

計算素粒子物理学の国際研究ネットワーク の形成

平成 16 年度～17 年度
日本学術振興会先端研究拠点事業成果報告書

平成 18 年 3 月

筑波大学計算科学研究センター

まえがき

この報告書は 2004 年度–2005 年度にわたり筑波大学計算科学研究センターを中心として実施された日本学術振興会先端研究拠点事業「計算素粒子物理学の国際ネットワークの形成」の成果をまとめたものである。

計算素粒子物理学とは、格子 QCD を代表とする格子上の場の量子論をスーパーコンピュータ等を用いた数値的方法を用いて解くことにより、理論からの予言の抽出と実験との比較検証を可能として素粒子の解明を図る方法である。この方法は、数ヶ月から数年にもわたるスーパーコンピュータの大規模な利用を必要とし、理論研究とは言え、従来の素粒子物理学とは異なる特徴を持っている。従って、この分野の研究を国際的な視点から推進するためには新たな国際的な研究協力体制の構築が必要である。特に、大規模計算で生成されたデータ（格子 QCD における gluon configuration 等）は、その上で様々な物理量を計算することが可能な貴重な研究資源であることから、これを世界の研究者コミュニティに公開し、相互に利用しあう仕組みが出来るならば、分野全体の進展に大きな役割を果たすと考えられる。

本事業の第一の目的は、米欧日の中核的拠点が協力して、このような仕組みを近年のインターネットの発展により成長してきたグリッド技術の利用により実現することである。本事業で構築を目指す世界的な計算素粒子物理学のデータグリッドを International Lattice Data Grid、略して ILDG と呼ぶ。ILDG は当該分野のデータ共有の枠組みを提供するだけでなく、国際共同研究の推進のための枠組みでもある。本事業の第二の目的は、定期的なセミナー開催や研究者交流により、最新の情報交換と人的交流を深め、それを通じて国際協力の強化と推進を図ることである。

本事業の開始された 2004 年 4 月には、計算素粒子物理学分野の計算力は CP-PACS（筑波大学計算科学研究センター）と QCDSF（米国コロンビア大学）に代表される 1Tflops クラスの計算機であった。この 2 年間に、コロンビア大学は 10Tflops の QCDOC の開発を完成させ、米国及び英国に合計 3 台が設置・稼働を開始している。わが国でも、計算科学研究センターでは 14.3Tflops の PACS-CS が 2006 年 7 月には稼働開始予定であり、KEK では既に 3 月から 57Tflops の BG/L が稼働している。これらの新鋭計算機群により、今後計算素粒子物理学において大きな進展が期待されている。ILDG は本事業に参画した各国メンバーの努力により 2006 年 6 月に公式に世界オープンする。時期的に願ってもないタイミングであり、今後の計算素粒子物理学分野の進展に大きな役割を果たすことが期待される。

本報告書には、ILDG の技術内容と仕様ドキュメントを中心として、2 年間の先端研究拠点事業の活動を取まとめたものである。ご覧頂くとともに、ご意見とご鞭撻を頂ければ幸いである。

平成 18 年 3 月

筑波大学科学研究センター
宇 川 彰

目次

第 I 部 事業計画	1
1 背景	3
1.1 計算素粒子物理学	3
1.2 International Lattice Data Grid	4
1.3 本プロジェクトの発足	5
2 計画概要	5
2.1 プロジェクト実施体制	5
2.2 実施計画	7
2.2.1 International Lattice Data Grid 構築	7
2.2.2 セミナー開催	12
2.2.3 共同研究	12
2.2.4 研究交流	12
第 II 部 事業の成果	15
3 International Lattice Data Grid の構築	17
3.1 概要	17
3.2 QCDml	18
3.2.1 QCDml の目的	18
3.2.2 QCDml 策定の経過	20
3.2.3 QCDml 設計の基本方針	20
3.2.4 QCDml の概要	21
3.3 ファイルフォーマット	24
3.3.1 経緯と経過	24
3.3.2 ILDG 配位フォーマットの概要	25
3.3.3 チェックサム	27
3.4 ILDG ミドルウェア	27
3.4.1 ILDG ミドルウェア設計の基本方針と経緯	27
3.4.2 ILDG ミドルウェアのコンポーネント	28
3.4.3 ILDG のソフトウェアモデル	29
3.4.4 ILDG サイトの連携と利用	30
3.4.5 認証について	30
3.4.6 現在の状況	31
3.5 Lattice QCD Archive	31
3.5.1 LQA の概要	31
3.5.2 LQA に格納されているデータと運用状況	32
3.5.3 LQA の今後	32
3.6 HEPNET-J/sc と Japan Lattice Data Grid	33

3.6.1	目的と経緯	33
3.6.2	Hepnet-J/sc	34
3.6.3	JLDG の概要	35
3.6.4	JLDG の現状と実運用に向けて	37
3.7	今後のスケジュール	37
4	格子 QCD 研究の推進	39
4.1	概要	39
4.2	近似なし QCD のハドロン質量スペクトル計算	40
4.3	クォーク質量	41
4.4	重いハドロンの物理の研究	42
5	セミナー	46
5.1	総論	46
5.2	概要	46
5.2.1	第 1 回セミナー”Lattice QCD via International Research Network”	46
5.2.2	第 2 回セミナー”From actions to experimentk”	47
5.2.3	第 3 回セミナー”Towards physics at the physical quark masses”	47
5.2.4	第 4 回セミナー”Lattice QCD via Internatinal Network”	48
6	共同研究	49
6.1	筑波ワークショップ”Lattice QCD and Particle Phenomenology”	49
6.2	奈良ワークショップ”Perspectives in lattice QCD”	49
6.3	非摂動くりこみの研究	50
6.4	オブジェクト指向格子 QCD コード体系の開発	51
7	若手交流	53
7.1	K_{l3} 崩壊からの Cabibbo-Kobayashi-Maskawa 行列要素 $ V_{us} $ の決定	53
7.2	有効結合定数のスケーリングの研究	53
7.3	格子上の重いクォークの相対論的定式化とそのパラメーターの決定	54
7.4	QCD シミュレーションコード最適化の研究	55
7.5	Wilson-clover クォーク作用による $N_f = 2 + 1$ シミュレーションの研究	56
第 III 部 ILDG 関係論文及び仕様ドキュメント		59
8	Reports at Lattice Symposia	61
9	仕様ドキュメント	83
9.1	QCDml draft v4.0	85
9.2	QCDml Ensemble Schema	122
9.3	QCDml Ensemble Schema sample	133
9.4	QCDml Ensemble Schema documentation	135
9.5	QCDml Configuration Schema	165

9.6	QCDml Configuration Schema sample	169
9.7	QCDml Configuration Schema documentation	170
9.8	ILDG file format v1.1	177
9.9	Meta Data Catalog specification	181
 第 IV 部 付録		187
10	2004 年度～2005 年度格子 QCD 論文リスト	189
10.1	学術雑誌発表論文	189
10.2	国際会議プロシーディングス	191
10.2.1	招待総合報告	191
10.2.2	原著発表	191
11	ILDG Workshop プログラム及び参加者リスト	193
11.1	First ILDG Workshop 19-20 December 2002	193
11.2	Second ILDG Workshop 2 May 2003	193
11.3	Third ILDG Workshop 5 December 2003	194
11.4	Fourth ILDG Workshop May 21 2004	195
11.5	Fifth ILDG Workshop December 3, 2004	197
11.6	Sixth ILDG Workshop May 12, 2005	199
11.7	Seventh ILDG Workshop Dec 8 2005	203
12	セミナー プログラム及び参加者リスト	206
12.1	第 1 回セミナー "Lattice QCD via International Research Network"	206
12.1.1	プログラム	206
12.1.2	参加者リスト	209
12.2	第 2 回セミナー "From actions to experimentk"	210
12.2.1	プログラム	210
12.2.2	参加者リスト	212
12.3	第 3 回セミナー "Towards physics at the physical quark masses"	214
12.3.1	プログラム	214
12.3.2	参加者リスト	217
12.4	第 4 回セミナー "Lattice QCD via Internatinal Network"	218
12.4.1	プログラム	218
12.4.2	参加者リスト	220
13	共同研究 プログラム及び参加者リスト	222
13.1	筑波ワークショップ "Lattice QCD and Particle Phenomenology"	222
13.1.1	プログラム	222
13.1.2	参加者リスト	224
13.2	奈良ワークショップ "Perspectives in lattice QCD"	225
13.2.1	プログラム	225
13.2.2	参加者リスト	227

第I部 事業計画

1 背景

素粒子物理学は、自然界の極微の構成要素とその間に働く力（相互作用）を探り、その知識に立って、自然界の成り立ちを理解しようとする学問である。素粒子物理学の研究方法には、高エネルギー加速器を用いた素粒子衝突実験に代表される実験的方法と、湯川秀樹の中間子論や朝永振一郎のくりこみ理論で良く知られる理論的方法が伝統的である。1980 年頃からは、これに加えてスーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションを中心とする計算物理学の方法が加わった。この方法は、素粒子の強い相互作用を記述する量子色力学（Quantum Chromodynamics 略して QCD）を中心として大きな発展を遂げ、計算素粒子物理学と呼ぶべき分野を形成するに至っている。

計算素粒子物理学は、一つの研究に数ヶ月から数年にもわたるスーパーコンピュータの大規模な利用が行われること、そのような計算で生成されたデータ自身が貴重な研究成果であって、その二次利用によって更なる研究成果が挙がること、さらには研究手段としてのスーパーコンピュータを研究者自らが開発・製作していることなど、従来の素粒子物理学とは異なる特徴を持っている。従って、この分野の研究を国際的な視点から推進するためには新たな国際的な研究協力体制の構築が必要である。本プロジェクトは、計算素粒子物理学分野で大きな役割を果たして来た筑波大学計算科学研究センターを我が国の中心拠点として、米国・英国・独国など、この分野の主要国に跨る国際的な研究推進体制を構築する事業である。

1.1 計算素粒子物理学

現在知られている自然界の構成要素は、6 種類のクォークと 6 種類のレプトンであり、これらの間には強い相互作用、電磁気相互作用、弱い相互作用がはたらいている。このような描像を統一的に記述すると考えられている理論体系が、素粒子の標準模型である。

標準模型によれば、陽子、中性子、パイ中間子など実験的に良く知られたハドロンと呼ばれる粒子は、複数個のクォークがグルオンにより媒介される力により結合した複合粒子である。クォークとグルオンを基本自由度として、素粒子の強い相互作用を記述する理論が QCD である。QCD はエネルギーが高いほど相互作用が弱くなるという著しい性質（漸近自由性）を持ち、これはまた逆にエネルギーが低い領域では相互作用が強くなることを意味する。この性質により、QCD は、高エネルギー素粒子衝突実験のスケーリングという特徴と、低エネルギーでクォークが単独で見つかっていない（クォークの閉じ込め）という、一見相反する二つの性質を単一の理論の枠内で説明すると考えられている。

QCD に基づいてハドロンの性質を求めるには格子 QCD という枠組を用いる必要がある。格子 QCD は、連続な時空を離散な 4 次元の時空格子で置き換え、格子点上のみにクォークとグルオンの場を定義する方法である。数学的に厳密な QCD の定式化であると同時に、モンテカルロ法などの数値シミュレーションの方法により、QCD の基礎方程式から様々な物理量を計算する実際的な方法を提供する点に重要な特徴がある。格子 QCD は K. Wilson により 1974 年に提案され、数値シミュレーションは 1980 年頃に M. Creutz 等により始まった。1980 年代を通じてスーパーコンピュータの発達と共に成長し、1990 年代に入ってから、QCD 専用の並列計算機が米国（Columbia 大学、IBM Watson 研究所等）・日本（筑波大学）・伊国（Rome 大学）で開発・製作されて QCD 実用計算に供され、汎用スーパーコンピュータに優る計算性能を提供している。

格子 QCD 計算では、典型的には $24 \times 24 \times 24 \times 48$ や $32 \times 32 \times 32 \times 64$ 等のサイズの 4 次

元格子を用い、この格子上のグルオン場の配位をモンテカルロ法により求める。配位が求まれば、その上でクォークの伝播関数を計算し、それを組み合わせることにより、様々なハドロンの物理量が求められる。現在までの研究により、ハドロンの質量スペクトルが QCD により精密に説明されるかどうか、クォークの質量は幾つか、といった QCD の基本的検証に関する計算、標準模型における CP 非保存の解明の鍵となる K 中間子や B 中間子の諸量 (B パラメータ、パイ中間子 2 個への崩壊振幅等) の理論的決定、さらには、クォークグルオンプラズマの臨界温度・相転移次数・状態方程式の計算等に大きな成果が挙げられている。

1.2 International Lattice Data Grid

格子 QCD 計算ではグルオン配位があれば、この上で様々な物理量を計算することができる。この意味でグルオン配位は格子 QCD の基本データである。精度の良い計算には、物理パラメータ 1 点あたり、通常 5 千から 1 万の独立な配位が必要であるが、そのために必要な計算時間は、世界最速のスーパーコンピュータや QCD 専用計算機を用いても数ヶ月から数年を必要とする。

このような大規模計算が可能な研究拠点は世界中でも限られている。生成したグルオン配位を自らのグループや国内研究者で利用するだけでなく、世界中の研究者に相互に公開すれば、それを用いて様々な研究を行うことができ、このような共用を促進することにより、計算素粒子物理学の研究を世界的に加速できると考えられる。

我が国では、1980 年代半ばから、高エネルギー物理学研究所 (現高エネルギー加速器研究機構 略称 KEK) 及び筑波大学を中心として、格子 QCD の活発な研究が行われてきた。筑波大学においては、超並列計算機 QCDPAX(1991 年完成) 及び CP-PACS (1996 完成時 Top500 リスト第一位) の開発・製作とそれによる QCD 研究が行われ、後者の開発拠点として設置された計算物理学研究センター (現計算科学研究センター) は、1990 年後半には格子 QCD の国際的拠点としての地位を確立しつつあった。同センター及び KEK では、全国共同利用の一環として、グルオン配位の公開と共用が 2002 年頃から検討され始めていた。特に計算物理学研究センターでは、大規模データをインターネットを活用して共用する所謂データグリッドの観点からの検討を始めていた。

このような中で、2002 年 6 月に、英国 Edinburgh 大学の Richard Kenway は、米国・日本・独国・伊国の主だった研究者に対して、グルオン配位を国際的に共有する機構を設立する可能性について提案を行い、2002 年 6 月に米国 Boston で開催された格子場理論国際会議では公式の呼びかけを行った。日本側では、この提案を受けて、既に検討を開始していた方向であることからその実現を図ることとし、2002 年 8 月には計算物理学研究センターに素粒子関係者 3 名・計算機工学者 2 名の合計 5 名からなるワーキンググループを設置して、技術的諸点の検討に入った。2002 年 12 月には、英国 Edinburgh において、国際的な検討会が開催され、英国・日本・米国・独国が参加した。この会合では、(1) 名称を International Lattice Data Grid (ILDG) とし web page を開設すること、(2) Metadata Working Group 及び Middleware Working Group を設置して、グルオン配位のデータベース化及び検索・ダウンロードに関する国際標準作成を行うことが決まり、国際協力活動がスタートした。その後、ILDG ワークショップは 6 ヶ月間隔で開催されている。3 回目までは Edinburgh 大学、第 4 回・第 5 回は筑波大学が開催拠点となり、そこでの議論を節目として ILDG の具体的構築がすすめられた。

1.3 本プロジェクトの発足

ILDG の進展と共に浮上してきた問題は、参加各国において予算を含めた国際協力のための体制を如何に構築するか、またそのような体制を基盤としての実際上の国際的な研究協力や研究者交流をどのように積み上げていくかであった。このような時期に、2003 年秋に日本学術振興会の先端研究拠点事業 拠点形成促進型 の公募がアナウンスされたことから、英国、米国、独国と連絡を取り、実施計画及び予算的裏付けに関する調整を図って日本側における申請を行った結果、平成 16 年度発足課題として「計算素粒子物理学による国際研究ネットワークの形成」が採択された。

2 計画概要

本プロジェクトの目的は、第一には、計算素粒子物理学において日米欧が協力して、大規模シミュレーションの生成データを共有して研究推進を図ることを目的とする International Lattice Data Grid を構築することである。第二には、それを共通基盤とする国際的な研究協力体制を構築することにより、素粒子物理学の理論的研究を推進することを目的とする。

2.1 プロジェクト実施体制

計算素粒子物理学は、我が国においては、筑波大学計算科学研究センター及び高エネルギー加速器研究機構を中心として先端的な研究が行われ、質・量共に世界的にも第一級の研究グループがある。また、日本全体の計算素粒子物理学研究者の組織として Lattice Field Theory Forum が 2002 年 11 月に作られている。従って、日本側組織としては、筑波大学計算科学研究センターが中心となり、Lattice Field Theory Forum を通じて連絡をとりながら計画を進めて行くことができる。

一方世界的には、当該分野において、米国及びヨーロッパ諸国（特に、英国、ドイツ等）が先端的な研究を展開して来た。

米国は、当分野において強力な研究グループを多数擁している。2002 年から、全米の拠点を網羅して当分野を推進するプロジェクトが、エネルギー省の SciDAC 計画（Scientific Discovery through Advanced Computing Program）により進められている。フェルミ国立加速器研究所（FNAL）は、当分野において顕著な実績があると同時に、SciDAC 計画の主要ノードであり、また素粒子実験においても世界的拠点である。従って、本計画の米国側組織としては、フェルミ国立加速器研究所を選び、SciDAC 計画を通じて、他の拠点との協力関係を構築することが可能である。

英国は、エディンバラ大学の並列計算機センター EPCC に主要なスーパーコンピュータを置き、同大学を中心として全英の計算素粒子物理学研究組織 UKQCD がある。特にスーパーコンピュータとインターネットを用いた研究体制（いわゆる “grid”）の構築に先進的な成果がある。従って、英国側組織としては同大学が最も適当と考えられた。

ドイツは、DESY（ドイツシンクロトロン研究所）の Hamburg site 及び Berlin 近郊 Zeuthen site を中心に、本分野の基礎的研究に極めて高い成果を挙げている。さらに DESY のジョンフォンノイマン計算研究所は、今後スーパーコンピュータ設備の中心となる予定であり、同研究所を通じて DESY 及び全独の拠点と連携を図ることができる。

日本	拠点機関 部局 コーディネータ メンバー数 協力機関数 協力機関名	筑波大学 計算科学研究センター 教授 宇川 彰 16 人（発足時）27 人（終了時） 3（発足時）4（終了時） 高エネルギー加速器研究機構 広島大学 京都大学 金沢大学（平成 17 年度）
アメリカ合衆国	拠点機関 部局 コーディネータ メンバー数 協力機関数 協力機関名	Fermi National Accelerator Laboratory Theory Division Senior Scientist Paul Mackenzie 20 人（発足時）26 人（終了時） 14（発足時）15（終了時） Boston University Columbia University Brookhaven National Laboratory Massachusetts Institute of Technology Washington University University of Washington University of California Santa Barbara Jefferson National Accelerator Facility University of Arizona Indiana University University of Utah University of Illinois at Urbana-Champaign Ohio State University University of Connecticut De Paul University（平成 17 年度）
イギリス	拠点機関 部局 コーディネータ メンバー数 協力機関数 協力機関名	University of Edinburgh Department of Physics Professor Richard Kenway 12 人（発足時）13 人（終了時） 4 University of Glasgow University of Wales Swansea University of Southampton University of Liverpool

表 1: プロジェクトコーディネータ及び参加機関

ドイツ	拠点機関 部局 コーディネータ メンバー数 協力機関数 協力機関名	Deutsches Elektronen Synchrotron John von Neumann Institute for Computing Group Leader Karl Jansen 12 人（発足時）15 人（終了時） 5 Humboldt University at Berlin University of Bielefeld University of Muenster University of Regensburg Max Planck Institute fuer Physik
イタリア （平成 17 年度）	拠点機関 部局 コーディネータ 協力機関数 協力機関名	University of Rome I Dept of Physics Professor Guido Martinelli 3 Univ. of Rome II Univ. of Rome III Univ.of Milano

表 2: プロジェクトコーディネータ及び参加機関（続）

以上の状況から、日本側では筑波大学計算科学研究センターが中心となり、米国 FNAL の Paul Mackenzie、英国 Edinburgh 大学の Richard Kenway、ドイツ DESY Zeuthen の Karl Jansen と連絡・調整を図った結果、表 1-2 に掲げる計画実施体制が整えられた。各国組織は計画 2 年目に拡充され、また、計算素粒子物理学において豊富な実績と研究者陣を有するイタリアが参加して、5ヶ国体制となった。表にはこれらの状況も示した。各国参加メンバーを表 3-7 に示す。

2.2 実施計画

本プロジェクトの実施計画は、International Lattice Data Grid の構築と、それを視野にいたした国際共同研究及び国際交流を二つの柱として 4ヶ国コーディネータの打ち合わせにより立案された。具体案は以下のとおりである。

2.2.1 International Lattice Data Grid 構築

International Lattice Data Grid 構築には以下の課題がある。

- データ記述方式及びデータ記録方式の国際標準の制定
ILDG は格子 QCD の基本データであるグルオン配位を蓄積し、世界各国の研究者が検索しダウンロードすることを可能とするのもであるので、蓄積されたデータファイルを記述する方式及びデータ記録の方式に国際的な共通性がなければならない。
- ILDG のデータ検索及びダウンロードのためのミドルウェアの開発

氏名	所属	職名
宇川 彰*	筑波大学・計算科学研究センター	教授
佐藤 三久	筑波大学・計算科学研究センター	教授
朴 泰祐	筑波大学・計算科学研究センター	助教授
高橋 大介	筑波大学・計算科学研究センター	講師
岩崎 洋一	筑波大学	学長
青木 慎也	筑波大学・数理物質科学研究科	教授
金谷 和至	筑波大学・数理物質科学研究科	教授
吉江 友照	筑波大学・計算科学研究センター	助教授
石塚 成人	筑波大学・計算科学研究センター	助教授
蔵増 嘉伸	筑波大学・計算科学研究センター	講師
谷口 裕介	筑波大学・計算科学研究センター	助手
Baer Oliver	筑波大学・数理物質科学研究科	助手
佐々木 潔	筑波大学・計算科学研究センター	研究機関研究員
石川 智己	筑波大学・計算科学研究センター	研究員（科学研究）
武田 真滋	筑波大学・数理物質科学研究科	学生
中村 庸介	筑波大学・数理物質科学研究科	学生
鈴木 隆平	筑波大学・数理物質科学研究科	学生
新谷 栄悟	筑波大学・数理物質科学研究科	学生
井出 健智	筑波大学・数理物質科学研究科	学生
橋本 省二	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	助教授
金児 隆志	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	助手
筒井 直人	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	学振研究員
松古 栄男	高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター	助手
山田 憲和	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	助手
大野木 哲也	京都大学・基礎物理学研究所	助教授
大川 正典	広島大学・大学院理学研究科	教授
石川 健一	広島大学・大学院理学研究科	講師
出淵 卓	金沢大学・理学部	助手

表 3: 日本側参加者（*コーディネータ）

氏名	所属	職名
Paul Mackenzie*	Fermilab・Theory Group	Senior Scientist
Andreas Kronfeld	Fermilab・Theory Group	Senior Scientist
Donald Holmgren	Fermilab・Theory Group	Scientist
Edward Neilsen	Fermilab・Theory Group	Scientist
Jim Simone	Fermilab・Theory Group	Scientist
Richard Brower	Boston University・Department of Physics	Professor
Claudio Rebbi	Boston University・Department of Physics	Professor
Norman Christ	Columbia University・Department of Physics	Professor
Robert Mawhinney	Columbia University・Department of Physics	Professor
Michael Creutz	BNL・Physics Department	Senior Scientist
Amarjit Soni	BNL・Physics Department	Senior Scientist
Chris Dawson	RIKEN-BNL Research Center	Scientist
John Negele	MIT・Department of Physics	Professor
Stephen Sharpe	Washington University・Department of Physics	Professor
Robert Sugar	UCSB・Department of Physics	Professor
William Watson, III	Jeffersonlab・Computing Division	Senior Scientist
David Richards	Jeffersonlab・Theory Group	Senior Scientist
Robert Edwards	Jeffersonlab・Theory Group	Senior Scientist
Doug Toussaint	University of Arizona・Physics Department	Professor
Steven Gottlieb	Indiana University・Department of Physics	Professor
Carleton DeTar	University of Utah・Physics Department	Professor
Claude Bernard	Washington University・Physics Department	Professor
Aida El-Khadra	University of Illinois・Department of Physics	Professor
Junko Shigemitsu	Ohio State University・Physics Department	Professor
Mathew Wingate	Washington University・Physics Department	Assistant Professor
Thomas Blum	University of Connecticut・Department of Physics	Assistant Professor
Massimo Di Peirro	School of Comp. Sci.・DePaul University	Associate Professor

表 4: 米国側参加者 (*コーディネータ)

氏名	所属	職名
Richard Kenway*	University of Edinburgh • School of Physics	Professor
Kenneth Bowler	University of Edinburgh • School of Physics	Professor
Balint Joo	University of Edinburgh • School of Physics	Lecturer
Anthony Kennedy	University of Edinburgh • School of Physics	Professor
Brian Pendleton	University of Edinburgh • School of Physics	Senior Lecturer
Christopher Maynard	University of Edinburgh • School of Physics	Lecturer
Christine Davies	University of Glasgow • Dep of Physics and Astronomy	Professor
Gunnar Bali	University of Glasgow • Dep of Physics and Astronomy	Lecturer
Christopher Allton	University of Wales Swansea • Department of Physics	Reader
Christopher Sachrajda	University of Southampton • Department of Physics	Professor
Jonathan Flynn	University of Southampton • Department of Physics	Senior Lecturer
Chris Michael	University of Liverpool • Dep of Mathematical Sciences	Professor
Alan Irving	University of Liverpool • Dep of Mathematical Sciences	Professor
Paul Rakow	University of Liverpool • Dep of Mathematical Sciences	Lecturer

表 5: 英国側参加者 (*コーディネータ)

氏名	所属	職名
Karl Jansen*	DESY. John von Neumann Institute for Computing, Zeuthen	Group Leader
Dirk Pleiter	DESY. John von Neumann Institute for Computing, Zeuthen	Research Associate
Rainer Sommer	DESY • Zeuthen	Senior Researcher
Jochen Heitger	DESY • Zeuthen	Research Associate
Michele Della Morte	Humboldt University at Berlin • Institute for Physics	Research Associate
Martin Hasenbusch	DESY • Zeuthen	Research Associate
Ulli Wolff	Humboldt University at Berlin • Institute for Physics	Professor
Frithjof Karsch	University of Bielefeld • Department of Physics	Professor
Gernot Muenster	University of Muenster • Department of Physics	Professor
Andreas Shaefer	University of Regensburg • Department of Physics	Professor
Peter Weisz	Max Planck Institute fuer Physik • Munich	Senior Researcher
Istvan Montvay	DESY • Hamburg	Senior Researcher
Hartmut Wittig	DESY • Hamburg	Senior Researcher
R. Hoffmann	Humboldt University at Berlin • Institute for Physics	Postdoctoral fellow
H. Meyer	DESY • Zeuthen	Research Associate
F. Knechtli	Humboldt University at Berlin • Institute for Physics	Research Associate

