiros vizinhos, foi outro marco importante dada a existência de possíveis realizações experimentais. Finalmente, eu citaria as soluções do Potts quiral[3] em supefícies com genus maior do que um.

Em geral buscamos encontrar soluções em que duas matrizes de transferência, com pesos de Boltzmann diferentes, comutam. As equações que garantem a comutabilidade são chamadas de equações de Yang-Baxter ou equações de fatorização. A existência de soluções não triviais dessas equações, quando acopladas a transformações de dualidade, permitem que se determine as linhas críticas de

transição de fase desse modelo. Além disso, os maiores autovalores da matriz de transferência, ou, equivalentemente, a função de partição por spin (ou por vértice, ou por dímero) geram equações funcionais na variável chamada parâmetro espectral. É importante ressaltar que o procedimento descrito acima tem funcionado em vários sistemas bidimensionais: em três dimensões, entretanto, tanto quando eu saiba, só existe a solução de Zamoldchikov usando as equações tetraédricas[13]

2 - Uma nova relação funcional para modelos de vértices

À medida que os modelos de vértices foram sendo generalizados, passando a incorporar mais estados nas ligações (no modelo de oito vértices são apenas 2 estados), foi ficando claro que a aplicação da técnica do espalhamento inverso [14] estava seriamente comprometida, pois a determinação do assim chamado pseudo-vácuo era praticamente impossível.

Se o método de espalhamento inverso fôsse aplicável então teríamos acesso ao conjunto total de autovalores da matriz de transferência. O desconhecimento do pseudo-vácuo porém, inviabilizava aquele procedimento. A partir de então, a técnica envolvendo equações funcionais adquire progressivamente mais importância. De qualquer forma, ambas estão baseadas na existência de soluções das equações de Yang-Baxter.

As equações funcionais eram duas: a relação de inversão e a relação de simetria[15], no jargão do pessoal de mecânica estatística ou unitariedade e simetria de cruzamento, no jargão oriundo do pessoal de matriz S.[16]

Bem, mas o que fazer quando a relação simetria não estivesse presente no modelo?

A resposta que obtive na época era absolutamente natural: devemos substituí-la por outra. Daí surgiu a nova relação funcional.

Supus a existência de um valor no parâmetro espectral tal que as equações (5) e (6) da referência[4] estivessem satisfeitas. Isto garantia a solubilidade das equações de fatorização e além disso, fornecia uma equação funcional adicional que, junto com a relação de inversão, permitiria a obtenção da função de partição por vértice do sistema.

O arcabouço estava pronto; só faltava um exercício de aplicação dessas equações funcionais. Ele me foi fornecido por um trabalho em que Sogo et al.[17] estudaram exaustivamente e classificaram modelos exatamente solúveis com duas componentes. O escolhido foi um modelo de oito vértices não simétrico, que obedece à condição de férmions livres e é mapeável no modelo de Ising definido na rede Union Jack.

3 - A relação triângulo-estrela duplicada

Desde que eu iniciei meus estudos de modelos exatamente solúveis, vindo de um mestrado em fenomenologia de partículas, uma das coisas que mais me intrigava era a exata relação existente entre as equações de fatorização e as chamadas relações triângulo-estrela. Sabe-se que o próprio Onsager já a estas se referia na década de 40. Foi somente com a publicação do livro do Baxter[1] que o enigma se desfez: a existência de soluções para a relação triângulo-estrela implicava na comutação da matriz de transferência. Foi aproveitando essas idéias que eu e o Prof. Valério Kurak demonstramos que a existência de soluções da relação triângulo-estrela e o conhecimento da solução de um sistema de spins na rede quadrada (com interação somente de primeiros vizinhos) permitiam estender e obter o resultado exato para as redes triangular e hexagonal[18]. Dessa maneira quando eu li o artigo do Baxter et al[19] meu espírito já estava preparado. Nesse trabalho eles estudaram o modelo de Potts[20] na rede triangular com interação de 2 spins primeiros vizinhos

e de 3 spins em triângulos alternados. Através de um método de operadores êles determinaram a linha crítica de transição de fase do sistema. O curioso desse sistema é que, muito embora sua linha crítica fosse conhecida exatamente, o mesmo não acontece com a função de partição sobre essa linha crítica. Isso era estranho, pois que se a solubilidade exata da linha crítica adviesse de uma relação triângulo-estrela deveria ser possível se obter a energia livre do sistema na linha crítica. Ao investigar isso acabei encontrando a relação triângulo-estrela duplicada.[5]

A relação triângulo-estrêla duplicada nada mais é do que a imposição de uma igualdade quando colocamos um triângulo dentro de uma estrêla e vice-versa (veja fig.2 da ref.[5]).

Sabemos que a renormalização de um sistema de spins e, em particular, a dizimação de spins, transforma interações antes de 2 spins vizinhos em interações multispins. Sabemos também que se um sistema tem transição única então esta ocorre no ponto auto-dual.

A combinação da relação triângulo-estrêla duplicada, dizimação de spins e transformação dual permitiu a obtenção da linha crítica desse sistema, bastando seguir os procedimentos descritos abaixo.

Primeiro: a dizimação de spins (fig. 4 da ref.[5]) transforma a rede estudada por Baxter et al [19] na rede A (fig. 1 da ref.[5]) com interação sòmente de spins primeiros vizinhos.

Segundo: A transformação triângulo-estrêla duplicada leva essa rede A na rede B (fig. 3 da ref.[5]).

Terceiro: A rede B é a rede dual de A.

Dessa maneira pudemos reobter a linha crítica de transição de fase do modelo.

4. Um modelo de dímeros, vértices e spins

Sistemas de vértices "staggered", isto é, com alternância de vértices tanto na direção horizontal quanto na vertical, sempre tiveram posição de destaque, desde o "boom" dos modelos exatamente solúveis na década de 70. E não é para menos. Estes sistemas incorporam modelos fundamentais da mecânica estatística: o modelo de Ising na presença de campo magnético e o modelo de Potts fora da criticalidade.[21]

Por outro lado, sistemas de dímeros têm solução no regime de empacotamento (isto é, quando cada sítio da rede é coberto por um e sòmente um dímero) através da técnica de Pfaffianos[22].

Nagle e Yokoi[23] estudaram um modelo de dímeros "staggered" na rede 4-8. Há duas sub-redes A e B e as ligações podem ser preenchidas com dímeros de atividades Z, W e 1. O diagrama de fases do modelo é bastante rico contendo em geral 3 fases e exibindo a assim chamada transição de ordem 3/2 (calor específico finito abaixo da temperatura crítica e divergência tipo raiz quadrada na transição). Graças a um isomorfismo com domínio de paredes, o modelo é interessante para o estudo de transições de fase tipo comensurável-incomensurável em adsorção de monocamadas de átomos em substratos sólidos.

Familiarizados que estávamos com modelos de vértices, eu e o Prof. Valério Kurak percebemos a semelhança desse modelo com o de seis vértices staggered, cujos aspectos matemáticos haviam sido anteriormente estudados por Wu e Lin[24].

Estabelecemos então a equivalência[6]: se a ligação horizontal (vertical) é coberta por um dímero de peso 1 colocamos uma flecha apontando de A para B (de B para A) ou flechas de B para A (de A para B) caso contrário. Como a cada vértice corresponde efetivamente a dois dímeros, a energia livre por vértice é duas vezes maior do que a energia livre por dímero.

Verificamos também que um modelo mais geral proposto por Nagle e

Yokoi[23] no final do trabalho, podia também ser mapeado num modelo staggered de sete vértices, sendo este último um caso particular de oito vértices (que obedece também à condição de férmions livres) discutidos e analisados anteriormente por Hsu, Lin e Wu.[25] Acreditamos que a permanência na obscuridade científica dos trabalhos [24] e [25] deva-se ao fato de que a energia associada a esses vértices sejam dependentes da temperatura. O trabalho de Nagle e Yokoi deu-lhes novo status no contexto físico de átomos adsorvidos em superfícies.

Ainda nesse nosso trabalho pudemos estabelecer uma correspondência entre esse modelo de vértices e um modelo de spins com interações de primeiros e segundos vizinhos tanto ferro quanto antiferromagnéticas. Novamente aqui, o sistema de spins padece do incoveniente de acoplamentos dependentes da temperatura.

SERVIÇO DE BIBLIOTE

III - Percolação: um estudo através de séries

"Probabilidade - Pseudônimo de Deus
quando êle não quer assinar o trabalho."
Anatole France

1. Introdução

Desde a sua proposição em 1957 por Broadbent e Hammersley (na sua versão por ligação[26]) e por Domb (na sua versão por sítio[27]) a percolação tem se transformado numa das grandes vedetes da mecânica estatística. São centenas de trabalhos despejados anualmente na praça.

Trabalha com aglomerados de partículas ou estados. Suas aplicações vão desde o estudo de solos, redes de resístores e diodos até modelos epidêmicos e evolução das galáxias.

Aliou-se, desde os seus primórdios, aos computadores (na verdade, "explodiu" graças a êles) e, mesmo não tendo uma hamiltoniana de interação, uniu-se à área de estudos de fenômenos críticos e transições de fase, transformando-se rapidamente no exemplo de transições de fase geométricas[28].

