SU(3)杨-米尔斯理论中禁闭的简单性

Xavier Crean ,[1, *] Jeffrey Giansiracusa ,[2, †] 和 Biagio Lucini [3, ‡][1]斯旺西大学理工学院数学系，*Fabian Way*，斯旺西，*SA1 8EN*，英国[2]杜伦大学数学科学系，*Upper Mountjoy* 校区，杜伦，*DH1 3LE*，英国[3]伦敦玛丽女王大学数学科学学院，*Mile End Road*，伦敦，*E1 4NS*，英国
(2026年2月11日)

我们提出一种与 SU(3)杨-米尔斯理论最大阿贝尔投影中定义的阿贝尔单极子流相关联的新型可观测量，它能够捕捉流环的拓扑。该可观测量称为简单性，定义为给定场构型下流图的零阶贝蒂数与一阶贝蒂数之比。在格点规范理论框架下对简单性的期望值进行数值研究，使我们能够以比传统方法更高的精度确定退禁闭温度，同时计算投入相当。我们的结果表明，阿贝尔流环与决定该理论禁闭性质的自由度强烈相关。本研究为定义量子色动力学中能够揭示该理论潜在丰富相结构的退禁闭序参量开辟了新视角。

arXiv:2602.10088v1 [hep-lat] 10 Feb 2026

引言 — 强相互作用中的色禁闭问题，即渐近态中不存在分数电荷粒子，普遍被认为是全面理解量子色动力学（QCD）乃至更广泛地理解非阿贝尔规范理论动力学时，最亟待解决的缺口之一。众所周知，高温下禁闭会消失。广为接受的观点是（近期综述可参见例如文献 [1]），超过临界温度后，系统会表现为由其基本组成粒子——夸克和胶子——构成的等离子体。近期，这一图景受到了质疑；越来越多的人认同，禁闭区域与退禁闭夸克—胶子等离子体区域之间存在一个中间区域（例如参见文献 [2–7]）。鉴于这一进展，全面刻画禁闭显得更加关键。研究量子色动力学时，一种常用的第一性原理方法是格点规范理论，通常还会结合解析方法提供的指导；该方法最早的应用，正是通过威尔逊环的面积定律证明禁闭 [8]。

长期以来，人们一直认为，可以从携带非平凡磁荷的拓扑激发的动力学角度来理解禁闭 [9, 10]。由此，人们提出通过一种称为阿贝尔投影 [11]的部分规范固定过程来定义阿贝尔磁单极子。许多研究从不同角度探索了这些想法 [12–14], ，从某些投影下阿贝尔自由度的主导性 [15] ，到无序参数 [16–18][1] 的构造以及有效单极子势 [21]。关于单极子凝聚规范独立性的研究 [22] 以及对热单极子性质的考察 [23, 24] ，为理解单极子动力学与禁闭/退禁闭相变之间的联系提供了重要见解。基于有效模型研究临界温度下单极子凝聚的方法 [25]，使得人们能够计算 SU(2) 杨-米尔斯理论中的临界温度 [26]。较新的研究 [27, 28] 再次确认了磁单极子在色禁闭中的核心地位。

尽管取得了显著进展，我们仍缺乏一种基于这些拓扑激发特征、稳健且不受格点伪影影响的杨-米尔斯理论禁闭（或退禁闭）序参量；这种序参量应能以足够精度确定表征相变动力学的量，并且能够轻松应用于存在动力学费米子的情形。一个关键难点在于单极子激发的拓扑性质，而在格点离散化中，这种性质更难显现。近年来，拓扑数据分析（TDA）作为一种稳健的方法，在计算拓扑学领域应运而生，可用于表征离散点集的拓扑性质。因此，TDA 在场论和统计力学中的应用正迅速增加（例如参见 [29–38]）。基于先前研究所形成的直觉，并沿着参考文献 [39, 40], 所开辟的路径借鉴 TDA 的严格工具，本文将提出并测试一种在 SU(3) 杨-米尔斯理论中由磁单极流导出的可观测量，用以定量表征去禁闭相变。我们将通过数值计算证明，该可观测量在存在费米子的情况下定义不变，能够准确确定纯规范系统中的耦合临界值和相变阶数，从而为阿贝尔单极子与杨-米尔斯理论中的退禁闭相关这一观点提供证据。

[1]在原始无序参数构造中发现的病态 [19] 促成了改进方案 [20]。

格点上的 *SU(3)* 杨-米尔斯理论 — 我们考虑由威尔逊作用量描述的 SU(3) 格点规范理论，

$$S = \beta \sum_i \sum_{\mu<\nu} \left[1 - \frac{1}{3} \Re\mathrm{e}\mathrm{Tr} U_{\mu\nu}(i) \right], \tag{1}$$

其中 $\beta \equiv 6/g^2$ 和 g 为该理论的耦合。该作用量在连续极限下成为杨-米尔斯作用量。量

$$U_{\mu\nu}(i) \equiv U_\mu(i) U_\nu(i+\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(i+\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(i) \tag{2}$$

是元格变量，其中 $U_\mu(i) \in$ SU(3)为链变量，定义在维数为 $N_t \times N_s^3$的四维欧氏格点上从点 i 出发并终止于点 $i + \hat{}\mu$ 的链$(i; \hat{}\mu)$上（其中$\hat{}\mu$ 为正方向 μ上的单位矢量）。所有方向均施加周期性边界条件。系统的温度 T 由下式给出

$$T = \frac{1}{a(\beta) N_t} \ , \tag{3}$$

其中 $a(\beta)$为格点间距，它是 β的单调递减函数。路径积分由下式给出

$$Z = \int \left(\prod_{i,\mu} dU_\mu(i) \right) \ \exp\{-S\}, \tag{4}$$

其中 $dU_\mu(i)$表示哈尔测度。

在热平衡状态下，给定可观测量 O 的期望值通过以下方式计算

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \left(\prod_{i,\mu} dU_\mu(i) \right) \ O \exp\{-S\}. \tag{5}$$

通过固定 N_t 并取无限体积极限 $N_s \to \infty$，我们可以研究系统在热力学极限下的行为。由此提取的热力学可观测量随后可通过在 N_t 中采用逐步精细的离散化，外推至连续极限。

最大阿贝尔规范中的磁单极子——SU(N)规范理论中阿贝尔磁单极子流的识别，是通过一种称为阿贝尔投影的规范固定程序来进行的。为定义阿贝尔投影，选取一个在伴随表示中变换的算符 F ，并实施部分规范固定。后者包括在每一点将 F 对角化，并将其本征值 $\lambda_1, \ldots \lambda_N$按非递减顺序排列。这一部分规范固定留下一个剩余的U(1)$^{N-1}$ 对称性。该过程揭示出 $N-1$ 种磁单极子，每一种对应于一个U(1)剩余规范因子。类型为 j 的磁单极子出现在 $\lambda_j = \lambda_{j+1}$处。在SU(3)杨-米尔斯理论中，我们因此有两类磁单极子。

尽管单极流的识别具有规范依赖性，这可能会模糊规范不变的图像，但在某种规范下，磁单极子的物理性质可以作为有益的起点，帮助我们更好地理解更复杂的底层拓扑结构的性质，而这些结构正是规范依赖对象所体现的。从这一角度来看，特别有用的一种规范是最大阿贝尔规范（最大阿贝尔规范，即 MAG），因为规范无关的激发态与在该规范下定义的阿贝尔单极子最大程度地重叠 [41]。按照文献 [42], 针对 SU(3) 格点杨-米尔斯理论给出的方案，我们将 ˜伴随算符 $X(i)$ 定义为

$$\tilde{X}(i) = \sum_\mu \left[U_\mu(i) \tilde{\lambda} U_\mu^\dagger(i) + U_\mu^\dagger(i-\hat{\mu}) \tilde{\lambda} U_\mu(i-\hat{\mu}) \right] \ , \qquad \tilde{\lambda} = \mathrm{diag}(1, 0, -1) \ . \tag{6}$$

˜最大阿贝尔规范定义为使 $X(i)$ 对角化的规范。这种规范选择等价于要求算符

$$\tilde{F}_{\mathrm{MAG}}(U, g) = \sum_{\mu,i} \mathrm{tr} \left(g(i) U_\mu(i) g^\dagger(i+\hat{\mu}) \tilde{\lambda} g(i+\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(i) g^\dagger(i) \, \tilde{\lambda} \right) \tag{7}$$

在 g上取最大值，即规范固定变换$\{g\}$可由以下条件导出

$$\{\tilde{g}\} = \underset{\{g\}}{\mathrm{argmax}} \, \tilde{F}_{\mathrm{MAG}}(U, g) \ . \tag{8}$$

在最大阿贝尔规范中，链路矩阵的对角元

U_{ii} 阅读

$$\tilde{U}_{ii} = r_i e^{i\varphi_i} \ , \qquad \sum_i \varphi_i = 2\pi n + \delta\varphi \ . \tag{9}$$

一般而言， $\delta\varphi \neq 0$, 这是由于即使在规范固定之后，链路也并非完全对角这一事实。角变量 ϕ_i 随后通过重新分配来定义

作为过剩相的

$$\phi_i = \varphi_i - \delta\varphi \frac{\left|\tilde{U}_{ii}\right|^{-1}}{\sum_j \left|\tilde{U}_{jj}\right|^{-1}} \ . \tag{10}$$

剩余规范中的两个格点阿贝尔场为$\theta_1 = \phi_1$ 和 $\theta_2 = -\phi_3$。相应种类的磁单极子按照参考文献 [43] 的方案加以定义。将该理论截断至由这两个角所表示的自由度，便利用最大阿贝尔规范给出了阿贝尔投影的一种定义。