表 6: ドイツ側参加者 (*コーディネータ)

氏名	所属	職名
Guido Martinell*	Dept of Phys. • Univ. of Rome I	Professor
Massimo Testa	Dept of Phys. • Univ. of Rome I	Professor
Roberto Petronzio	Dept of Phys. • Univ. of Rome II	Professor
Gian Carlo Ross	Dept of Phys. • Univ. of Rome II	Professor
Anastassios Vladikas	Dept of Phys. • Univ. of Rome II	Professor
Vittorio Lubicz	Dept of Phys. • Univ. of Rome III	Professor
Silvano Simula	Dept of Phys. • Univ. of Rome III	Professor
Roberto Frezzotti	Dept of Phys. • Univ. of Milano	Professor

表 7: イタリア側参加者 (*コーディネータ)

ILDG は国際的なデータグリッドであるが、基本的な考え方として、各国内部でのグリッドの構成は各国の自主性と判断に任せることとし、しかしながら国際的な検索やダウンロードが可能な相互運用可能性を保証するために、国内グリッドと ILDG のインタフェースは共通化することとされた。これに対応して、インタフェースのアーキテクチャの制定と各国におけるミドルウェアの開発が必要となる。

- 各国におけるアーカイブサイトの設置と運用

以上の準備の下に、ILDG 参加各国はグルオン配位を蓄積し世界に公開するためのアーカイブサイトを建設し、運用しなければならない。このためには、各国研究者コミュニティが、生成グルオン配位の世界公開に対してどのような方針を取るかをあらかじめ検討し、できるだけ協調した方針を取る必要がある。

以上の課題の内最初の 2 件は計算機科学に関わる技術的課題である。これについては、平成 14 年 12 月に始まった ILDG ワークショップ以来、Metadata Working Group 及び Middleware Working Group が設立されており、年 2 回開催 (12 月及び 5 月) のインターネット経由のテレビ会議を通じて検討が進められてきた。本プロジェクトでは、引続きこのワークショップを強化しつ開催を継続し、技術開発の集約点とすることが妥当とされ、平成 16 年 5 月及び 12 月のワークショップは日本が開催を担当する予定が了承された。またその後平成 17 年 5 月と 12 月のワークショップは米国が担当することとなった。さらに、実際の技術開発においては、直接会合しての議論と調整が必要であることから、新たに年 1~2 回程度、技術担当者が集まって、技術検討会議を行うことが計画された。

第三の点は最終的に ILDG の効果を左右する重要な点であるが、グルオン配位の生成は多大の労力と予算を必要とし、また質の良い配位であるほどその上での物理量測定は多くの物理結果を生むことができることから、第三者への公開を何時、どのような形で行うかは単純な問題ではない。従って、この問題に対して幅広く研究者コミュニティの賛同を得るには、様々の場所と機会を捉えて議論の必要がある。また、このような議論には、計画実施 2 年間の間に世界的にどのようなグルオン配位生成が行われるかの把握も必要である。これらは、技術的な問題を越えた事項であるので、ILDG ワークショップだけでなく、後述する定期セミナーにおいて情報交換と討議を重ねることとなった。

2.2.2 セミナー開催

ILDG 構築の目的は計算素粒子物理学の推進であるので、当該分野における研究状況に関して最新の情報交換を行って、研究の方向性を見定め、また共同研究の芽を探ることは本計画の重要な要素である。この点については、コーディネータ間での意見交換の結果、6ヶ月間隔で、物理に重点を置いたセミナーを各国持ち回りで開催することとなった。開催国及び目的概要は以下のとおりとされた。

- 第一回 日本
格子 QCD の大規模数値シミュレーションの現状を総括し、国際研究ネットワークによる研究の進展の可能性を具体的に議論する。
- 第二回 英国
格子 QCD シミュレーション全般について、本拠点事業の初年度の成果を中心に現状を整理し、次年度の課題を整理する。
- 第三回 米国を予定
第 1 回セミナーでの種々の問題提起、第 2 回セミナーでの問題解決への研究の進展の報告などを受けて、実際にどのように問題が解決されつつあるのかを総括する。
- 第四回 日本を予定
2 年間の本研究を終えるに当たってこの 2 年間の活動を総括し、この分野での研究協力の発展とそれによる問題解決の枠組を将来的にどのように遂行して行くかを議論する。

2.2.3 共同研究

ILDG の構築は、明確なターゲットとスケジュールを持って実施される具体的な国際共同研究であるが、これと並んで、物理面に重点をおいた共同研究の追求も非常に重要なテーマであるので、以下の課題が追求されることとなった。

- 滞在型ワークショップ
テーマを定めて各国の研究者が数週間滞在し、当該テーマの現状のレビュー、課題の検討、今後に向けての研究の方向性、に関する集中討論を行う。
その後の調整により、平成 16 年度は筑波において”Lattice QCD and Particle Phenomenology”をテーマに、平成 17 年度は奈良において”Perspectives in Lattice QCD”をテーマに開催することとなった。
- 課題別共同研究
個別の具体的テーマを定めての共同研究。その後の調整により、日本とドイツの間で「非摂動くりこみの研究」を、また日本と米国の間で「オブジェクト指向格子 QCD コードの開発」を行うこととなった。

2.2.4 研究交流

研究者交流、特に、若手研究者及び大学院生の国際交流と国際経験の涵養は、重要な課題である。この目的を実現するために、本計画においては、若手研究者及び大学院の海外拠点への長期

派遣を行い、また本計画で実施するセミナー等には積極的な派遣と成果発表の機会を与えることとした。

第 II 部

事業の成果

3 International Lattice Data Grid の構築

3.1 概要

ILDG の構築には、(1) データ検索とダウンロードのための計算機技術面からの開発・実装、(2) このような活動を世界的規模で進めていくための制度的仕組みの整備、(3) 実際のデータの蓄積とその利用による計算素粒子物理学研究の推進、の3つの側面がある。これらのいずれの面においても、2002 年 12 月に第一回が開催され、その後 6ヶ月間隔で開催されている ILDG Workshop が大きな役割を果たしている。このワークショップは Internet を利用したテレビ会議形式で開催されており、第 3 回までは Access Grid <http://www.accessgrid.org> と VRVS <http://www.vrvs.org> の二つのテレビ会議システムを利用して行われたが、両者の間のブリッジが不調であることが多いため、第 4 回以降は VRVS に一本化された。表 8 に現在までの 7 回の開催概要を示す。また、第 4 章付録に各回のプログラム及び決定事項を記載する。

International Lattice Data Grid Workshops

	date	organizer	# participating sites
ILDG-1	19-20 December 2002	Edinburgh University	3
ILDG-2	2 May 2003	Edinburgh University	5
ILDG-3	5 December 2003	Edinburgh University	7
ILDG-4	21 May 2004	University of Tsukuba	6
ILDG-5	3 December 2004	University of Tsukuba	11
ILDG-6	12 May 2005	Boston University	15
ILDG-7	8 December 2005	Boston University	17
ILDG-8	11 May 2006 予定	DESY Zeuthen	

表 8: ILDG Workshops 開催状況

ワークショップにおいて決められた主要な事項は次のとおりである。

- 第一回：Working Group の設置

2002 年 12 月に英国 Edinburgh において行われた第一回の ILDG Workshop において Metadata Working Group 及び Middleware Working Group を設置することが決まり、これらの Working Group を中心として、グルオン配位のデータベース化及び検索・ダウンロードに関する国際標準作成作業のための国際協力活動がスタートした。

Metadata Working Group のメンバーを表 9 に掲げる。主査は発足時の互選により吉江友照 (筑波大学計算科学研究センター) が務めることになり、データ記述標準 QCDml の制定、data binary format の制定に大きな役割を果たした。

Middleware Working Group のメンバーを表 10 に掲げる。主査は置かず、William Watson III (米国 Jefferson National Accelerator Facility)、Balint Joo (当時英国 Edinburgh University 現在米国 Jefferson National Accelerator Facility) 及び佐藤三久 (筑波) の三人が co-convenor として全体取まとめを行うようになっている。

- 第三回：ILDG Board の設置

第3回の Workshop において組織面での検討が行われ、ILDG の活動を取りまとめるために ILDG Board を設置することが決まった。ILDG Board の規約は次のとおりである。

International Lattice Data Grid Board:

- The Board is established with one member from each country to decide policy and oversee the working groups.
- The chairperson will rotate on an annual basis, changing at the Lattice Conference.
- The Board is charged with expanding the membership, seeking the allocation of resources from their national projects, and considering the access policy for ILDG data and guidelines for data sharing.
- The chairperson is responsible for organising the 6 monthly workshops.

Board member は各国の研究者コミュニティから選出され、Board Chair は毎年 12 月の ILDG ワークショップで交替している。現在までの Board member 及び Board chair を表 11 に記す。

- 第四回：QCDml の取まとめ

計算素粒子物理学の基本データである gluon configuration の記述言語 QCDml の策定が Metadata Working Group で行われ、略最終版の取まとめが 2004 年 5 月の第 4 回ワークショップで行われた。

- 第五回：ミドルウェア基本アーキテクチャに関する合意

ILDG の各国間サイトを相互運用可能とするためのインタフェースアーキテクチャが Middleware Working Group において策定され、2004 年 12 月の第 5 回ワークショップで合意された。参加各国はこれに従い国内データグリッドのミドルウェア作成を進めている。

- 第五回-第六回：公式オープニング期日

ILDG の公式オープニング期日を 2006 年 6 月とすることが 2004 年 12 月の第 5 回ワークショップで了承され、2005 年 5 月の第 6 回ワークショップで確認された。

3.2 QCDml

3.2.1 QCDml の目的

格子 QCD の数値シミュレーションでは、種々の物理条件（裸の結合定数、クォーク数、クォーク質量、格子サイズ等）を設定して、モンテカルロ法によって多数の QCD 配位を生成する。配位生成時に用いられる格子作用やアルゴリズムも多種多様である。ILDG に保管される QCD 配位データは、この様な配位の生成条件を記述したデータ（メタデータ）を伴ってはじめて意味を持つ。つまり、メタデータを ILDG を構成する各グリッドでメタデータベースとして保持し、ユーザーが特定の条件を指定して配位を検索できる仕組みを構築しなければならない。QCDml(QCD markup language) は、配位生成条件を記述する国際規格として、策定するものである。

International Lattice Data Grid Metadata Working Group

国	氏名	所属
イタリア	G. Andronico	INFN
オーストラリア	P. Coddington	University of Adelaide
日本	T. Yoshie(convenor)	筑波大学計算科学研究センター
米国	R. Edwards	Jefferson National Accelerator Facility
	J. Simone	Fermi National Accelerator Laboratory
英国	C. Maynard	Edinburgh University
ドイツ	D. Pleiter	DESY Zeuthen

表 9: ILDG Metadata Working Group

International Lattice Data Grid Middleware Working Group

国	氏名	所属
イタリア	G. Andronico	INFN
日本	M. Sato	筑波大学計算科学研究センター
米国	W. Watson III	Jefferson National Accelerator Facility
	J. Hetrick	NERSC
	D. Holmgren	Fermi National Accelerator Laboratory
英国	B. Joo	Edinburgh University
ドイツ	A. Gellrich	DESY Hamburg

表 10: ILDG Middleware Working Group

International Lattice Data Grid Board

国名	氏名	所属
日本	Akira Ukawa	筑波大学計算科学研究センター
米国	Richard Brower	Boston University
英国	Richard Kenway	Edinburgh University
ドイツ	Karl Jansen	DESY Zeuthen

Board Chair

2002 年 12 月 ~ 2003 年 12 月	Richard Kenway	英国
2004 年 1 月 ~ 2004 年 12 月	Akira Ukawa	日本
2005 年 1 月 ~ 2005 年 12 月	Richard Brower	米国
2006 年 1 月 ~ 2006 年 12 月	Karl Jansen	ドイツ

表 11: ILDG Board

3.2.2 QCDml 策定の経過

2002 年 12 月に開催された第 1 回 ILDG ワークショップにおいて、QCDml 策定の為のワーキンググループを立ち上げることが合意された。2003 年 1 月にメタデータワーキンググループを組織し、主として電子ベースで議論を続けた。ワーキンググループのメンバーは既に表 9 に掲げたが、後に C.Detar (Utah) 氏が議論に加わった。議論や合意事項の要約は、半年に一回開催される ILDG ワークショップや毎年開催される格子場理論国際会議に於て報告され、ILDG 参加者や格子 QCD コミュニティからのパブリックコメントを取り入れる形で、策定作業をすすめた。

QCDml 策定に至る主な経過は以下の通りである。

- 2003 年 7 月に QCDml のドラフトバージョン (QCDml draft ver3.9) の取纏めを完了した。
- 格子場理論国際会議 lattice'03 後のパブリックコメントを受け、討論を重ね、QCDml の改訂版 (QCDml0.40) の提案を 2004 年 5 月に開催された ILDG ワークショップにておこなった。当該ワークショップでの議論を受け、2004 年 7 月に QCDml1.0 をリリースした。ドラフトバージョンからの主な改良点は、
 - 同一物理条件・格子作用で生成される配位の組 (ensemble) に対するメタデータの記述と配位そのもののメタデータの記述の分離
 - 格子作用の木構造の実現方法の変更

である。この時点で、QCDml の基本設計が完了した。

- その後 QCDml を 3 回改訂し、ILDG で実際に使われる QCDml1.3 を 2006 年 3 月にリリースした。主な改良点は以下の通りである。
 - 格子作用の木構造の実現に於けるバグフィックス
 - 記述可能な格子作用の追加
 - ensemble に対する基本物理量の記述の追加
 - ネームスペース割り当て規則の整理

3.2.3 QCDml 設計の基本方針

QCDml 策定にあたって採用した基本方針は以下の通りである。

- XML による QCDml の設計と作用の木構造の実現
QCD 配位のメタデータのセットは、格子 QCD 研究の進展とともに拡大する。格子 QCD のシミュレーションで現在用いられている種々の格子作用は、基本的な格子作用から出発して、種々の物理的アイディアに基づいて順次改良されたものであり、今後も新たな格子作用が提唱されシミュレーションに用いられる可能性が高い。従って、QCDml は、既存の QCD 配位のメタデータを記述できるのみならず、将来提唱される作用への拡張が上位互換を保って実現できる必要がある。ILDG では、メタデータの記述言語の拡張が容易で、事実上の業界標準である XML 技術を用いて QCDml を策定することとした。種々の格子作用は、元的作用と改良された作用を繋ぐと木構造で表現できる。QCDml では、この木構造を XML-Schema のモデルグループの substitution の手法を用いて実現している。また、XML を採用することにより、QCDml をクォーク伝搬関数等のメタデータの記述へ拡張することも容易になる。

- メタデータ間・データ – メタデータ間の連携

QCDml では、メタデータベースの検索を容易にするため、ensemble とその ensemble に属する配位のメタデータを別々の XML ドキュメントで記述する。ILDG では、相互のドキュメント間及びメタデータと配位ファイルそのものの対応関係を保持する仕組みを、XML ドキュメントや配位に埋め込むタグで実現することとした。この仕組みは、将来 ILDG をクォーク伝搬関数等を含む様に拡張する際にも、有効である。

- Schema によるメタデータ記述の曖昧さの排除

ILDG では、配位の生成条件を記述する際、“同じものを同一の名称を用いて記述する” 事が必須であるが、格子 QCD のコミュニティでは、格子作用やシミュレーションパラメータに統一的な名称があるわけではない。QCDml では、もっとも標準的であると思われる名称を採用し、共通に用いることとした。異なった名称の誤用を避けるため、QCDml では、全ての名称を XML 要素で記述することにより、メタデータドキュメントがルールに従って記述されていることを検証できる様に設計した。

- 必要最小限の配位生成条件の記述

配位の生成条件は多種多様であるが、QCDml で記述する必須の生成条件は“配位や ensemble を検索する意味のあるメタデータ” に限り、配位を提供するグループ固有の情報は、別途、グループ毎に準備するドキュメントに纏めることとした。

- 配位とメタデータの素姓と履歴の記述

QCDml では、配位生成条件に加えて、その配位を誰（どのグループ）が何時如何なるプロジェクトで生成したを記述することとした。また、必要に応じて、schema の変更履歴を記録することとした。

3.2.4 QCDml の概要

ILDG メタデータワーキンググループの活動の成果は、QCDml Schema であり、以下の URL にて格子 QCD コミュニティに公開されている。

<http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensemble1.3/QCDmlEnsemble1.3.0.xsd>

<http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3/QCDmlConfig1.3.0.xsd>

前者は ensemble を記述する schema で、後者は配位を記述する schema である。

Ensemble schema は、markovChainURI 要素、management 部、physics 部、algorithm 部から構成される（図 1 参照）。一方、配位 (configuration) schema は、management 部、implementation 部、algorithm 部、precision 要素、markovStep 部から構成される（図 2 参照）。本報告書では、QCDml の各部の概要と特筆すべき事項を述べるにとどめる。詳細は、成果物として添付する上記 URL の schema、schema ドキュメント、及び QCDml ドキュメントサンプルを参照されたい。

Ensemble schema: markovChainURI 要素

markovChainURI 要素は、ensemble に付与されるタグを記述する要素である。タグ名の形式は、

mc://collaboration 名/collaboration 依存 path 名

である。タグは、ensemble に属する配位のメタデータドキュメントの <markovStep/markovChainURI> の値と一致させ、ensemble と configuration の対応を保持する。

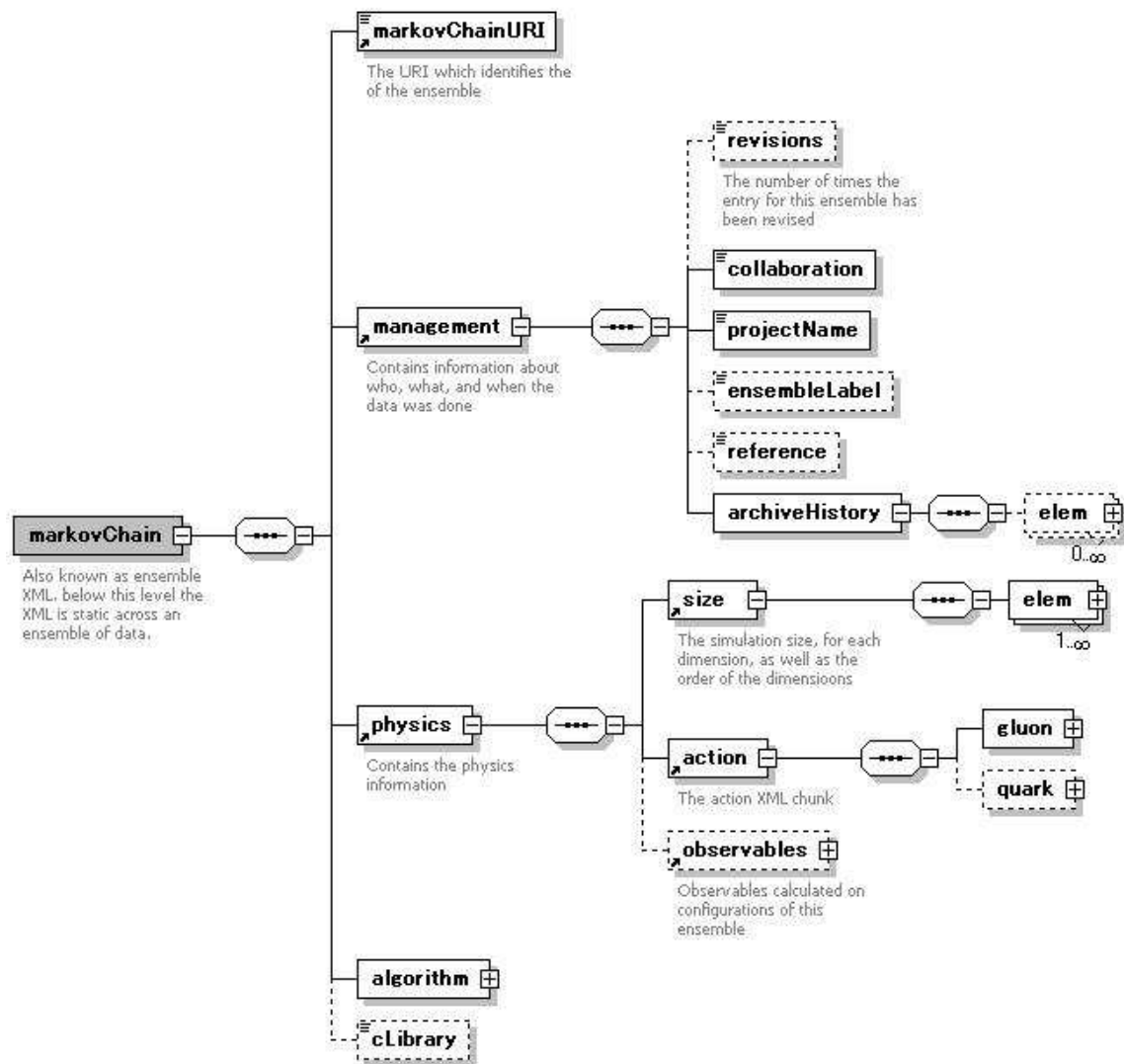


図 1: ensemble schema の構成図

Ensemble schema: management 部

management 部は、ensemble の素姓と履歴を記録する。当該 ensemble を生成した collaboration 名、プロジェクト名、文献、メタデータベースへの登録日などの履歴情報が記述される。

Ensemble schema: physics 部

physics 部には、ensemble 生成の物理条件、つまり、格子サイズ、gluon 作用（名称、境界条件、結合定数等）quark 作用（名称、境界条件、quark 数、質量パラメータ等）の情報が記述される。前節で述べたように、格子作用は schema レベルで木構造をもつ。現時点で記述可能な作用を木構造とともに、図 3 に示した。図 4 は、典型的な格子作用の記述構造図である、また、physics 部には、ensemble の基礎物理量（ π , ρ 質量比等）をオプションとして記述することができる。

Ensemble schema: algorithm 部

シミュレーションに用いられた algorithm を記述する。Algorithm は多種多様であり、その詳細を

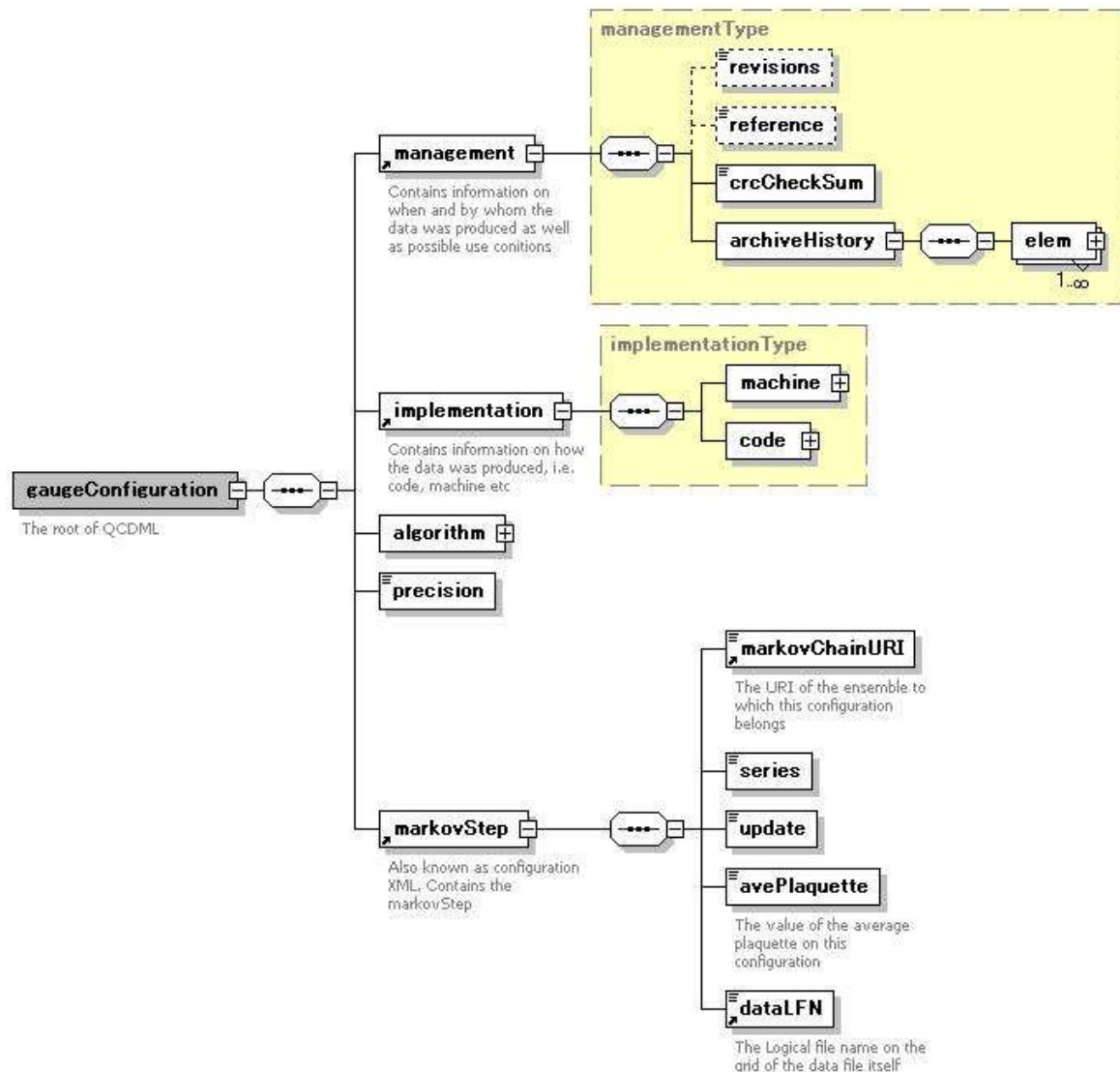


図 2: configuration schema の構成図

統一的に記述するのは不可能であるので、QCDml では、algorithm 名称、文献、厳密な algorithm が否か、のみを必須の情報として記述する。その他の付加情報は、グループの必要に応じて、名称値のペアか任意タイプで記述する。

Configuration schema: management 部

Configuration schema の management 部には、その配位の生成者・生成日、ILDG への登録者・登録日などの履歴情報と、配位の checksum が記述される。

Configuration schema: implementation 部

配位生成に用いられた計算機や、シミュレーションプログラムの情報が記述される。

Configuration schema: algorithm 部

Algorithm のうち、配位依存な情報が記述される。Algorithm のどの情報を ensemble/configuration ドキュメントのどちらに記述するは、colloboration の選択にまかされる。