Na sua formulação original tem um único parâmetro chamado de probabilidade de ocupação. Faz-se uma varredura das ligações ou sítios de uma rede. Números randômicos, uniformemente distribuídos no intervalo entre zero e um, são sorteados. Toda vez que o número sorteado é maior do que a probabilidade de ocupação (fixa) ocupa-se o sítio ou a ligação. Dessa maneira formam-se aglomerados na rede. Diz-se que o sistema "percolou" quando um desses aglomerados atravessa a rede inteira. O valor da probabilidade de ocupação em que isto ocorre é chamado de crítico e corresponde a uma transição de fase contínua. Numa analogia aos sistemas

de spin, a probabilidade de percolação seria a magnetização e o tamanho médio dos aglomerados corresponderia à suscetibilidade.

Tem-se como certo que as versões por ligação e por sítio se encontram na mesma classe de universalidade, muito embora não exista ainda nenhuma prova rigorosa deste fato.

Graças à facilidade de ensaiar esses sistemas nos rápidos computadores atuais, a percolação se constitue hoje num verdadeiro laboratório de estudos dos efeitos de tamanho finito do sistema sôbre as grandezas físicas. Há sempre,porém, que se extrapolar os resultados para redes de tamanho infinito.

Tamanha dedicação da comunidade científica só poderia redundar, como de fato ocorreu, numa proliferação dos "tipos" de percolação. A percolação no formato original passou a ser chamada, embora sem caráter pejorativo, de "percolação ordinária". Suas realizações experimentais seriam: os ferromagnetos diluídos onde a probabilidade de percolação crítica está associada à concentração mínima necessária para que continue existindo a fase ferromagnética; a transição sol-gel em polímeros onde a identificação se dá com o chamado número de ligações cruzadas (crosslinks); a propagação de pragas num pomar e de incêndios na floresta.

O primeiro descendente da percolação ordinária foi a assim chamada percolação direcionada, estudada sistemáticamente pela primeira vez por Blease[29]. Sabe-se que os direcionamentos acíclicos (cíclicos) colocam o sistema em diferente (mesma) classe de universalidade da percolação ordinária. Como exemplos de aplicações dessa importante vertente da percolação temos: redes randômicas de resístor-diodo, propagação de incêndios em florestas com vento e evolução das galáxias.

O segundo descendente foi a chamada percolação "bootstrap"[30]. Nela a percolação ordinária é acrescida de uma regra de seleção; só sobrevivem sítios ocu-

pados com um determinado número de vizinhos. A percolação "bootstrap" modela sistemas em que átomos magnéticos diluídos são coagidos pela vizinhança a não se manifestarem magnéticamente. Como exemplo temos átomos de Fe diluídos em NbMo. Em geral, pertence a uma classe de universalidade diferente daquela da percolação ordinária.

O terceiro descendente foi a chamada percolação por invasão [31]. Descreve o fluxo de 2 fluidos imiscíveis em meio poroso (exemplo: água e óleo) e processos de ocupação através de caminhos de menor resistência. É apresentado em duas versões: sem e com armadilhamento (fluido incompressível). Sua formulação baseia-se na verificação experimental de que a água, ao expulsar o óleo das rochas, o faz primeiramente nos poros de menor diâmetro. Associando-se o tamanho dos poros a números randômicos temos a dinâmica da percolação por invasão: ocupamos na rede, um a um, os sítios (poros) com menor número randômico (tamanho) associado.

De uma maneira geral, as principais ferramentas no estudo de percolação têm sido técnicas de Monte Carlo e séries. As séries são hoje responsáveis pelas melhores estimativas tanto da percolação crítica quanto dos expoentes críticos. Foi através de séries que eu iniciei meus estudos de percolação, trazido pela mão do Baxter que, sem dúvida, era, até então, o meu guru. O meu envolvimento com o assunto foi tal que Baxter acabou perdendo um discípulo.

2. Percolação por ligação

Uma das consequências da invariança conforme exibida por vários modelos bidimensionais é que seus expoentes críticos são simples números racionais.

A percolação (ordinária) por ligação é mapeável no modelo de Potts de um estado. Logo todo o conhecimento que a invariança conforme trouxe ao modelo

de Potts se transfere para a percolação ordinária. O direcionamento da rede, porém, quebra de imediato até mesmo a invariança translacional. Não devemos, portanto, esperar que os expoentes críticos da percolação direcionada sejam simples números racionais. Em 1988, Baxter e Guttmann[7] estudaram a percolação direcionada por ligações na rede quadrada e obtiveram uma expansão em série para a probabilidade de percolação. Esta é, em geral, bem mais difícil de ser obtida do que as séries para os momentos da conectividade de pares onde longas séries foram conseguidas[32].

Surprendentemente, para a percolação direcionada por ligação na rede hexagonal, não havia nenhuma série para a probabilidade de percolação. Assim surgiu o meu trabalho[8] que obteve a série exata até ordem q^{13} (q = probabilidade de uma ligação não estar ocupada).

O método utilizado lança mão da técnica da matriz de transferência. Em primeiro lugar a rede é colocada de maneira piramidal (fig.1 da ref.[8]) com a origem sempre ocupada.

Em seguida, a "estrêla" da rede hexagonal é somada sobre seus estados internos e associada a um "triângulo" de spins tipo Ising com 2 estados (equação (4), ref.[8]).

Ao avançarmos de uma camada N para uma camada N+1, os coeficientes de $1, q, q^2, ...q^{N-1}$ permanecem inalterados, ou seja se constituem nos coeficientes exatos obtidos no limite termodinâmico.

Fomos até ordem q^{13}. Tentativas de se estender além, usando combinações lineares envolvendo coeficientes da série e números de Catalan não tiveram sucesso (ao contrário, do que ocorreu com a rede quadrada).

Finalmente utilizamos aproximantes de Dlog Padé e o método da razão para estimar a probabilidade de ocupação crítica e o expoente crítico β.

3. Percolação por sítio

Logo após o término do meu trabalho com percolação direcionada por ligação fiquei a me perguntar se não seria possível se obter resultados semelhantes para a versão percolação direcionada por sítios. O problema estava em encontrar uma formulação de matriz de transferência em que aquela milagrosa estabilização dos coeficientes ocorresse novamente.

Colocamos a rede quadrada na forma piramidal[9] e a direcionamos de maneira acíclica (o direcionamento cíclico leva à mesma classe de universalidade da percolação ordinária). Lembrando que um sítio ocupado só pertence ao aglomerado se e sòmente se existir pelo menos um caminho que o conecte à origem (e que, por sua vez, está sempre ocupada), concluimos que um sítio ocupado na linha N tem que ter pelo menos um sítio ocupado e primeiro vizinho na linha N-1.

Cada configuração na linha N será um polinômio em q ($q = 1 - p$, p = probabilidade de ocupação do sítio). Se armazenarmos cada uma das 2^N possíveis configurações da linha N e mantivermos, por exemplo, o polinômio até ordem q^{16}, necessitaremos de uma matriz $2^N \times 16$ para guardar essa informação.

Suponhamos que todas as configurações da linha N-1 sejam conhecidas até ordem q^{16}. Fixemos uma configuração na linha N cuja probabilidade queremos determinar. Para cada configuração compatível da linha N-1 (isto é, aquelas que permitem a todos os sítios ocupados da linha N se conectarem à origem) multiplicamos sua probabilidade (conhecida) por $p^m q^n$, onde m é o número de sítios ocupados da linha N e n é o número de sítios perimetrais da linha N (isto é, sítios vazios da linha N que têm pelo menos um sítio ocupado na linha N-1). Se somarmos sobre todas as configurações compatíveis da linha N-1, teremos a probabilidade dessa configuração ocorrer na linha N.

Juntamente com Ubiraci P.C. Neves, então meu estudante de mestrado,

escrevemos um programa Fortran que incorporou as observações feitas acima. Levou 36 horas de CPU no Convex.Fomos até $N = 15$ e mantivemos os polinômios até ordem q^{16}

Ao analisarmos os coeficientes que obtivéramos percebemos que uma sequência de números inteiros estava surgindo. Consultando a tabela do Sloane[33] descobrimos que esta sequência nada mais era do que a enumeração das dissecações de uma bola, problema resolvido anteriormente por Beineke e Pippert[34]. Sabíamos que algo semelhante ocorria entre a percolação direcionada por ligações e os números de Catalan. Havíamos descoberto o equivalente para a percolação direcionada por sítio. Como resultado pudemos incrementar de mais um termo a série da probabilidade de percolação.

O conhecimento da probabilidade associada a cada configuração permitiu calcular também uma série para o tamanho médio do aglomerado.

Finalmente, utilizando os aproximantes de Dlog Padé, estimamos a probabilidade de percolação crítica e o expoente crítico β. Os resultados foram muito bons e compatíveis com os obtidos por outras técnicas.

SERVIÇO DE BIBLIOTE... ...ÇÃO - IFQSC

IV - Pesquisas em andamento

"Conservador - Pessoa que acredita que
nada deve ser feito pela primeira vez"
Alfred Wiggam

1 - Percolação por invasão

Durante um seminário que eu dei no departamento, analisando a questão de percolação, estava na platéia o estudante Adolfo Posadas, aluno de doutorado de Sílvio Crestana (ambos do Núcleo de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação Agropecuária - EMBRAPA). Nesse seminário, eu fiz um ensaio sobre a evolução da população do autômata celular chamado "Game of Life" num aglomerado crescido segundo as regras da percolação por invasão. Conversamos, e eu vim a saber que eles haviam ensaiado nos laboratórios a percolação da água através da areia, num situação muito próxima da bidimensional. Imagens do experimento, que depois foram digitalizadas, mostravam várias etapas dessa experiência e a formação de "fingers". Como a água, ao percolar, ocupa preferencialmente os menores poros existentes entre os grãos de areia, germinou a idéia de modelar os resultados experimentais através da percolação por invasão[31].