拓扑简单性 — 为了研究单极流的拓扑，定义对偶格 Λ^*较为方便，它是通过将每个点沿所有正方向平移半个格点间距而得到的。原始格点 Λ 中维数 d 的每个几何元素，在其中心被 Λ^* 中维数 $4-d$的一个元素穿过。这两个元素互为对偶。由于定义在 Λ的立方体上，在 Λ^* 上磁荷是链变量，更恰当地称为流。对于每个格点构型，每条对偶链路$(j;\hat{}\mu)$携带一个流$m_\mu(j) = 0, \pm 1, \pm 2$。对偶链路$(j;\hat{}\mu)$上的非平凡流 m 可视为电荷 m 从格点 j 移动到格点 $j+\hat{}\mu$。类似于基尔霍夫定律，进入对偶格点 j 的总电荷等于离开该格点的总电荷。出于同样的原因，流不能终止于格点，而必须形成闭合环。链路集合 $G \equiv \{(j;\hat{}\mu)\ m_\mu(j) \neq 0\}$ 是与已计算$m_\mu(j)$的构型相关联的流图。该对象被解释为一个图，其顶点与 G中链路的端点重合，其边与 G中的链路重合。 G 的连通分支数定义贝蒂数 b_0，而环的总数定义贝蒂数b_1。在 [40],中，我们已经表明这两个量

$$\rho_0 = \frac{\langle b_0 \rangle}{N_s^3} \qquad \text{and} \qquad \rho_1 = \frac{\langle b_1 \rangle}{N_s^3} \tag{11}$$

对相变很敏感，因为它们提供了数值证据，表明其磁化率 χ_0 和 χ_1会在 β 的某个值 $\beta_c(N_s,\ N_t)$处出现峰值；对于固定的N_t ，该值按以下方式缩放

$$\beta_c(N_s, N_t) = \beta_c(N_t) + a/N_s^3 \ , \tag{12}$$

其中， $\beta_c(N_t)$是在 N_t固定时 β 的临界值。虽然这些结果揭示了流图的拓扑性质与退禁闭相变之间显著的联系，表明贝蒂数 b_0 和 b_1 的期望值是理解禁闭的关键，但仍未能为退禁闭相变提供序参量。

在本研究中，我们利用上述信息以及从先前计算中形成的预期，定义一个

N_t	N_s	$\beta_{\min}$	$\beta_{\max}$	N_β	N_{meas}
4	16, 20, 24, 28, 32	5.6600	5.7200	15	600
6	24、30、36、42、48	5.8100	5.9300	12	600
8	32, 40, 48, 56, 64	6.0350	6.0800	12	400

表 I. 本表列出了本研究所用的各种格点大小， N_t 和N_s。对于 $N_t = 4$，我们针对一系列 15 β 取值抽取 $N = 600$ 个构型样本。对于$N_t = 6$，我们针对一系列 12 β 取值抽取 $N = 600$ 个构型样本。对于 $N_t = 8$，我们针对一系列 12 β 取值抽取 $N = 400$ 个构型样本。

表现得像序参量的量。这个可观测量是拓扑简单性，或简称为简单性，其定义为

$$\lambda = \left\langle \frac{b_0}{b_1} \right\rangle \ . \tag{13}$$

定义该可观测量 $\frac{b_0}{b_1}$的比值，是每个连通分量所含环数的倒数，有时称为**复杂度**，且其值至少为 1。对于空网络，简单性和复杂度均未定义；不过，在非无限β 下，典型构型会包含一个非空的单极子网络。在低温禁闭相中（固定N_t 时对应较低的 β），通常会看到一个含有一个分量和许多环的渗流电流网络，因此简单性趋近于 0。在高温去禁闭相中（固定 N_t 时对应较高的 β），玻尔兹曼权重会抑制大幅涨落，占主导地位的构型所含电流网络由稀疏的环气体组成，因此简单性约为 1。在临界区域，由于渗流环断裂，简单性从 0 上升到 1。

然而，这种定性行为并不足以证明 λ 与相变相关自由度的耦合。为了检验 λ是否为对去禁闭相变敏感的可观测量，我们研究其磁化率的行为

$$\chi_\lambda = V\left(\left\langle \left(\frac{b_0}{b_1}\right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{b_0}{b_1} \right\rangle^2\right) \tag{14}$$

在临界区域内一系列 β 取值上，针对一系列空间延展尺度 N_s 以及时间延展尺度 N_t =4, 6,8，如表 I 所示。较大的 N_t 值对应于与温度相关方向上更精细的离散化（见式 (3)）。而改变 N_s则将使我们能够证明对预期一级去禁闭相变的敏感性，这将通过探测式 (12) 中的标度行为来表明。

我们在图 1 中报告了 λ 和 χ_λ的行为，以及对 $N_t = 8$ 下 β_c 的测定，采用的方法为

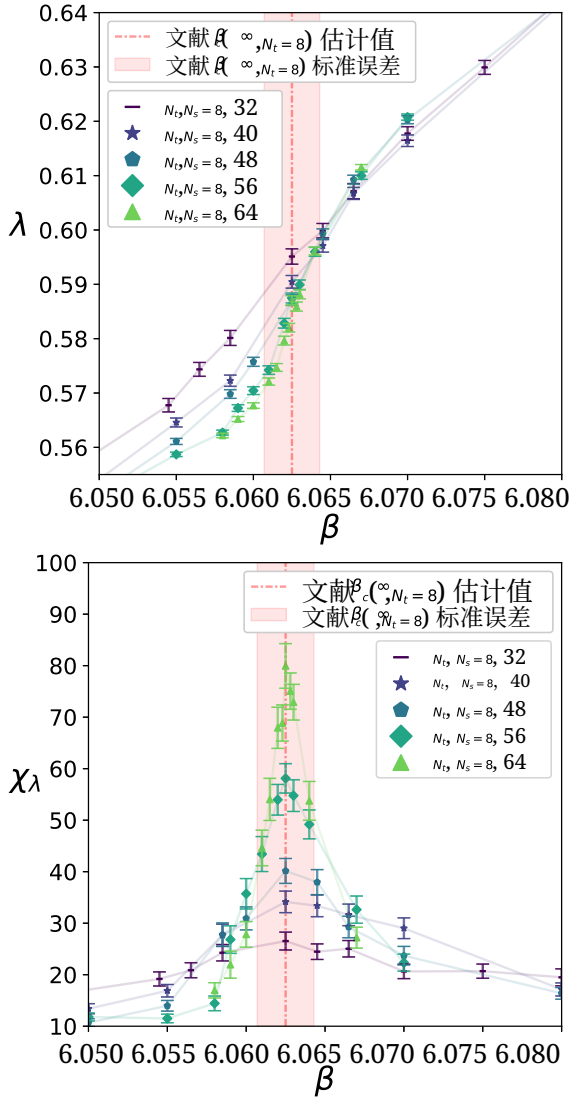

图 1. 对于 $N_t = 8$、 λ 和 χ_λ，展示其作为 β 函数在临界区域内放大后的情况，并用半透明线辅助观察。垂直线和带状区域分别表示文献 [44]中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

传统方法，数据取自参考文献 [44]。 λ 呈单调递增趋势，其斜率在接近 β_c 时变得更陡，并且随着体积增大，这一趋势愈发明显。因此，磁化率χ_λ 在临界区域出现峰值，且峰高随体积增大。图 2、3 和 4 分别展示了 χ_λ 峰值位置随空间体积的标度关系，对应于 $N_t = 4$， 6，8。数据采用式（12）进行拟合，并针对不同拟合区间加入了 $1/N_s^3$ 中的高阶修正；随后，使用参考文献 [45] 中实现的赤池信息原理合并拟合结果，以确定加权外推值及其对应误差（两者也在图中给出）。

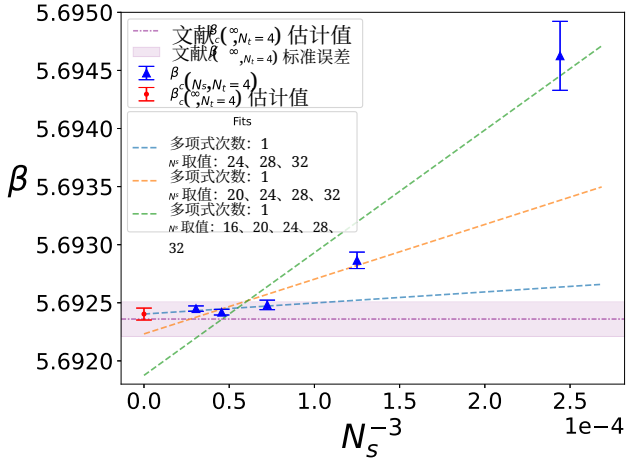

图 2 χ_λ $N_t = 4$。$N_s = 16, 20, 24, 28, 32$ 晶格的峰值位置，取值为 ,,,,（蓝色三角形）。虚线表示用于对这些峰值进行无限体积外推的多项式回归拟合，红色圆圈表示在热力学极限下得到的 β_c 估计值（更多详情请参阅补充材料）。水平线和带状区域分别表示文献 Ref. [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

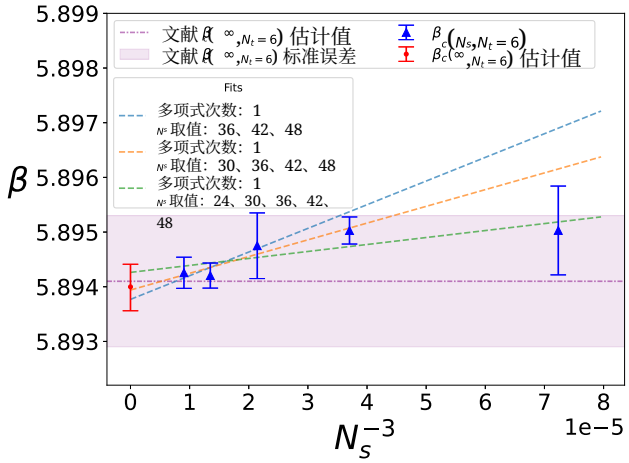

图 3 χ_λ $N_t = 6$。$N_s = 24, 30, 36, 42, 48$ 晶格的峰值位置，取值为 ,,,,（蓝色三角形）。虚线表示用于对这些峰值进行无限体积外推的多项式回归拟合，红色圆圈表示在热力学极限下得到的 β_c 估计值（更多详情请参阅补充材料）。水平线和带状区域分别表示文献 Ref. [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