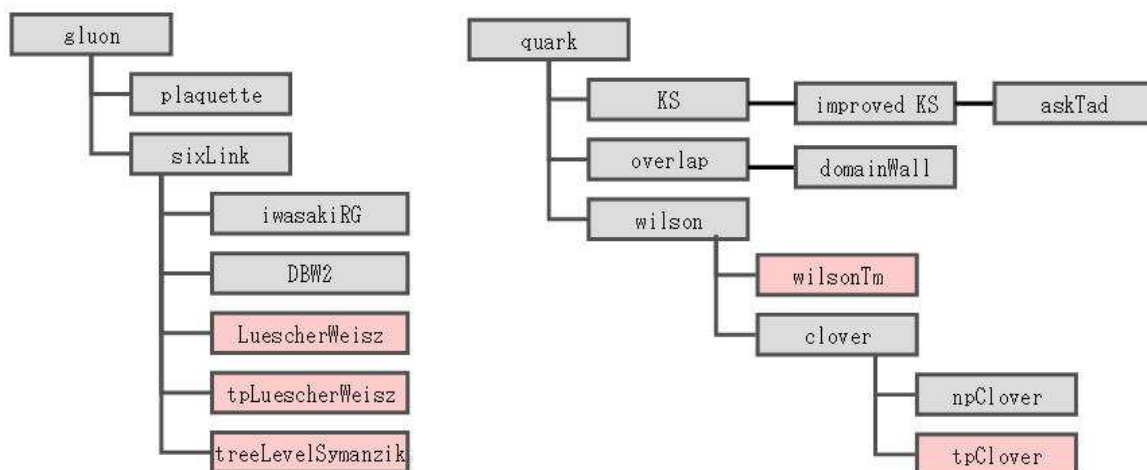


図 3: QCDml1.3.0 で記述可能な gluon 作用 (左) と quark 作用 (右)

Configuration schema: precision 要素

配位生成時の計算精度が記述される。

Configuration schema: markovStep 部

markovStep 部は、その配位が属する ensemble の markovChainURI、ensemble 内の位置情報、配位の plaquette の値、及び、配位を特定するタグ dataLFN (data logical file name) が記述される。タグ名の形式は、

lfn://collaboration 名/collaboration 依存 path 名

である。タグは、次章『データバイナリフォーマット』で述べる様に、配位ファイルに埋め込まれる。これによって、ILDG で配布される配位から逆に配位のメタデータを検索する手段を与える。

3.3 ファイルフォーマット

3.3.1 経緯と経過

ILDG に保管され共有される QCD 配位は、ILDG ユーザーが配位を正しく読み取れる様、特定の規則に従ってファイル中に保持されなければならない。ILDG の配位フォーマットは、主として、メタデータワーキンググループで議論された。

2003 年 7 月に策定された QCDml のドラフト版では、既に多くのグループが自前のファイルフォーマットで配位を保管しており、それらを標準のフォーマットに変換するコストは膨大であることを考慮して、

- ILDG の標準フォーマットは抽象的なものであり、実際のフォーマットはグループ毎に異なっていて構わないこと
- 配位の提供者は、自前のフォーマットで保管されたファイルから標準フォーマットで配位を読み出すライブラリを提供すること

が、提案された。

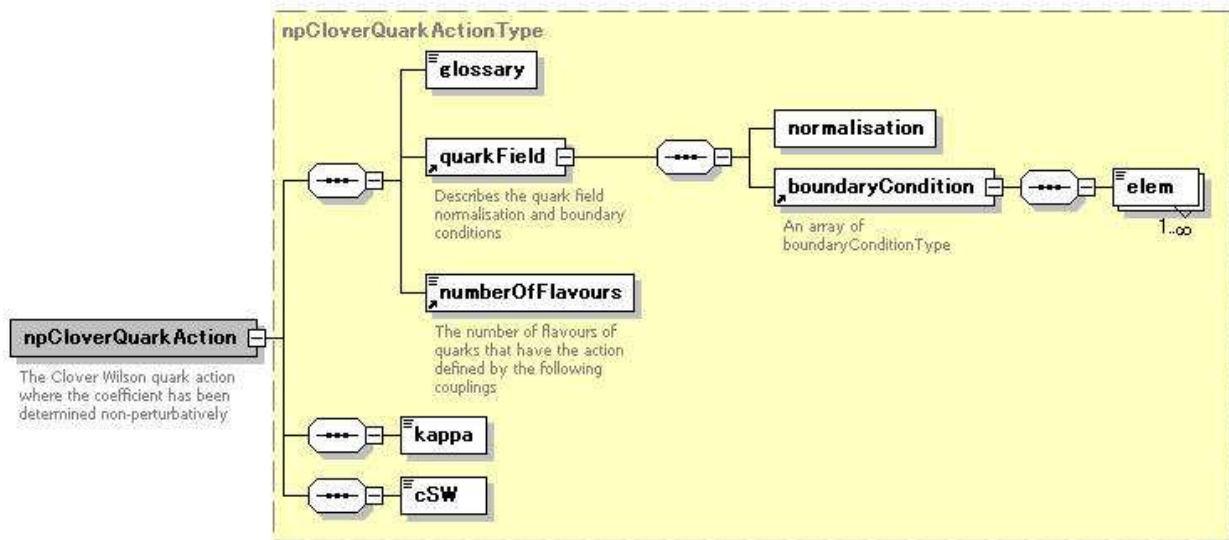


図 4: 非摂動的に $O(a)$ 改良された Wilson-Clover quark 作用の記述構成図

その後、1) 全てのプラットフォームと全ての計算機高級言語に対応したライブラリの作製は容易ではないこと、2) ファイルとライブラリの組を常にセットで取り扱うことはユーザーには負担が大きいこと、等が議論され、ILDG では、

- 全ての配位を標準フォーマットに変換し保管すること

が合意された。標準フォーマットは、ミドルウェアワーキンググループのメンバも加えて議論を重ね、2005 年 5 月開催の第 6 回 ILDG ワークショップに提案され、承認された。

3.3.2 ILDG 配位フォーマットの概要

パッキング 配位ファイルは配位のバイナリデータを保持するのみならず、

- 配位ファイルから、その出自を辿れる仕組みを提供し
- 配位ファイルに記録されたメタデータ以外のデータを参照することなく、バイナリデータを読み込むことを可能にする

必要がある。これを実現するため、ILDG では配位ファイルに、配位のタグである `dataLFN` (logical file name) と、格子サイズやバイナリデータの精度等のデータを読み込む際に必要となる最低限のメタデータ (format metadata) を埋め込むこととした。

データとメタデータのパッキングには、SciDAC で開発された LIME (Lattice QCD Interchange Message Encapsulation) を用いる。LIME は、複数の ASCII やバイナリデータをレコードとして保持し、各レコードをファイルをアンパックすることなく取り出す仕組みを提供する。また、提供されている C 言語のライブラリを用いることにより、ユーザーの物理量測定プログラムから直接配位のバイナリデータを読み込むことも可能である。

message	record	LIME record type
#1
...
#n
	#i	ildg-format

	#j	ildg-binary-data

...
#m	#1	ildg-data-lfn
...

図 5: ILDG 配位ファイルのフォーマット

ファイル構造 LIME の一ファイルは、一つの又は複数のメッセージから構成され、一つのメッセージは、一つの又は複数のレコードから構成される。図 5 に、QCD 配位のメッセージ/レコードの構成を示した。バイナリデータ、format metadata、dataLFN は、図に示したレコードタイプを持つ。

ILDG の QCD 配位ファイルには、上記の dataLFN と format metadata に加えて、配位提供者の利便の為、配位提供者独自の情報をパックできる。配位提供者独自のレコードは ... の位置に置くことができ、レコードタイプの最初のダッシュ (‘-’) までは配位提供者の namespace を表す。

その他のファイル構造規則の詳細は、成果物として添付する文書 “ILDG Binary File Format (Rev.1.1)” 参照のこと。

ildg-format レコード ファイルフォーマットメタデータは、上述の様に格子サイズやデータ精度を Format Schema に従って記述した XML ドキュメントである。下の例に示した様に、SU(3) ゲージ群の配位データ以外への拡張を想定し、<field> 要素を記述することとした。なお、Format Schema は成果物として添付する。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<ildgFormat xmlns="http://www.lqcd.org/ildg"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://www.lqcd.org/ildg/filefmt.xsd">
  <version> 1.0 </version>
  <field> su3gauge </field>
  <precision> 32 </precision>
  <lx> 20 </lx> <ly> 20 </ly> <lz> 20 </lz> <lt> 64 </lt>
</ildgFormat>
```

ildg-data-lfn レコード このレコードは dataLFN を表す一つの string であり、対応する配位 XML ドキュメントの <dataLFN> 要素の値と一致しなければならない。

ildg-binary-data レコード このレコードは配位のバイナリデータである。SU(3) ゲージ配位は 4 次元超立方体のリンク上に定義された SU(3) 行列の組である。 $x(n)$ を格子点 $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ でのクォーク場とすると、

$$x^\dagger(n)U_\mu(n)x(n+\hat{\mu}) \equiv \sum_{a,b=1}^3 [x^\dagger(n)]_a [U_\mu(n)]_{ab} [x(n+\hat{\mu})]_b \quad (1)$$

がゲージ不変となる様、配位 $[U_\mu(n)]_{ab}$ が定義される。

配位は 8 (7) 次元の浮動小数点実数 (複素数) の配列に保持される。配列のインデックスは、ゆっくり変化する順に (括弧内は C-style のインデックス) 以下の通りとする。

1. 時間方向のサイトインデックス t ($t = 0, \dots, NT - 1$)
2. z 軸方向のサイトインデックス z ($z = 0, \dots, NZ - 1$)
3. y 軸方向のサイトインデックス y ($y = 0, \dots, NY - 1$)
4. x 軸方向のサイトインデックス x ($x = 0, \dots, NX - 1$)
5. 方向のインデックス μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$: この順に x, y, z, t 方向を表す)
6. color のインデックス a ($a = 0, 1, 2$)
7. color のインデックス b ($b = 0, 1, 2$)
8. (実部 (0) 虚部 (1) のインデックス ir ($ir = 0, 1$))

対応する C の配列宣言 (C 言語では、右のインデックスから早く走る) は、

```
double U[NT][NZ][NY][NX][NDIMENSION][NCOLOR][NCOLOR][2];
```

となり、Fortran (左のインデックスから早く走る) では、