O primeiro passo foi proibir a água de subir na direção vertical. Propusemos então a percolação por invasão direcionada em uma única direção.

Nos ensaios numéricos que se seguiram percebemos que os nossos aglomerados tinham muito mais buracos que os da experiência. Inventamos então um parâmetro (cujo valor seria fixado através do ajuste das dimensões fractais do volume e da superfície da teoria com os do experimento) que levava em conta o número de vizinhos ocupados em torno de um sítio de crescimento (obviamente um sítio com maior número de vizinhos tem maior probabilidade de vir a ser ocupado).

Resultados preliminares já foram apresentados no XV Encontro Nacional de Matéria Condensada [35] como trabalho convidado.

Atualmente, incorporamos mais 2 aspectos físicos ao problema: a intensidade da aceleração da gravidade e a pressão. Computacionalmente estamos na fase de grande demanda de CPU, tentando reduzir erros para a casa dos 3 %.

Por outro lado, o Adolfo Posadas deve ainda medir experimentalmente o perfil de distribuição dos diâmetros dos poros. Necessitamos desses dados para checar uma conjectura minha de que, uma vez fitados os resultados experimentais, poderíamos usar o perfil de aceitação (que está exibindo um pico) para obter, teoricamente, o histograma do perfil dos diâmetros dos poros.

2. Colapso em Polímeros

Um polímero é um cojunto de monômeros conectados com interações atrativas entre si e repulsivas com relação às moléculas do solvente. Os polímeros ramificados são aqueles que tem "loops". Na fase gel, dependendo do solvente e da temperatura, ele exibe uma transição de fase chamada de transição de colapso. Há uma grande variação no volume do polímero.

Este sistema foi estudado através de matriz de transferência na faixa [36] e por técnicas de Monte Carlo[37]. Em ambos os casos o modelo é de um animal na rede com interação atrativa de primeiros vizinhos. Constatou-se a transição de colapso e a existência de um ponto tricrítico onde a transição passa de 1ª ordem (baixa fugacidade) para 2ª ordem (alta fugacidade).

Recentemente, Madras et al[38] (este é um dos poucos trabalhos teóricos que eu conheço com 7 autores) enumeraram animais com tamanho até 19 na rede quadrada (10 horas de CPU no CRAY).

Ocorreu-me,então, que essa enumeração faz com que a função geratriz,

escrita nas variáveis fugacidade e peso de Boltzmann, seja exata atá ordem 19 e 18 respectivamente.

As derivadas primeira e segunda da função geratriz com relação à fugacidade dão, basicamente, a densidade e a compressibilidade isotérmica do sistema.

Para valores fixos da fugacidade, fiz gráficos da densidade contra a temperatura. Eles exibem claramente a existência do ponto tricrítico: para baixas fugacidades a densidade tem uma variação brusca na temperatura de transição, já, para altas fugacidades a variação é muito mais suave. No caso da compressibilidade isotérmica os picos são estreitos e largos para fugacidades baixas e altas, respectivamente.

Para terminar este trabalho necessito ainda escrever um programa (provavelmente usando computação algébrica já que os coeficientes da série são números inteiros grandes) que permita calcular o ponto tricrítico e seus expoentes.

Exitem 2 candidatos: os aproximantes de Canterbury e os aproximantes diferenciais parciais[39]. Infelizmente nenhum deles (os disponíveis atualmente) goza de boa reputação [39,40].

3 - Multifractais

O formalismo multifractal[41] se baseia no fato de que distribuições de probabilidade altamente não uniformes e que surgem em sistemas também não uniformes, possuem, frequentemente, leis de escala bastante ricas. A característica multifractal foi encontrada em diversos sistemas : nas galáxias [42], ligas [43], sistemas de diodos e resistores [44].

A descrição do multifractal pode ser feita de 2 maneiras: (que estão ligadas por uma transformação de Legendre): as dimensões generalizadas D_q que

correspondem ao q-ésimo momento da medida ou, alternativamente, o espectro de singularidade $f(\alpha)$ que é a dimensão fractal do conjunto cuja probabilidade escala com α.

Em 1989, Chhabra e Jensen[45] propuseram uma maneira direta de se obter $f(\alpha)$ e α sem ter que primeiramente determinar os momentos.

Logo após o mestrado do Ubiraci (abril/92) eu me interessei pelo "backbone" da percolação direcionada por sítios, ou seja, pelo conjunto de pontos que têm pelo menos um caminho que os conecte ao infinito. Um sub-conjunto do "backbone" é constituído pelos chamados sítios vermelhos: a remoção de um desses sítios provoca a interrupção da conectividade e a divisão do aglomerado em duas partes desconexas. A distribuição desses sítios vermelhos seria um multifractal?

Já comecei a escrever um programa, usando o esquema de Chhabra e Jensen, para obter a resposta. Nada tenho ainda de conclusivo.

V - Conclusões

"Nós sabemos todas as respostas:

Sim, Não e Talvez"

Como em toda atividade humana, na vida acadêmica também os insucessos são tão importantes para o progresso humano quanto o êxito. Muitas das nossas idéias ou ficam engavetadas ou, em muitos casos, vão parar na cesta de lixo por serem equivocadas. É um trabalho de garimpo encontrar boas idéias.

Eu classificaria os trabalhos científicos em tres categorias: os lineares - são aqueles que, ao sabor de uma técnica apreendida, mudam apenas de sistema (o equivalente experimental seria apenas a mudança das amostras), tem começo e fim conhecidos e rapidez na execução; os adaptadores - que ajeitam uma técnica de uma área para outra ou de um assunto para outro e os inovadores - que criam uma nova idéia ou técnica. Revendo meus trabalhos acredito que eu tenha me esforçado para situá-los nas categorias de adaptação e inovação.

A vida acadêmica tem duas componentes principais: a pesquisa e o ensino. Em ambas, o entusiasmo e a dedicação são condições fundamentais na boa execução das tarefas. Muito embora a carreira na USP premie predominantemente a pesquisa, é o contacto com os alunos que, no nosso dia a dia, cataliza e realimenta nossas forças. Gosto de lembrar o comentário exemplar do Prof. Zerbini, pioneiro de transplantes cardíacos no país, ao receber o Prêmio Moinho Santista: "Eu me considero um grande professor, ensinei tão bem que meus alunos me ultrapassaram".

Agradecimentos

Gostaria de agradecer de uma maneira geral aos meus colegas do Departamento pelo muito que me ensinaram e, em particular, àqueles que compõem o grupo de Mecânica Estatística, os professores: Roland Köberle, Sylvio Goulart Rosa e Fernando Fontanari e que criaram um bom ambiente de trabalho e de convívio durante todos esses anos. À Cecília pela datilografia e às bibliotecárias pela assistência.

À minha esposa Néia e meus filhos Carolina, Patrícia e Guilherme pelo amor com que sempre me cercaram.

Referências

[1] Baxter R.J. - *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic, London, 1982)

[2] Belavin A.A., Polyakov A.M. e Zamolodchikov A.B. - J. Stat.Phys. 36, 775 (1984)

[3] An-Yang H., McCoy B.M., Perk J.H.H., Tang S. e Yan M. - Phys.Lett.A (1987)

[4] Onody R.N. - Phys.Rev.A, 32, 1185 (1985)

[5] Onody R.N. - Phys.Lett. A, 118, 290 (1986)

[6] Onody R.N. e Kurak, V. - Phys.Rev. B, 38, 5061 (1988)

[7] Baxter R.J. e Guttmann A.J. - J.Phys.A: Math.Gen. 21, 3193 (1988)

[8] Onody R.N. - J.Phys.A:Math.Gen. 23, L335 (1990)

[9] Onody R.N. e U.P.C. Neves - aceito para publicação no J.Phys.A 1992).

[10] Onsager L. - Phys.Rev. 65, 117 (1944)

[11] Baxter R.J. - Ann.Phys. (N.Y.) 70, 193 (1972)

[12] Baxter R.J. - J.Phys.A:Math.Gen. 13, L61 (1980)

[13] Zamolodchikov A.B. - Commun. Math. Phys. 79, 489 (1981)

[14] Takhtadzhan L.A. e Faddeev L.D., Russ.Math.Surveys 34, 11 (1979)

[15] Pokrovsky S.V. e Bashilov Y. - Commun. Math. Phys. 84, 103 (1982)

[16] Shankar, R. - J. Stat.Phys. 29, 649 (1982)

[17] Sogo K., Uchimani M., Akutsu Y. e Wadati M., Prog. Theor. Phys. 68, 508 (1982)

[18] Onody R.N. e Kurak V. - J. Phys.A:Math. Gen. 17, L615 (1984)

[19] Baxter R.J., Temperley H.N.V. e Ashley S.E. - Proc. R. Soc. A 358, 535 (1978)

[20] Wu F.Y. - Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982)

[21] Baxter R.J. - J. Phys.C: Solid State Phys. 6, L445 (1973)

[22] Kasteleyn P.W. - J. Math. Phys. 4, 287 (1963)

[23] Nagle J.F. e Yokoi C.S.O. - Phys.Rev. B 35, 5307 (1987)

[24] Wu F.Y. e Lin K.Y. - Phys. Rev. B 12, 419 (1975)

[25] Hsue C.S., Lin K.Y. e Wu F.Y. - Phys.Rev. B 12, 429 (1975)

[26] Broadbent S.R. e Hammersley J.M. - Proc. Camb. Phil. Soc. 53, 629 (1957)