讨论与展望 — 与参考值相比，外推值的误差条更小；而参考值是通过对数量级多出约十倍的构型取平均得到的。这一结果表明，简单性所捕捉的拓扑性质对色禁闭动力学具有重要意义。

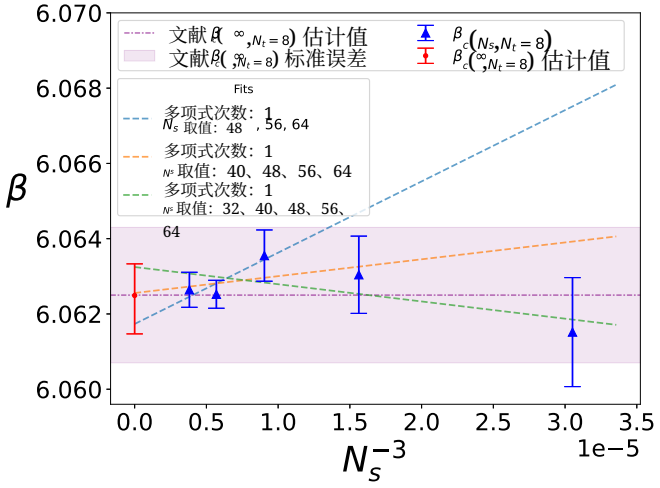

图 4 $\chi\lambda$ N_t =。8 N_s = 32 40 48 56 64 晶格的峰值位置，其中 和 ,,,,（蓝色三角形）。虚线表示用于对这些峰值进行无限体积外推的多项式回归拟合，红色圆圈表示热力学极限下 β_c 的估计值（更多细节请参见补充材料）。水平线和带状区域分别表示文献 Ref. [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

我们指出，即使存在动力学费米子，也可以采用简单性。根据我们对自旋系统的研究，若量子色动力学中存在一种新的中间温度行为，那么采用与简单性类似的方法构造的可观测量已被证明对有序-无序相变敏感，因此我们预期，简单性的磁化率会在温度更高时的机制变化处呈现非单调结构。

致谢 — 我们感谢 M. D'Elia、A. Gonzalez-Arroyo 和 T. Sulejmanpasic 与我们进行讨论。XC 获得了由工程与物理科学研究理事会（EP/V521917/1）提供的数学科学追加资助计划以及海尔布隆数学研究所的支持。JG 获得了工程与物理科学研究理事会通过拓扑数据分析中心提供的资助（EP/R018472/1），以及通过资助（EP/Y028872/1）提供的埃尔朗根人工智能中心的支持。BL 的工作部分获得了工程与物理科学研究理事会 ExCALIBUR ExaTEPP 项目（EP/X017168/1）以及科学和技术设施委员会综合资助（编号：ST/T000813/1 和 ST/X000648/1）的支持。

数值模拟在斯旺西SUNBIRD集群（威尔士超级计算项目的一部分）和 AccelerateAI A100 GPU 系统上进行。斯旺西SUNBIRD系统和 AccelerateAI 的部分资金来自威尔士政府通过欧洲区域发展基金（ERDF）提供的资助。

本工作使用了剑桥大学的 DiRAC 数据密集型服务（CSD3），由剑桥大学大学信息服务代表科学和技术设施委员会 DiRAC 高性能计算设施（www.dirac.ac.uk）进行管理。剑桥 CSD3 的 DiRAC 部分由商业、能源与工业战略部、英国研究与创新署和科学和技术设施委员会的资本资助以及科学和技术设施委员会的运营拨款提供资金。DiRAC 是英国研究与创新署数字研究基础设施的一部分。

开放获取声明 —为实现开放获取，作者已对由此产生的任何作者接受稿版本采用知识共享署名（CC BY）许可协议。

研究数据获取声明 — 本文的数据和分析代码可从参考文献 [46]下载。蒙特卡罗代码可从参考文献 [47]获取。

* 2237451@swansea.ac.uk
† jeffrey.giansiracusa@durham.ac.uk ‡ b.lucini@qmul.ac.uk

[1] G. Aarts 等，《粒子与核物理进展》133, 104070 (2023), arXiv:2301.04382 [高能物理—格点]. [2] L. Y. Glozman，《波兰物理学学报增刊》10, 583 (2017), arXiv:1610.00275 [高能物理—格点]. [3] A. Alexandru 和 I. Horváth，《物理评论 D》100, 094507 (2019), arXiv:1906.08047 [高能物理—格点]. [4] M. Cardinali、M. D'Elia 和 A. Pasqui，arXiv:2107.02745 [高能物理—格点] (2021), arXiv:2107.02745. [5] M. Hanada、H. Ohata、H. Shimada 和 H. Watanabe，《理论与实验物理进展》2024, 041B02 (2024), arXiv:2310.01940 [高能物理—理论]. [6] Y. Fujimoto、K. Fukushima、Y. Hidaka 和 L. McLerran，《物理评论 D》112, 074006 (2025), arXiv:2506.00237 [高能物理—现象学]. [7] J. A. Mickley、C. Allton、R. Bignell 和 D. B. Leinweber，《物理评论 D》112, 054505 (2025), arXiv:2507.17200 [高能物理—格点]. [8] K. G. Wilson，《物理评论 D》10, 2445 (1974). [9] S. Mandelstam, Phys. Rept. 23, 245 (1976). [10] G. 't Hooft，载于《亚核物理学中的新现象》，A. Zichichi 编（Editrice Compositori，博洛尼亚，1976），第 1225–1249 页；本文为其在第 13 届亚核物理学国际学校"亚核物理学中的新现象"上所作报告的会议论文，1975 年 7 月 11 日至 8 月 1 日，意大利埃里切。[11] G. 't Hooft，《核物理 B》190, 455 (1981). [12] A. S. Kronfeld、G. Schierholz 和 U. J. Wiese，《核物理 B》293, 461 (1987). [13] A. S. Kronfeld、M. L. Laursen、G. Schierholz 和 U. J. Wiese，《物理学快报B》198, 516 (1987). [14] T. L. Ivanenko、A. V. Pochinsky 和 M. I. Polikarpov，《物理学快报B》302, 458 (1993). [15] Z. F. Ezawa 和 A. Iwazaki，《物理评论 D》25, 2681 (1982). [16] L. Del Debbio、A. Di Giacomo、G. Paffuti 和 P. Pieri，《物理学快报B》355, 255 (1995), arXiv:hep-lat/9505014. [17] A. Di Giacomo、B. Lucini、L. Montesi 和 G. Paffuti，《物理评论 D》61, 034503 (2000), arXiv:hep-lat/9906024. [18] A. Di Giacomo、B. Lucini、L. Montesi 和 G. Paffuti，《物理评论 D》61, 034504 (2000), arXiv:hep-lat/9906025. [19] J. Greensite 和 B. Lucini，《物理评论 D》78, 085004 (2008), arXiv:0806.2117 [高能物理—格点]. [20] C. Bonati、G. Cossu、M. D'Elia 和 A. Di Giacomo,

《物理评论 D》85, 065001 (2012), arXiv:1111.1541 [高能物理—格点]. [21] M. N. Chernodub、M. I. Polikarpov 和 A. I. Veselov, 《物理学快报B》399, 267 (1997), arXiv:hep-lat/9610007. [22] J. M. Carmona、M. D'Elia、A. Di Giacomo、B. Lucini 和 G. Paffuti, 《物理评论 D》64, 114507 (2001), arXiv:hep-lat/0103005. [23] M. N. Chernodub 和 V. I. Zakharov, 《物理评论快报》98, 082002 (2007), arXiv:hep-ph/0611228. [24] A. D'Alessandro 和 M. D'Elia, 《核物理 B》799, 241 (2008), arXiv:0711.1266 [高能物理—格点]. [25] M. Cristoforetti 和 E. Shuryak, 《物理评论 D》80, 054013 (2009), arXiv:0906.2019 [高能物理—现象学]. [26] A. D'Alessandro、M. D'Elia 和 E. V. Shuryak, 《物理评论 D》81, 094501 (2010), arXiv:1002.4161 [高能物理—格点]. [27] M. Nguyen、T. Sulejmanpasic 和 M. Ünsal, 《物理评论快报》134, 141902 (2025), arXiv:2401.04800 [高能物理—理论]. [28] J. Giansiracusa、D. Lanners 和 T. Sulejmanpasic, 《物理评论快报》135, 221901 (2025). [29] I. Donato、M. Gori、M. Pettini、G. Petri、S. De Nigris、R. Franzosi 和 F. Vaccarino, 《物理评论 E》93, 052138 (2016), arXiv:1601.03641. [30] Q. H. Tran、M. Chen 和 Y. Hasegawa, 《物理评论 E》103, 052127 (2021), arXiv:2004.03169 [cond-mat.stat- mech]. [31] K. Kashiwa、T. Hirakida 和 H. Kouno, Symmetry 14, 1783 2022 2103 ( ), arXiv: .12554 [高能物理—格点]. [32] B. Olsthoorn、J. Hellsvik 和 A. V. Balatsky, 《物理评论研究》2, 043308 (2020), arXiv:2009.05141 [cond-mat.stat- mech]. [33] A. Cole、G. J. Loges 和 G. Shiu, 《物理评论 B》104, 104426 2021 2009 ( ), arXiv: .14231 [cond-mat.stat-mech]. [34] N. Sale、J. Giansiracusa 和 B. Lucini, 《物理评论 E》105, 024121 (2022), arXiv:2109.10960 [cond-mat.stat- mech]. [35] D. Sehayek 和 R. G. Melko, 《物理评论 B》106, 085111 (2022), arXiv:2201.09856 [cond-mat.stat-mech]. [36] N. Sale、B. Lucini 和 J. Giansiracusa, 《物理评论 D》107, 034501 (2023), arXiv:2207.13392 [高能物理—格点]. [37] D. Spitz、J. M. Urban 和 J. M. Pawlowski, 《物理评论 D》107, 034506 (2023), arXiv:2208.03955 [高能物理—格点]. [38] D. Spitz、J. M. Urban 和 J. M. Pawlowski, 《物理评论 D》111, 114519 (2025), arXiv:2412.09112 [高能物理—格点]. [39] X. Crean、J. Giansiracusa 和 B. Lucini, SciPost Phys. 17, 100 (2024), arXiv:2403.07739 [高能物理—格点]. [40] X. Crean、J. Giansiracusa 和 B. Lucini, PoS LAT- TICE2024, 395 (2025), arXiv:2501.19320 [高能物理—格点]. [41] C. Bonati、A. Di Giaco mo、L. Lepori 和 F. Pucci, 《物理评论 D》81, 085022 (2010), arXiv:1002.3874 [高能物理—格点]. [42] C. Bonati 和 M. D'Elia, 《核物理 B》877, 233 (2013), arXiv:1308.0302 [高能物理—格点]. [43] T. A. DeGrand 和 D. Toussaint, 《物理评论 D》22, 2478 (1980). [44] B. Lucini、M. Teper 和 U. Wenger, JHEP 2004 (01), 061, arXiv:hep-lat/0307017. [45] W. I. Jay 和 E. T. Neil, 《物理评论 D》103, 114502 (2021), arXiv:2008.01069 [stat.ME]. [46] X. Crean、J. Giansiracusa 和 B. Lucini, 《杨-米尔斯理论中禁闭的简单性》 SU(3) — 数据与分析代码发布 (2026). [47] X. Crean、J. Giansiracusa 和 B. Lucini, 《杨 - 米尔斯理论中禁闭的简单性》 SU(3) — 蒙特卡罗代码发布 (2026). [48] N. Cabibbo 和 E. Marinari, 《物理学快报B》119, 387 (1982)。[49] P. Dlotko，载于*GUDHI*用户与参考手册（GUDHI编辑委员会，2015）。[50] A. M. Ferrenberg 和 R. H. Swendsen, 《物理评论快报》**63**，1195（1989）。[51] M. Luscher, 《计算机物理通讯》**79**，100（1994），arXiv:hep-lat/9309020。