```
complex U(NCOLOR,NCOLOR,NDIMENSION,NX,NY,NZ,NT)
```

となる。

各実数は、IEEE の浮動少数点実数の 32bit/64bit フォーマットで書かれ、byte order は bigendian とする。

3.3.3 チェックサム

ILDG では転送されたファイルが壊れていないことをチェックする仕組みが必要である。このため、配位提供者は、配位のバイナリデータ部の 32bit CRC チェックサムを計算して、対応する配位メタデータの <management>/<crcChecksum> 要素に記録することとした。LIME でバックされたデータをアンパックすることなくチェックサムを計算するツールが提供されている。

3.4 ILDG ミドルウェア

3.4.1 ILDG ミドルウェア設計の基本方針と経緯

ILDG のミドルウェア開発は Middleware Working Group を設置して行われた。メンバーは表 10 に掲げたとおりである。まず基本方針の検討を行い、グループ基本方針として、地域毎に構築する QCD データグリッドを連携するために、以下の方針をとることになった。

- 連携するためのインタフェースとして、グリッド分野で標準的なインタフェースとなっている web サービスを用いる。
- 基本的なアーキテクチャと構成要素について決め、その間のインターフェースのみを定義することをワーキンググループで決定し、実装については各拠点に任せる。
- もちろん、共通に使えるソフトウェアの開発については推奨し、その普及については支援を行う。

以上のように、分担して開発するといった強い連携ではなく、インタフェースを設計、決定することを主な作業とすることによって緩い連携が可能になり、同時にそれぞれのサイトの事情に合わせたシステムとすることができるようになった。

Middleware Working Group では、定期的な ILDG ワークショップでの議論・報告の他に、メールでの議論を進め、さらに詳細検討のための技術検討ワークショップを行った。第一回目は 2004 年 10 月に Edinburgh にて、また第二回目は 2005 年 10 月に筑波大にて開催し、設計並びに仕様決定の作業を進めた。

日本においては、筑波大計算科学研究センターにて、国立情報学研究所 (NII) の委託を受けて、ILDG ミドルウェアの基本設計と開発を行った。

3.4.2 ILDG ミドルウェアのコンポーネント

共有するデータとしては、次の 3 種類のものがある。

- ensemble metadata : ensemble とは、ある特定の物理条件や計算のアルゴリズムを指定するもので、それを QCDML で記述したメタデータ。
- configuration data : ある ensemble において、格子サイズ、乱数の系列等を指定して計算した結果のファイル
- configuration metadata: configuration data を QCDML にて記述したメタデータ (QCDml については、QCDml の章を参照のこと。)

ILDG を構成するサイトには、上記の QCD データに対して、以下の 3 つのコンポーネントを設置する。それぞれのコンポーネントには web サービスのインタフェースが定義されており、これを用いてアクセスする。

- MDC(Meta Data Catalog): QCDML で記述されたメタデータを検索するための Web サービス。Xpath また SQL を用いて、メタデータを検索する。ensemble の検索結果としては、ensemble ID、configuration の検索結果としては configuration ファイル (計算結果) に対する LFN(logical file name) などの情報が得られる。LFN とは、データグリッド中に存在する configuration データファイルに関する論理的なユニークな名前である。MDC の定義については添付ドキュメントを参照のこと。
- RC(Replica Catalog): LFN に対応する Replica の URI のリストを返す Web サービス。LFN に対応するファイルの実体は複数存在することがあり、これを Replica とよぶ。これを SURL(Site URL) という。ここで返される URL は、下記の SRM の URI でもいいが、実際の転送するための http や ftp の URL でもよい。

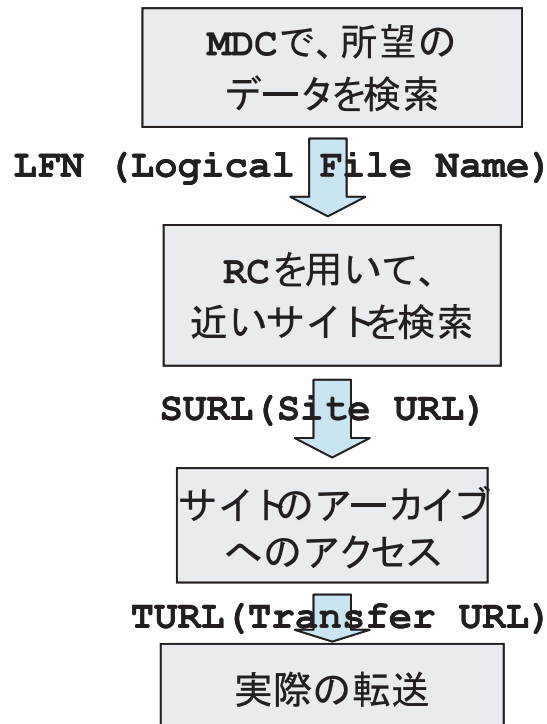


図 6: ILDG のコンポーネントと一般的なアクセスフロー

- SRM(Storage Management System): データアーカイブなどから、データとりだし転送をセットアップするためのサービス。URI の一つとして、用いられる。SRM の URI は、ftp などの実際の転送の TURL(Transfer URL) に変換され、実際の転送はそのプロトコルで行われる。

MDC と RC は必須であるが、RC から返される URI は直接、ftp や http などの実際の転送の URI でもいいため、SRM はオプションとなる。

図 6 に、SRM を使わない場合の一般的なフローを示す。

3.4.3 ILDG のソフトウェアモデル

上記のコンポーネントに対し、ユーザは大きく分けて 2 つの方法で利用することになる。

- ユーザが、直接 MDC や RC などの web service にアクセスするアプリケーションプログラムを作成し、利用する。
- web サーバが、MDC や RC などのコンポーネントにアクセスし、web ブラウザからの利用を可能にする。

特に、後者の場合、web サーバの中にあるプログラムが MDC や RC の web サービスのクライアントになるため、サーバサイドクライアントとよばれ、このようにして web ブラウザを通じてサービスを提供するモデルを、3 層モデル (three-tier model) と呼ぶ。これを図 7 に示す。ユーザは web ブラウザで検索などをしたあと、configuration データを転送する。

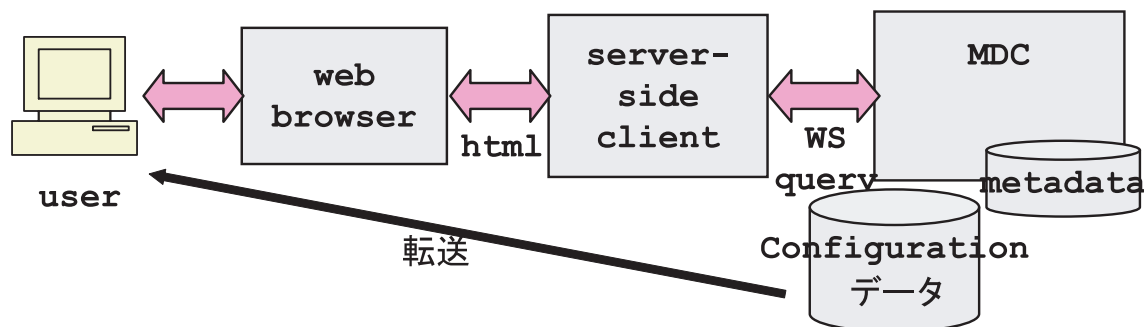


図 7: ILDG の web ブラウザからの利用：3 層モデル

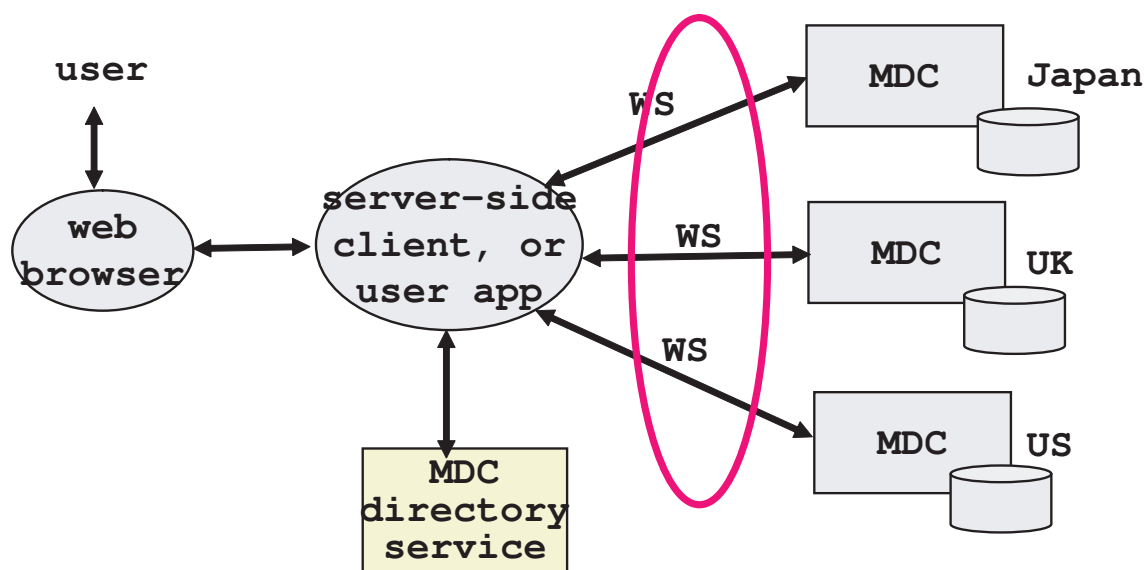


図 8: ILDG サイトの連携

3.4.4 ILDG サイトの連携と利用

ILDG のサイトは、それぞれ、自サイトにあるデータに関して、上記の web サービスを提供する。ILDG のメインサイト ildg.org では、各サイトに関する情報を (http にて) 取り出すことができ、クライアントアプリケーションはこの情報から、それぞれのサイトの web サービスにアクセスすることになる。

複数のサイトがある場合の連携について、図 8 に示す。ユーザは、MDC に直接アクセスするアプリケーションもしくは、サーバサイドクライアントを用いて、それぞれのサイトの web サービスにアクセスし、各国のサイトにあるデータへの情報を取得することになる。

3.4.5 認証について

認証については、メタデータへの検索時には行わず、実際の configuration データの取得時に行うことになった。すなわち、MDC などでのメタデータの検索や RC による URI の取得などの Web サービスへのアクセスは公開し、認証は行わなくてもよい。Web サービスへの認証が必要な場合

には、https などを用いて、コネクションベースの認証を使うことにする。

実際の configuration データを取得する場合に、グリッドの標準的な認証方法である公開鍵 (PKI) による認証方法を標準として、グリッドのファイル転送のツールである gftp 等を用いる。

web サービスについての認証方法については、現在様々な方法がグリッド分野において提案されているが、今後、技術動向を見て検討していくことになった。

3.4.6 現在の状況

RC と SRM に関しては、FNAL、JLab 等の米国の研究機関、CERN 等のヨーロッパの研究機関で、高エネルギー素粒子実験のデータグリッドに使われているものであり、web サービスの定義はそれに準ずる。また、MDC のインタフェースについては、2005 年の筑波大でのミドルウェアワーキンググループのワークショップで大枠がきまり、2006 年 3 月にほぼ決定、4 月には相互運用の実験を行っている。

2006 年 5 月の ILDG ワークショップにて、最終的な合意をもって、実験的な運用を開始する予定である。

3.5 Lattice QCD Archive

3.5.1 LQA の概要

LQA (Lattice QCD Archive) は、筑波大学計算科学研究センターで公開している格子 QCD 計算のためのデータベースである。ILDG への展開を視野にいれ、2003 年 12 月より ILDG のプロトタイプとしてを構築し運用してきた。

その特徴を挙げる。

- ILDG の標準化の初期段階のメタデータとコンフィグレーションのデータを格納し、web ブラウザからメタデータに対して検索を行い、条件にあったデータを取得することができる。
- 条件検索に関しては、ILDG の標準的な検索方法である Xpath によるメタデータの検索の他に、筑波大計算科学研究センターで公開するデータに関して、対話的に条件検索ができるユーザインタフェースを提供している。
- 検索されたデータを一括して、ダウンロードすることができる。
- ユーザ登録を行い、登録されたユーザにたいしては、コンフィグレーションをダウンロードする時点で認証を行う。

図 9 に対話検索機能の画面を示す。格納されているデータの選択肢が示され、ユーザはインタラクティブに条件を絞って、検索していただくことができる。

検索結果が絞られた時点で "List Data" というタブを選択することにより、現在のリストが示される。その一例を図 10 に示す。個別にダウンロードする場合には、所望のデータにマーク、あるいは全部を選択して、これに対するダウンロードするコマンドスクリプトを生成する。これを、ファイルに保存し、実行させることにより、一括してダウンロードすることができる。なお、このデータをダウンロードする段階で登録によって提供させるアカウントが必要となる。

3.5.2 LQA に格納されているデータと運用状況

現在 LQA には超並列計算機 CP-PACS により生成されたフレーバー数 2 の動的なクォークの効果を含む configuration がアーカイブされ、公開されている。データのパラメータとデータ数を表 12 に示す。表 13 に平成 16 年 6 月以降のダウンロードファイル数を示す。

また、CP-PACS Collaboration と JLQCD Collaboration が協力して生成を続けてきた $N_f = 2+1$ QCD の配位の生成も一区切りがついており、平成 18 年夏過ぎを目処に世界公開すべく準備が進められている。

β	lattice	c_{SW}	$a(\text{fm})$	$La(\text{fm})$	m_{PS}/m_V for sea quarks # trajectories			
1.80	$12^3 \times 24$	1.60	0.2150(22)	2.580(26)	0.807(1)	0.753(1)	0.694(2)	0.547(4)
					6250	5000	7000	5250
1.95	$16^3 \times 32$	1.53	0.1555(17)	2.489(27)	0.804(1)	0.752(1)	0.690(1)	0.582(3)
					7000	7000	7000	7000
2.10	$24^3 \times 48$	1.47	0.1076(13)	2.583(31)	0.806(1)	0.755(2)	0.691(3)	0.576(3)
					4000	4000	4000	4000
2.20	$24^3 \times 48$	1.44	0.0865(33)	2.076(79)	0.799(3)	0.753(4)	0.705(5)	0.632(7)
					2000	2000	2000	2000

表 12: CP-PACS $N_f = 2$ configuration data

月	年	ファイル数
June	2005	2251
July	2005	5931
August	2005	4688
September	2005	683
October	2005	2
November	2005	0
December	2005	725
January	2006	1147
February	2006	1136
March	2006	925

表 13: LAQ 月あたりダウンロードファイル数

3.5.3 LQA の今後

現在、ILDG のミドルウェアの開発がほぼ終了しており、これを用いた LQA も開発した。ILDG の運用がはじまり次第、ILDG のミドルウェアをベースにしたものに移行する予定である。これ

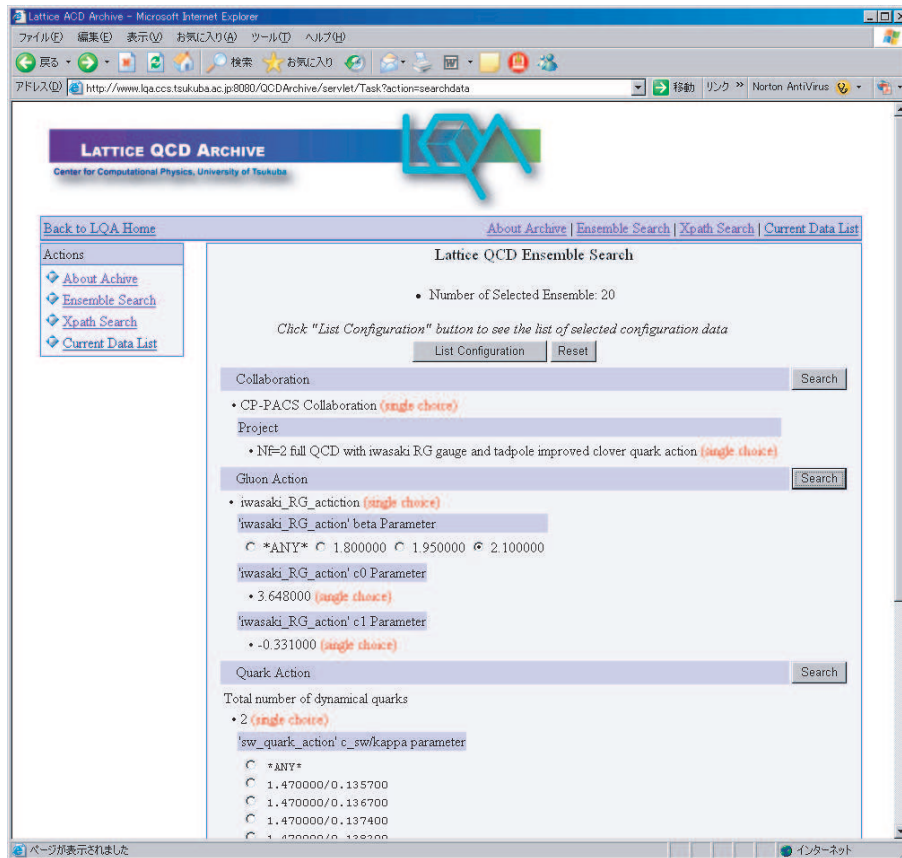


図 9: LQA の対話検索機能のスナップショット

により、同じインタフェースで各国のデータベースを検索できることが期待される。

3.6 HEPNET-J/sc と Japan Lattice Data Grid

3.6.1 目的と経緯

ILDG は地域毎に構築する QCD データグリッドを繋ぐ、所謂 “Grid of Data Grids” である。JLDG (Japan Lattice Data Grid) は、日本の複数の格子 QCD 研究グループがデータを共有する為のデータグリッドとして構築し、その一部を ILDG を通じて世界に公開する機構を備える。

筑波大学計算科学研究センターでは、ILDG の日本グリッドのプロトタイプとして LQA (Lattice QCD Archive) を 2003 年 12 月に構築し運用してきた。これとは独立に、日本の格子 QCD 研究グループでは、高エネルギー物理学用の計算機ネットワークの一部として、ファイル共有の為の専用ネットワーク Hepnet-J/sc を 2002 年から運用してきている。JLDG は、Hepnet-J/sc の運用上の問題点を解消し、LQA を ILDG の標準に合致する様改編した上で、両者を結合したデータグリッドとして構築された。

JLDG は、2005 年 11 月に基本構想の合意がなされ、国立情報学研究所 (NII) の委託を受けて、その基本設計を筑波大学計算科学研究センターがおこない、実際のシステム構築を外注して 2006 年 3 月に小規模システムが完成した。なお、現在、JLDG プロジェクトには、筑波大学、高エネルギー加速器研究機構 (KEK)、京都大学、広島大学の各機関が参加している。

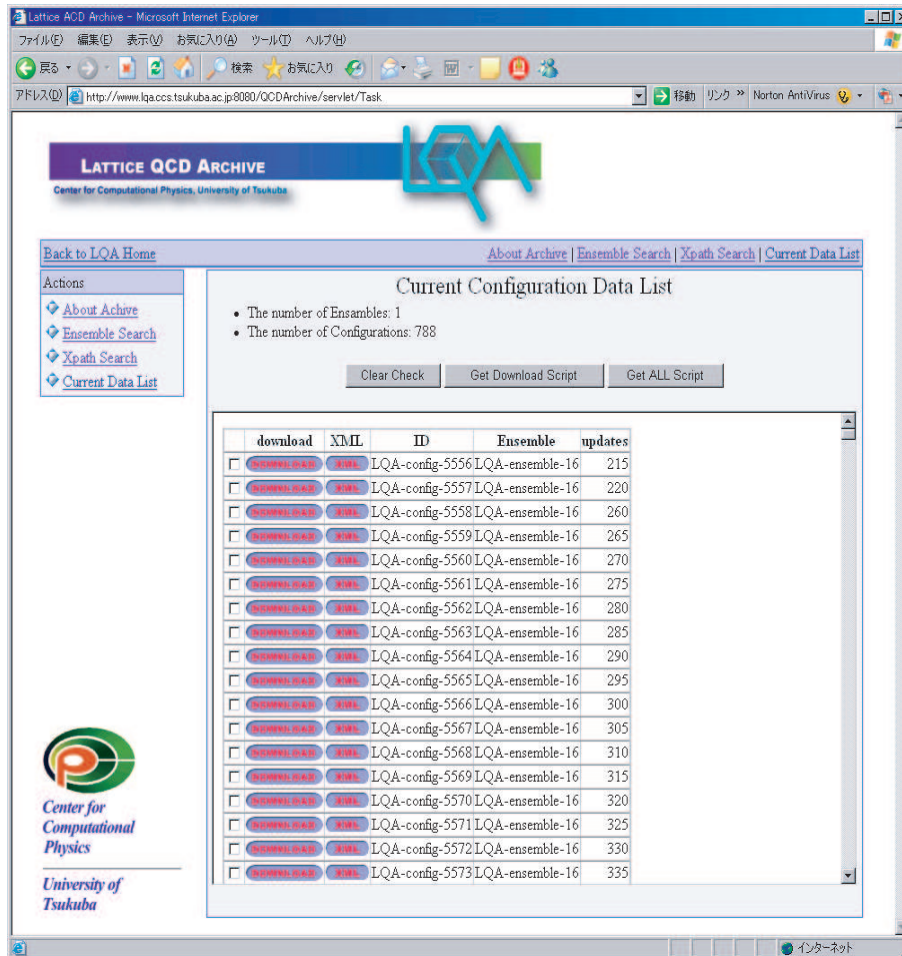


図 10: LQA の検索結果の表示 / ダウンロードのスナップショット

3.6.2 Hepnet-J/sc

Hepnet-J/sc は、2002 年から国内の格子 QCD 研究グループが運用している広域分散型のファイルミラーリングシステムである。バックボーンとして、NII 設置の Super SINET Gigabit 専用線・MPLS 接続線を束ねた KEK をハブとするプライベートネットワークを用い、各拠点に置かれた NAS 間で、データを定期的（一日に数回）にミラーすることにより、ファイルの共有を実現している。各拠点では、格子 QCD 計算に使われるスーパーコンピュータが NAS のファイルシステムをマウントしており、ある拠点で生成された QCD 配位を用いて別拠点で解析することを可能にしている。図 11 に、Hepnet-J/sc ファイルミラーリングの概念図を示した。2005 年末現在で、図 12 に示した 6 拠点が Hepnet-J/sc に接続しており、NAS の総容量は 60TB に及ぶ。

Hepnet-J/sc によるファイルミラーリングは、国内の複数の格子 QCD グループの研究の推進におおいに寄与してきた。特に、最近の国内の格子 QCD 研究の最大のプロジェクトである『近似なし格子 QCD シミュレーション研究』では、Hepnet-J/sc による KEK, 筑波大学, 広島大学間のファイル共有によって、研究の進捗が大幅に加速された。

このように Hepnet-J/sc は有効に利用されてきたが、長期間運用を続け多くのデータが蓄積されるにつれ、以下の様な幾つかの問題点が明らかになった。

- 一纏まりのデータが複数のディスクに分散

格子 QCD のシミュレーションでは、一つのパラメータで生成される一連のデータはしばしば数 TB の規模に達するが、Hepnet-J/sc に接続された NAS 群のディスク/パーティションは最大 1TB-2TB であるので、複数のディスクに分散して保管せざるを得ない。データの増大に伴って、どのデータがどのディスクに保管されているかを人手で管理するのが困難になった。

- ミラー元ミラー先の対応の管理が困難

国内には複数の格子 QCD 研究グループがあり、構成メンバーも複数の拠点に散らばっており、各グループは複数の研究プロジェクトを推進している。従って、Hepnet-J/sc では多数のミラー元ミラー先の対応関係が存在する。ミラーリングの設定は管理者が行っているが、ユーザーのニーズに従ってきめ細かくミラーリングを設定しようとすると、ミラー元ミラー先の対応関係の管理コストが膨大になる。

- ユーザーがオンデマンドでデータを転送する手段がない

格子 QCD 研究では配位データを生成拠点とは別の複数の拠点で、物理量毎に、または配位毎に分担して解析する例は珍しくない。この状況に対応する為には、同一データセットのミラーを複数の拠点に保持する必要がある。ミラーされたデータは（バックアップのための一つのミラーを除いて）物理量計算後には不要になる。Hepnet-J/sc は、ユーザーの計算の進行にあわせてデータをミラーし、また不要なミラーを削除する機構を備えていない。

以上の問題点の大半は、Hepnet-J/sc の NAS を統合し『仮想的な単一の Unix 的パーティション』として運用できれば解決する。つまり、全てのデータは見掛け上同一のパーティションに存在し、ミラーはパーティション内の（実際は拠点間にまたがる）バックアップであり、ユーザー・グループは必要に応じて仮想パーティションから手元にデータをコピーできる。JLDG では、この『仮想的な単一のパーティション』的グリッドを実現することを主目的としてシステムの構築を行った。

3.6.3 JLDG の概要

ファイルシステム部 JLDG のグリッドファイルシステムは、産業技術総合研究所 (AIST) で開発された国産のグリッドデータファームソフトウェア Gfarm をベースに、認証機構を VOMS (Virtual Organization Membership Service) によって強化して、これをミドルウェアとして用いた。

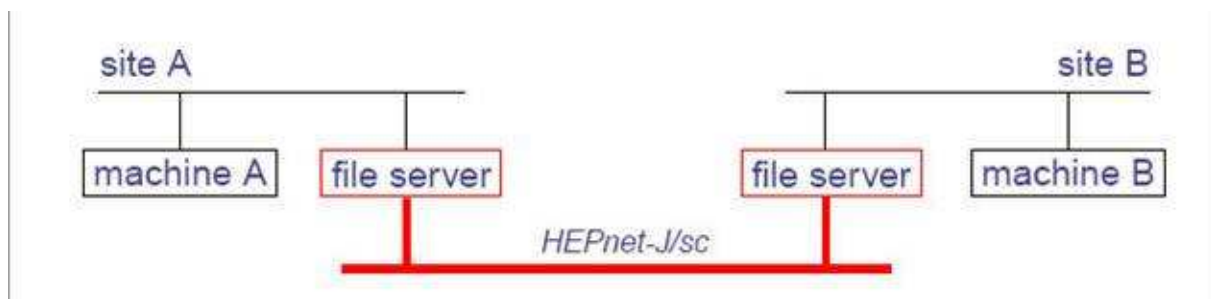


図 11: Hepnet-J/sc のファイルミラーリング概念図

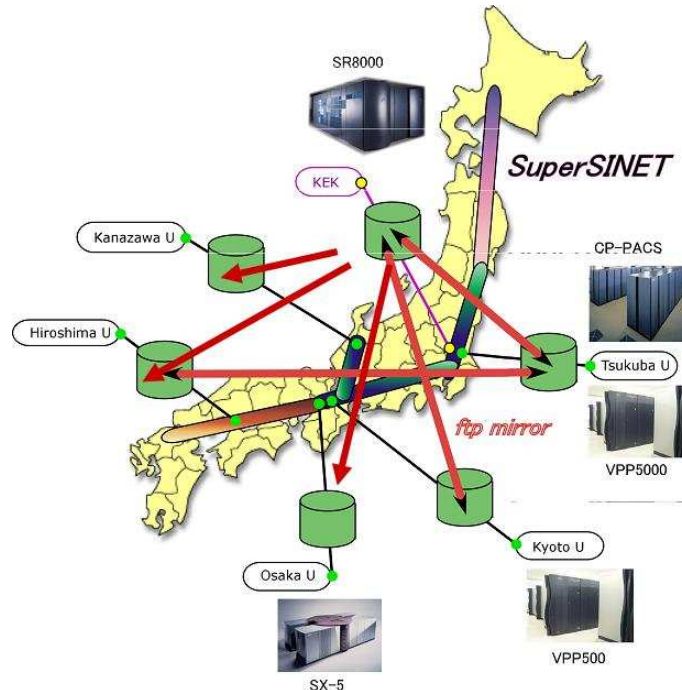


図 12: Hepnet-J/sc 参加機関とミラーリングの現状

図 13 に、JLDG ファイルシステムの構成概念図を示した。各拠点には Grid server を置き、Gfarm デモンを走らせる。Grid server はサーバのローカルディスクや各拠点の Grid NAS のディスクを束ね、拠点間の Grid サーバの連携により、Hepnet-J/sc 全体で単一のデータグリッドを構成する。ユーザーは Grid server にログインし、スーパーコンピュータがマウントするローカルな NAS と JLDG データグリッド間でファイルを自在にコピーできる。認証機構とファイル単位のアクセス制限によって、研究グループ外に非公開にすべきデータを保護することも可能である。また、Gfarm は、ファイルのミラーリングの機能を提供しているので、これを用いてデータの自動バックアップを実現する。

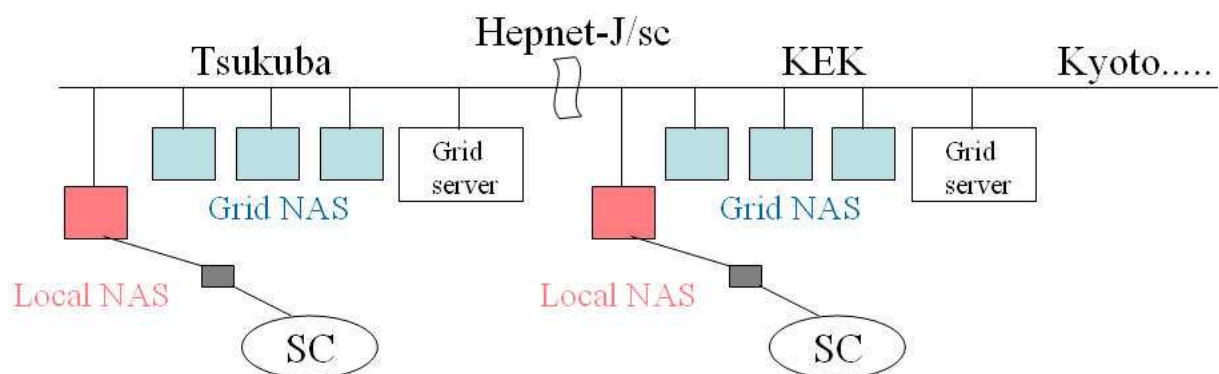


図 13: JLDG ファイルシステムの構成概念図

ILDG インターフェース部 JLDG の目的の一つは、日本の研究グループが生成した QCD 配位を ILDG を通して世界に公開するための gateway を構築することである。この目的のため、図 14 に示した様に、2 台のサーバ ws.jldg.org と www.jldg.org を筑波大計算科学研究センターに設置し、後者を JLDG のグリッドファイルシステムに接続した。

JLDG の ILDG gateway の概要は、以下の通りである。

- ws.jldg.org 上には、メタデータカタログ (MDC) とレプリカカタログ (RC) が置かれ、ILDG ミドルウェアワーキンググループが取纏めた Web Service の規約に従って、ILDG ユーザーからの QCD 配位の検索や、dataLFN からファイルの URL への変換要求に応答する。ファイルの URL は、www.jldg.org 上の http プロトコル `http://www.jldg.org....` で指定される。
- 一方、JLDG グリッド側では、ILDG に公開する QCD 配位をグリッドファイルシステムの一つのディレクトリツリー以下に置き、ILDG へのデータ提供用に特別に用意する ILDG 仮想ユーザーからの読み込み権限を与えておく。当該ディレクトリは、www.jldg.org のウェブサーバが公開するディレクトリとして設定される。つまり、ウェブサーバは公開用のディレクトリ以下に保管されたファイルを http プロトコルによってユーザーに転送する。

以上のように、Gfarm で構成された JLDG グリッドファイルシステムと ILDG を gateway を介して接続する方式の利点は、以下の通りである。

- ILDG に公開するファイルを管理する別途の仕組みが不要
ILDG に公開するファイルは、JLDG グリッドファイルシステムの一部であるので、ファイルの公開は、管理者 (又はユーザー) が公開するファイルを ILDG 公開用ディレクトリに置く (または移動する) だけで完了する。JLDG の通常の使用方法と何らかわる事なく作業できる。同時に、Gfarm の認証とアクセス制限機能によって、ILDG に公開しないデータを保護できる。
- ファイル転送用の別途のソフトウェアの開発が不要
Gfarm は、(一部の Unix システムでは) libc をフックすることによって、既存のアプリケーションを変更することなく、アプリケーションからグリッドファイルシステムのファイルに対する読み書きを可能にしている。このため、グリッドファイルシステムには (apache 等の) 既存のウェブサーバを使用できる。

3.6.4 JLDG の現状と実運用に向けて

JLDG は、2006 年 3 月の時点で、筑波大学と KEK の 2 拠点間を結ぶ小規模システムが稼働している。現在、2006 年 6 月の ILDG 運用開始に向けて、システムの調整・拡張作業とデータ (ILDG 規約に従った QCD 配位とそのメタデータドキュメント) の準備を行っている。

3.7 今後のスケジュール

2006 年 5 月 11 日には ILDG Workshop の第 8 回が開催の予定である。同会議において参加各国のミドルウェア及び公開予定 configuration の準備状況が報告され、最終的な調整の上、2006 年 6 月には ILDG が公式に運用を開始する。

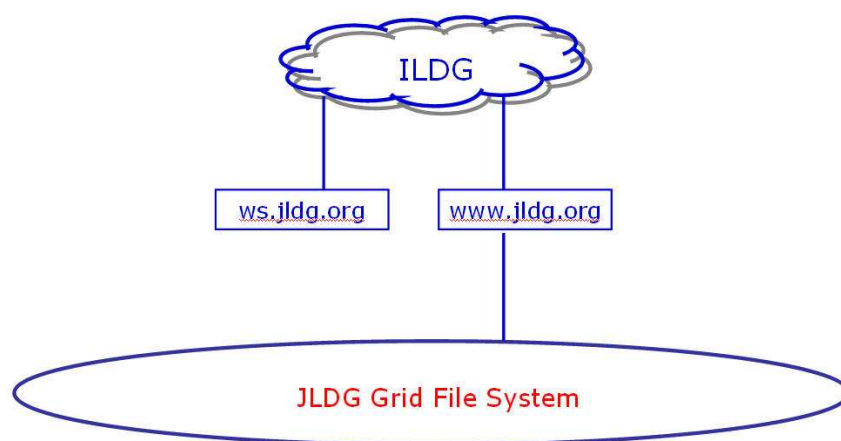


図 14: JLDG と ILDG の連携概念図

また、2006 年 7 月 23 日-28 日には 2006 年度格子上の場の理論国際会議が米国アリゾナ州 Tucson で開催予定であり、同会議において ILDG の状況を報告してその利用促進を図る予定である。

4 格子 QCD 研究の推進

本事業では、ILDG の構築と並行して、格子 QCD の研究を推進した。本分野においては、1Tflops クラスの計算機である超並列計算機 CP-PACS (筑波大学計算科学研究センターにて 1996 年に稼働) 及び QCDSF (米国コロンビア大学において 1998 年に稼働) などが開始して以降、クォークの動的真空偏極効果を取り入れた計算が本格的に進み始めた。特に最近は、三つの軽いクォーク up, down, strange の全てを動的に扱うシミュレーションが $N_f = 2 + 1$ 計算と呼ばれて、世界的な中心課題となってきた。

我が国においては筑波大学計算科学研究センターを中心とする CP-PACS Collaboration と、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) を中心とする JLQCD Collaboration においてこの方向の研究が行われ、2002 年からは協力して、Wilson-clover クォーク作用を用いた大規模 $N_f = 2 + 1$ シミュレーションを進めてきた。本事業期間中にもこの研究が推進され、その進捗の状況は本事業により開催されたセミナー等において適宜報告され、海外参加者からの意見等の有益なフィードバックがあった。また、生成されたグルオン配位は Lattice QCD Archive を通じて近日中に世界公開の予定で準備が進められている。

4.1 概要

本事業期間中に進められた中心的な研究項目は以下のとおりである。得られた物理結果の概要を次節以下に記す。

- $N_f = 2 + 1$ シミュレーションの実行
O(a) 改良された Wilson-clover クォーク作用とくりこみ群により改善されたグルオン作用を用いて u,d,s 三種類のクォークを動的に扱ったシミュレーションを実施した。本計算は膨大な計算量を必要とすることから、地球シミュレータ、KEK の日立 SR8000/100、筑波大学計算科学研究センターの CP-PACS 及び SR8000/12 を用いた。平成 15 年度からの 3 ヶ年にわたる計算により、三つの格子点でサイズ約 2fm の格子を用いたシミュレーションが実施された。
- $N_f = 2 + 1$ のハドロン質量スペクトル及びクォーク質量の計算
上記シミュレーションにより生成されたグルオン配位を用いてハドロン質量の計算が行われた。中間子については高い精度のデータが得られており、連続極限への外挿後実験との非常に良い一致が得られている。またクォーク質量については $N_f = 2$ の結果を追認し、クエンチ近似を大幅に下回る値が得られている。
- 重いクォークの計算
チャームクォーク、ボトムクォークを含む重いハドロンの性質は小林・益川・Cabibbo 行列の決定と素粒子標準模型の検証に重要な役割を果たす。このためには、各種の重いハドロン行列用要素 (D,B 中間子の崩壊定数等) が必要となる。相対論的な格子上での重いクォークの定式化を用いて D,B 中間子の物理量を計算すべく準備を開始した。

4.2 近似なし QCD のハドロン質量スペクトル計算

ハドロン質量スペクトル計算の次のステップは、軽い u, d クォークの対生成・消滅効果に加えて比較的重い s クォークの対生成・消滅効果をも取り入れた計算を実行することである。さらに重い c, b, t クォークの質量は QCD の典型的なスケール Λ_{QCD} より格段に大きいため、それらの対生成・消滅効果は充分小さいと考えられる。従って軽い u, d と比較的重い s の効果を取り入れた QCD ($N_f = 2 + 1$ QCD) 計算は、近似なしの QCD 計算とみなすことができる。

s クォークの対生成・消滅効果を取り入れたシミュレーションを実行するには、 $N_f = 2$ QCD 計算に用いられる従前の Hybrid Monte Carlo 法を拡張し、奇数個の動的クォークを厳密に扱う事が可能なアルゴリズムの開発が必要である。我々は、格子ディラック行列の逆に対する多項式近似と動的クォーク効果を表すディラック行列の行列式に対するメトロポリス法を組み合わせた Polynomial Hybrid Monte Carlo アルゴリズムプログラムを開発し、これを動的 s クォークのシミュレーションに用いた。

荒い格子上の計算から信頼できる連続極限でのスペクトラムを求めるため、グルーオンに対しては繰り込み群によって改良したゲージ作用を用いた。標準ゲージ作用を用いた場合、 $N_f = 2 + 1$ QCD に bulk な一次相転移が存在し、連続極限が取れない可能性があることも、改良したゲージ作用を採用した理由の一つである。クォークに対しては、クローバクォーク作用を採用し、改良係数を非摂動的に決め [3] 用いた。従って、我々の採用した作用では格子による離散化 (格子間隔 a) に起因する系統誤差は $O(a^2)$ である。

我々は、格子の物理サイズをほぼ一定 $La \approx 2$ fm に取って、3つの格子間隔 $a \approx 0.07, 0.10, 0.122$ fm (a^2 でほぼ等間隔) でシミュレーションを行った。各格子間隔に対して、 u, d クォークについては $m_{PS}/m_V \sim 0.60 - 0.78$ の範囲の 5つの質量パラメータを、 s クォークについては $m_{PS}/m_V \sim 0.7$ 程度の 2つの質量パラメータを採用し、都合 10組の (m_{ud}, m_s) に対してハドロン質量を決定し、 π, ρ, K (K -input) 又は π, ρ, ϕ (ϕ -input) 中間子の質量の実験値をインプットし、他のハドロンの質量の予言値を導いた [4]。

数値シミュレーションは、CP-PACS のみならず、計算科学研究センターフロント計算機、学術情報メディアセンター VPP5000 (以上筑波大学)、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) SR8000 及び地球シミュレータを用いて行った。また QCD 配位データは 国立情報学研究所設置の Super SINET 上に構築した 広域分散 NAS システムを用いて 筑波大学、KEK、広島大学で共有し、各拠点で分担して解析を行った。解析には 東京大学 SR11000 も援用した。

図 15 に、中間子質量の格子間隔依存性と連続極限への外挿を示した。(各格子間隔で、 K -input 及び ϕ -input で決めた格子間隔の値は統計誤差の範囲で一致する。) 図からわかる様に、中間子質量の格子間隔 (a) 依存性は、理論予想通り a^2 に比例し、連続極限での値は実験値と無矛盾である。我々は、格子間隔 0.10 fm の格子に対し別途物理サイズ $La = 1.6$ fm のシミュレーションを実行している。その結果と物理サイズ $La = 2.0$ fm での結果の比較から、有限サイズ効果は、連続極限での統計誤差と同程度であると見積もっている。また、2種類の軽い u, d クォーク質量に関する外挿 (カイラル外挿) の比較から、カイラル外挿に起因する系統誤差は大きくないと予想している。従って、この計算で得られた中間子質量の予言値は近似無しの QCD に於ける系統誤差の小さい結果であると期待され、これが実験値と良く一致する事は、QCD が低エネルギー領域で正しい理論である事を強く指示する結果であると考えられる。ただし、 $N_f = 2 + 1$ QCD の中間子質量と $N_f = 2$ のそれは、前者の誤差が大きいため有意な差を見いだすことは出来なかった。中間子質量の動的 s クォーク質量依存性を調べる事は今後の研究課題の一つである。

図 16 に、重粒子質量の格子間隔依存性と連続極限への外挿を示した。連続極限での値は統計誤

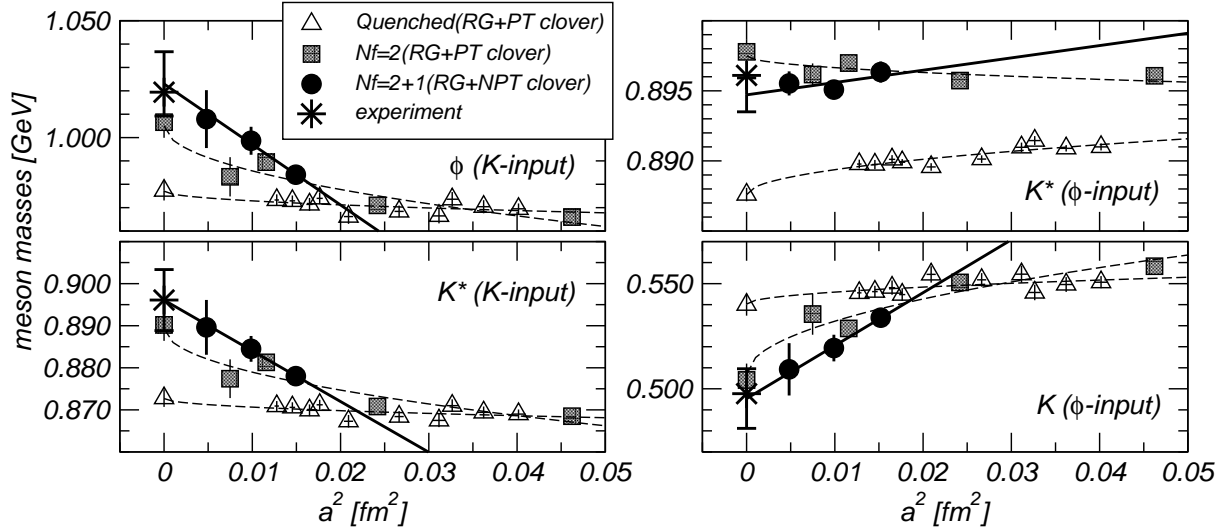


図 15: $N_f = 2 + 1$ の近似無し QCD 計算による，中間子質量の連続極限 [4]. s クォーク質量のインプットとして K 中間子質量を用いた場合 (左) と， ϕ 中間子質量を用いた場合 (右) の結果を示した. 比較の為，クエンチ QCD と $N_f = 2$ QCD の結果も載せた [1, 2]. $a^2 = 0$ の星印は実験値である.

	$m_{u,d}$ (MeV)		m_s (MeV)	
	(K より)	(ϕ より)	(K より)	(ϕ より)
quenched QCD	$4.29(14)^{+0.51}_{-0.79}$		$113.8(2.3)^{+5.8}_{-2.9}$	$142.3(5.8)^{+22.0}_{-0}$
$N_f = 2$ QCD	$3.44^{+0.14}_{-0.22}$		88^{+4}_{-6}	90^{+5}_{-11}
$N_f = 2 + 1$ QCD	$3.49(15)$	$3.47(15)$	$90.4(4.3)$	$91.6(5.5)$

表 14: クォーク質量の結果 ($\overline{\text{MS}}$ スキームで 2GeV における値) [1, 2, 4]. クエンチ QCD の結果で，最初の誤差は統計誤差，第 2 の誤差はカイルル外挿による系統誤差である.

差の範囲で実験値と無矛盾である. 我々が計算を行った物理サイズ 2.0 fm の格子は，重粒子には小さすぎ，我々の結果には有意な有限格子サイズ効果による系統誤差が存在すると予想される. 十分大きな格子でシミュレーションを行って， $N_f = 2 + 1$ の系統誤差の小さい重粒子質量を求めることも今後の課題である.

4.3 クォーク質量

クォーク質量は QCD の基本パラメータであり，特に s クォークの質量を精密に決定することは，弱い相互作用の現象論を構成する上で重要である. クォークはハドロン中に閉じ込められているので，実験でその質量を決めることは出来ず，QCD の種々の現象論的模型を用いてその値が推測されている. 一方，格子 QCD によれば，クォーク質量を第一原理である QCD から直接計算することができる. しかし，これまでの格子上の計算では，十分な精度が得られていなかった.

我々は，クエンチ近似， $N_f = 2$ QCD 及び $N_f = 2 + 1$ QCD の各々に対して，クォーク質量の

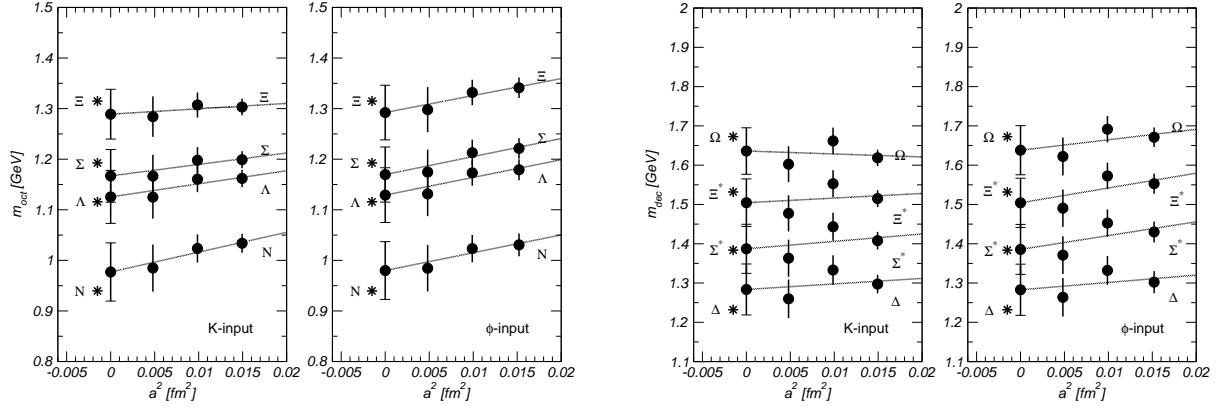


図 16: $N_f = 2 + 1$ の近似無し QCD 計算による，8 重項（左）と 10 重項（右）重粒子質量の連続極限 [4]．

精密計算を行った [1, 2, 4]．図 17 に u, d クォーク質量と s クォーク質量の格子間隔依存性を示す．また，表 14 に，現時点での我々のクォーク質量の結果を示す．本計算によって新たに得られた知見は，以下の通りである．

- 格子計算では，クォーク質量の計算に何種類かの方法がある．異なった方法（図 17 では，“VWI”，“AWI” と示した．また $N_f = 2$ QCD では“VWI PQ” と略記される別の方法もある．詳細は [2] 参照．）は，有限格子間隔では異なった値を与えるが，連続極限では値が一致する [1, 2, 4]．これは，我々の解析の信頼性が高いこと意味する．
- s クォーク質量は， K 中間子，又は， ϕ 中間子質量の実験値を用いて計算される．クエンチ近似計算では，図 17 の右図に示した様に，連続極限においても s クォーク質量の値が，何れの間子質量を用いるかによって異なる [1]．これは，クエンチ近似による系統誤差である．一方， $N_f = 2$ QCD や $N_f = 2 + 1$ QCD では，その差異が著しく小さくなり，図 17 に示した様に， K 中間子，又は， ϕ 中間子質量のどちらを用いた場合でも，90 MeV 程度の値を与える [2, 4]．
- $N_f = 2$ QCD と $N_f = 2 + 1$ QCD の結果に大きな違いはみられない [4]．full QCD から得られたクォーク質量は，クエンチ近似に比べ 20–30% も小さく，この予想以上に大きな動的クォーク効果は，主に軽い u, d クォークに起因していると考えられる．

full QCD 計算で得られた s クォーク質量は，これまで用いられてきたクエンチ近似の場合の値や現象論的モデルによる評価値より著しく小さい．小さい s クォーク質量は，弱い相互作用における CP 非保存のパラメータ $\text{Re}(\epsilon'/\epsilon)$ に対して，既存の予想値より大きな値を与える．実際，最近の実験によって， $\text{Re}(\epsilon'/\epsilon)$ のかなり大きな値が得られており，我々の s クォーク質量は，それらの実験結果と矛盾しない．

4.4 重いハドロン物理学の研究

重い b クォークを含む B 中間子， B_s 中間子の崩壊定数などは，実験から弱い相互作用の基本パラメータである小林・益川混合行列要素を決定する際必要となる，重要な物理量である．格子

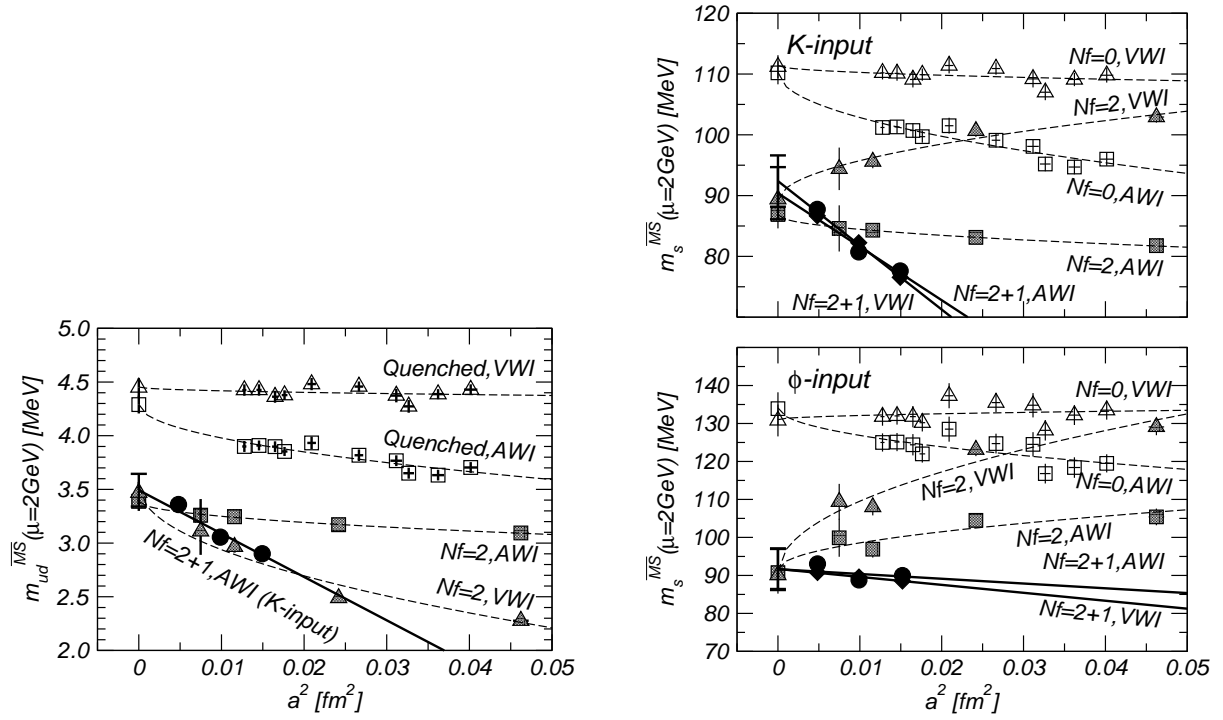


図 17: u, d クォーク質量 (左) と s クォーク質量 (右) の格子間隔 (a) 依存性と連続極限への外挿 [4] . 比較のため, クエンチ QCD と $N_f = 2$ QCD の結果も載せた [2].

QCD を用いて重いクォークを扱う際の最大の問題は, 現在の計算機性能では格子 QCD のカットオフ, 即ち格子間隔の逆数 (a^{-1}) は重いクォークの質量 (m_Q) より小さく取らざる得ないことである. 例えば, 現在の数値計算においてはボトムクォークの質量 (m_b) とカットオフの比はおよそ $m_b a \approx 2 - 3$ 程度である. この大きな $m_Q a$ 比の効果をコントロールするために, 幾つかのアイデアが提案されているが, その殆んどは非相対論的 QCD 或はフェルミラボ解釈法のように $m_Q a \gg 1$ という仮定に基づいている. この場合カットオフの大きさは, 重いクォークの質量よりも小さくなければならないので, ハドロン行列要素の連続極限を考えることは原理的に出来ない. このことは, 第一原理に基づいた計算という格子 QCD の本質的な利点を放棄しており, 格子上における重いクォークの定式化として満足できるものではない. この問題を解決するために, 近年筑波大学グループによって $m_Q a \approx 1$ の条件下における格子上の重いクォークの相対論的定式化が新たに提唱された. 我々は現在それを用いて種々の物理量の計算に取り組んでいる [5]. この定式化の最大の特徴は, 重いクォークを含んだ物理量の連続極限を考えることが可能であり, 現在広く行なわれている非相対論的近似を越えた計算が実現できる点である. 図 18 にクエンチ近似におけるチャーモニウムとボトモニウムの超微細構造の格子間隔依存性を, また, 図 19 においてはクエンチ近似における D_s, B_s 中間子の崩壊定数の格子間隔依存性を示した. 図中において "RHQ" とは新しく提唱された相対論的定式化を, "clover-iso" とは等方格子におけるクローバークォーク作用を, "clover-aniso" とは非等方格子におけるクローバークォーク作用を "NRQCD" とは非相対論的クォーク作用を用いたことをそれぞれ表している. いずれの物理量においても, 相対論的定式化は他の方法と比較して同等かそれ以上に良いスケーリングの振舞いを示している. これらはクエンチ近似の範囲内の計算であるが, 今後は full QCD の計算に取り組む計画である.

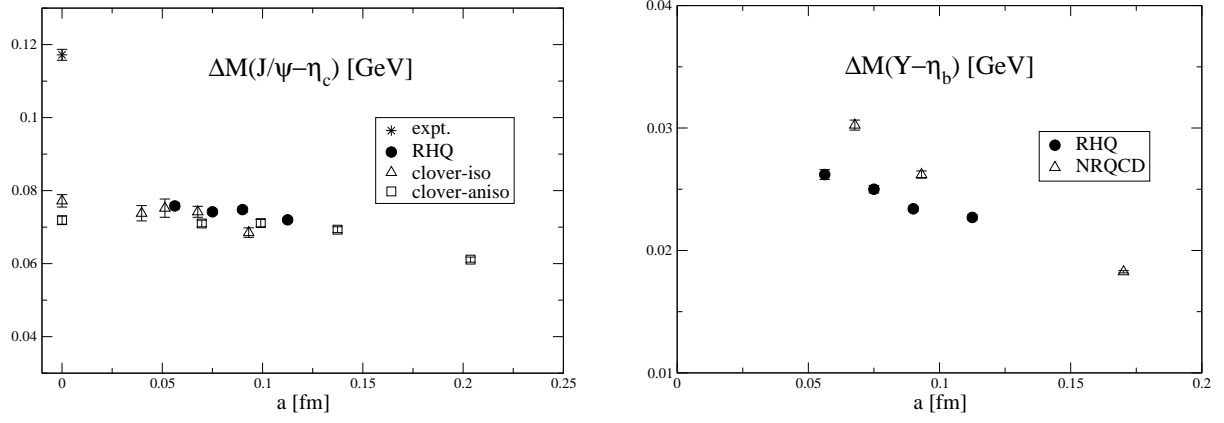


図 18: クエンチ近似における (左) チャーモニウムおよび (右) ボトモニウムの超微細構造の格子間隔依存性.

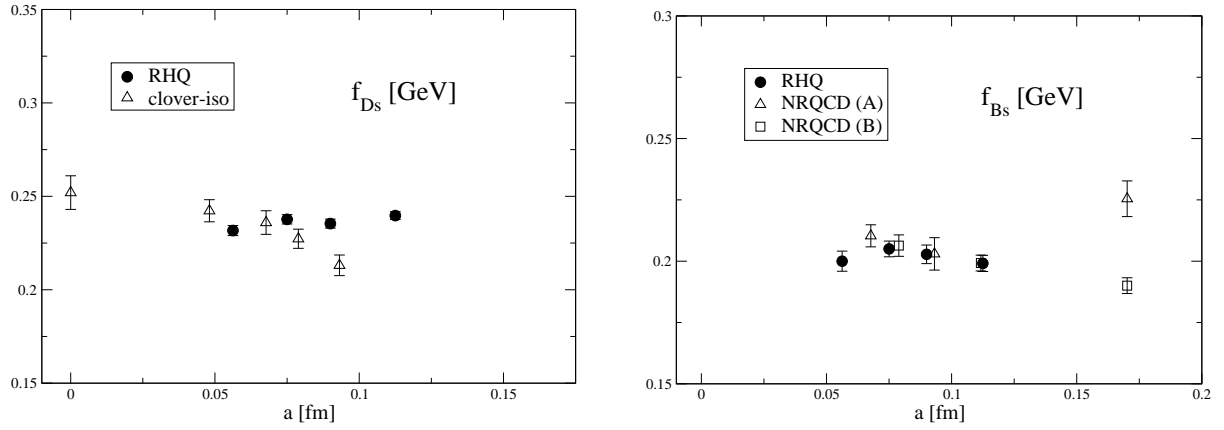


図 19: クエンチ近似における (左) D_s および (右) B_s の崩壊定数の格子間隔依存性. NRQCD(A), NRQCD(B) は異なるグループによる結果を表す.

参考文献

- [1] CP-PACS Collaboration, “Quenched Light Hadron Spectrum” (hep-lat/9904012), Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 238-241; CP-PACS Collaboration, “Light Hadron Spectrum and Quark Masses from Quenched Lattice QCD” (hep-lat/0206009), Phys. Rev. D 67 (2003) ref.034503, pp.1-46.
- [2] CP-PACS Collaboration, “Dynamical quark effects on light quark masses” (hep-lat/0004010), Phys. Rev. Lett. 85, No.22 (2000) 4674-4677; CP-PACS Collaboration, “Light hadron spectroscopy with two flavors of dynamical quarks on the lattice” (hep-lat/0105015), Phys. Rev. D 65 (2002) ref.054505, pp.1-50.
- [3] CP-PACS, JLQCD Collaborations, “Non-perturbative $O(a)$ -improvement of wilson quark action in three-flavor QCD with plaquette gauge action” (hep-lat/0406028), Phys. Rev. D

- 71 (2005) ref.054505, pp.1-16; CP-PACS, JLQCD Collaborations, “Nonperturbative $O(a)$ improvement of the Wilson quark action with the RG-improved gauge action using the Schrödinger functional method” (hep-lat/0508031), Phys. Rev. D in press.
- [4] CP-PACS and JLQCD Collaborations, “Light hadron spectrum and quark masses in 2+1 flavor QCD” (hep-lat/0509142), presented at Lattice2005, PoS(LAT2005) ref.057, pp.1-6; 本論文準備中.
- [5] CP-PACS Collaboration, “Quenched scaling study of Charm and Bottom systems with a relativistic heavy quark action”, presented at Lattice2005, PoS(LAT2005) ref.226, pp.1-6.

5 セミナー

5.1 総論

本事業の目標は国際的な計算素粒子物理学の拠点形成である。セミナーの主な目的は以下の2点である。

1. 拠点形成の実現に向け国際的なデータ共有の枠組みとして ILDG を構築することは本事業の主目的の1つであるが、セミナーにおいては ILDG の構築に関する状況報告と討論を行い、多くの研究者に現状を伝え、そこからの意見を吸い上げ、より良い ILDG の構築に役立てる。
2. 本事業の重点である格子 QCD 分野の最新の研究動向に関する情報交換を行い、研究の方向性を探り、また共同研究の芽を探る。

上記の目的のために、コーディネータ間での意見交換の結果、6ヶ月間隔で、物理に重点を置いたセミナーを各国持ち回りで開催することで合意し、以下に述べる通りに実施した。

これらのセミナーにより、世界各地の研究者が定期的に研究成果のみならず研究計画についても情報交換・討議する機会を得、世界的な枠組みで研究の進め方自体に関して意見交換や計画調整を行うようになったことは大きな成果である。

	開催場所	開催期日	参加者数				
			日本	米国	英国	独国	総数
第一回	日本 伊豆	2004 年 9 月 21 日-24 日	24	6	8	4	42
第二回	英国 Edinburgh	2005 年 3 月 7 日-10 日	18	6	25	1	50
第三回	米国 Newport News	2005 年 10 月 3 日-6 日	11	27	5	2	45
第四回	日本 葉山町	2006 年 3 月 8 日-11 日	17	12	2	1	32

表 15: セミナー参加状況

5.2 概要

以下、4 回のセミナーの概要を纏める。各国からの参加状況については表 15 に示す。プログラム及び参加者リストは付録-II に掲載する。また proceedings に代り web 上のプログラムページに発表資料をリンクする形態を採用しているので、URL を記載する。

5.2.1 第 1 回セミナー”Lattice QCD via International Research Network”

開催期日 2004 年 9 月 21 日-24 日

開催場所 静岡県伊豆市大平 1529 ラフォーレ修善寺ホテル

内容

第一回目は、格子 QCD の大規模数値シミュレーションの現状を総括し、国際研究ネットワークによる研究の進展の可能性を具体的に議論することを目的として開催した。国内から 26 名、国外から 22 名の参加者を集めて 4 日間の日程で行い、合計 31 の研究発表があった。

日・米・英・独における格子 QCD 研究の現状と今後の方向性について、特にセミナー開催時点で各国で運用の開始が予定されている格子 QCD 専用計算機とそれによる物理プログラムについての報告と討議があった。各国からの参加者はそれぞれのグループを代表する著名な研究者であり、議論は実質的かつ内容の濃いものとなった。

3 日目午後には ILDG の現状報告のセッションを設け、活発な議論を行い、ILDG による生成データの共有と有効利用を考える上での、共通理解を促進することが出来た。

最終日の午後は、インフォーマルなワークショップを設け、格子ゲージ理論の中でもホットトピックである twisted mass QCD の相構造に関するより詳細な議論を行った。論文発表前の結果やいろいろなアイデアなどが討議され、非常に有意義で中身の濃いものとなった。

5.2.2 第 2 回セミナー”From actions to experimentk”

開催期日 2005 年 3 月 7 日-10 日

開催場所 英国 Edinburgh 大学 e-Science Institute

内容

第 2 回目は、本研究ネットワークの英国側の拠点であるエジンバラ大学で行われた。エジンバラ大学には ILDG の発案者の一人である R. Kenway 教授が率いる格子ゲージ理論のグループがあり、英国の格子ゲージ理論の中心になっている。全体の参加者は 53 名、日本からの参加者は 18 名であった。初回と同様、4 日間の日程で、合計 32 の研究発表があった。

格子 QCD の重点課題毎に過去 6 ヶ月の発展を報告する講演を中心に、格子ゲージ理論の理論的側面から素粒子現象論への応用にわたってバランスのとれたプログラムが組まれ、幅広い議論を行った。特に、平成 16 年冬から英国と米国で稼働を開始した QCD 専用機 QCDOC の状況および最初の結果の報告が行われ、今後 6 ヶ月の研究方向の討議が行われた。また、日本における専用計算機の開発予定の報告がなされた。

2 日目の昼休憩を利用して、エジンバラ大学に導入されたばかりの専用計算機 QCDOC の見学会が行われ、20 人あまりの研究者が見学会に参加した。

5.2.3 第 3 回セミナー”Towards physics at the physical quark masses”

開催期日 2005 年 10 月 3 日-6 日

開催場所 米国 Newport News Jefferson National Accelerator Facility

内容

第 3 回目は、本研究ネットワークの米国側の拠点の一つである、ジェファークソン研究所で行われた。ジェファークソン研究所は、米国の原子核物理学を代表する研究所の一つであり、格子ゲージ理論の有力なグループを持っている。全体の参加者は 46 名、日本からの参加者は 11 名であった。4 日間の日程で、合計 36 の研究発表があった。

初めて米国で行われた今回のワークショップでは、比較的若手の研究者が多く集まり、新しいアイデアに関する検討が活発に行われた。また、格子ゲージ理論に適した計算機アーキテクチャに関するセッションも設けられた。物理の話題としては、特に米国および日本を中心として 2+1 フレーバーの格子 QCD の大規模シミュレーションの状況が報告され注目を集めた。10 テラフロップスクラスの計算機の稼働開始によって格子 QCD 研究が新たな段階に入っている状況に対する共通認識ができた。

2 日目の午前に、ILDG の進展に関するセッションが行われ、ILDG における共有データの公開に向けてメンバー各国における準備状況が報告され、その進捗状況に対する共通理解が得られた。

3 日目の昼休みは、ジェファースン研究所の加速器や実験施設、計算機設備などを見学するツアーが企画され、大多数の人が参加した。

5.2.4 第 4 回セミナー”Lattice QCD via International Network”

開催期日 2006 年 3 月 8 日-11 日

開催場所 神奈川県三浦郡葉山町総合研究大学院大学

内容

本事業の最終回として第 4 回目の会議は、日本の総合研究大学院大学葉山キャンパスで開催された。参加者は日本国内から 19 名、国外から 13 名の計 32 名であった。

2 年間の本研究を終えるに当たってこの 2 年間の活動を総括として、ILDG 構築の状況報告及び利用形態の討議や、2 年間での物理研究プログラムの進展の現状などが報告された。特に QCDOC を使った $2+1$ フレーバーの計算の進行状況や、日本での新しい計算機の進捗状況などを中心に議論が行われた。また、多くの若手研究者による新しいアイデアに基づく研究成果も発表され、活発な議論が行われた。

また、次年度以降の国際協力プロジェクト計画についての討議も行われた。この分野での研究協力の発展とそれによる問題解決の枠組を将来的にどのように遂行して行くかが議論された。特に ILDG に関しては平成 18 年 6 月の世界一斉稼働開始の確認が行なわれた。また、次年度以降も本事業の継続を図ることが提案された。その事業内容については ILDG による成果の追求に加えて、国際的な若手育成のための Advanced International School を各国が持ち回りで開催することなどが織り込まれた。

6 共同研究

6.1 筑波ワークショップ”Lattice QCD and Particle Phenomenology”

開催期日 2004 年 12 月 6 日–17 日

開催場所筑波大学計算科学研究センター

参加者 国外：8 名 国内：23 名 合計：31 名概要

本計画は、比較的緩い形の新しい共同研究を目指して企画された滞在型のワークショップである。この滞在型ワークショップは、海外からの著明な研究者 8 名と日本からの参加者とが 2 週間という比較的長い間、同じ場所で物理に関する議論をし、新しい研究のアイデアの誕生やそれに基づいた共同研究などの開始などを意図したものであり、筑波大学で行われた。場所は新しく建てられた総合研究棟 B 棟の 12 階を使ったが、その眺めが素晴らしく参加者から好評であった。

海外からの参加者は 8 名、日本からの参加者は 23 名で、1 日の講演は一つか二つ、全体で 18、というゆったりスケジュールで行われ、この点も参加者から好評であった。議論の時間などもを多く取り、リラックスした中でいろいろな問題点や新しいアイデアなどが盛んに議論された。講演の内容は格子 QCD の物理の研究プログラムの新しい展開が中心で、論文として発表前の多くの新しい研究成果が報告された。

具体的な共同研究などがその場で始まるようなことはなかったが、ワークショップの中で議論されたことから新しい結果などが出て、論文として発表されたものなどがあった。

海外からの参加者であり、最初に格子 QCD の数値計算を行った著明な研究者である、クロイツ博士による物理の大学院生向けのコロキウムも行われ、好評であった。また、海外からの参加者の一部と KEK のベルの実験家との小研究会が KEK で行われ、有益な情報交換が行われた。

このような長期的な滞在型の研究会は、国際拠点の形成や共同研究の推進に非常に有効であることが実感されたが、そのサポート体制など将来にわたって検討し改善していくべき点も多くあることも明らかになった。

付録-II にプログラム及び参加者リストを掲げる。

6.2 奈良ワークショップ ”Perspectives in lattice QCD”

開催期日 2005 年 10 月 31 日–11 月 10 日

開催場所奈良市国際セミナーハウス

参加者 国外：13 名 国内：32 名 合計：45 名概要

本ワークショップは、格子ゲージ理論におけるこれまでの発展と現状について重要なテーマごとに集中的な討議を行い、それをもとに広い視野にたって今後の課題と進むべき方向性について議論を行うことを意図したものである。具体的なテーマとしては

- 繰り込み群とその応用
- 非摂動的繰り込みと格子上のフェルミオン作用の改良
- 格子上のカイラルゲージ理論
- カイラルフェルミオン
- 格子 QCD の現象論的応用

- 数値計算上のアルゴリズム
- カイラル摂動論の格子 QCD への応用

を選定し、これまでの発展と現状について各々第一線の研究者に比較的長めの講演をお願いした。ワークショップの期間は二週間で、講演は一日二つか三つとし、議論の時間も十分確保できるよう余裕のあるスケジュールとした。