[27] Domb C. - Nature 184, 509 (1959)

[28] Stauffer D. - *Introduction to Percolation Theory* - (London: Taylor and Francis), 1985

[29] Blease J. - J. Phys. C: Solid State Phys. 10, 317 (1977) e Blease J. - J. Phys.C: Solid State Phys. 10, 3461 (1977)

[30] Chalupa J., Leath P.L. e Reich G.R. - J. Phys.C 12, L31 (1981)

[31] Wilkinson D. e Willemsen J.F. - J. Phys.A: Math. Gen.16, 3365 (1983)

[32] Essam J.W., Guttmann A.J. e De'Bell K. - J. Phys. A:Math.Gen. 21, 3815 (1988)

[33] Sloane N.J.A. - *A handbook of integer sequences* - New York: Academic 1973

[34] Beineke L.W. e Pippert R.E. - Math.Ann.191, 87 (1971)

[35] XV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada - Caxambu/MG - maio/1992

[36] Derrida B e Herrmann H.J. - J. Physique 44, 1365 (1983)

[37] Dickman R e Schieve W.C. - J. Phys. (Paris) 45, 1727 (1984)

[38] Madras N., Soteros C.E., Whittington S.G., Martin J.L., Sykes M.F., Flesia S e Gaunt D.S. - J.Phys.A:Math.Gen.23, 5327 (1990)

[39] Guttmann A.J. - *Phase transitions and critical phenomena* - Domb e Lebowitz - volume 13.

[40] Stilck J.F. e Salinas S.R. - J.Phys.A:Math.Gen. 14, 2027 (1981)

[41] Halsey T.C., Jensen M.H., Kadanoff L.P., Procacia I. e Shraiman B.I. - Phys.Rev.A, 33, 1141 (1986)

[42] Coleman P.H. e Pietronero L - Physica A, 185, 45 (1992)

[43]Blacher S., Brouvers F. e Anauthakrishna G. - Physica A, 185, 28 (1992)

[44] Schmittbuhl J., Olivier G. e Roux S. - J.Phys.A:Math.Gen 25, 2119 (1992)

[45] Chhabra A. e Jensen R.V. - Phys.Rev.Lett. 62, 1327 (1989)

New functional relation for vertex models

R. N. Onody
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13560 São Carlos, São Paulo, Brasil
(Received 20 December 1984; revised manuscript received 18 March 1985)

A new functional relation for factorizable vertex systems that do not satisfy the so-called symmetry relation is proposed. Together with the unitary condition this relation enables one to obtain the free energy of these systems in the thermodynamic limit. These relations are then used to solve a particular case of the free-fermion eight-vertex model.

I. INTRODUCTION

In recent years there has been considerable growing interest on an exhaustive analysis of two-dimensional models that can be solved exactly. The efforts in this direction involve both spin and vertex systems.[1-3] The existence of nontrivial solutions of the factorization equations plays an essential role: When such solutions do exist, then two transfer matrices with different Boltzmann's weights commute.[4,5] From this commutation one can extract two functional relations for the partition function: the unitarity relation and the symmetry relation.[5-7] These two relations together with some analytical considerations are sufficient to determine the free energy per vertex (or per spin) in the thermodynamic limit.[8] Although this technique seems to be poorer than the inverse scattering method[9-11] (which allows in principle the determination of the whole eigenvalue spectrum of the transfer matrix, not only the largest one as in the functional technique) it has the advantage that the search for the pseudovacuum is not needed. Meanwhile, there are some models where the functional may fail. This usually happens when the model does not exhibit a 90° rotation symmetry (at the S-matrix level, this corresponds to models without crossing symmetry[5]). It is necessary then to find a substitute functional relation to supply the absence of the symmetry relation. This has already been done on the context of some $Z(N)\times Z(N)$ models,[12] but unfortunately (as we shall see in this paper) it does not work in some other cases. For this reason I propose in Sec. II a new functional relation which is applied, in Sec. III, to solve a special case of the free-fermion eight-vertex model.

II. THE FUNCTIONAL RELATION

Let $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ be the two-particle scattering amplitude as shown in Fig. 1. The indices run from 0 to $q-1$ and correspond to the q kinds of particles. The parameter θ is the rapidity or spectral parameter.

The factorization equations or Yang-Baxter equations can be written as follows

$$S_{i_2 i_2}^{k_1 k_2}(\theta) S_{k_1 i_3}^{j_1 k_3}(\theta+\theta') S_{k_2 k_3}^{j_2 j_3}(\theta') = S_{i_2 i_3}^{k_2 k_3}(\theta') S_{i_1 k_3}^{k_1 j_3}(\theta+\theta') S_{k_1 k_2}^{j_1 j_2}(\theta) , \quad (1)$$

where summation over repeated indices is understood. In Fig. 2 we give a graphical representation of these equations.

From Eq. (1) it is clear that if $\theta=\theta'=0$ then the so-called initial condition

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(\theta=0)=\delta_{i_1}^{j_2}\delta_{i_2}^{j_1} \quad (2)$$

is a trivial solution. If we put in the expression (1) $\theta+\theta'=0$ and use the initial condition we get

$$S_{i_1 i_2}^{k_1 k_2}(\theta) S_{k_2 k_1}^{j_1 j_2}(-\theta)=\rho(\theta)\delta_{i_1}^{j_2}\delta_{i_2}^{j_1} , \quad (3)$$

where $\rho(\theta)$ is some even function of θ. The unitarity condition (3) can be extended to the partition function per vertex, $k(\theta)$, of the associated vertex model[5,6,13]

$$k(\theta)k(-\theta)=\rho(\theta) . \quad (4)$$

The expression (4) is the unitarity (or inversion) relation. In order to solve the vertex it is necessary to aggregate another functional equation to the unitarity relation. This is usually done through the symmetry relation[6] which comes from a 90° rotation plus parity symmetries of the vertex model.[5] Naturally, there are models where such symmetries are absent, and a substitutional functional equation must be found, an example of which are

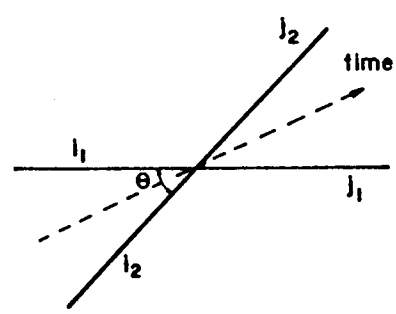

FIG. 1. S matrix in (1 + 1) dimensions.

 ©1985 The American Physical Society

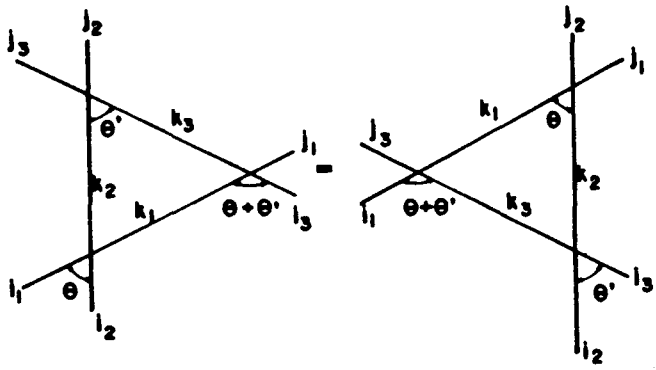

FIG. 2. Graphical representation of the factorization equations.

Belavin's solutions[14] of factorizable $Z(N)\times Z(N)$ models. Belavin and Zamolodchikov[12] found the following alternative form: if it is possible to find a number η such that

$$\sum_{i_1,j_1=0}^{N-1} S_{k_1 i_1}^{j_1 k_2}(2\eta)\psi_{j_1}^{i_1}=0,\quad k_1,k_2=0,1,\ldots,N-1$$

has as a *unique* solution $\psi_{j_1}^{i_1}\sim\delta_{j_1}^{i_1}$ then

$$\sum_{k_1,k_2=0}^{N-1} S_{i_1 k_1}^{k_2 j_1}(\eta-\theta)S_{i_2 k_2}^{k_1 j_2}(\eta+\theta)=\bar{p}(\theta)\delta_{i_2}^{j_1}\delta_{i_1}^{j_2}$$

satisfies the factorization equations and implies that the partition function per vertex obey the relation

$$k(\eta-\theta)k(\eta+\theta)=\bar{p}(\theta)\ .$$

However, Sogo *et al.*[2] have recently made an exhaustive analysis of all factorizable eight-vertex models and they found, in this category, a free-fermion eight-vertex model (they classify this model as type II, type I being the symmetric one solved by Baxter[15]). If we apply to this system the prescription developed by Belavin and Zamolodchikov we would have arrived at the conclusion (on account of the free-fermion condition) that the matrix ψ in diagonal form is *not* the unique solution and therefore their procedure cannot be used.

The factorization equations are invariant if we multiply the matrix $S(\theta)$ by a normalization function $\lambda(\theta)$, i.e., $S'(\theta)=\lambda(\theta)S(\theta)$ also satisfies the equations. Now one supposes that there exists a value $\theta=\bar{\theta}$ such that

$$S'^{j_1 j_2}_{i_1 i_2}(\bar{\theta})=\delta_{i_1}^{i_2}\delta_{j_1}^{j_2} \tag{5}$$

and

$$\sum_{k_1,k_2=0}^{q-1} S'^{i_2 k_2}_{k_1 i_1}(\theta+\bar{\theta})S'^{j_1 j_2}_{k_1 k_2}(\theta)=\rho'(\theta)\delta_{i_1}^{j_2}\delta_{i_2}^{j_1}\ , \tag{6}$$

then the factorization equations (1) are satisfied.