补充材料：SU(3)杨-米尔斯理论中禁闭的简单性

Xavier Crean，[1] Jeffrey Giansiracusa，[2] 和 Biagio Lucini[3]

[1]数学系，斯旺西大学理工学院，*Fabian Way*，斯旺西，*SA18EN*，英国[2]数学科学系，杜伦大学，*Upper Mountjoy* 校区，杜伦，*DH1 3LE*，英国[3]数学科学学院，伦敦玛丽女王大学，*Mile End Road*，伦敦，*E1 4NS*，英国

格点规范理论的拓扑数据分析

拓扑学关注的是量化形状在拉伸和变形下保持不变的性质。拓扑数据分析（TDA）源于这一领域，是一组计算工具，可用于从数据中产生对象形状的数值不变量。这些数值不变量能够揭示一组样本背后分布的形状。在此，我们采用一种不同的方法，使用 TDA 工具为格点规范理论产生对构型中出现的大尺度结构敏感的非局域可观测量。

在代数拓扑中，人们常用单纯复形来表示几何对象。不过，由于我们研究的是定义在立方格点上的格点规范理论，因此用立方复形来表示几何对象更为方便。立方复形就是通过沿着边界粘合立方体构成的对象。

拓扑中的一个基本代数不变量是同调，它用于量化形状中的孔洞和空腔。孔洞有不同的类型。平面上缺失的一个点是一个一维孔洞，因为可以用一个圆来圈住它，而圆是一维流形。然而，圆无法圈住三维空间中缺失的一个点，因为它总能从上方或下方滑脱；这个孔洞必须用一个球面包裹，而球面是二维流形，因此这是一个二维孔洞。同调将这一思想形式化。输入是一个单纯复形或立方复形 X。对于每个自然数 n，输出都是一个向量空间 $H_n(X)$。$H_n(X)$ 的维数表示 n 维孔洞的数量。以下是同调的一些有用性质。

1. 如果 X 是一个点（或可缩的），那么 $H_0(X)$ 是一维的，并且对于所有$n > 0$，$H_n(X) = 0$（平凡向量空间）。

2. 一般而言，$H_0(X)$ 的维数等于 X 的连通分支数。3. 不交并 $X \cup Y$对应于直和：$H_n(X \cup Y) \cong H_n(X) \oplus H_n(Y)$。4. 对所有大于 X维数的 n，$H_n(X) = 0$。5. 如果 X 是一个 d维的闭可定向流形，那么 $H_d(X)$ 是一维的。6. 如果 X 和 Y同伦等价，那么对于所有 i，$H_i(X) \cong H_i(Y)$。

在某些情况下，拥有一个向量空间所包含的信息多于仅仅知道它的维数。然而，本文中我们只会用到维数。$H_i(X)$ 的维数称为 X的第 i贝蒂数，记作 b_i。

立方复形

n维立方体就是 n 个单位区间 $[0,1]$的笛卡尔积。更系统地说，给定一个有限集 A，与之对应的立方体 $C(A)$是 $[0,1]^A$。设$(x_a)_{a\in A}$ 为立方体上的坐标。该立方体的一个面 是一个子空间，其中某些坐标 x_a 取值为 0 或 1。每个面都与一个较低维数的立方体自然地线性同胚。

立方体 $C(A)$ 的定向对应于集合 A 的一种排序，且排序视偶置换而定。由于立方体是带边界和角的流形，$C(A)$ 的定向会在每个余维 1 面上诱导出一个定向。就排序而言，$x_a = 0$ 处面的诱导定向可表示为

将 A 排序，并把 a 放在最后，然后将其限制为 $A \setminus \{a\}$ 的排序；而 $x_a = 1$ 处对面的诱导定向则与此相反。

一个立方复形 是一个拓扑空间 X，并配有一组映射 $\{f_i : C_i \to X\}$，这些映射将立方体 C_i 映入 X，且满足以下条件：

1. 每个 f_i 都是到其像上的同胚。
2. 所有像的并集就是整个 X。
3. 若 f_i 和 f_j 的像有非空交集 K，则将 f_i 限制在 K的原像上，再与 f_j^{-1} 复合，所得映射是从 C_i 的一个面到 C_j的一个面的线性同胚。

一个子复形 是 X 的一个子空间，它是若干立方体的像的并集。

这里我们关注的例子是与时空 Λ的格点离散化相对应的对偶格 Λ^* 的立方复形，以及与一组链路相对应的子复形。

链复形及其同调

一个链复形是由一列向量空间和线性映射组成的序列

$$\dots \xrightarrow{\partial_{d+1}} V_d \xrightarrow{\partial_d} V_{d-1} \xrightarrow{\partial_{d-1}} V_{d-2} \longrightarrow \dots$$

使得所有复合映射 $\partial_d \circ \partial_{d+1}$ 都等于 0。

给定一个立方复形 $(X, \{f_i : C_i \to X\})$，简记为 X，可如下构造一个链复形。次数为 d 的空间 V_d 由以下配对张成

$$(C_i \text{ an } d\text{-cube of } X,\ o \text{ an orientation on } C_d)$$

并满足关系 $-(C, o) = (C, -o)$。边界映射 ∂_d 将 (C, o) 映为 C 的余维一面之和，并赋予这些面由其诱导的定向。

注意，如果所有向量空间都定义在域 $\mathbb{Z}/2$ 上，那么就无需追踪定向和符号，因为 $(C, o) = (C, -o)$。

同调

∂_d 的核中的元素称为次数 d的圈，圈所成的子空间记为 Z_d。∂_{i+d} 的像中的元素称为次数 d的边界，边界空间为 B_d。每个边界都是圈，因此 $B_d \subset Z_d$，但反之未必成立。同调 H_d 定义为商向量空间Z_d/B_d。它度量了存在并非边界之圈的程度。

上述代数定义或许看起来并不那么直观，但它的优点在于可以很容易地转化为一种算法，用以给出任意给定次数下同调的一组基，从而确定贝蒂数。

图

（不含起止于同一顶点的边的）图是立方复形的一个例子。事实上，这是本文需要考虑的唯一一类立方复形。

若 X 是一个图，则同调仅在次数0和1上非平凡。次数0的部分告诉我们连通分支的个数，即第零贝蒂数 b_0。若 G 是连通图，且 $T \subset G$ 是一棵生成树（即一个本身为树的子图，并具有如下性质：将 G 的任意一条额外的边添加到 T 后，它便不再是树），则收缩 T 的所有边会得到单个顶点 v，以及一组起止于 v的环边，T的补集中的每条边对应一条这样的环边。见图S1。由于生成树 T 是树，因而可收缩，原图 G 与收缩 T所得的结果同伦等价。

可以证明，第一贝蒂数 b_1（$H_1(G)$ 的维数）等于生成树补集中的边数，也就是 G/T 中环的数量。

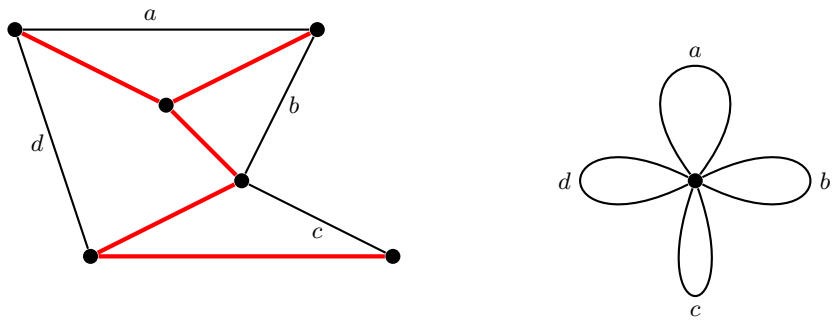

图 S1. 左：图 G 和生成树 T（红色）。右：将 T 收缩为一个顶点后得到的图 G/T。

蒙特卡罗模拟

在本研究中，我们使用马尔可夫链蒙特卡罗重要性抽样方法（即热浴算法和过度松弛算法 [48]）抽取 SU(3)格点规范场构型样本。我们将一次复合更新定义为 1 次热浴更新，随后进行 4 次过度松弛更新。请注意，马尔可夫链成功达到平衡后，重要性抽样便能可靠地近似系统的玻尔兹曼分布；因此，对于每次模拟，我们都会舍弃前 10,000 次复合更新。此外，为尽量减少连续记录的构型之间的自相关，我们每隔 2,000 次复合更新记录一次。对于每种格点大小，我们选取适当范围的 β 值进行研究，并精心选择这些值以覆盖退禁闭相变的临界区域；相关范围此前已在文献中给出，例如参考文献 [44]。对于所选范围内的每个 β 值，我们记录 N_{meas} 个构型样本。根据现有的计算资源，我们能够为 $N_t = 4$,6 的晶格记录 $N_{\mathrm{meas}} = 600$ 个构型，为 $N_t = 8$ 的晶格记录 $N_{\mathrm{meas}} = 400$ 个构型。随后，根据公式 (5)，将可观测量的热期望值估计为关于 β 的样本均值。我们使用含 $N_{\mathrm{bs}} = 2{,}000$ 次重复抽样的自助法，估计样本均值的标准误差。有关计算流程的更多细节，请参见本出版物随附的代码发布，见参考文献 [46]。