日本における格子ゲージ理論、特に格子 QCD はつくばを中心として発展してきたため、国際会議やワークショップもつくば市で開催されることが多かったが、本ワークショップに関してはその意図を考え、国内各地からの参加を促すため場所は奈良を選んだ。その結果、国外から 13 名、国内から 32 名の参加者を得ることができ、ワークショップは盛況であった。特に、多数の若い研究者の参加が見受けられたことは意義深い。

本ワークショップの性格から具体的な共同研究がすぐに始まるということではなかったが、格子ゲージ理論の現状と問題点に関して共通の認識を持つことができ、今後の研究の方向性などが議論をとおしてより明確になった。これらは、今後の新規の共同研究の立ち上げや推進にとって重要なことであり、広い視野にたって格子ゲージ理論全体を包括的に議論した本ワークショップの意義は大きいと考えられる。

付録-II にプログラムと参加者リストを掲げる。

6.3 非摂動くりこみの研究

格子量子色力学 (格子 QCD) の数値シミュレーションは、強い相互作用の物理を非摂動的に研究することができる強力な手法であり、結合定数、クォークの質量などの標準理論の基本パラメータの決定から、その標準理論を越えた新しい物理の探索に向けたハドロン行列要素の高精度決定まで、幅広く応用されている。この格子 QCD は、有限の格子間隔によって素粒子の運動量に上限値を導入した正則化と見ることができ、その結果を現象論に応用するためには、格子上の結果を modified minimal subtraction scheme ($\overline{\text{MS}}$ scheme) 等の良く知られた正則化での値に変換する必要がある。この” 格子上の結果のくりこみ” を摂動的に行うと、典型的に、5-10% 程度の小さな系統誤差が生じることが知られている。

また、物理量を高精度で決定するためには、クォークのダイナミクスを考慮したダイナミカル QCD のシミュレーションを行う必要があるが、クォークの質量を軽くするとともに、シミュレーションに必要な計算時間は極めて急速に増大する。このため、計算機資源の制約から、実際のシミュレーションは比較的大きい格子間隔で行わざるを得ない。そこで、近年の研究では、格子 QCD の作用、演算子を改良して、その格子間隔依存性を小さくし、物理量の連続極限への外挿の系統誤差を抑えるという手法が一般的に用いられている。

これらのくりこみ、改良を非摂動的に行う手法の一つとして、独国側参加者が中心的役割を果たしている ALPHA Collaboration が Schrödinger functional という定式化を用いた手法を提案し、クォークのダイナミクスを無視するクエンチ近似のもとでは多くの物理量の計算に適用されてきた。そこで、本共同研究では、ダイナミカル QCD での物理量の高精度計算に向けて、非摂動改良、及び、くりこみに関する以下の課題に取り組んだ。

第一に、結合定数の非摂動決定に取り組んだ。まず、独国側拠点機関を訪問し、クエンチ近似での経験、特に、ゲージ作用の選び方が最終結果の精度に与える影響についての情報交換を行った。また、それぞれが開発したプログラムの結果が一致することを確認し、計算の信頼性を高め

たことも非常に有益であった。現在は、これらの準備的研究で得られた知見に基づいて、アップ、ダウクォークのダイナミクスを考慮した2フレーバー QCDにおいて、結合定数のエネルギー発展を記述するステップスケリング関数の非摂動計算に着手した。今後の主な課題は、低エネルギー領域での数値シミュレーションによってエネルギースケール、従って、結合定数を精密に決定することと、この計算をストレンジクォークのダイナミクスも考慮した3フレーバー QCDに拡張することである。

また、アップ、ダウン、ストレンジクォークの全てのダイナミクスを考慮した3フレーバー QCDにおいて、軸性ベクトルカレントの非摂動改良に取り組んだ。軸性ベクトルカレントは、中間子の崩壊定数やクォーク質量の決定などに用いられる基本的な演算子であり、その格子間隔依存性を削減することは、これらの物理量を高精度で決定するために重要である。具体的には、軸性カレントに最低次の格子間隔依存性を取り除くための相殺項を加え、その係数を、独国側研究者が最近提案した方法を用いて非摂動的に計算した。さらに、くりこみ係数の非摂動計算も行い、日本の CP-PACS/JLQCD Collaborations が生成した3フレーバー QCD でのデータに適用して、崩壊定数、及び、クォーク質量を計算することが今後の課題である。

6.4 オブジェクト指向格子 QCD コード 体系の開発

動的クォーク効果を含むシミュレーションが進展するにつれて、QCDシミュレーションのコンピュータプログラムはますます複雑になってきている。このため、国際的にはプログラム開発をオブジェクト指向言語で記述して、プログラム体系を整理する試みが進んでいる。一方、国内では伝統的な Fortran 言語が主流である。これはコンパイラによる最適化がもっとも有効であるためだが、近年のコンパイラ技術の進歩等によって状況は変わりつつある。この共同研究の目的は、オブジェクト指向コード開発に関して米国のグループと情報交換を行い、可能であれば共同開発を進めることである。

国内の研究者は、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) のチーム (橋本、金児、松古、山田) と筑波大学のチーム (青木、蔵増) が参加した。

KEK のチームは、JLQCD collaboration で将来使用するプログラム体系にオブジェクト指向技術を取り入れるべく調査を行った。このために拠点事業の経費を使ってボストン大学に出張し、R. Brower らが開発中のプログラム "SciDAC software structure" に関して聞き取り調査を行うとともに意見交換を行った。また、プログラムの Blue Gene スーパーコンピュータへの最適化についてもワークショップに参加して議論した。

筑波大学のチームは、移植可能で汎用性の高いコード体系を C++ を用いて構築する可能性を検討した。格子 QCD では自前で計算コードを作成するため、各研究グループや各個人がそれぞれ計算コードを作成しそれを研究に使っているが、計算機が変わるたびに書き換える必要があり、また、新しい計算を始めるたびに新しい計算コードを書かねばならない。そのため、コード作成時間が研究の送れに与える影響は大きく問題であった。そこで汎用性の高いコード体系を構築し、新しく作るコードをそこに加えるとする事で、膨大なコードを再利用し、時間のロスを減らし、研究の効率化を図ったわけである。そのためにはオブジェクト指向のプログラミングが必要であり、C++ を使うことにした。

コード体系を 1 から構築する可能性もあったが、米国ではこのような試みがすでに行われているので、交際共同研究の一環として、コロンビア大学等で開発/使用中の ColumbiaPhysics System (CPS) を基にコード体系を構築することにした。主に、青木が年に数回、アメリカのブルックヘブ

ン国立研究所を訪問し、CPS⁺⁺を勉強し、その体系を学んだ。また、そこに領域分割 HMC アルゴリズムなど新しいアルゴリズムを付け加えたり、このコード体系を KEK に導入された BlueGene/L に移植したりした。これからは、このコード体系を日本でひろめ、それを用いているいろいろな研究や学生の教育を推進する予定である。

7 若手交流

7.1 K_{l3} 崩壊からの Cabibbo-Kobayashi-Maskawa 行列要素 $|V_{us}|$ の決定

近年の素粒子物理学の最重要のテーマの一つは、クォーク混合を記述する Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) 行列要素を高精度で決定し、標準理論を越える新しい物理を探索することである。そのためには、ハドロン崩壊率などを実験から、崩壊定数、バグパラメータ、形状因子などを理論から高精度で決定する必要がある。前者に関しては、国内外の大型加速器を用いた実験により年々精度が上がっている。後者に関しては、従来の摂動論を用いた方法では強い相互作用の寄与を記述するハドロン行列要素を精度良く計算することが困難であるため、格子量子色力学 (格子 QCD) の数値シミュレーションによって非摂動的に計算するという手法が有望である。

本研究交流では、アップクォークとストレンジクォーク間の遷移を記述する CKM 行列要素 V_{us} の絶対値に着目する。 $|V_{us}|$ は K 中間子の K_{l3} 崩壊 ($K \rightarrow \pi l \nu_l (l = e, \mu)$) の崩壊率の実験測定、及び、形状因子の理論計算から決定することができる。ところが、数年前に、 K_{l3} 崩壊から決められた値と CKM 行列の unitarity から決めた値の間に 2σ のずれがあることが指摘され、これが標準理論の枠内で計算した CKM 行列の unitarity の破れ、即ち、新しい物理の存在を示唆しているか否かを明らかにすることが重要な課題の一つとなった。

このため、ここ数年、ブルックヘブン国立研究所の E865 実験を始めとする崩壊率の測定実験が盛んに行われた。しかし、この問題において決定的な結論を得るためには、形状因子の高精度な理論計算も不可欠である。そこで、本研究交流では、形状因子を格子 QCD の数値シミュレーションによって非摂動的に決定する共同研究を行うことを目的として、ブルックヘブン国立研究所を訪問した。

まず、計算手法について現地の研究者と議論し、その結果、アップ、ダウンクォークのダイナミクスを考慮した 2 フレイバーの格子 QCD の数値シミュレーションを、有限格子間隔でもカイラル対称性を持つドメインクォーク作用を使用して行い、 B 中間子の形状因子の計算において非常に有効であった “double ratio method” を用いて形状因子を計算することとした。また、このような計算が理研ブルックヘブン研究センター設置の並列計算機 QCDOC で行えるようなプログラムを開発した。

滞在終了後も現地研究者との共同研究を継続し、本研究交流は、派遣者を中心として QCDOC を用いて実際に形状因子を計算するまでに発展した。その結果、形状因子の値として $0.964(10)$ という値を得た。この結果は、これまでの $|V_{us}|$ の決定に用いられてきた 20 年以上前の現象論的モデルに基づいた計算結果と consistent であるが、本研究交流で第一原理から非摂動的に形状因子を計算できた意義は大きい。また、近年の崩壊率の実験結果を用いて得られた $|V_{us}|$ の値は CKM 行列の unitarity と完全に consistent であり、上述の 2σ のずれは実験測定、理論計算の系統誤差によるものである可能性が高いことがわかった。

7.2 有効結合定数のスケーリングの研究

素粒子物理学における標準模型の一つの柱である量子色力学 (QCD) は、結合定数とクォーク質量によって特徴づけられる。時空を離散化した格子上で QCD を定義した格子量子色力学 (格子 QCD) を用いて、現象論側からも注目を集めているこれらのパラメータのエネルギー発展を非摂動的に調べるのが本研究の目的である。以下では、特に結合定数について話を進める。

近年における高エネルギー実験では、様々な方法によって結合定数が測定されている。現在の

ところ、全世界の平均は、 Z ボゾン質量のエネルギースケールで、およそ 0.11 という結果が出されている。我々、格子 QCD を研究する者に課せられた課題は、第一原理計算からこの値を導くことである。実際、世界中の多くの研究者がこの研究を行っている。現在のところ、質量がゼロのアップクォークとダウクォークをダイナミカルな効果として取り入れたときの結合定数の非摂動的なエネルギー発展の結果がドイツのグループによって出された。しかし、低エネルギーの物理を理解するためには、3 つのクォークを取り入れた計算が必要であり、近年になって、そのようなアルゴリズムが CP-PACS Collaboration によって完成された。本研究の具体的な目標は、そのアルゴリズムを用いて、3 フレーバーの結合定数のエネルギー依存性を調べることである。

この分野で先進的な研究を行っている前出のドイツのグループのメンバーと議論するため、2004 年 10 月 26 日から 12 月 20 日までの間、DESY Zeuthen を訪問した。特に、Rainer Sommer と物理量を測定するためのプログラムについて議論した。彼の属するグループではすでに、プログラムを開発済みなので、それと照し合わせるにより、派遣者が作成したプログラムが正しいことを検証することができた。また、滞在中にセミナーを行い、これまで派遣者が行ったクォークを含まないシミュレーション結果を発表した。その派遣者の研究結果から、ある特定のゲージ作用では格子化による離散化誤差が大きく信頼できる結果が得られないことがわかっていたが、その発表を通して、現地の研究者にゲージ作用の選び方について影響を与えた。このように、この滞在は派遣者自身に成長を促したばかりではなく、派遣先の研究者にも影響を与え、相互に利益を生むことにつながった。

滞在後、筑波大学計算科学研究センターの超並列計算機 CP-PACS を用い、2 つのクォークの効果を取り入れた計算を行った。この計算は、最終的な目的である 3 フレーバーの計算の前段階であり、特に、岩崎作用を用いた場合のステップスケール関数の格子間隔依存性を調べることに主たる目的である。いろいろな改良の組み合わせを試し、もっとも格子間隔依存性の少ないものを探した。これまでに得られた、もっとも格子間隔が粗いところでの計算結果が示すところによれば、ゼロフレーバーの結果と一貫性があり、予想されていた結果が得られた。また、離散化誤差を少なくするために、摂動計算ですでにわかっている離散化誤差を数値データの解析の際に除去するなどの改良を行った。すると、劇的に格子間隔依存が緩和されることが確認された。今後はさらに細かい格子間隔で計算を進め、連続極限をとる予定である。

7.3 格子上の重いクォークの相対論的定式化とそのパラメーターの決定

現在世界の主要加速器で行われている B 中間子崩壊の精密測定の実験によって我々は CP の破れについて高精度のデータを手にすることができ、それをもとに標準理論を超える新しい物理を探ることが可能になると期待されている。そのためには高精度の実験結果を精確な標準理論の予言と比較することが必要であるが、この精確な標準理論の予言を得るためには弱い相互作用の低エネルギー有効ハミルトニアンハドロン行列要素を信頼できる方法で評価することが不可欠である。

ところが、格子 QCD を用いて弱い相互作用における重いハドロン (チャーム、ボトムクォークを含むハドロン) の行列要素を精度良く計算しようとする場合はそれ固有の困難がある。問題は、現在の計算機性能では格子 QCD のカットオフ、即ち格子間隔の逆数 (a^{-1}) は重いクォークの質量 (m_Q) より小さく取らざるを得ないことである。例えば、現在の数値計算においてはボトムクォークの質量 (m_b) とカットオフの比はおよそ $m_b a \approx 2 - 3$ 程度である。(尚、数値計算に要する時間は単純に考えて a^{-4} に比例するので近い将来 $m_b a \ll 1$ の条件が実現することはありえな

い。)この大きな m_{Qa} 比の効果をコントロールするために幾つかのアイデアが提案されているが、その殆んどは非相対論的 QCD 或はフェルミラボ解釈と呼ばれる方法のように $m_{Qa} \gg 1$ という仮定に基づいている。この場合カットオフの大きさは重いクォークの質量よりも小さくしなければならないので、ハドロン行列要素の連続極限を考えることは原理的に出来ない。このことは、第一原理に基づいた計算という格子 QCD の本質的な利点を放棄しており、格子上における重いクォークの定式化として満足できるものではない。

この現状を打開するべく、近年筑波大グループは $m_{Qa} \sim O(1)$ の条件下における格子上の Heavy Quark の相対論的定式化を提唱した。基本的なアイデアとしては、重いクォークの作用に m_{Qa} に依存するパラメータを導入し、それによって $m_{Qa} \sim O(1)$ によるカットオフ効果を取り除くというものである。現在摂動計算によってこのパラメータ及び双線形演算子の改良係数を one-loop level で決めることに成功し、これらを用いて我々の定式化の数値的検証を行っているが、one-loop の範囲内でも従来の方法に対する優位性がはっきりと定量的に確認できている。我々の相対論的定式化によって重いクォークを含んだ物理量の連続極限を考えることが原理的に可能となり、現在広く行なわれている非相対論的近似を越えた計算が実現できる。

他方、米国のコロンビア大学とブルックヘブン国立研究所の格子 QCD 研究者グループも重いクォークの相対論的定式化に興味を持っており、彼らはクォーク作用のパラメータを非摂動的に決定することを目指している。そこで本研究交流においては、重いクォークの相対論的定式化についての共同研究の可能性を探るべく、筑波大学側から蔵増がブルックヘブン国立研究所に二週間滞在し、相互の研究内容を説明し今後の研究の方向性について議論した。相手側の行っているクォーク作用パラメータの非摂動的決定は重要な研究テーマではあるが、現時点ではまだ課題も多く、すぐに共同研究を立ち上げられるという段階ではなかった。しかしながら、議論を通じて研究の方向性に関して共通認識ができたことの意義は大きく、今現在も電子メールを使って重いクォークの相対論的定式化についての議論や意見交換を行っている。

7.4 QCD シミュレーションコード最適化の研究

2004 年 10 月 26 日–11 月 6 日の日程で、橋本省二 (高エネルギー加速器研究機構) が、米国ブルックヘブン国立研究所 (BNL) およびフェルミ国立加速器研究所 (Fermilab) を訪問した。

BNL では、理研、コロンビア大、UKQCD で開発された QCD 専用計算機である QCDOC と、それに近いアーキテクチャをもつ IBM Blue Gene/L に関するワークショップが開催されており、関連する研究者が数多く集まって、それらの計算機での QCD プログラムの最適化に関する議論が行われた。橋本もワークショップに参加して情報収集に努めるとともに、現地の研究者と情報交換を行った。

Fermilab では、インテル製 CPU (Pentium4 および Xeon) での QCD コードの最適化の専門家と議論し、最適化の作業を進めた。これらの CPU での最適化に際しては、CPU に備わっている SIMD 拡張命令セット (SSE2 あるいは SSE3) を使うことが必須だが、インテル製コンパイラを用いても充分によいコードは生成されない。Fermilab の D. Holmgren らは SSE 命令を書くノウハウを蓄積しているだけでなく、個別の CPU とチップセットについての QCD コードの性能評価を幅広く行っており、直接議論することで貴重な情報を得ることができた。また、C プログラム中に SSE 向け専用関数を書き込むことで最適化する手法についても評価した。

7.5 Wilson-clover クォーク作用による $N_f = 2 + 1$ シミュレーションの研究

目的 国際シンポジウム「German-Japanese Symposium “Towards Precision Physics from Lattice QCD Simulated on Tera-Flops Computers”」に参加し、CP-PACS and JLQCD Collaborations で行っている $2 + 1$ フレーバーの動的クォークを入れた格子量子色力学の数値計算に関する最新の成果を発表する。また、DESY Zeuthen に滞在し現地研究者と格子量子色力学について意見・情報交換を行う。

成果 University of Bielefeld (独、ビールフェルト) で 2004 年 11 月 22-25 日に行われた国際ワークショップ「International Workshop “QUANTUM FIELDS IN THE ERA OF TERAFLOP-COMPUTING”」に参加し、格子量子色力学の数値シミュレーションに関して情報収集、参加者との意見交換を行った。

ビールフェルトでの国際ワークショップ後移動し、DESY Zeuthen (独、ベルリン) で 2004 年 11 月 2-29 日に行われた国際シンポジウム「German-Japanese Symposium “Towards Precision Physics from Lattice QCD Simulated on Tera-Flops Computers”」にて「Status of light hadron mass spectrum in unquenched $2 + 1$ flavor QCD」という表題で、CP-PACS and JLQCD Collaborations で行っているプロジェクトである $2 + 1$ フレーバーの動的クォークを入れた格子量子色力学の数値シミュレーションに関する口頭発表を行った。この研究は従来の数値シミュレーションで使わざるを得なかったクエンチ近似を取り除いた画期的なものである。我々の数値シミュレーションではクォーク作用として高度に改良された Wilson 型クォーク作用を用いている。この作用は (1) フェルミオン・ダブラーと呼ばれる物理的でないフェルミオン自由度を消すために Wilson 項を導入するが、この項の存在が有限の格子間隔でのカイラル対称性を陽に破ってしまう、(2) 計算コストが比較的大きく、軽いクォーク質量での数値シミュレーションが非常に困難である等のデメリットがあるが、(3) 理論的には不定性は少ない。このシミュレーションは全部で格子間隔 3 点で行うものであるが、2004 年 11 月の時点でほぼゲージ配位の生成が終了している格子間隔が粗い方の 2 点で中間子スペクトル、クォーク質量、中間子崩壊定数の解析を行い連続極限を取った。結果は次の通りである。

- 軽い中間子スペクトルの計算結果は実験値を良く再現している。これはクエンチ近似を取り除いた効果であると考えられる。
- アップ・ダウン・ストレンジクォークの質量は現象論で用いられてきた値に比べて 20-30% 軽い。
- 軽い中間子の崩壊定数は大きな統計誤差の範囲内で実験値と矛盾しない。

発表に対してのコメントは概ね良好であったが、参加者から、格子上の計算で求めたクォーク質量を連続理論のものにマッチさせるときに必要な繰り込み係数に対して一部、不備があるとの貴重な意見を頂いた。

国際シンポジウム終了後、そのまま DESY Zeuthen に 2 週間程滞在し、現地研究者と意見交換を行った。当時はプロジェクトはようやく半分終了したという段階であったが滞在中に得られた意見はその後の研究遂行に大いに役立った。

目的 米国・ブルックヘブン国立研究所に滞在し、格子量子色力学の数値シミュレーションに関するセミナーを行い、現地研究者と意見交換を行う。また並列計算機 QCDOC と格子量子色力学のコード体系 CPS++ についての情報収集を行う。

成果 ブルックヘブン国立研究所 (米国、ニューヨーク州) に約 2 週間滞在し、研究を行った。滞在中、「Light hadron spectrum in 2+1 flavor unquenched lattice QCD」という表題で、CP-PACS and JLQCD Collaborations で行っているプロジェクトである 2+1 フレーバーの動的クォークを入れた格子量子色力学の数値シミュレーションの研究に関するセミナーを行った。この研究は従来の数値シミュレーションで使わざるを得なかったクエンチ近似を取り除いた画期的なものである。このシミュレーションは格子間隔 3 点で行うが、現在までにゲージ配位の生成は全て終了し、この配位上でクエンチ近似を取り除いた様々な物理量の計算を行うことができる。セミナーでは第一段階の解析として行った軽いハドロン・スペクトル等について発表を行った。セミナーで取り上げた計算結果は、

- 軽い中間子スペクトルの計算結果は実験値を良く再現している。これはクエンチ近似を取り除いた効果であると考えられる。
- アップ・ダウン・ストレンジクォークの質量は現象論で用いられてきた値に比べて 20-30% 軽い。
- 軽い中間子の崩壊定数は統計誤差の範囲内で実験値と矛盾しない。
- ゾンマー・スケールは現象論的モデルから得られる値と矛盾しない。

等である。発表内容について様々なコメントを頂き、現在行っているの論文作成に大いに参考になった。

ブルックヘブン国立研究所には、米国・ブルックヘブン国立研究所、理研 BNL 研究センター、米国・コロンビア大学で共同開発を行った格子 QCD 専用計算機 QCDOC が設置されている。これは計算ノードを 64 個搭載したマザーボードを単位とし、システム全体で 192 のマザーボードからなる、最大理論ピーク性能で毎秒約 10 兆回の浮動小数点計算が可能な並列計算機である。同種のシステムは米国・コロンビア大学、英国・エジンバラ大学にも設置されており、IBM 社の商用計算機 BlueGene シリーズの原型にもなっている。滞在中、この QCDOC を見学、並びにシステムの説明を受け、また QCDOC 上で動作する C++ 言語で書かれた格子量子色力学の数値シミュレーションコード群 CPS++ (Columbia Physics System) についての情報収集を行った。CPS++ は非常に体系化されたコード群で、これを用いることにより比較的少ない労力で短時間に格子量子色力学の数値シミュレーション・コード開発を行うことができる。現在のところ Fortran 言語が主流である日本には、このように体系化された格子量子色力学のコード群が存在せず、コード開発の点で非常に非効率な状況にある。滞在中に得た情報は、今後の我々のコード開発の方針に対して大きな参考となった。

第 III 部

ILDG 関係論文及び仕様ドキュメント

8 Reports at Lattice Symposia

- "Progres in building an International Lattice Data Grid", A. C. Irving, R. D. Kenway, C. M. Maynard, T. Yoshie, *Proceedings of Lattice 2003*, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 129, 159-163 (2004)
- "Staus of International Lattice Data Grid – An Overview –", A. Ukawa, *Proceedings of Lattice 2004*, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 140, 207-208 (2005)
- "ILDG Middleware Working Group Status Report", B. Joo, W. Watson, *Proceedings of Lattice 2004*, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 140, 209-212 (2005)
- "QCDml: First milestone for building an International Lattice Data Grid", C. M. Maynard, D. Pleiter, *Proceedings of Lattice 2004*, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 140, 213-221 (2005)

Progress in building an International Lattice Data Grid

A.C. Irving^a, R.D. Kenway^b, C.M. Maynard^b and T. Yoshié^c

^aTheoretical Physics Division, Department of Mathematical Sciences, University of Liverpool, Liverpool L69 3BX, UK

^bSchool of Physics, University of Edinburgh, Edinburgh EH9 3JZ, UK

^cCenter for Computational Physics, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan

We report on progress in setting up the International Lattice Data Grid. We describe the aims and objectives of the ILDG, what has been achieved during its first year of activity and invite feedback from the community.

1. INTRODUCTION

Since the announcement of the International Lattice Data Grid (ILDG) project at Lattice 2002 [1] significant progress has been made toward its initial objectives. The aim of the ILDG is to develop grid-based technologies that enable simple and reliable exchange of data between those international lattice research groups who choose to use it. It is possible that the ILDG vision may develop into something much more comprehensive than the simple publishing or exchange of gauge configurations. This remains to be seen. The initial proposal emerged out of the QCDgrid project which is being developed by UKQCD as a means of securely storing data and making it readily accessible to its members irrespective of geographical location. The ILDG was envisaged as a means of coordinating and promoting similar initiatives by other international groups for their mutual benefit.

In the last year, there have been two (virtual) meetings of ILDG participants from Australia, Europe, Japan and the USA. In December 2002, two working groups were set up to drive forward the necessary technology: a Middleware Working Group (MWWG) [2] and a Metadata Working Group (MDWG) [3].

In the following sections, some of their achievements and the issues exposed by their work are described. Broadly-speaking, the MDWG is charged with defining (via XML schema) the

metadata required for grid storage of lattice data. The MWWG is charged with defining standards for the software interfaces of the middleware used to manipulate and manage the data contributed from local or national grids and other storage systems.

The initial work of these groups was reviewed at a virtual meeting (via AccessGrid) in May 2003 and their medium and short terms goals revised. The short term goals (i.e. by LATTICE 2003) included presentation of an initial XML schema (QCDML) capable of describing gauge configurations generated by a range of algorithms and actions and demonstration of remote browsing of lattice data collections in 3 continents.

2. MIDDLEWARE

First we review some general grid concepts and then report on how these are being, or might be, applied in the context of ILDG. One might well ask “what is a grid and why do we want one?”. The grid is sometimes described as the next iteration in the development of the internet. The World Wide Web, invented by and for particle physicists, is for sharing information. The (computational) grid is for the automated sharing resources on demand (such as computer cycles, data storage, data, etc) in the same way as the electricity grid gathers and distributes electrical power to consumers. In this analogy, the ILDG is intended to provide the sort of inter-grid link that connects

the UK and French power grids. In the past, lattice data has often be stored somewhat haphazardly in large archival systems, without any systematic way of noting what or where the data is. This can lead to the situation where the data storage pattern is ‘write-once, read-never’. There is a need to build separate, but interoperable, systems which themselves, rather than the user, take care of recording what the data are and where it resides

The assumption is that each collaboration participating in ILDG will have its own data storage system. Rather than impose some system on all the collaborations, what is required is a uniform interface for each grid to interact with another. This is sometimes called a grid-of-grids, although technically this is a slightly misleading term. However, what is important is that the owner of each resource controls access to it.

Security of data and systems is obviously of paramount importance. The identity of users is ensured by the use of X509 certificates and SSL public/private key encryption. There is a single login to the grid. Time limited proxy certificates are generated for remote operations. At a remote site, this proxy certificate is mapped to an account, which could be a specific user account, or a non-specific one. Certificates, for both machines and people, are issued by a Certificate Authority (CA). The resource owner decides which CAs are trusted and whether to accept their certificates. For instance, in the UK the national e-science CA requires authentication from your home institution and photographic ID before issuing a certificate. UK citizens are not required to carry ID, so in the UK your virtual identity is stronger than your real one! ILDG will need to establish a trust network of other CAs or could act as its own CA.

2.1. Filenames and namespaces

A namespace is collection of names which form a mathematical set. A name can be given to the namespace, and this is often done using a URI (Uniform Resource Identifier). A name of an object is then valid only in that namespace. An XML namespace differs slightly in that it must have a URI reference and can have internal structure in the namespace. Both types of names-

paces can be amalgamated. For example, in the QCDML schema there is an element “field”, this has a meaning in the namespace of QCDML. In an application the name “field” may already have a meaning, in which case there would be a conflict. Both namespaces can be made explicit, then “app:field” and “qcdml:field” are distinguishable.

The Logical Filename (LFN) is the name of a file in a particular namespace. The namespace may encapsulate different machines in different domains. The LFN is not the physical address of the file. It is a name which uniquely identifies that file in that namespace. Often it is a URI.

In a grid, the Replica Catalogue (RC) maps the LFN to the physical address of the file. In a data grid, where there may be more than one copy of the file, the RC tracks the number and location of the file instances. Data access is via the RC and the LFN. The user doesn’t need to know anything about the file’s physical location.

2.2. QCDgrid - an example

As an example of a data grid, and to highlight some of the ideas above, we describe UKQCD’s data grid, QCDgrid. QCDgrid is a member of GridPP [4] a collaboration of all UK groups in particle physics working on the grid. The hardware infrastructure is Linux PCs (currently) running RH7.x with ~ 1 Tbytes RAID disk arrays. This is relatively cheap and the RAID adds built in redundancy. Globus is used for the low level middleware. The European Data Grid (EDG) software will be used when and where possible, but at the moment the software consists of custom written client tools and the central control thread (CT) which runs the grid. Each of UKQCD’s gauge configurations has an accompanying XML metadata file. Access to the data is via the metadata. This can be searched in a browser which queries the XML database (eXist, running in Tomcat).

The CT runs in a cycle on one node of the grid. As this is a single point of failure, the node broadcasts its configuration files so that if it goes down, another node can run the CT. The CT controls the flow of data between users and storage nodes. The CT checks how much disk space is available on each storage node, decides on which

nodes data is stored and from which node data is supplied to users, as well as registering any changes with the RC. Data access is either with command line tools and the LFN or via the metadata browser. The browser GUI builds an Xpath query on the metadata, and the data can then be downloaded. All UKQCD gauge configurations are stored and accessed in this way.

2.3. Grid of grids

To implement the grid-of-grids we need to aggregate the RCs of different grids. This has to be done in a secure fashion, such that the owner controls the resource, and to distinguish between public, restricted and private access. As a first step we make two RCs simultaneously readable, and this requires a common interface between the grids. Storage Resource Manager (SRM) seems ideally suited to this role. SRM is defined by the interface it presents to the outside world, but behind that interface anything is allowed. The SRM standard is still evolving. As a first step we aggregated the RCs of QCDgrid and JLab running SRM as an interface. Version 1 of the specification is employed, specifically a SOAP based XML protocol and the JLab Java browser as a GUI for web services. This can list the LFN of the QCDgrid and JLab RCs simultaneously

In the next step we would need to set up a trust network of CAs, increase the functionality of the SRM, and interact with the metadata. Both the QCDgrid software and the Globus SRM API are available under a GPL licence [5].

3. METADATA

QCD Markup Language (QCDML) is an XML schema for QCD lattice gauge theory data. In this section, we summarise only the basic features of the initial QCDML draft [6] for the description of gauge configurations completed recently by the MDWG. We focus here on the description of physical parameters and the algorithm and on a proposal for the binary format.

Collaborations submitting configurations to the ILDG will write a QCDML XML document for each configuration and store it on their database (and RC). Researchers then issue a

search query to the database or RC and get information on availability. The database or RC delivers the LFN in the ILDG namespace which then enables researchers to retrieve the configuration using the ILDG middleware.

3.1. Strategy and structure

The MDWG has worked out the following strategy: 1) QCDML defines a minimal set of configuration information which researchers are usually interested in, without spoiling extensibility to other lattice data. 2) In order to provide a unique description of information, we use principally “element” instead of “attribute” or “value”, because one can define an allowed set of elements. A module for each lattice action/field is prepared together with its precise definition written in a human readable glossary document and put on the ILDG web page.

Each QCDML document consists of “management”, “implementation” (machine/code) and “markov_step” sections. Elements for a particular configuration such as trajectory number are placed just under the “markov_step” section. Ensemble information described in “physics”, “algorithm” and “precision” parts are put together in “markov_chain” subsection of the “markov_step”.

3.2. Physics section

The physics part has a rich structure. A lattice action is divided into gluon and quark parts, each of which is a sum of operators (e.g. Wilson-Dirac operator) which in turn consist of fields (e.g. Wilson quark and link variables) and coupling parameters (e.g. κ). A lattice field is in general independent of the lattice action. Boundary conditions are a property of fields. Lattice size is also independent from field and action. The structure then looks like Fig. 1 which we have tried to describe straightforwardly in QCDML.

The number of dynamical quarks is the most important information and is recorded in the quark action section, because different actions may be used for different flavours. As an example, we record a configuration for $N_f = 2+1$ QCD as