The introduction of the function $\lambda(\theta)$ comes only to take into account the fact that the value $\bar{\theta}$ may correspond to a pole of the original S matrix (as in the case that we shall study in the next section).

Returning to the original S matrix, we have

$$\sum_{k_1,k_2=0}^{q-1} S_{k_1 i_2}^{i_2 k_2}(\theta+\bar{\theta})S_{k_1 k_2}^{j_1 j_2}(\theta)=\bar{p}(\theta)\delta_{i_1}^{j_2}\delta_{i_2}^{j_1}\ , \tag{7}$$

where

$$\bar{p}(\theta)=\frac{\rho'(\theta)}{\lambda(\theta)\lambda(\theta+\bar{\theta})}\ .$$

Now what I would like to say is that the local condition (7) extends to the level of the partition function per vertex, i.e.,

$$k(\theta+\bar{\theta})k(\theta)=\bar{p}(\theta)\ . \tag{8}$$

This is a delicate point since if one tries to use the standard method to prove (8), the first step would be to show that the two transfer matrices $T(\theta)$ and $T(\theta+\bar{\theta})$ commute.[6] But the determinant of $S'(\theta)$ is zero, so the matrix is singular, and therefore the commutation cannot be proved from the factorization equations. However when Eq. (8) is applied to a particular case of the free-fermion eight-vertex model then at the level of the associated spin model (Ising model on a Union Jack lattice) it becomes exactly the symmetry relation. In any circumstance a more direct proof would be required.

III. SOLUTION OF A FREE-FERMION EIGHT-VERTEX MODEL

Sogo *et al.*[2] studied a factorizable free-fermion eight-vertex model where the allowed vertex configurations and the respective weights are shown in Fig. 3. It is a particular case of the one solved by Fan and Wu[16] using the method of dimers, and it corresponds to the Ising model defined on a Union Jack lattice.[17,18]

The free fermion condition reads

$$h_1h_2+h_t^2=1+h_a^2\ . \tag{9}$$

Through the factorization equations Sogo *et al.*[2] found the following parametrization (see Felderhof[19] who also solved the free-fermion model using elliptical function parametrizations)

$$h_1(\theta)=\frac{\mathrm{cn}(\theta,k)}{\mathrm{dn}(\theta,k)}+\frac{\gamma\epsilon\,\mathrm{sn}(\theta,k)}{(1-\gamma^2)^{1/2}},\quad \epsilon=\pm1\ , \tag{10a}$$

$$h_2(\theta)=h_1(-\theta)\ , \tag{10b}$$

$$h_t(\theta)=\frac{\epsilon\,\mathrm{sn}(\theta,k)}{(1-\gamma^2)^{1/2}}\ , \tag{10c}$$

$$h_a(\theta)=\frac{\delta k\,\mathrm{sn}(\theta,k)\mathrm{cn}(\theta,k)}{\mathrm{dn}(\theta,k)},\quad \delta=\pm1\ , \tag{10d}$$

$$h_r(\theta)=1\ , \tag{10e}$$

where θ is the rapidity, k is the modulus of the Jacobian elliptic functions,[20] and γ is an additional parameter.

First I define

$$(1-\gamma^2)^{1/2}=\mathrm{sn}(\xi,k) \tag{11}$$

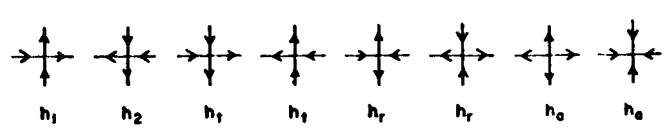

FIG. 3. Vertices of the free fermion model and their respective activities.

and for convenience, I will change all the elliptic functions to the modulus $\bar{k}$

$$\bar{k}=\frac{ik}{k'} \tag{12}$$

where k' is the complementary modulus.

In this way, Eqs. (10) can be rewritten (putting $\epsilon=\delta=1$)

$$h_1=\mathrm{cn}(u,\bar{k})+\frac{\mathrm{cn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{sn}(u,\bar{k})}{\mathrm{sn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{dn}(u,\bar{k})}\,, \tag{13a}$$

$$h_2=\mathrm{cn}(u,\bar{k})-\frac{\mathrm{cn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{sn}(u,\bar{k})}{\mathrm{sn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{dn}(u,\bar{k})}\,, \tag{13b}$$

$$h_t=\frac{\mathrm{dn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{sn}(u,\bar{k})}{\mathrm{sn}(\eta,\bar{k})\,\mathrm{dn}(u,\bar{k})}\,, \tag{13c}$$

$$h_a=\frac{-i\bar{k}\,\mathrm{sn}(u,\bar{k})\,\mathrm{cn}(u,\bar{k})}{\mathrm{dn}(u,\bar{k})}\,, \tag{13d}$$

$$h_r=1\,, \tag{13e}$$

where $u=k'\theta$ and $\eta=k'\xi$.

The physical regime when all weights are positive in the ordered phase corresponds to $0<\bar{k}<1$, $u=iv$, $\eta=i\tau$, $0<v<\tau$, $0<\tau<\bar{K}'$, and $\bar{K}'-v<\tau$ ($\bar{K}'$ is the complete elliptic integral of the first kind of the complementary modulus $\bar{k}'$). It is easy to verify that condition (5) is satisfied for $\bar{u}=i\bar{K}'$ and $\lambda(u)=[\mathrm{cn}(u,\bar{k})]^{-1}$. Using Eqs. (3), (4), (7), and (8) one can derive the functional relations for the reduced free energy per vertex f ($f=-\beta F$)

$$f(u)+f(-u)=\ln\left[\frac{\mathrm{sn}^2\eta-\mathrm{sn}^2u}{\mathrm{sn}^2\eta\,\mathrm{dn}^2u}\right], \tag{14a}$$

$$f(u+i\bar{K}')=\ln\left[\frac{\mathrm{cn}(u+i\bar{K}')}{\mathrm{cn}u}\right]+f(-u)\,, \tag{14b}$$

where I have omitted the explicit dependence on $\bar{k}$ of the elliptic functions.

The logarithms have the following expansion for $\bar{k}<1$:

$$\ln\left[\frac{\mathrm{sn}^2\eta-\mathrm{sn}^2u}{\mathrm{sn}^2\eta\,\mathrm{dn}^2u}\right]=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{16q^n}{n(1-q^{2n})}\sin\left[\frac{\pi n}{2\bar{K}}(\eta+\bar{K}-i\bar{K}')\right]\times\sin\left[\frac{\pi n}{2\bar{K}}(\eta-\bar{K}-i\bar{K}')\right]\sin^2\left[\frac{\pi nu}{2\bar{K}}\right], \tag{15a}$$

$$\ln\left[\frac{\mathrm{cn}(u+i\bar{K}')}{\mathrm{cn}u}\right]=-2\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{2q^n+(-1)^n(1+2q^n)}{n(1-q^{2n})}\right]\sin\left[\frac{\pi ni\bar{K}'}{2\bar{K}}\right]\sin\left[\frac{\pi n}{\bar{K}}\left[u+\frac{i\bar{K}'}{2}\right]\right], \tag{15b}$$

where

$$q=\exp\left[-\frac{\pi\bar{K}'}{\bar{K}}\right].$$

From these expressions and Eqs. (14) one can derive the reduced free energy per vertex in the ordered phase (for the disordered phase, i.e., $\bar{k}>1$, it is necessary to change $\bar{k}\to(\bar{k})^{-1}$ and derive the new expansion for the logarithms),

$$f(u)=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n(1-q^{2n})\cos\left[\frac{\pi ni\bar{K}'}{2\bar{K}}\right]}[g_n(u)+h_n(u)] \tag{16}$$

with

$$g_n(u)=[2q^n+(-1)^n(1+q^{2n})]\sin\left[\frac{\pi ni\bar{K}'}{2\bar{K}}\right]\sin\left[\frac{\pi nu}{\bar{K}}\right]$$

and

$$h_n(u)=8q^n\sin\left[\frac{\pi n}{2\bar{K}}(\eta+\bar{K}-i\bar{K}')\right]\sin\left[\frac{\pi n}{2\bar{K}}(\eta-\bar{K}-i\bar{K}')\right]\sin\left[\frac{\pi nu}{2\bar{K}}\right]\sin\left[\frac{\pi n}{2\bar{K}}(u-i\bar{K}')\right].$$

IV. CONCLUSION

For factorizable vertex models that do not satisfy the symmetry relation I have presented an alternative functional relation. This relation is verified to be true for a free-fermion eight-vertex model which corresponds to the Ising model defined on a Union Jack lattice; nevertheless a more direct demonstration is still lacking.

ACKNOWLEDGMENT

It is a pleasure to acknowledge V. Kurak for calling my attention to this problem and for many useful discussions.