数据分析

在这项工作中，我们分析阿贝尔磁单极流的并集——平等地处理这两种种类。我们已验证，分别考虑每一种种类所得结果与分析这两种种类的并集所得结果相符。此外，我们没有观察到这两种种类之间存在统计学上的显著差异——这与文献中的图景一致，例如参考文献 [4, 40, 42]。

我们的目标是分析单极流网络中易于计算的拓扑不变量，即贝蒂数。通过任意选定一种定向（结果与这一选择无关），我们将单极流网络映射为有向图 G。随后，我们计算表示图连通分支数的 $b_0(G) \equiv \dim H_0(G)$，以及表示图中环数的 $b_1(G) \equiv \dim H_1(G)$。在计算 $b_k(G)$ 时，我们采用了一个经过高度优化的同调计算算法实现，即参考文献 [49], 中为处理立方复形而设计的算法。这是可行的，因为有向图是一维立方复形；因此，立方复形是表示图的一种便捷数据结构。更多详情见参考文献 [39], 。

我们分别在 $N_t = 4, 6, 8$ 处绘制了 $\rho_i(\beta)$ 和 $\chi_i(\beta)$ 的结果（定义见正文）。我们选取了适当范围的 β 值，覆盖临界区域；误差棒采用自助法计算，$N_{\mathrm{bs}} = 2{,}000$。可以看到，磁化率 χ_i 在临界值处达到峰值；随着空间体积增大，峰变得更高、更集中，这正如一级相变临界值处的广延可观测量所预期的那样。

类似地，我们将 $N_t = 4, 6, 8$ 时的简单性 $\lambda(\beta)$ 和 $\chi_\lambda(\beta)$ 分别绘于图 S8、S9 和 1 中。可以看出，磁化率 χ_λ 在临界值处出现峰，且随着空间体积增大，峰变得更高、更集中。在图 S10 中，我们绘制了 $N_t, N_s = 8, 32$ 时更大范围的 β 值，以便清楚展示有限 N_s 尺寸下的整体趋势。

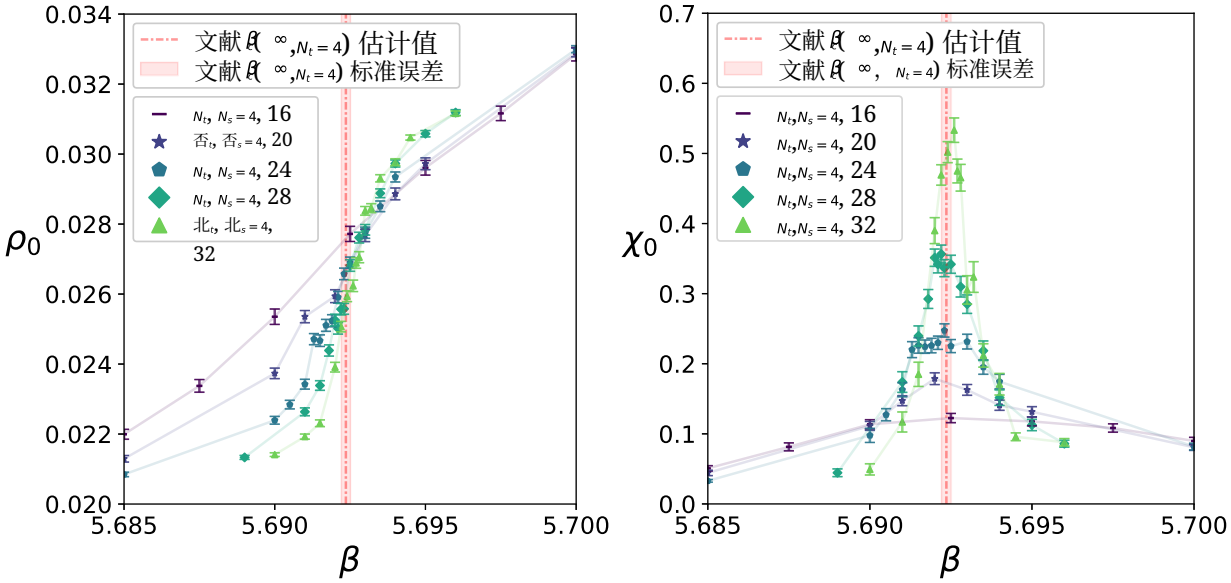

图 S2。对于 $N_t = 4$， ρ_0 和 χ_0 关于 β 的散点图，配以半透明线以引导视线。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

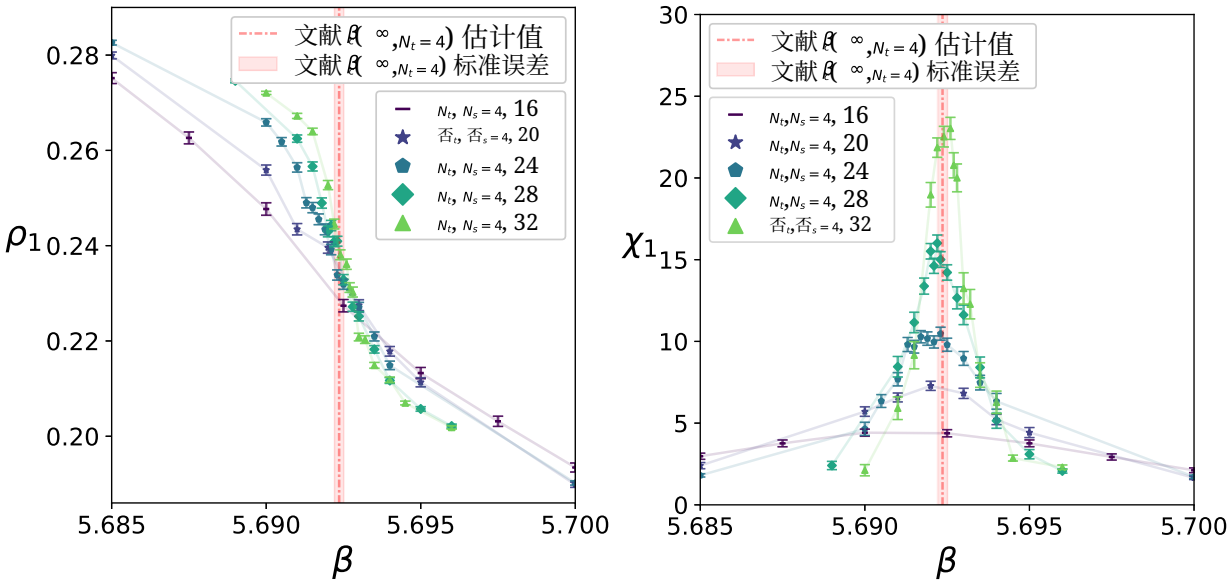

图 S3。对于 $N_t = 4$， ρ_1 和 χ_1 关于 β 的散点图，配以半透明线以引导视线。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

通过态密度估计进行重加权

我们的目标是估计 $\chi_i (i = 0, 1, \lambda)$ 峰的位置，以便将其外推至无限体积极限 $N_s \to \infty$。我们采用多重直方图重加权，通过在覆盖模拟值峰的 β 值范围内进行高分辨率估计$\chi_i(\beta)$，从而更精确地确定峰的位置。此过程需要学习系统的态密度 $\rho(E)$，此时配分函数可表示为

$$Z_\beta = \sum_E \rho(E) e^{-\beta E}. \tag{S1}$$

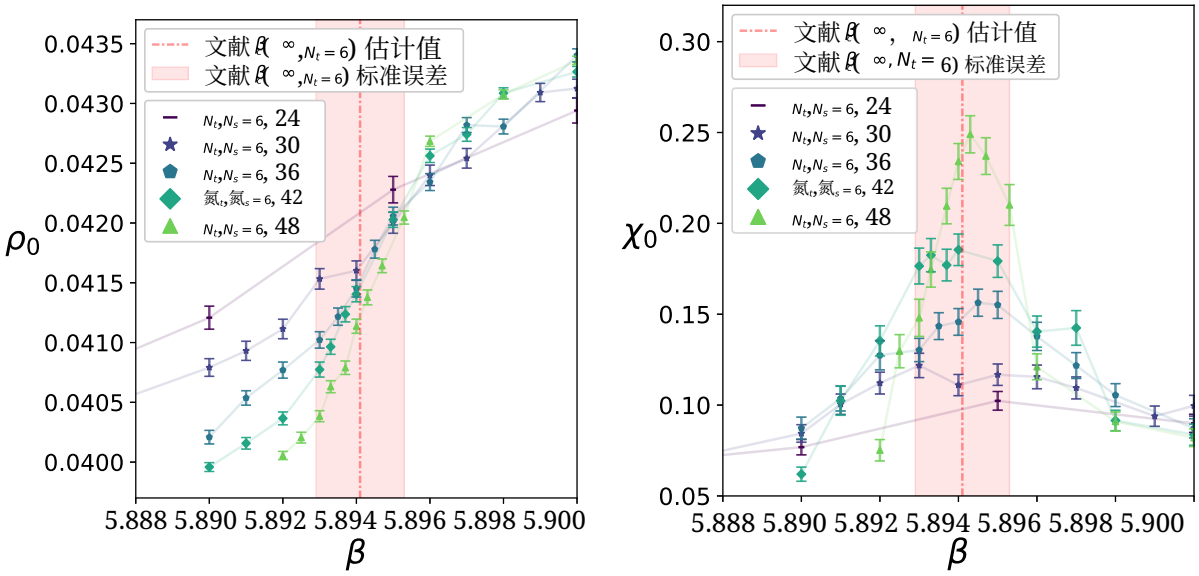

图 S4. 对于 $N_t = 6$, ρ_0 和 χ_0 关于 β 的散点图，放大显示临界区域，并用半透明线作为视觉指引。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