```
<quark>
  <n_sea_quarks>3</n_sea_quarks>
```

For the ILDG, keeping identification of configurations is important. Information such as collaboration name and physics parameters is not defined in the standard format. Such information is recorded in a corresponding QCDML document. Therefore, we propose to encapsulate the binary configuration, QCDML document and BinX document into one file using DIME technology, and distribute it via the ILDG. The details for this will be discussed with the MWWG.

4. PROGRESS AND FEEDBACK

The QCDML proposal for gauge configuration metadata described above is now open for comment and feedback from the community. Please submit your opinion to the MDWG via the forum page of the conference website or write to them directly (qcdml@rccp.tsukuba.ac.jp). Following this feedback, the ILDG will adopt a modified version of this schema and recommend that participants use it to mark up configurations which they intend to share. The assumption is that normal etiquette on collaboration, cooperation and publication will be observed when making use of any ‘published’ configurations. It is expected that the MDWG will then turn its attention to expansion of the schema to cope with other lattice data objects (e.g. correlators) which collaborations may wish to share.

The demonstration of intercontinental browsing of configuration collections (initial goal for the MWWG) was partially successful – within the limitations of bandwidth available at the conference site. Collections in the UK (QCDgrid) and in the USA (JLab) were browsed during the conference (see Fig 2).

As noted above, further work remains to be done to implement suitable grid certification procedures. The requirement here is to allow, within a global grid context, easy read access to all potential users and controlled write access to specified participants who themselves may be geographically distributed. The MWWG also welcomes community input on these and other issues.

A brief discussion session which followed the ILDG presentation and demonstration indicated considerable potential interest in the community.

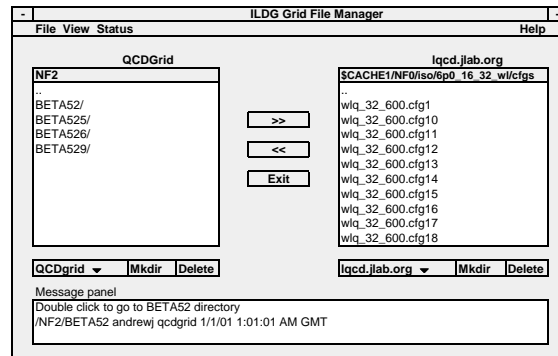


Figure 2. The prototype ILDG file manager used to browse remote data in QCDgrid (UK) and JLAB (USA).

In particular, the desire was expressed for better mechanisms for promoting technical feedback from lattice collaborations to the working groups and for ratifying ILDG proposed standards. It was also suggested that a third working group be established to develop data access policies. These issues will be considered at future ILDG workshops [6].

REFERENCES

1. C.T.H. Davies, A.C. Irving, R.D. Kenway and C.M. Maynard (UKQCD collaboration), Nucl Phys B (Proc Suppl) 119 (2003) 225-226
2. MWWG members are G. Andronico (INFN), Y. Chen (JLAB), A. Gellrich (DESY), J. Hettrick (NERSC), D. Holmgren (FNAL), A. Jackson (EPCC Edinburgh), E. Neilson (FNAL), T. Perelmutov (FNAL), J. Perry (EPCC Edinburgh), M. Sato (Tsukuba), J. Simone (FNAL), C. Watson (JLAB).
3. MDWG members are G. Andronico (INFN), P. Coddington (Adelaide), R. Edwards (JLAB), B. Joo (Edinburgh), C. Maynard (Edinburgh), D. Pleiter (NIC/DESY), J. Simone (FNAL), T. Yoshié (Tsukuba).
4. <http://www.gridpp.ac.uk/>
5. <http://forge.nesc.ac.uk/>
6. <http://www.lqcd.org/ildg/>
7. <http://www.edikt.org/>

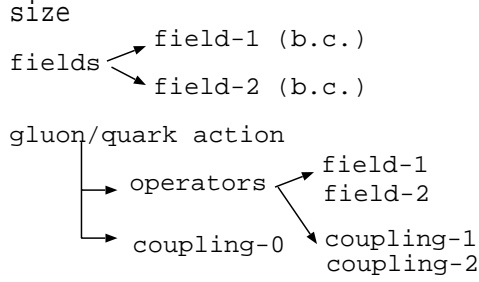


Figure 1. Schematic diagram of the physics part.