[1]J. M. Maillard and T. Garel, J. Phys. A **17**, 1251 (1984); **17**, 1257 (1984).
[2]K. Sogo, M. Uchinami, Y. Akutsu, and M. Wadati, Prog. Theor. Phys. **68**, 508 (1982).
[3]K. Sogo, Y. Akutsu, and T. Abe, Prog. Theor. Phys. **70**, 730 (1983); **70**, 739 (1983).
[4]R. J. Baxter, *Fundamental Problems in Statistical Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1980) p. 109.
[5]R. Shankar, J. Stat. Phys. **29**, 649 (1982).
[6]S. V. Pokrowski and Y. A. Bashilov, Commun. Math. Phys. **84**, 103 (1982).
[7]R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, (Academic, London, 1985).
[8]R. J. Baxter, J. Stat. Phys. **28**, 1 (1982).
[9]L. A. Takhtadzhan and L. D. Faddeev, Russ. Math. Surveys, **34**, 11 (1979).
[10]H. B. Thacker, J. Math. Phys. **21**, 1115 (1980).
[11]R. N. Onody and M. Karowski, J. Phys. A **16**, L31 (1983).
[12]A. A. Belavin and A. B. Zamolodchikov, Phys. Lett. **116B**, 165 (1982).
[13]A. B. Zamolodchikov, Commun. Math. Phys. **69**, 165 (1979).
[14]A. A. Belavin, Nucl. Phys. **B52**, 180 (1981).
[15]R. J. Baxter, Ann. Phys. (N.Y.) **70**, 193 (1972).
[16]C. Fan and F. Y. Wu, Phys. Rev. B **2**, 723 (1970).
[17]V. G. Vaks, A. I. Larkin, and Yu. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 1180 (1965) [Sov. Phys.—JETP **22**, 820 (1966)].
[18]J. E. Sacco and F. Y. Wu, J. Phys. A **8**, 1780 (1966).
[19]B. U. Felderhof, Physica (Utrecht) **65**, 421 (1972); **66**, 279 (1973); **66**, 509 (1973).
[20]I. S. Gradsteyn and I. M. Ryzhik *Table of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1980).

De acordo com as políticas editoriais, este artigo não pode ser depositado em repositório de acesso aberto. Para acesso ao artigo completo entre em contato com o(a) autor(a) ou com o Serviço de Biblioteca e Informação IFSC - USP (bib@ifsc.usp.br).

ONODY, R. N. Critical line of the triangular potts model with two-and three-site interactions : a simple derivation. **Physics Letters A,** v.118, n.60, p.290-2, Oct. 1986.

Equivalences between a dimer, a vertex, and a spin model

R. N. Onody and V. Kurak
Departamento de Fisica e Ciência dos Materiais, Instituto de Fisica e Quimica de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13560 São Carlos, São Paulo, Brazil
(Received 6 October 1987)

It is shown that a recently introduced anisotropic dimer model with domain-wall behavior can be mapped into a staggered free-fermion six-vertex model. The associated spin model with ferromagnetic and antiferromagnetic couplings and interactions between first and diagonal neighbors on a square lattice is also given.

Recently, in a very interesting paper, an exactly solvable dimer model has been treated by Nagle and Yokoi.[1] The model has two independent activities z and w and it is defined in a staggered way on a 4-8 lattice shown in Fig. 1. They solved the dimer problem in the close-packed regime using the Pfaffian method.[2] In the general case there are three phases and the intermediate phase is an incommensurate phase. The system exhibits a $\frac{3}{2}$-order transition[3] at a lower temperature and an inverted $\frac{3}{2}$-order transition at a higher temperature. For the special case $z=w$ the model is the ferroelectric stannous chloride dihydrate model.[4]

In this Comment we show that the model described above can be mapped into a general staggered free-fermion six-vertex model studied by Wu and Liu.[5] It is also shown that this six-vertex model is an Ising-like model with some forbidden configurations.

To see the first equivalence let us recall the prescription given by Wu and Liu:[5] if the edge is covered by a dimer weighted by 1 we draw an arrow from A to B (B to A) in the horizontal (vertical) direction, otherwise an arrow from B to A (A to B). A one-to-one correspondence between the dimer configurations of the 4-8 lattice and the staggered six-vertex configurations of the square lattice is established. These rules lead then to the vertices shown in Fig. 2 with their respective weights. Of course, as each vertex corresponds effectively to two dimers, the free-energy per vertex is twice the free-energy per dimer. Observing that on both sublattices the free-fermion condition is satisfied the proof is now completed. It can be also shown in a straightforward way that the generalized model studied by Nagle and Yokoi[1] at the end of their paper corresponds to a staggered seven-vertex model which is, on the other hand, a particular case of the free-fermion staggered eight-vertex model discussed by Hsue, Lin, and Wu.[6]

Although the six- and eight-vertex models include the dimer models considered by Nagle and Yokoi[1] from a mathematical point of view, the associated six- and eight-vertex models are nonphysical in that at least one of the vertex energies depends upon temperature, so these models were previously ignored in the literature. The work of Nagle and Yokoi[1] has shown that this nonphysical feature of these particular six- and eight-vertex models is not present when viewed as abstract models of dimers or in the physical context of domains walls and adsorbed atoms.

Now the second equivalence can be seen if we start with an "interactions-round-a-face" or "IRF" model[7] shown in Fig. 3. On the sublattice A the weights are given by

$$\begin{aligned} w^A(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4) &= \rho(1-\delta_{\sigma_2,\sigma_4}\delta_{\sigma_1,-\sigma_3}) \\ &\quad \times \exp[L/2(\sigma_1\sigma_2+\sigma_3\sigma_4)+L'/2(\sigma_1\sigma_4-\sigma_2\sigma_3) \\ &\quad +K(\sigma_1\sigma_3-\sigma_2\sigma_4)]\,, \end{aligned} \tag{1}$$

where ρ is a proportionality function and the couplings L, L', and K are in reduced form. The weights in the sublat-

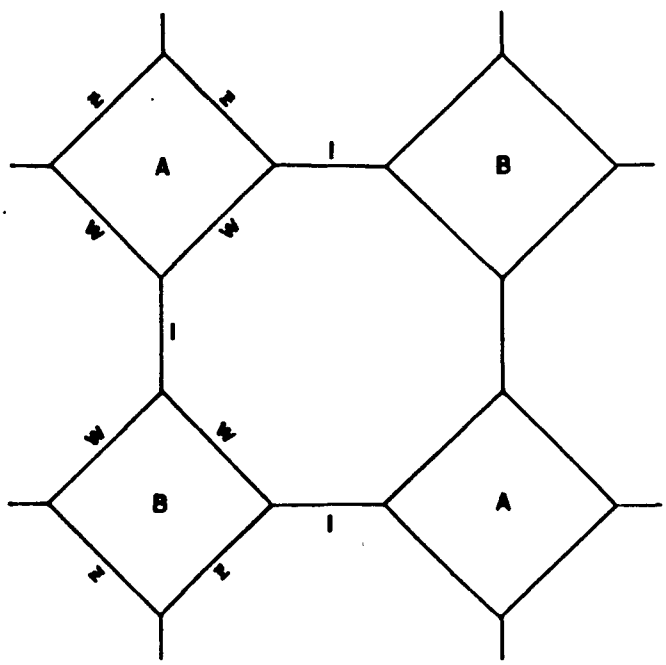

FIG. 1. The 4-8 lattice with activities z and w around the squares and activity 1 on all horizontal and vertical bonds.

 ©1988 The American Physical Society

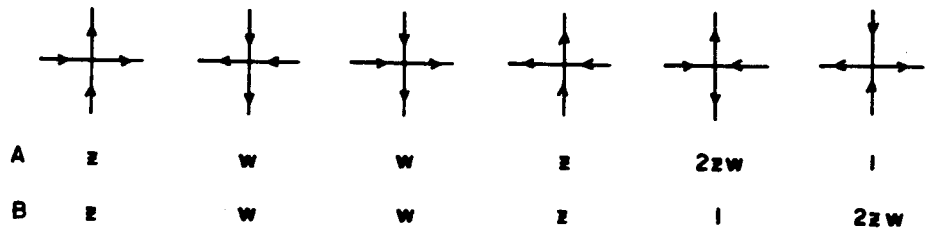

FIG. 2. The associated six-vertex model with the respectives weights for each sublattice.

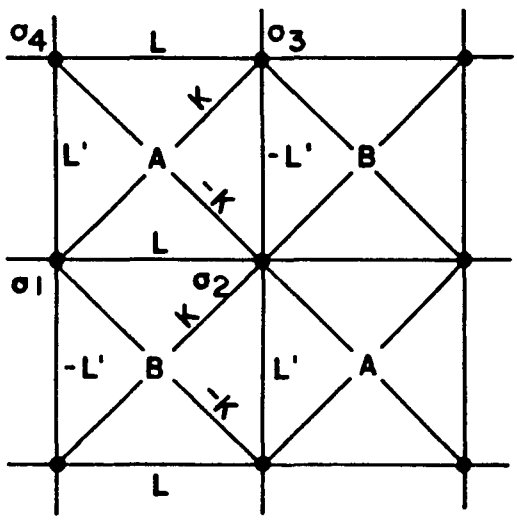

FIG. 3. The associated spin model. The variables σ_i assume the values ± 1.

tice B can be obtained from Eq. (1) through the exchange $L' \leftrightarrow -L'$. Thus the spin model defined above can immediately be associated with the former six-vertex model using the standard prescription: if two neighbors spins are like (unlike) put arrows pointing up or to the right (down or to the left). This gives a two-to-one correspondence between spins and vertices configurations. In this way, the following connection comes out

$$\rho = \sqrt{2w} \ , \tag{2a}$$

$$e^{L} = \sqrt{z/w} \ , \tag{2b}$$

$$e^{L'} = \sqrt{2zw} \ , \tag{2c}$$

$$e^{2K} = \sqrt{2} \ . \tag{2d}$$

Observe that K is fixed and the critical behavior is under control of L and L'. The frontiers of the four regions found by Nagle and Yokoi[1] corresponds here to the lines $L = \pm L'$.