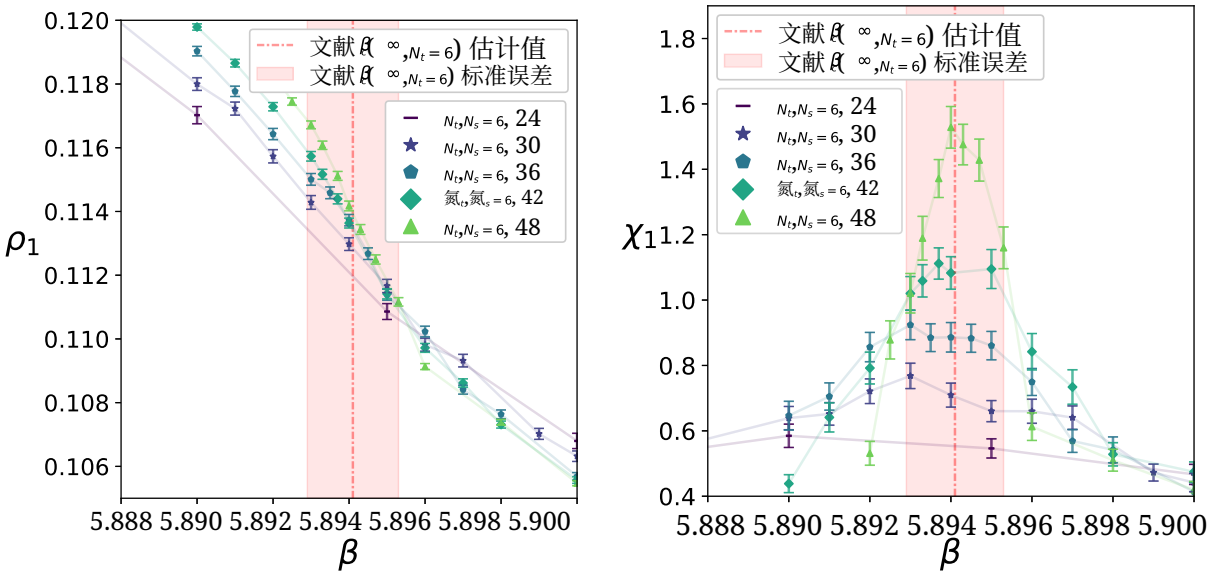

图 S5. 对于 $N_t = 6$, ρ_1 和 χ_1 关于 β 的散点图，放大显示临界区域，并用半透明线作为视觉指引。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

实际上，按照参考文献 [50], ，这是通过迭代求解方程来隐式实现的

$$Z_\beta = \sum_{i=1}^{R} \sum_{a=1}^{N_i} \frac{g_i^{-1} e^{-\beta E_i^a}}{\sum_{j=1}^{R} N_j g_j^{-1} e^{-\beta_j E_i^a - \log Z_{\beta_j}}} \tag{S2}$$

其中

- R 分别表示在 β_i 下进行的模拟次数，样本量为 N_i,
- E_i^a 是模拟中第 a 个记录构型的能量测量值（在我们的案例中为作用量） ion

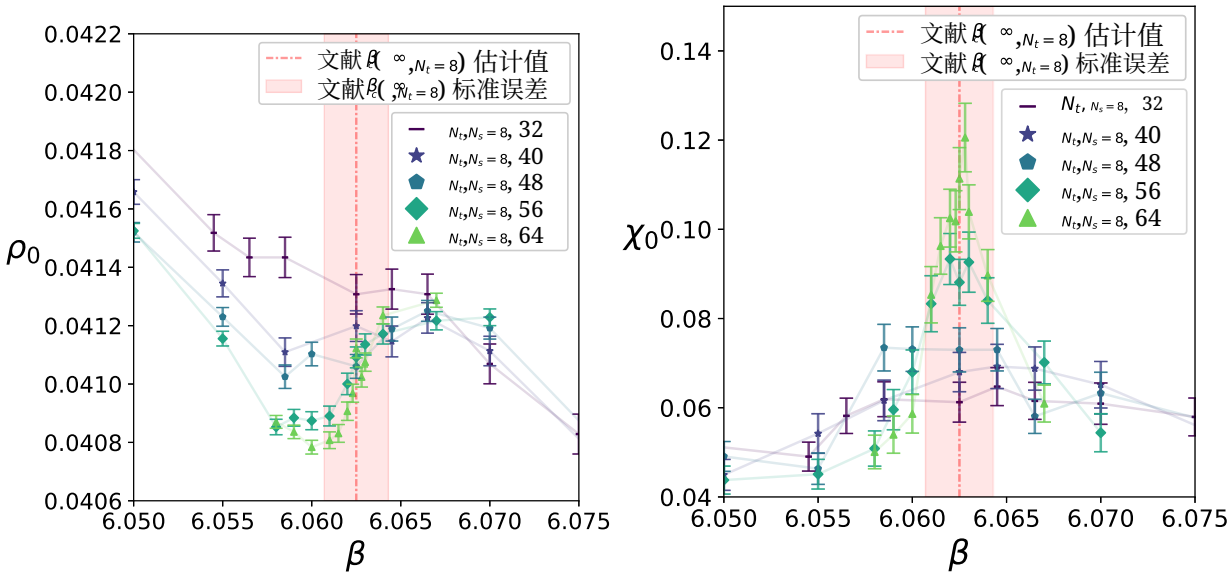

图 S6. 对于 $N_t = 8$，展示了 ρ_0 和 χ_0 随 β 变化的散点图，放大了临界区域，并以半透明线条引导视线。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44]中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

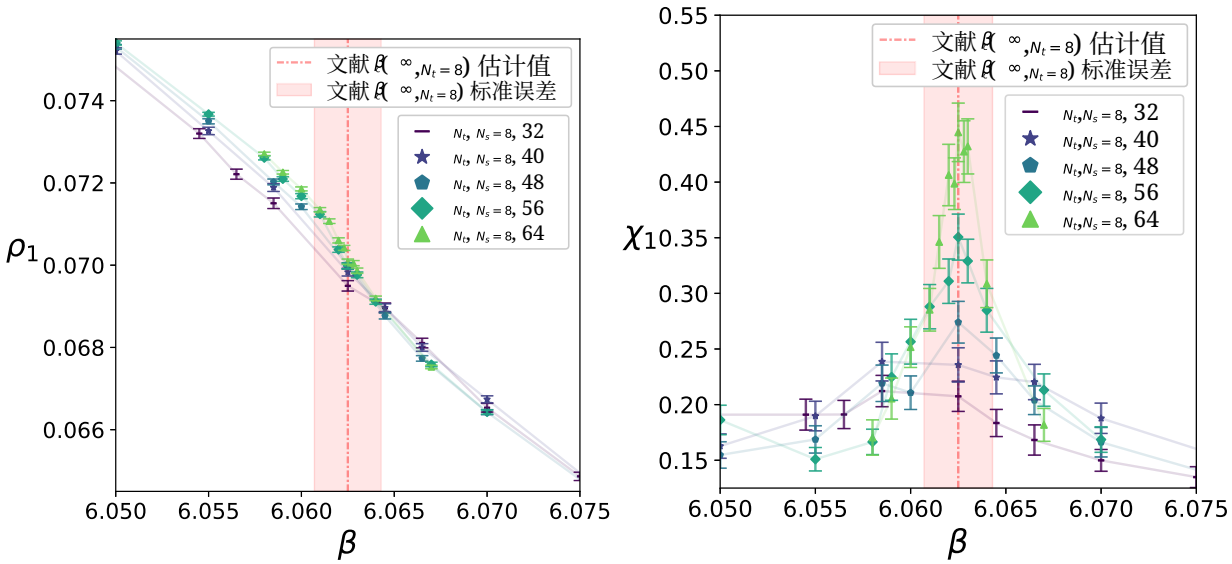

图 S7. 对于 $N_t = 8$， ρ_1 和 χ_1 随 β 变化的散点图，放大显示了临界区域，并用半透明线引导视线。垂直线和带状区域分别表示在参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

- ，而 $g_i = 1 + 2\tau_i$ 是衡量记录构型之间自相关时间的系数。

随后，我们可以使用以下方法估计可观测量 O 的期望值

$$\langle O \rangle_\beta \approx \sum_{i=1}^{R} \sum_{a=1}^{N_i} \frac{O_i^a g_i^{-1} e^{-\beta E_i^a + \log Z_\beta}}{\sum_{j=1}^{R} N_j g_j^{-1} e^{-\beta_j E_i^a - \log Z_{\beta_j}}}. \tag{S3}$$

请注意，保持形式为 $\exp\{-(\Delta\beta)S\}$ 的指数函数处于稳定数值范围内（避免下溢至 0）可能颇具挑战，尤其是当作用量 S 随晶格时空体积 $N_t N_s^3$ 增大时。我们在参考文献 [46] 中的算法实现采用长双精度和重新居中，以避免数值下溢。