```

<sw_quark_action>
  <n_quarks>2</n_quarks>
  .....
</sw_quark_action>
<sw_quark_action>
  <n_quarks>1</n_quarks>
  .....
</sw_quark_action>
</quark>

```

For a better understanding of the structure of the action part, we reproduce a complete pseudo-XML document below for the clover quark action. See Ref. [6] for details and further explanations.

```

<sw_quark_action>
  <n_quarks>2</n_quarks>
  <wilson_fermi_operator>
    <field> link_gluon </field>
    <field> wilson_quark </field>
    <coupling>
      <kappa> 0.1350 </kappa>
    </coupling>
  </wilson_fermi_operator>
  <sw_fermi_operator>
    <field> link_gluon </field>
    <field> wilson_quark </field>
    <coupling>
      <c_sw> 2.02 </c_sw>
      <determination> NP </determination>
    </coupling>
  </sw_fermi_operator>
</sw_quark_action>

```

3.3. Algorithm section

Since there are often many variants of a particular algorithm, the MDWG came to the conclusion that it is not practical to describe an algorithm precisely on a unique common basis. We therefore devolve responsibility for the full description of an algorithm to the supplier collaboration.

The QCDML defines only four common elements, “name”, “reference”, “exact”, and “parameters”. In the “reference”, we quote a paper containing the algorithm when this is published. Otherwise, each collaboration writes a glossary document, puts it on the web page, and quotes the URL. Under the “parameters” element, each collaboration places several elements whose names depend on collaboration and algorithm. The collaboration name prefix (e.g. groupA:) is placed at the beginning of each element. This (namespace) feature allows different collaborations to continue to use their own terminology. The working group asks all contributors to list at least the most basic and important parameters.

3.4. Binary format and distribution

The MDWG also proposes a standard binary format of configurations as an abstract/reference format. Each contributor will prepare a C library to read their configuration (whose format can be different from the standard one) into the standard format. Then the user can convert it to their own format by writing a corresponding small C program.

Another method of format conversion proposed depends on BinX [7] (an XML schema to describe binary format) technology. Using a conversion tool which will be provided by the BinX project and the MDWG, one can convert contributor format to user format without referring to the standard format. For that purpose, we ask contributors to prepare a BinX description of their own binary format.

Details of the standard format are given in Ref. [6]. An important point to note here is that we propose to store only the first 2 rows of the 3x3 unitary matrix. Users will reconstruct the third row using the unitarity condition.

Status of International Lattice Data Grid – An Overview –

Akira Ukawa^a

^aCenter for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan

We report on the status of the International Lattice Data Grid.

1. Introduction

International Lattice Data Grid (ILDG)[1] is an effort toward building a data grid of lattice QCD gluon configurations so that people in the lattice field theory community could share them and fully exploit their physics content. It should provide an infrastructure for international research effort, and hopefully work as a vehicle for enhancing collaborations and exchange of people in our community.

ILDG started with the proposal of the UKQCD Collaboration at Lattice 2002[2]. The first ILDG Workshop [4] was held in December 2002. Discussions on the target and strategy of ILDG was made, and a Metadata Working Group and a Middleware Working Group were set up to carry out technical work. The second workshop followed in May 2003[4], and the “virtual” format of this workshop series was established.

The activities of ILDG in its first year was reported at Lattice 2003[3]. A draft version of QCDml, an XML for describing gluon configurations, was presented.

In this second year, two more workshops were held, in December 2003[4] and May 2004[4]. Thanks to the effort of the Metadata Working Group and people who participated in the discussions, v1.1 of QCDml has been completed. Building up middleware also made progress. In addition to technical work, the organizational aspects of ILDG was also discussed, and the ILDG Board was introduced at the 3rd ILDG Workshop in December 2003.

Our report of ILDG at Lattice 2004 consists of four presentations. The present report provides an overview of the ILDG activities since Lattice 2003. The status of the Middleware Work-

ing Group is reported by Bálint Joó[5], and that of the Metadata Working Group with emphasis on QCDml v1.1 by Dirk Pleiter. Chris Maynard gives a tutorial on QCDml v1.1 so that people understands it and use it for marking up gluon configurations. The presentations of Pleiter and Maynard are combined in a single writeup[6].

2. Activities of Working Groups

The Metadata Working Group consists of G. Andronico (INFN), P. Coddington (Aelaide), R. Edwards (JLAB), B. Joó (Edinburgh), C. Maynard (Edinburgh), D. Pleiter (NIC/DESY), J. Simone (FNAL), and T. Yoshié (Tsukuba, convenor). In response to the presentation of QCDml draft v4.0 at Lattice 2003, important comments were made by the SciDAC Software Group of USA[7]. QCDml v1.1 presented at Lattice 2004[6] incorporates these comments.

While QCDml v1.1 provides a standard for the *description* of gluon configuration files, a separate standard is necessary for the *data format* of configuration files. Discussions on the data format are being conducted jointly by the Metadata and Middleware Working Groups, and a final report is expected soon.

The Middleware Working Group consists of G. Andronico (INFN), Y. Chen (JLAB), A. Gellrich (DESY), J. Hettrick (NERSC), D. Holmgren (FNAL), A. Jackson (EPCC Edinburgh), B. Joó (EPCC Edinburgh, co-convenor), E. Neilsen (FNAL), T. Perelmutov (FNAL), J. Perry (EPCC Edinburgh), M. Sato (Tsukuba, co-convenor), J. Simone (FNAL) and C. Watson (JLAB, co-convenor). The goal of this working group is to design standard middleware for search

and retrieval of configuration files stored in ILDG. The architecture for the middleware is now formulated, and work is in progress, albeit slowly, to fill out the technical details[5].

3. ILDG Board

As various issues began to proliferate on technical and strategic aspects of ILDG, it was felt that an organizational structure is needed to coordinate its effort. The ILDG Board was introduced at the 3rd ILDG Workshop to meet this need. Further details of the Board is as follows:

1. The Board consists of one member from each country to decide policy and oversee the working groups. The initial membership is Brower (US), Jansen (Germany), Kenway (UK), Ukawa (Japan).
2. The chairperson rotates on an annual basis. Kenway effectively acted as chairperson till December 2003, and Ukawa is serving for 2004.
3. The Board is charged with expanding the membership, seeking the allocation of resources from their national projects, and considering the access policy for ILDG data and guidelines for data sharing.
4. The chairperson is responsible for organizing the 6 monthly workshops.

4. Data Sharing Policy

Up to now, only two cites offer gluon configurations to lattice field theory community. One is the NERSC cite[8] set up many years ago where configurations generated by the MILC Collaborations are stored. The other is the Lattice QCD Archive at Tsukuba [9] opened in February 2004 where two-flavor configurations are made available.

ILDG envisages that many more cites begins to operate in Europe and USA in the near future. Hence discussions and coordination on the data sharing policy is an important step to make ILDG an effective tool for our community.

At the Lattice 2004 presentation of ILDG, comments were invited on this point. While an undercurrent seemed to be there that an open policy is desirable and appreciation was expressed to-

ward the collaborations which already made the configurations available, it was felt that further discussions were needed.

The ILDG Board discussed this issue after Lattice 2004. It came to conclude that an initial data sharing policy should be moderate. The proposal from the ILDG Board reads as follows:

ILDG Data Sharing Policy

In addition to the normal practice of sharing data within restricted groups for specific joint projects, collaborations that are generating substantial sets of gauge configurations should

1. mark up their data using the QCDml standard;
2. adopt a policy to make their data generally available as soon as possible;
3. announce on the ILDG web pages, at the time of production, their chosen action and parameter values, and when their configurations will be made generally available through ILDG.

5. Conclusions

We are now entering a new era when new machines such as QCDOC and ApeNEXT begin to operate. We hope that ILDG develops timely to exploit the potential of these and future machines for further progress of lattice field theory.

REFERENCES

1. <http://www.lqcd.org/ildg/>
2. C.T.H. Davies, A.C. Irving, R.D. Kenway and C.M. Maynard (UKQCD collaboration), Nucl Phys B (Proc Suppl) 119 (2003) 225-226
3. A.C. Irving, R.D. Kenway, C.M. Maynard and T. Yoshié, Nucl Phys B (Proc Suppl) 129 (2004) 159-163
4. See links in Ref. [1].
5. B. Joó and W. Watson, ILDG Middleware Working Group Status Report, in these proceedings.
6. C. Maynard and D. Pleiter, QCDml: First Milestones for building an International Lattice Data Grid, in these proceedings.
7. <http://www.lqcd.org/scidac/>
8. <http://qcd.nersc.gov/>
9. <http://www.rccp.tsukuba.ac.jp/lqa/>

ILDG Middleware Working Group Status Report

B. Joó ^a, W. Watson ^b

^aSchool of Physics, University of Edinburgh, Edinburgh, Scotland, U.K

^bThomas Jefferson National Accelerator Facility, Newport News, Virginia, U.S.A

We report on the status of the ILDG Middleware Working Group.

1. INTRODUCTION

The Middleware Working Group was formed with the aim of designing standard middleware to allow the interoperation of the data grids of ILDG member collaborations. Details of the working group are given in section 6. In this contribution we outline the role of middleware in the ILDG, present our proposed middleware architecture and discuss our current status and future work within the working group.

1.1. What is Middleware

Consider a lattice gauge theory practitioner in the US wishing to retrieve data from the data grid in the UK. He¹ is used to the way things work in the US. However, for historical reasons, the UK has developed its own *drive on the left* grid software before the advent of the ILDG. The US and UK systems are different. They use different databases for the catalogues. They use different storage systems. How is the researcher to avoid the headache of re-learning everything he has painstakingly learned about the US data grid?

The researcher interacts with *applications* (such as web browsers) which we will also refer to as *clients*. The actual databases holding the catalogues and the storage systems are called the *back end*. The *middleware* comprises of the layers of abstractions, interfaces, services and protocols between the applications and the back end. One piece of middleware for example would be a front end to a catalogue that an application could send

queries to in a single standardised way, irrespective of the actual back end database. Another piece of middleware may be an abstraction such as the concept of a logical name given to a piece of data. The logical name differs from a filename in the sense that it does not encode the location of the data. Hence applications dealing with logical names instead of file names can immediately work between different grids sharing the namespace of files. However, in order to retrieve the data, logical names still need to be resolved to actual file names. This can be done by sending the logical name to a *service* that can return the location details. The file can then be downloaded using a particular file transfer *protocol*, such as FTP, HTTP, or GSIFTP.

1.2. Web Services

Middleware can thus allow the interoperation of data grids given that the abstractions, protocols, interfaces and services comprising it are standardised. How can the interfaces and services to be standardised?

In the past, gateways to services were *server* programs which interacted with *client* programs through some messaging protocol. Custom and sometimes unportable messages were often used. Web services are modern versions of these server programs, with the difference that the definitions of the interfaces and the messaging protocol have been standardised. Messages and interfaces are specified in Extensible Markup Language (XML) [1], using the Simple Object Access Protocol (SOAP) [2] for messages and Web Services Description Language (WSDL) [3] for the interfaces. XML, SOAP and WSDL are industry

¹for the sake of grammar only, we assume that the researcher is male

standards defined and maintained by the W3C consortium [4].

2. WEB SERVICE ARCHITECTURE

2.1. Overview

The ILDG middleware architecture is to be based on a collection of stateless web services. These are to provide a standardised interface to back end services such as a local storage system or the grid service layer of a non ILDG data grid.

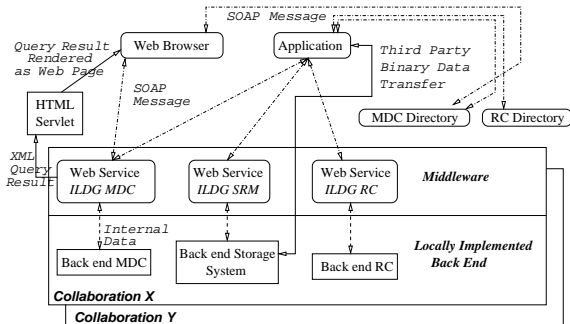


Figure 1. The Middleware Web Service Architecture

We illustrate the middleware architecture in figure 1. The large rectangles represent the grids belonging to hypothetical participating collaborations X and Y. These are split into the *Middleware* and *Locally Implemented Back End* respectively. The ILDG Middleware web services appear in the *Middleware* half. We have drawn in the three main web services:

- ILDG Metadata Catalogue (MDC),
- ILDG Storage Resource Manager (SRM)
- ILDG Replica Catalogue (RC) service.

These web services interact with back end implementations. The back end implementations are specific to the participating grid. For example the back end storage system may be directly

controlled by the ILDG SRM service for collaborations who use SRM to manage their data. Alternatively, the back end storage system may be some collaboration specific non-SRM implementation, in which case the ILDG SRM web service acts as an “interoperability layer” allowing ILDG compliant applications to treat the back end storage as if it was an SRM. What is important from the point of view of interoperability is that the applications see a standard web service interface.

Figure 1 also shows possible data transfers between the application, the web services and the back end. The SOAP messages exchanged between the application and the web services are shown as dashed-dotted lines. The solid line between the application and the back end storage system illustrates the idea of third party transfers, where the storage system can initiate data upload/download between itself and the application directly. We also show the hypothetical case of the ILDG MDC returning the result of a metadata query, and how this can be rendered from its XML form into a human readable web page by passing it through an HTML rendering servlet.

Finally we illustrate in figure 1 a possible way for applications to learn of the existence and whereabouts of the ILDG Web Services of participating collaborations. This may be done through the use of *directory services*. An application can consult, say, the MDC Directory service to discover how to contact one or more ILDG MDC services. It is not yet clear who will operate the directories. Each collaboration may operate one, or perhaps the ILDG could maintain one or more global instances of these services, details of which may be made public on the ILDG web pages.

At this point we should highlight that the middleware working group regards its primary role as that of standardising the web services in the architecture just presented. The working group does not feel responsible for providing the applications or the back end services described.

2.2. Naming the Data

It is envisaged that each item of data in the ILDG will be identified by a global logical filename (GFN). The space of GFNs will be partitioned between participating collaborations to

avoid name clashes. The individual collaborations will then be responsible for managing their own allocated name spaces.

Since the data item may be replicated a GFN may correspond to several copies of the data. The mapping between GFNs and individual files is maintained by the RC. We will refer to these individual filenames as site universal resource locators (SURLs). SURLs may be presented to the SRM service in order to retrieve the actual files.

2.3. Metadata Catalogue

The ILDG MDC service has the task of allowing the standardised interrogation of the MDCs of participating collaborations. Applications can present metadata queries to the ILDG MDC. The replies can be either GFNs or they can be full or partial metadata instance documents that are selected by the query. This gives the ILDG MDC *read only* semantics. It is envisaged that the ILDG MDC will interrogate a locally implemented MDC which allows for maintenance of the local catalogue. In other words: insertion/deletion of metadata is expected to be handled outside of the ILDG framework by the participating collaborations.

2.4. Replica Catalogue

The ILDG RC service has to track various existing copies of a given file. Essentially, it performs a mapping from a GFN to one or more SURLs. In order to allow files to migrate it may be necessary for the back end services or applications to create and remove entries from the catalogue. Further, we expect that as files migrate, some of the SURLs returned from the replica catalogue may become invalid. The burden of dealing with this complexity is pushed onto the applications. Prototype RCs exist at the Jefferson Laboratory ² (JLab) and at Fermilab ³.

2.5. The SRM

The Storage Resource Manager (SRM) has the task of managing the storage system within a collaborating data grid. SRM is actually a sophisticated storage resource management system de-

veloped between a variety of institutions. The design of the SRM is lead by the Storage Resource Management Working Group which is soon expected to become a Global Grid Forum Grid Storage Management Working Group [5].

At the time of writing, version 2.1 of SRM has been defined and the WSDL definition has been made available online [5]. The JLab has an implementation of the SRM 2.1 specification, which was completed in the middle of summer 2004.

The chief envisioned functionality of the SRM in the ILDG, which may be much more limited than its complete functionality, is to allow the downloading of files. On the presentation of an SURL, the SRM identifies the individual file server which holds the file and returns a transfer URL (TURL) to the file. This is a URL which can be used to download the actual file, for example by using the *wget* utility with the TURL if the download is to proceed via the HTTP transfer protocol, or the *globus-url-copy* utility if the transfer is to proceed through GSIFTP.

3. FUTURE WORK

We have presented a high level overview of the middleware architecture as it is currently envisaged. Many details still require discussion, in particular the detailed WSDL definition of the interfaces of all the components remains to be completed. This is particularly true for the case of the MDC and the RC. Work on the MDC is underway at the CCS at Tsukuba, and at Fermilab. A prototype RC implementation is nearly ready at the JLab.

The UKQCD collaboration will attempt to implement an SRM compatibility layer in order to allow the transfer of data between its UK QCD-Grid and a standard SRM such as the one at the JLab.

The interaction of MDCs between grids still needs to be clarified. One suggestion has been to produce a specification which is *recursive*. In this case one can interact with a root MDC, which transparently queries lower level MDCs it knows about. Another suggestion which has already been alluded to is the use of directory services.

An interesting unresolved issue is how to per-

²in full: Thomas Jefferson National Accelerator Facility

³in full: Fermi National Accelerator Laboratory

form metadata queries. The metadata working group has proposed a definition of QCDML which assumes a hierarchical XML data model. However hierarchical and XML databases are not as mature and well known as relational ones, and it may be desirable to hold the metadata in a relational database at least at the lowest level. The question is whether to present an XML (XQuery) or a relational (SQL) view of the databases for the applications to query, or perhaps to provide both. If the SQL view is to be provided, it may be useful to define a relational table based view of the QCDML schema in order to allow straightforward use of SQL back end databases.

4. FILE FORMATS AND PACKAGING

So far we have neglected issues pertaining to the format and packaging of data. The middleware working group is currently in discussion with the metadata working group on these issues.

The key question is whether the ILDG should or should not mandate a standard gauge configuration file format. Should a file format be mandated, the question arises as to how to provide tools so that collaborations can transform the data between the standard format and their own formats in a straightforward manner. It is also possible to not mandate a standard format, but to provide a standard way to *describe the format* of the stored configurations from which tools can be generated to effect the transformation between formats.

One option for the former case is to maintain program code as part of the metadata whereas in the latter case the binary data layout may be completely specified by BinX markup [6]. The BinX project also provides a software library that can be used to perform transformations on the data such as a rearrangement of indices, reversal of bit and byte order and the selection of various slices, making it straightforward to write programs to transform the data in any desired way.

5. CONCLUSIONS

Currently, the main limitation of the middleware working group is a lack of manpower.

Nonetheless, progress is being made albeit slowly. The working group plans to hold a working meeting to be attended by the conveners and some implementers to finish the definitions of the web services described here.

6. ABOUT THE WORKING GROUP

The working group has three joint conveners:

- *William Watson* from the Thomas Jefferson National Accelerator Facility (JLab), Newport News, VA, USA,
- *Mitsuhisa Sato* from the Centre for Computational Sciences, Tsukuba, Japan,
- *Bálint Joó* from the School of Physics, University of Edinburgh, Edinburgh, UK.

We would also like to highlight the participation of *Eric. H. Nielsen* from Fermilab, Batavia, IL, USA, who, while not a convener, has been an extremely active member of the working group contributing a lot of material including analysis, use cases and samples of WSDL that have greatly aided the progress of the working group.

Communication in the working group has hitherto proceeded by email and through the public mailing list [7] which is archived at [8]. Further information about the working group is also available through the ILDG Web Site [9].

REFERENCES

1. <http://www.w3.org/XML>
2. <http://www.w3.org/2000/xp/Group>
3. <http://www.w3.org/TR/wsd1>
4. <http://www.w3.org>
5. <http://sdm.lbl.gov/srm-wg>
6. <http://www.edikt.org/binx>
7. ildg-middleware@forge.nesc.ac.uk
8. <http://forge.nesc.ac.uk/pipermail/ildg-middleware>
9. <http://www.lqcd.org/ildg>

QCDml: First milestone for building an International Lattice Data Grid

C.M. Maynard^a, D. Pleiter^b,

^aSchool of Physics, University of Edinburgh, Edinburgh EH9 3JZ, UK

^bJohn von Neumann Institute NIC / DESY Zeuthen, D-15738 Zeuthen, Germany

We present an XML schema for marking up gauge configurations called QCDml. We discuss the general principles and include a tutorial for how to use the schema.

1. REPORT FROM THE METADATA WORKING GROUP

To achieve ILDG's aim of sharing gauge field configurations world-wide a standardised description of configurations is mandatory. XML (Extensible Markup Language) is the language of choice for metadata since it is designed to describe data. These metadata documents will be both human readable, since XML is verbose, and easy to parse by computers. Finally, standards on the structure and contents of XML documents can be enforced by using XML schemata.¹

The ILDG metadata working group [1] addressed in recent years the task of defining an XML schema. During the 2003 lattice conference [2] the group presented an initial proposal. Since then the strategy for marking-up the physics parameters has been revised. However, whilst the contents remained unchanged, the usability has been significantly improved. The working group presented at this conference the first working version of the schema, QCDml.

Many lattice practitioners, who are typically not familiar using XML yet, might ask whether the proposed strategy is too complicated. However, using XML is much easier than many might expect. A large number of software tools exists for creating and parsing XML documents. When looking at the proposed schema, it should be realised that it's complexity originates from the large variety of different simulations being carried out within the lattice community. Metadata documents will only contain information on one par-

ticular simulation. All metadata documents will have to conform to the schema. It is the schema which contains the complexity which allows the many different actions being used for simulating QCD with dynamical fermions.

During the design process three general requirements have been taken into account. Firstly, the schema has to be *extensible* as parameters of future simulations cannot be anticipated. This has to be done in such a way that any metadata document which conforms to the current schema will also conform to any future extended schema. The long-term validity of all metadata documents published by users of ILDG is a definite design goal of the schema. Secondly, the mark-up of simulation parameters has to be *unique* to avoid, e.g., the same action being described in two different ways. This would otherwise spoil the possibility to search for certain configurations. Finally, the schema has been kept *general* enough to allow the description of data other than gauge configurations (propagators, correlators, etc.) in the future.

1.1. Overview on the xml schemata

Gauge configurations are generated by a Markov chain. All configurations from one chain share many properties. Therefore the metadata can be split into two documents. The *ensemble XML* document contains all parameters which remain unchanged for the whole Markov chain. Other parameters are specific to one or a set of consecutive Markov steps and will be stored in a *configuration XML* document. A Universal Resource Indicator (URI) is used to link these

¹See section 2 for references and further details.

two documents as well as the Logical File Name (LFN) to link the configuration XML document and the gauge configuration itself (see Fig. 1). For both types of XML documents corresponding schemata have been developed which can be downloaded from the working group's website [1].

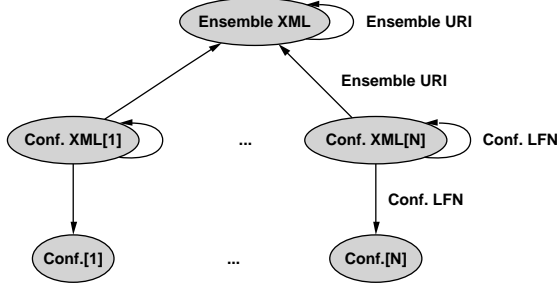


Figure 1. Logical file names (LFN) and URIs linking ensemble and configuration XML documents as well as gauge configurations.

An example for parameters which will be the same for all configurations of an ensemble are the physics parameters. The corresponding parts of the ensemble XML document consists of information about the lattice size and a mark-up of the action. The description of the action is most critical for preserving uniqueness and extensibility of the schema. The metadata working group adopted the following strategy which is visualised in Fig. 2:

- Each action can be split into a gauge and a fermion action.
- The ensemble XML schema contains an element `<generalGluonAction>` and an optional element `<generalQuarkAction>` which will be substituted by the actually used action.
- Actions which contain a structure which is the same as for a simpler action are ordered by an inheritance tree. For example, the clover fermion action is equivalent to the standard Wilson fermion action plus an improvement term.

- Actions which have the same structure in common are grouped. For instance, the Iwasaki and the Symanzik improved gauge actions only differ by the choice of the couplings.

This inheritance tree of possible actions is obviously extensible. Any action will be included into the schema only once to ensure uniqueness.

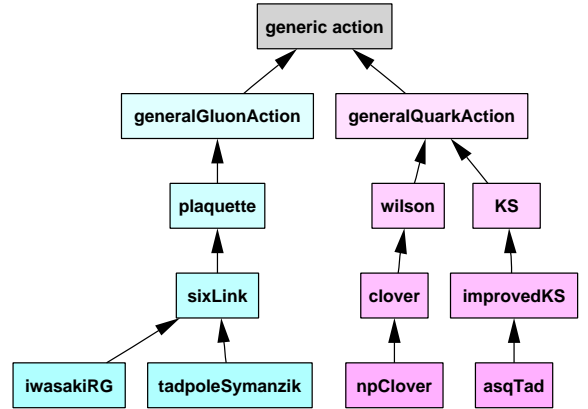


Figure 2. Hierarchy of actions in the ensemble XML schema.

The description of each action is organised in three parts (See Fig. 3). Firstly, an array of `<couplings>` allows to store the names and values of all couplings and, in case of the fermion action, the number of flavours. Secondly, a description of the fields is required to store information, e.g., about the used normalisation or boundary conditions. Finally, any further information can be stored in a *glossary*.

The element `<glossary>` contains a URL to a document provided by the contributors. This document does not have to conform to any schema, it may even be not an XML but rather a human readable document, e.g. a TeX file. This gives the contributors the freedom to store all kind of information with regard to the used action, for instance information on the particular choice of couplings. Nevertheless, some guidelines will be needed to ensure that these documents contain all relevant information in a comprehensive form.

The variety of algorithms being used in lattice simulations is even larger than the number of different actions. The parameters of the algorithms are therefore essentially unconstrained. It should be noted that as a consequence such parameters are in practise not searchable. The only constrained element `<exact>` provides information on whether the algorithm being used is exact or not.

It will be mandatory to provide a reference to a publication on the used algorithm and an URL to a glossary document. Furthermore, all submitters are strongly encouraged to provide a full list of all algorithmic parameters used in their simulations. The names of the parameters should be chosen in such a way that they can be uniquely related with the algorithmic parameters described in the publication and the glossary file. Unlike the physics parameters the algorithmic parameters might change when generating a Markov chain. For instance, the step size of the HMC algorithm might be adjusted during a run. While the ensemble XML document will contain most of the information on the used algorithm, the submitter can store those parameters which might change within an ensemble into the configuration XML document.

As an matter of good scientific research practise, the generation of each configuration should be fully and comprehensively documented. Therefore submitters will have to provide information which machine and what code has been used to generate a particular configuration. Each machine can be identified by machine (or partition) name, the hosting institution and the machine type. Additional information can be stored as an optional comment. Concerning the simulation program submitters have to ensure that it can be identified by a name, a version string (e.g. a CVS tag), and the date of compilation. Again an optional comment allows to add further information, e.g. on compile time variables. All these parameters are not constrained and therefore not searchable. Only the information on the precision used to generate configurations will be searchable, as users might care about the used machine precision, in particular when quark masses become light.

The metadata will also include information about who submitted a configuration to ILDG within which project. This information can be stored in the management section which is foreseen in both the ensemble and the configuration XML document. Within this section also information will be stored which allows the user of a configuration to check the integrity of the downloaded data. To do so he can verify the checksum for the binary files, which will however not be preserved when transforming the gauge configuration into a different format. The user can still perform another test by recalculating the plaquette value and comparing this with the value stored in the configuration XML document. It should however be noticed that this test is less strong as both values will only agree within rounding errors and because the plaquette value is preserved by various transformations of a gauge field configuration.

All operations affecting an ensemble or just a particular configuration should be documented. Possible actions include the insertion and modification of an ensemble and the insertion, replacement or even the revocation of a configuration. The last two actions might be necessary if for example the computer or the code which was used to generate a configuration turned out to be broken. It should be noted that the submitters of configurations might not have to generate this information themselves, as the user interfaces to be developed for performing such actions could take care of patching the ensemble and configuration XML documents accordingly.

2. QCDML TUTORIAL

The purpose of this section is to demonstrate how to mark up configurations according to the XML schema QCDml. We start with some Frequently Asked Questions (FAQ) about XML schema.

2.1. XML Schema FAQ

- What is XML Schema?
 - XML schema is a collection of rules for XML documents
 - An XML schema is itself an XML instance Document (ID)

- Why do we need an XML schema?
 - So that computers can read and understand XML IDs
 - e.g. `<length>16</length>`
 - The meaning of length is context dependent, the schema makes this information explicit
- Do users need to learn XML schema?
 - No. XML schema makes it easier to write XML IDs

2.2. Getting started

QCDml1.1 is available for use and can be downloaded along with documentation and example XML IDs from the ILDG website [3] by following the links in the metadata section. In QCDml1.1 the metadata is split into two parts. Metadata which is common to all configurations in an ensemble lives in the namespace of the ensemble, and only one XML ID for the whole ensemble is required.

An XML namespace is defined by W3C [4] consortium as *a collection of names identified with a URI reference*. Metadata which is specific to each configuration lives in a separate namespace and an XML ID is required for each configuration. Below is an XML chunk, it is the start of an example QCDml ID.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<markovChain xmlns="http://www.lqcd.org/
#ildg/QCDml/ensemble1.1"
xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/
#XMLSchema-instance"
xsi:schemaLocation="http://www.lqcd.org/
#ildg/QCDml/ensemble1.1
#www.ph.ed.ac.uk/ukqcd/community/
#the_grid/QCDml1.1/
#QCDml1.1Ensemble.xsd">
  <markovChainURI>
    www.lqcd.org/ildg/ukqcd/ukqcd1
  </markovChainURI>
  +<management/>
  +<physics/>
  +<algorithm/>
</markovChain>
```