[1]J. F. Nagle and C. S. O. Yokoi, Phys. Rev. B 35, 5307 (1987).
[2]P. W. Kasteleyn, J. Math. Phys. 4, 287 (1963).
[3]J. F. Nagle, Proc. Natl. Acad. Sci. 70, 3443 (1973).
[4]S. R. Salinas and J. F. Nagle, Phys. Rev. B 9, 4920 (1974).
[5]F. Y. Wu and K. Y. Lin, Phys. Rev. B 12, 419 (1975).
[6]C. S. Hsue, K. Y. Lin, and F. Y. Wu, Phys. Rev. B 12, 429 (1975).
[7]R. J. Baxter, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics V*, edited by F. G. D. Cohen (North-Holland, Amsterdam, 1980), p. 109.

De acordo com as políticas editoriais, este artigo não pode ser depositado em repositório de acesso aberto. Para acesso ao artigo completo entre em contato com o(a) autor(a) ou com o Serviço de Biblioteca e Informação IFSC - USP (bib@ifsc.usp.br).

ONODY, R. N. Directed bond percolation on the honeycomb lattice. **Journal of Physics A**, v.23, n.7. , p.335-8, 1990

Series expansion of the directed percolation probability

R.N.Onody and U.P.C.Neves

Departamento de Física e Ciência dos Materiais
Instituto de Física e Química de São Carlos
Universidade de São Paulo - Caixa Postal 369
13560 - São Carlos, São Paulo, Brasil.

Abstract

Using a transfer matrix technique we obtain extended series expansion of the percolation probability for the directed site percolation problem on the square lattice. Our approach reveals an up to now unsuspected connection between this problem and the enumeration of the number of ways of dissecting a ball. We show that the method can also be used to determine a series expansion for the mean cluster size. An analysis based on Padé approximants gives estimates of the critical threshold and also of the critical exponent β .

ICP - 0520

1 Introduction

Percolation theory has a fundamental role in the study of geometric phase transitions. Since it has been proposed in its *bond* (Broadbent and Hammersley 1957) and *site* version (Domb 1959) a huge amount of techniques and weapons were used in order to increase our understanding on the subject, e. g., series expansions, Monte Carlo methods, transfer-matrix technique and various types of calculations spawned by the renormalization group theory (Stauffer 1985).

Directed percolation is an anisotropic variant of percolation where now the lattice is *oriented* . Acyclic (cyclic) orientation leads to a different (same) universality class from undirected percolation (Blease 1977).

Directed percolation has many possible applications and realizations including crack propagation (Kertész and Vicsek 1980), epidemics with a bias (Grassberger 1985), galactic evolution (Schulman and Seiden 1982) and resistor-diode networks (Redner and Brown 1981). Moreover, it can also be associated to Reggeon field theory (Grassberger and Sundermeyer 1978, Cardy and Sugar 1980), collapse transition for branched polymers (Dhar 1987) and vicious random walkers (Arrowsmith *et al* 1991). Recently a number of results have been obtained for directed percolation regarding, e.g., the fractal dimension at threshold (Hede *et al* 1991), Kasteleyn-Fortuin formulas for a chiral Potts model (Arrowsmith and Essam 1990), a new scaling mechanism for the longitudinal correlation length (Henkel and Privman 1991), conversion site-to-bond method (Duarte 1990), mean field renormalization group (Neves and Leal da Silva 1991), transfer matrix methods (ben-Avraham *et al* 1991), series techniques (Onody 1990, Ruskin and Cadilhe 1991) and self-organized criticality (Obukhov 1990).

Focusing our attention on series expansion methods we note that for the pair connectdness moments (low density expansions) very long series are now available (Essam *et al* 1988) for both site and bond percolation on the directed square and triangular lattices. However, for the corresponding series expansion of the percolation probability (high density expansion) the status is not the same and only for the directed *bond* percolation some recent improvements

SERVIÇO DE DOCUMENTAÇÃO

were made (Baxter and Guttmann 1988, Onody 1990). In fact, for the *site* percolation defined on the directed square lattice, the longest previously published series has remained the ten-term series of De'Bell and Essam (1983). In this paper, using a transfer matrix method, we extend the known series for the percolation probability to 16 terms.

This paper is organized as follows. In section 2 we present the transfer- matrix method we have used to get the series expansion of the percolation probability to order 15. In section 3 we establish a connection between this expansion and the number of dissections of a ball. This fact allow us to increment the series by one more term. We also show how the mean cluster size can be obtained using the same transfer-matrix scheme. A Padé approximant analysis of the series is used in section 4 to estimate the percolation threshold q_c and the critical exponent β . We conclude the paper with a short summary.

2 The Transfer-Matrix Method

Consider a square lattice drawn diagonally as in figure 1. Sites are independently present with probability p and absent with probability $q = 1 - p$ and the edges of the lattice are oriented as shown in the figure 1 (acyclic orientation).

The order parameter for this system is the percolation probability $P(q)$, i.e., the probability that the origin O belongs to an infinite cluster.

As p approaches its critical value p_c from above, $P(p)$ goes to zero according to the power-law

$$P(p) \sim (p - p_c)^{\beta} \tag{2.1}$$

where β is the critical exponent.

Figure 1 to be inserted here

For this quantity the longest existent series was evaluated through the enumeration of a lattice animal generating program (De'Bell and Essam 1983). We shall use a transfer-matrix approach that stores information from one row to the next one.

Let us denote an occupied site by 1, an empty site by 0 and one configuration (of the 2^N allowed) of the N sites living in the row N by $\{\alpha\}_N = \{\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_N\}$ with α_i being 0 or 1 and corresponding to the state of occupation of i-th site of that row. Let $P(\{\alpha\}_N)$ be the probability of occurrence of such configuration.

For the second row we have explicitly : $P(\{1,1\}) = p^2$, $P(\{1,0\}) = P(\{0,1\}) = pq$ and $P(\{0,0\}) = 0$ (remember that the origin is always occupied and that the configuration $\{0,0\}$ is forbidden since it interrupts the cluster). We store the four configurations in a 4x3 matrix reserving one line for each configuration and with the columns keeping the coefficients of the corresponding polynomial in the variable q. Summing over all configurations we have

$$P_2(q) = \sum_{\{\alpha\}_2} P(\{\alpha\}_2) = 1 - q^2 \tag{2.2}$$

Now using this information retained up to the row 2, we can formulate a procedure that enable us to get *all* configurations probabilities $P(\{\alpha\}_3)$ of the row 3. The rules are the following:

i) Consider a configuration of the row 3, say $\{1,0,0\}$.

ii) Match this with all *compatible* configurations of the row 2. By *compatible* configuration we mean one configuration of the second row that allows *all* the occupied sites of the third row being connected to the origin. In other words,every occupied site of the row 3 *must* have at least one occupied nearest neigbour at the row 2.This preserves the concept that a site only belongs to the directed cluster if and only if it is connected to the origin.

iii) For *each* compatible configuration of the row 2 multiply the corresponding probability by a factor $p^m q^n$ where m is the number of occupied sites and n is the number of perimeter sites (i.e., *all* empty sites of the row 3 with at

least one occupied nearest neighbour site in the row 2) of the third row. Sum over all compatible configurations.

$$P(\{1,0,0\}) = pq^2P(\{1,1\}) + pqP(\{1,0\}) \qquad (2.3)$$

iv) Doing the same thing for all configurations of the third row, we can then store these probabilities in a matrix 2^3 x 6 in the same way that we did with the second row.

It is easy to get that

$$P_3(q) = \sum_{\{\alpha\}_3} P(\{\alpha\}_3) = 1 - q^2 - 3q^3 + 4q^4 - q^5 \qquad (2.4)$$

Proceeding in the same way we can get $P(\{\alpha\}_N)$ and $P_N(q)$ for N = 4,5,...

We wrote a FORTRAN program to execute the rules above until the row $N = 15$ keeping the polynomials up to order q^{16} (the reason for this will become clear in the next section). It took 36 CPU hours in our CONVEX.

For a finite lattice of N rows we have

$$P_N(q) = \sum_{m=0}^{\frac{(N-1)(N+2)}{2}} a_{Nm}q^m \qquad (2.5)$$

For $q < q_c$ we expect that

$$P(q) = \lim_{N\to\infty} P_N(q) \qquad (2.6)$$

In fact we can take this as a more precise definition of P(q).

Analysing these polynomials we observe that in going from row N to row $N+1$ leaves the coefficient of $1, q, q^2, ..., q^N$ *unchanged* such that the percolation probability can be written

$$P(q) = P_\infty = \sum_{N=1}^{\infty} a_{NN}q^N \qquad (2.7)$$

In this way, we have the series expansion

$$P(q) = 1 - q^2 - 3q^3 - 8q^4 - 21q^5 - 56q^6 - 154q^7 - 434q^8 - 1252q^9 - 3675q^{10} - 10954q^{11} - 33044q^{12} - 100676q^{13} - 309569q^{14} - 957424q^{15}... \qquad (2.8)$$

3 Dissections of a Ball

Through the analysis of the coefficients a_{Nm} of (2.6) or, more precisely, through analysis of the differences $(a_{N,N+1} - a_{N+1,N+1})$ we have found the following amazing integer sequence: 1, 3, 12, 55, 273, 1428, 7752, 43263, 246675, etc. This sequence is exactly an enumeration problem of ball dissections ! (Beineke and Pippert 1971, Sloane 1973) .