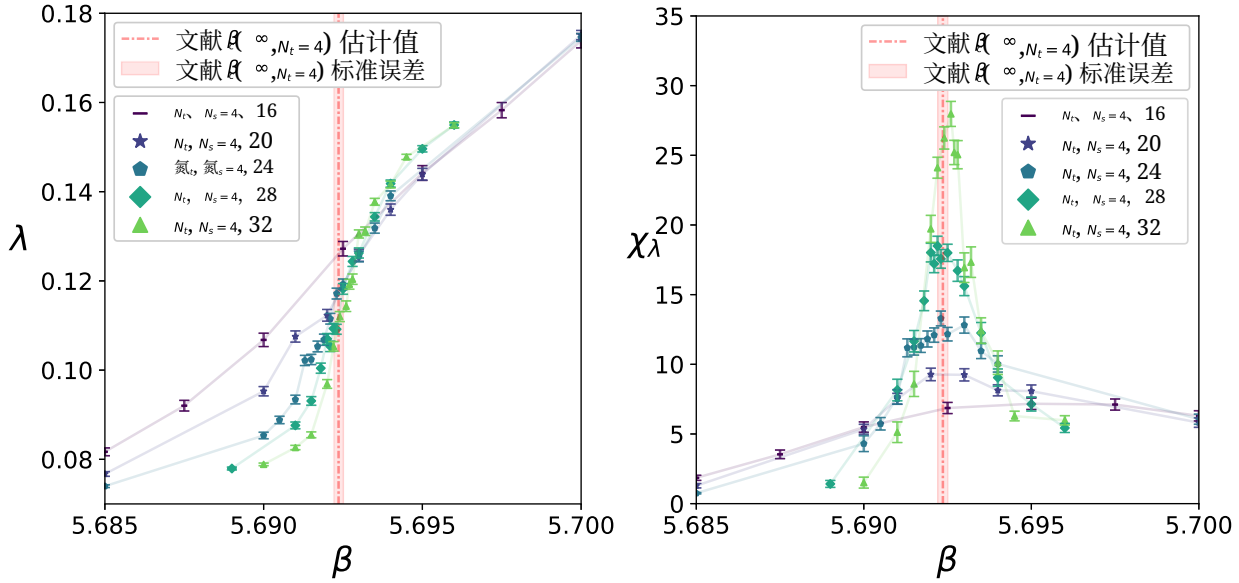

图 S8。对于 $N_t = 4$， λ 和 χ_λ 关于 β 的散点图，并用半透明线辅助观察。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

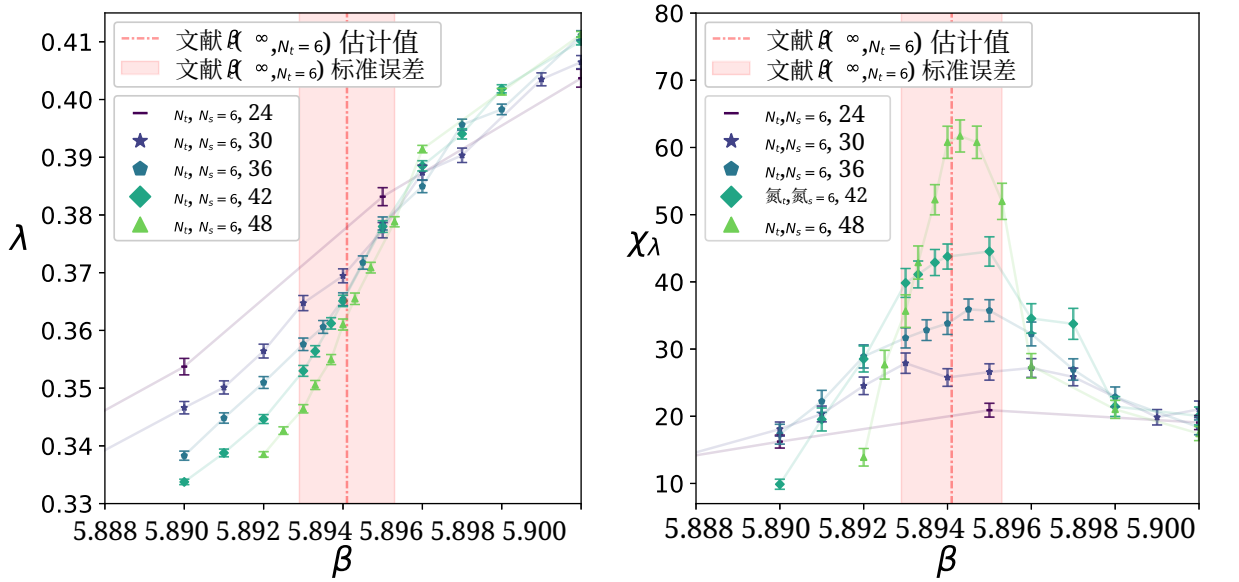

图 S9。对于 $N_t = 6$， λ 和 χ_λ 关于 β 的散点图，并用半透明线辅助观察。垂直线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

为了估计重加权过程中的系统误差，我们使用自助法，重复 N_{bs} =2，000 次。具体而言，按照参考文献 [50], 的方法，对于在 β_i 上进行且样本量为 N_i 的模拟，我们估计样本中已记录构型之间的自相关τ_i 。在近似 $g_i \approx \tau_i$ 后，我们随机进行子抽样，以生成由去相关构型组成的有效样本，其大小为

$$N_i^{\text{eff}} = \lfloor N_i/\tau_i \rfloor \ , \tag{S4}$$

其中 $\lfloor \cdot \rfloor$ 为下取整函数。为尽量减小自相关，我们使用参考文献 [51] 中定义的 RANLUX 随机数生成器。由于此自助样本中的构型实际上彼此去相关，因此我们可以迭代求解方程 (S2)，并使用 $g_i = 1$。我们采用的收敛容差为 10^{-14}（更小的容差也显示出一致的收敛结果）。因此，我们得到的自助法分布包含 2，000 条重加权曲线。

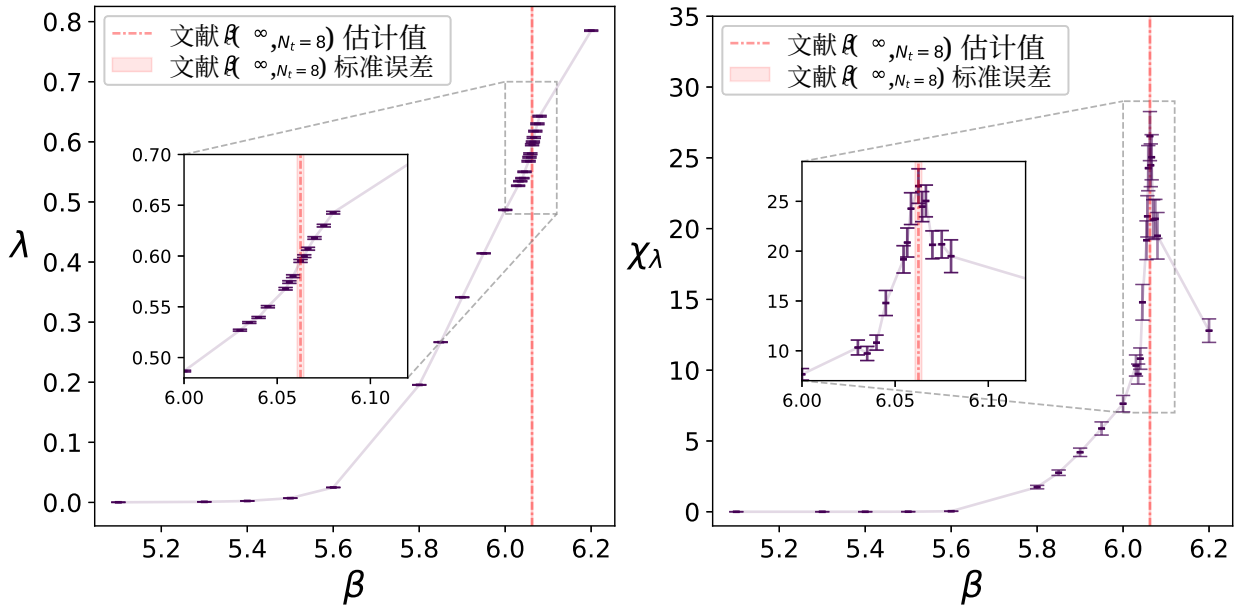

图 S10。对于 N_t，$N_s = 8$，32，展示了 λ 和 χ_λ 随 β 变化的散点图，覆盖更宽的 β 范围——插图放大了临界区域。图中添加了半透明线以引导视线。可以看到，正如预期，$\lambda \in [0, 1]$。红色垂直线和带状区域分别表示文献 Ref. [44]中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

对于自助法分布中的每个样本，我们提取 $\beta_c = \text{argmax}\{\chi_i(\beta)\}$，即每条曲线峰值的位置。然后取其均值作为估计值，标准差作为标准误差。

数值结果拟合

为了将我们的可观测量 $\beta_c(N_s, N_t)$ 的峰（称为伪临界值）外推至热力学极限 $N_s \to \infty$，我们使用空间体积倒数幂的多项式假设对数据进行拟合

$$\beta_c(N_s, N_t) = \beta_c(N_t) + \sum_{k=1}^{k_{\max}} \alpha_k (N_s^3)^{-k} \tag{S5}$$

其中，$k_{\max} < \infty$ 定义了多项式次数。我们通过改变数据范围和多项式次数进行多种拟合。注意，由于在热力学极限下只有次领先的非线性修正才是有效的，因此我们舍弃在数据点范围内具有极值的模型。$\beta_c(N_t)$ 的估计值是每个拟合的截距，并再次使用自助法，通过 $N_{\text{bs}} = 2,000$ 估计标准误差。

我们不选择单个拟合，而是基于拟合系综生成一个估计值。按照文献 [45]，我们使用由赤池信息准则（AIC）构造的统计量，该统计量综合考虑拟合优度、模型复杂度和模型中的自由度。大致而言，其思路是：对拟合优度得分高、模型复杂度低且使用所有可用数据点的模型赋予较高权重。将这些权重归一化并解释为概率后，可通过以下表达式计算

$$w_i = \frac{1}{\mathcal{N}} \exp\{-\frac{1}{2}(\chi^2 + 2n_{\text{par}} - n_{\text{data}})\} \tag{S6}$$

其中，χ^2 是标准卡方统计量，n_{par} 是模型中的参数个数，n_{data} 是拟合所用的数据点数量，而 $\mathcal{N}$ 是相对于所有拟合的归一化因子。接下来，我们用高斯分布的加权和来对该分布进行建模，其概率密度函数为

$$p(x) = \sum_i w_i N(x; \mu_i, \sigma_i) \tag{S7}$$

均值为 μ_i，标准差为 σ_i，后者取为截距估计值的统计误差（如上文通过自助法估算）。对该分布求累积分布函数（CDF），即可数值求得 16%、

可观测量	$N_t = 4$	$N_t = 6$	$N_t = 8$
ρ_0	$5.69247^{+0.00005}_{-0.00006}$	$5.8942^{+0.0004}_{-0.0004}$	$6.0645^{+0.0014}_{-0.0017}$
ρ_1	$5.69257^{+0.00010}_{-0.00008}$	$5.8942^{+0.0006}_{-0.0004}$	$6.0625^{+0.0006}_{-0.0009}$
λ	$5.69240^{+0.00005}_{-0.00005}$	$5.8940^{+0.0004}_{-0.0004}$	$6.0625^{+0.0008}_{-0.0010}$
文献值	$5.69236^{+0.00015}_{-0.00015}$	$5.8941^{+0.0012}_{-0.0012}$	$6.0625^{+0.0018}_{-0.0018}$

表 S1。利用贝蒂数可观测量、简单性及其各自的磁化率进行有限尺寸标度分析，本表给出了我们对于 β_c 在热力学极限 $N_s \to \infty$ 下、时间方向尺寸为$N_t = 4, 6, 8$的晶格的估计值。误差棒采用编码各种拟合的高斯加权和的68%置信区间计算。作为与文献的比较，最后一行是参考文献 [44]的结果。该研究使用了可比的蒙特卡罗方法来生成其构型，从而使我们能够将我们的阿贝尔磁单极子可观测量与标准可观测量对去禁闭相变的敏感度进行可靠比较。在该研究中，使用了平均波利亚科夫环 $\langle |P| \rangle$ 的模的期望值，并利用相应磁化率 χ_P（β）的峰给出 β_c 的估计值 $N_s \to \infty$。可以看出，我们的结果与文献中给出的结果相符。

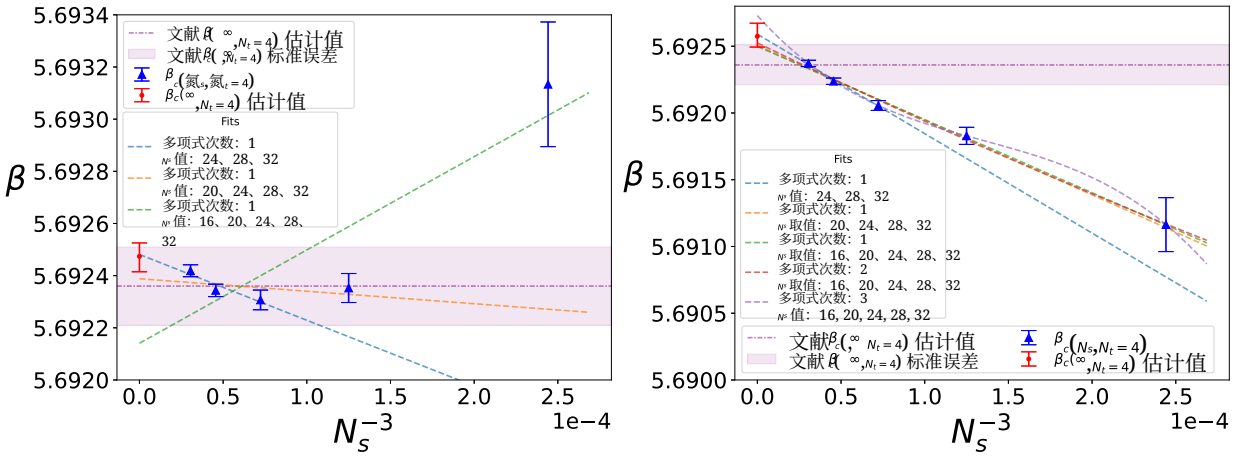

图 S 11 ρ_0 ρ_1 $N_t = 4$ $N_s =$. 对晶格进行有限尺寸标度分析，分别研究可观测量（左）和（右），其中晶格具有,,,,。蓝色三角形表示（,），即重加权磁化率曲线上相应峰的位置；误差棒通过自助法计算，使用 $N_{bs} = 2,000$ 次重采样。虚线表示用于将这些峰值外推至无限体积的多项式回归拟合。红点表示我们根据正文中概述的加权程序计算得到的热力学极限下的 β_c 估计值 $N_s \to \infty$。水平线和带状区域分别表示文献 [44]中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

16 20 24 28 32 β_c N_s $N_t = 4$

50%、84% 百分位数，分别作为下界、估计值和上界。这个最终估计值汇总了所有拟合的加权贡献，因此我们认为，与仅报告任何单个拟合所得的估计值相比，这种做法更稳健。 β_c 的估计值见表 S1。 ρ_0 和 ρ_1 的标度分析图见图 S11、S12 和 S13。 λ 的标度分析图见图 2、3 和 4。

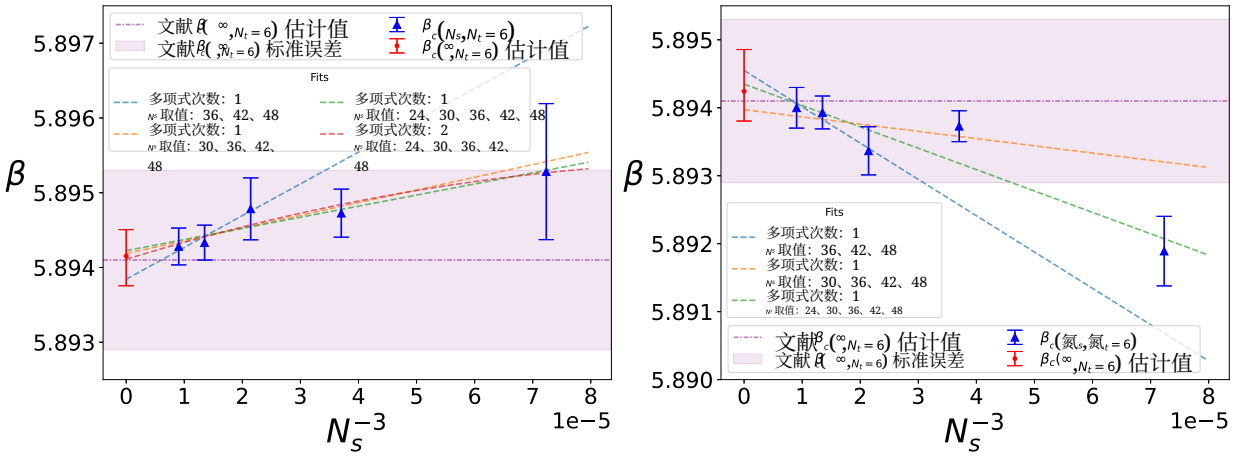

图 S 12 ρ_0 ρ_1 $N_t = 6$ $N_s =$ 。针对具有 24、30、36、42、48 的晶格，对可观测量（左）和（右）进行有限尺寸标度分析。蓝色三角形表示 β_c，即重加权磁化率曲线上相应峰的位置；误差棒通过自助法计算，使用 $N_{bs} = 2$、000 次抽样。虚线表示用于对这些峰值进行无限体积外推的多项式回归拟合。红点表示我们使用正文中概述的加权程序计算得到的热力学极限下 β_c 的估计值 $N_s \to \infty$。水平线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。

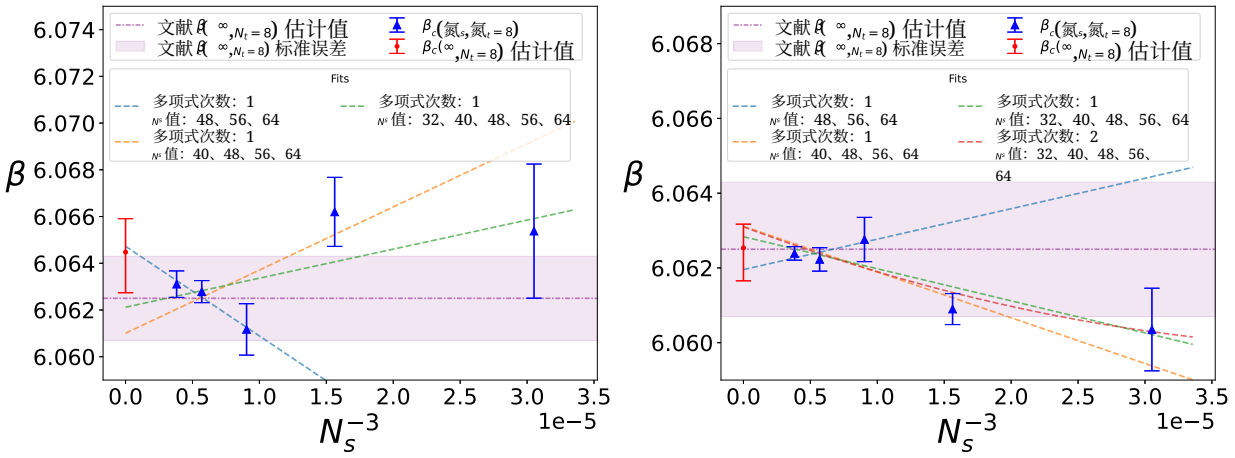

图 S 13 ρ_0 ρ_1 $N_t = 8$ $N_s =$ 。针对具有 32、40、48、56、64 的晶格，对可观测量（左）和（右）进行有限尺寸标度分析。蓝色三角形表示 β_c，即重加权磁化率曲线上相应峰的位置；误差棒通过自助法计算，使用 $N_{bs} = 2$、000 次抽样。虚线表示用于对这些峰值进行无限体积外推的多项式回归拟合。红点表示我们使用正文中概述的加权程序计算得到的热力学极限下 β_c 的估计值 $N_s \to \infty$。水平线和带状区域分别表示参考文献 [44] 中确定的外推 β_c 的中心值和统计误差。