The problem of dissections was first formulated by Euler as the number of ways of dissecting a convex polygon of n+2 sides into n triangles. This question leads to the Catalan numbers $C_n = \frac{(2n)!}{n!(n+1)!}$ ($n \geq 1$). Such numbers have already appeared in the context of directed *bond* percolation (Baxter and Guttmann 1988). Since the boundary of a polygon is homeomorphic to a circle, such a triangulation can be considered as a dissection of a disk and therefore it is a two dimensional problem. The three dimensional analogue corresponds to dissections of a ball.

Let $D_3(n)$ be the number of ways of inserting n-4 sheets through a ball having n vertices on its surface in such a way that each sheet contains precisely three of the vertices and so that pairs of sheets meet only on surface curves joining vertices. This problem was solved by Beineke and Pippert (1971).

$$D_3(n) = \frac{(3n-9)!}{(n-3)!(2n-5)!} \tag{3.1}$$

for $n \geq 3$.

Turning back to our sequence we can identify

$$a_{N,N+1} - a_{N+1,N+1} = D_3(N+3) = \frac{(3N)!}{(N)!(2N+1)!} \tag{3.2}$$

That is the reason we have kept the polynomial $P_{15}(q)$ till order q^{16}. We have $a_{15,16} = 11121767818$ and using (3.2) we can find

$$a_{16,16} = -2987846 \tag{3.3}$$

incrementing the percolation probability by one more term.

Although we have found the link between the directed site problem and the dissection problem, we don't know its origin. It would be very interesting if one could demonstrate (3.2).

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

To close this section let us show how the method we have developed so far can also be used to obtain the mean cluster size series $S_N(p)$ (low density series). It is necessary to incorporate, in each row, its site content. Thus, in a row m, we multiply each configuration probability $P(\{\alpha\}_m)$ by the number of *occupied* sites of *this* configuration and sum over *all* possible configurations to get a partial sum $S(m,p)$. Up to row N the mean cluster size will be given by

$$S_N(p) = \sum_{m=1}^{N} S(m,p) \tag{3.4}$$

which gives the correct answer to order p^{N-1} (that is, in going to rows $\geq N$ the polynomial coefficients until order $N-1$ will not be changed anymore).

We can easily calculate by hand the first few partial sums. For example

$S(1,p) = 1$
$S(2,p) = 2p$
$S(3,p) = -p^3 + 4p^2$
$S(4,p) = -4p^4 + 8p^3$

giving

$$S_4(p) = 1 + 2p + 4p^2 + 7p^3 - 4p^4 \tag{3.5}$$

which it is correct to order p^3.

Although it was amusing to see that our method works equally well for both low and high density series expansion, our results for the mean cluster size do not compete with the previous one based on Dyson-type equation (Essam *et al* 1988). Indeed they are very far from these as long as we were not able to go beyond $N = 15$.

4 Analysis of Series

Order parameter series are usually well suited to analysis by Dlog Padé approximants. Accordingly, we show in table 1 the standard Dlog Padé approximants for the percolation probabilities series.

Table 1 to be inserted here

Note that there is a general upward trend and limits around $q_c = 0.2945$ and $\beta = 0.276$ appears entirely attainable. We observe that our estimate for the critical threshold is in disagreement with that recently proposed by ben-Avraham *et al* (1991) which has a central value at $q_c = 0.293478$. From table 1 we see that the approximants exceed that value from the very beginning. Nevertheless our estimated value is completely compatible with $q_c = 0.294511 \pm 0.000004$ previously proposed by Essam *et al* (1988).

The critical exponent $\beta = 0.276$ is in good agreement with that calculated for the directed *bond* percolation on the square lattice (Baxter and Guttmann 1988) confirming once more that universality holds for both the site and the bond formulations of the percolation problem.

As our values for the critical threshold and critical exponent are less precise than the values obtained by Essam *et al* (1988) and Baxter and Guttmann (1988) we can use their values in order to get refinements.

Following Gaunt and Guttmann (1974) we wrote down Padé approximants to the series

$$(q - q_c)\frac{d\, ln P(q)}{dq} \tag{4.1}$$

and the results are shown in table 2.

Table 2 to be inserted here

Now, conversely, we can use a good estimate of β to form Padé approximants to the series

$$[P(q)]^{\frac{1}{\beta}} \tag{4.2}$$

to get better estimates of q_c . The results are given in table 3.

Table 3 to be inserted here

5 Summary

We have calculated an exact series expansion for the percolation probability of the directed site percolation problem on the square lattice. This expansion increases the known series from order q^{10} to order q^{16}. The method used was a transfer matrix which simultaneously allowed to establish an interesting connection between this problem and the combinatorial problem of enumerating the number of dissections of a ball. Our approach also permits to extract series for the mean cluster size. Finally, we gave estimates for the critical threshold and the critical exponent of the order parameter through an analysis based on Padé approximants.

References

Arrowsmith D K and Essam J W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3068

Arrowsmith D K, Mason P and Essam J W 1991 *Physica* **177** 267

Baxter R J and Guttmann A J 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 3193

Beineke L W and Pippert R E 1971 *Math. Ann.* **191** 87

Ben-Avraham D, Bidaux R and Schulman L S 1991 *Phys. Rev. A* **43** 7093

Blease J 1977 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** 917

Broadbent S R and Hammersley J M 1957 *Proc. Camb. Phil. Soc.* **53** 629

Cardy J L and Sugar R L 1980 *J. Phys. A: Math. Gen.* **13** L423

De'Bell K and Essam J W 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** 3145

Dhar D 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** L847

Domb C 1959 *Nature* **184** 509

Duarte J A M S 1990 *Z. Phys. B* **80** 299

Essam J W , Guttmann A J and De'Bell K 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 3815

Gaunt D S and Guttmann A J 1974 *Phase Transitions and Critical Phenomena* **3** ed. C. Domb and M.S.Green (Academic Press)

Grassberger P 1985 *J. Phys. A: Math. Gen.* **18** L215

Grassberger P and Sundermeyer K 1978 *Phys. Lett.* **77B** 220

Hede B, Kertész J and Vicsek T 1991 *J. Stat. Phys.* **64** 829

Henkel M and Privman V 1991 *Mod. Phys. Lett. B* **5** 555

Kertész J and Vicsek T 1980 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13** L343

Neves A and Leal da Silva J K 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** 5363

Obukhov S P 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1395

Onody R N 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* **23** L335

Redner S and Brown A C 1981 *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** L285

Ruskin H J and Cadilhe A *J. Non-Cryst. Sol.* **127** 114

Schulman L S and Seiden P E 1982 *J. Stat. Phys.* **27** 83

Sloane N J A 1973 *A Handbook of Integer Sequences* (New York: Academic)

Stauffer D 1985 *Introduction to Percolation Theory* (London: Taylor and Francis)

Figure Caption

Figure 1: Acyclic orientation of the square lattice. The origin is always occupied and we have labeled the rows as used in the text.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

Table Captions

Table 1: Dlog Padé approximants to the percolation probability series. Entries to the left (right) are q_c (β) estimates

Table 2: Padé approximants to the series (4.1) using $q_c = 0.294511$.

Table 3: Padé approximants to the series (4.2) using $\beta = 0.2764$.

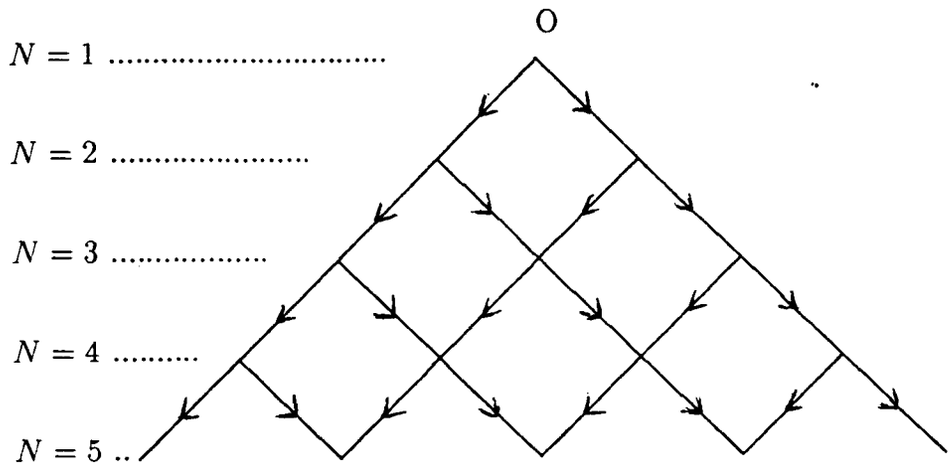

Figure 1

N	[(N-1)/N]		[N/N]		[(N+1)/N	
4	0.29394	0.2688	0.29391	0.2687	0.29427	0.2720
5	0.29393	0.2688	0.29433	0.2727	0.29430	0.2723
6	0.29427	0.2719	0.29432	0.2725	0.29427	0.2720
7	0.29442	0.2739	0.29445	0.2745	0.29448	0.2750
8	0.29451	0.2759				

Table 1

N	[(N-1)/N]	[N/N]	[(N+1)/N
4	0.272929	0.260376	0.275017
5	0.274829	0.275265	0.274598
6	0.279587	0.275471	0.275643
7	0.275610	0.275790	0.275789
8	0.275789		

Table 2

N	[(N-1)/N]	[N/N]	[(N+1)/N
5	0.294682	0.294661	0.294143
6	0.294710	0.294461	0.293865
7	0.294643	0.294562	0.294548
8	0.294545	0.294541	

Table 3