The “+” symbol is used to show that there is substructure below the element, and the # symbol is used to indicate line continuation. The element `<markovChain/>` is the root of the XML ID. The rest of the first line is the URI which identifies the namespace of the ensemble metadata. This has no prefix to identify elements which belong to this namespace as it is the default namespace. The second line is the namespace of XML schema itself. The third and fourth lines give the location of the file which contains the schema. The attribute `xsi:schemaLocation` is used to link the URI which identifies the namespaces with a URL which is the file which contains the schema. This could be a URL which is the URI of the namespace but it doesn’t have to be.

The element `<markovChainURI/>` which follows `<markovChain/>` is the URI which identifies this ensemble. Each configuration XML ID which belongs to this ensemble is linked to it using this URI.

If an XML ID conforms to the rules of a particular schema it is said to be *valid*. A software application which verifies that an XML ID is valid is unsurprisingly called a validator. Schema aware applications can then read and use valid XML IDs. One can write XML IDs in an editor such as `vi` or `emacs`, however, other tools are available. XMLspy is commercial software which can be used for schema and XML ID manipulation, it can, for instance, generate an XML ID from the schema. There are many other XML manipulation tools, links can be found at [5].

2.3. Physics and Actions

The element `<physics/>` contains two elements, `<size/>` and `<action/>`. The former is rather self explanatory and contains the size of the system.

Most searches of metadata will be on the action, consequently a lot of thought has gone into marking up the actions. Some of the object oriented features of XML schema have been employed in the schema to categorise actions, such as inheritance and the substitution group. This enables the XML IDs to be relatively simple. The general structure is shown in figure 3. The action has been split into two parts, gluon and quark.

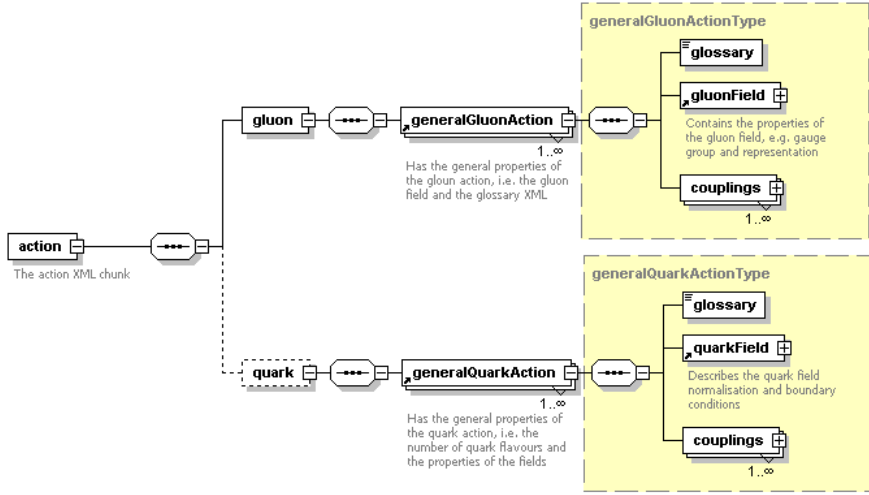


Figure 3. A diagram of the action in QCDML

These *general* elements encapsulate the general properties of the actions, such as the fields and the glossary document. The glossary contains information such as the mathematical definitions of the actions and a reference to a paper where the action is discussed. However, this type of information is not suitable to being marked up in XML, it is essentially unconstrained and as such is not really searchable by a computer.

Specific quark and gluons inherit their properties from the general actions. These actions, such as `<wilsonQuarkAction/>` have specific couplings, in this case `<kappa/>`. The `<cloverQuarkAction/>` is an extension of this action, as it is a Wilson action, but has an extra coupling, `<cSW/>`. This is shown in figure 4. An inheritance tree for various actions can be built up in this way.

The metadata working group (MDWG) has not set up inheritance trees for all possible actions, but the schema is extensible so that further actions can be added without existing XML IDs having to be modified. Actions that have been added to QCDml are shown at the ILDG metadata web pages, and an example of which is shown

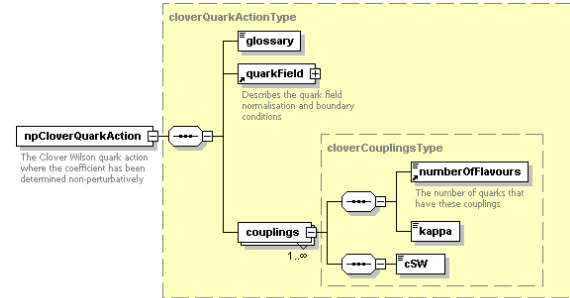


Figure 4. A diagram of the NP Clover action

in figure 5.

For the gauge actions the metadata working group adopted a particular convention for `<sixLinkGluonActions/>`

$$S_g^{6\text{link}} = \beta \times (c_0 \mathcal{P} + c_1 \mathcal{R} + c_2 \mathcal{C} + c_3 \mathcal{X}) \quad (1)$$

Where \mathcal{P} is the Plaquette Wilson loop, \mathcal{R} the six-link rectangle, \mathcal{C} the six-link chair and \mathcal{X} the three dimensional Wilson loop. The values of some of the couplings can be restricted to certain ranges or specific values. For example, in the Iwasaki RG action, the couplings are constrained, $c_2 =$



Figure 5. A diagram showing the inheritance tree for quark and gluon actions.

$c_3 = 0$, $c_0 = (1 - 8c_1)$ and $c_1 = -0.331$.

The quark action coupling has an integer valued element `<numberOfFlavours/>`. This labels how many flavours have these couplings, i.e. how many degenerate flavours. The element `<couplings/>` is array valued, that is this part of the action can be repeated but with different couplings. This is useful for marking up non-degenerate quark flavours.

An XML chunk for the $n_f = 2$ non-perturbative clover action is shown below.

```

<npCloverQuarkAction>
  <glossary>
    www.lqcd.org/ildg/
  #npCloverQuarkAction.xml
  </glossary>

```

```

+<quarkField/>
<couplings>
  <numberOfFlavours>
    2
  </numberOfFlavours>
  <kappa>0.1350</kappa>
  <cSW>2.0171</cSW>
</couplings>
</npCloverQuarkAction>

```

This is quite a short XML chunk, as the hierarchy `npCloverQuarkAction` \rightarrow `CloverQuarkAction` \rightarrow `WilsonQuarkAction` \rightarrow `GeneralQuarkAction` is contained in the schema.

A rather technical point is that in the XPath 1.0 [6] specification, there is no support for substitution groups which means that a search for `WilsonQuarkAction` elements would not return any `cloverQuarkAction` elements, although this can be achieved with a boolean “or” such as `[/action/quark/npCloverQuarkAction | /action/quark/WilsonQuarkAction]`. However, the specification for XPath 2.0 is nearing completion [7], and this issue is beginning to be addressed.

An XML chunk for the $n_f = 2 + 1$ AsqTad Kogut-Susskind quark action is shown below.

```

<asqTadQuarkAction>
  <glossary>
    www.lqcd.org/lqcd/
  #asqTadQuarkAction.xml
  </glossary>
  +<quarkField/>
  <couplings>
    <numberOfFlavours>
      2
    </numberOfFlavours>
    <mass>0.02</mass>
    <cNaik>-0.05713116</cNaik>
    <c1Link>0.625</c1Link>
    <c3Link>-0.08569673</c3Link>
    <c5LinkChair>
      0.02937572
    </c5LinkChair>
    <c7LinkTwist>
      -0.006713076
    </c7LinkTwist>
    <cLepage>-0.1175029</cLepage>
  </couplings>
</asqTadQuarkAction>

```

```

</couplings>
<couplings>
  <numberOfFlavours>
    1
  </numberOfFlavours>
  <mass>0.05</mass>
  <cNaik>-0.05713116</cNaik>
  <c1Link>0.625</c1Link>
  <c3Link>-0.08569673</c3Link>
  <c5LinkChair>
    0.02937572
  </c5LinkChair>
  <c7LinkTwist>
    -0.006713076
  </c7LinkTwist>
  <cLepage>-0.1175029</cLepage>
</couplings>
</asqTadQuarkAction>

```

The structure is the same, and all the couplings are clearly shown. The non-degenerate quark masses result in a second `<couplings/>` element, but with different number of flavours and different mass. It is easy to distinguish between $n_f = 2 + 1$ and $n_f = 3$.

2.4. Management

This metadata gives the status of the data that is registered with the ILDG. In that sense it is created when the data is made public. In principal this would be generated or “stamped” by some ILDG middleware. As this application does not yet exist, it will have to be generated “by hand”. Below is an example of the management chunk of XML.

```

<management>
  <revisions>1</revisions>
  <collaboration>UKQCD</collaboration>
  <projectName>Clover NF=2</projectName>
  <archiveHistory>
    <elem>
      <revision>1</revision>
      <revisionAction>
        add
      </revisionAction>
      <numberConfigs>
        829
      </numberConfigs>
    </elem>
  </archiveHistory>
</management>

```

```

<participant>
  <name>Chris Maynard</name>
  <institution>
    University of Edinburgh
  </institution>
</participant>
<date>
  2004-04-04T16:20:10Z
</date>
<comment>
  This is the time of addition
</comment>
</elem>
</archiveHistory>
</management>

```

The `<archiveHistory/>` element can have several revisions. `<revision/>` is array valued. An ensemble could have configurations added to it, replaced or even removed, if a mistake has been found. So the allowed values of `<revisionAction>` are an enumeration of `{add,remove,replace}`. To discover how many configurations are in an ensemble, it is relatively easy to construct an XPath query to find the number of revisions and then the number of configurations for each revision.

2.5. Algorithm

Algorithmic metadata is split between the ensemble and configuration documents, as it is possible, for instance, to have different stopping requirements for the inverter across the ensemble. The algorithmic metadata is in the form of unconstrained `<name/>` `<value/>` pairs. For example

```

<algorithm>
  <name>GHMC</name>
  <glossary>
    www.ph.ed.ac.uk/ukqcd/
    #community/GHMC.xml
  </glossary>
  <reference>
    Phys.Rev.D65:054502,2002
  </reference>
  <exact>true</exact>
  <parameters>
    <name>stepSize</name>
    <value>0.00625</value>
  </parameters>
</algorithm>

```

```

    </parameters>
</algorithm>

```

It would be very difficult to create a hierarchical structure for algorithms, and especially difficult to make such hierarchy extensible. Again there is a glossary document which contains the free text, or mathematical definition of the algorithm, and a reference to a paper which describes the algorithm. There is also the boolean valued element `<exact/>` which denotes whether or not the algorithm is exact.

2.6. Configuration XML

The configuration XML follows along similar lines. However, it is much shorter and so in principle could be directly output from the code that produced the configuration. Below is an example configuration XML ID. Again we start with a set of namespace declarations, which whilst the default namespace for configuration is separate from that of the ensemble, it still follows the same pattern.

The management section is very similar to that of the ensemble, however, there is an important addition: there is a “zeroth” revision which is *generate*. There is important metadata of when the gauge configuration was generated, and not just when it is submitted to the ILDG catalogue. As noted above ILDG middleware will eventually create the management part of the metadata when it is added to the ILDG catalogue, but this has yet to be written. The second important difference between the ensemble and configuration metadata is the `<crcChecksum/>` which can be used to verify the data has been copied correctly.

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<gaugeConfiguration
  xmlns="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/
  #config1.1"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/
  #XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://
  #www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.1
  www.ph.ed.ac.uk/ukqcd/community/
  #the_grid/QCDml1.1/QCDml1.1Config.xsd">
  <management>
    <revisions>1</revisions>

```

```

    <crcChecksum>
      2632843688
    </crcChecksum>
    <archiveHistory>
      <elem>
        <revision>0</revision>
        <revisionAction>
          generate
        </revisionAction>
        <participant>
          <name>Chris Maynard</name>
          <institution>
            Edinburgh
          </institution>
        </participant>
        <date>
          1998-04-24T10:25:52Z
        </date>
      </elem>
      <elem>
        <revision>1</revision>
        <revisionAction>
          add
        </revisionAction>
        <participant>
          <name>Chris Maynard</name>
          <institution>
            University of Edinburgh
          </institution>
        </participant>
        <date>
          2002-04-24T10:25:52Z
        </date>
      </elem>
    </archiveHistory>
  </management>
</implementation>
<machine>
  <name>T3E-900</name>
  <institution>
    epcc Edinburgh
  </institution>
  <machineType>
    Alpha processor
  </machineType>
</machine>
<code>
  <name>

```

```

    UKQCD FORTRAN
  </name>
  <version>16.8.3.1</version>
  <date>
    1997-04-04T16:20:10Z
  </date>
</code>
</implementation>
<algorithm>
  <parameters>
    <name>targetResidue</name>
    <value>1e-07</value>
  </parameters>
</algorithm>
<precision>single</precision>
<markovStep>
  <markovChainURI>www.lqcd.org/
#ildg/ukqcd/ukqcd1</markovChainURI>
  <series>1</series>
  <update>010170</update>
  <avePlaquette>
    0.53380336E+00
  </avePlaquette>
  <dataLFN>
    D52C202K3500U010170
  </dataLFN>
</markovStep>
</gaugeConfiguration>

```

The next element is `<implementation/>` which holds information such as code versions, and machine version. Both of these entries are really only important for bug tracking, but if ever a bug is found then they are vital for tracking down the effected configurations. This metadata section is best written by the code that generated the configuration, as it is quite easy for this metadata to become lost.

The `<algorithm/>` element is the same as that of the ensemble, e.g. a name value pair for each algorithmic parameter that is specific to that configuration. The `<precision/>` element is also algorithmic in nature. it is the precision in which the configuration was computed, not in which the data is stored. It is an enumeration of `{single,double,mixed}`, it is possible to have some parts of gauge configuration generation code in single precision and some in double.

The final segment `markovStep` is the most immediately useful. `<markovChainURI/>` is the URI of the Markov Chain to which this configuration belongs. This links the ensemble and the configuration XML IDs together. `<series/>` and `<update/>` locate the configuration in the Markov Chain. The average Plaquette is useful for checking that downloads, copies or data reads have all worked correctly, not least as this metadata is data format independent. Finally `<dataLFN/>` is the logical filename of the data on the grid. This links the metadata to the data. In QCDgrid (UKQCD's data grid) the data submission tool reads this element from the metadata and then uses this as the logical file name.

This tutorial hopefully gives a flavour of how to mark up gauge configurations in QCDml1.1. The ILDG website contains more detailed documentation on the schema along with example XML IDs. The website will be updated regularly as changes and extensions occur, but this should still serve as a guide.

3. FUTURE PROGRESS

The MDWG along with the middleware working group is actively considering the issue of data and file formats, but this is discussed elsewhere. Completing the hierarchy tree for all commonly used actions is another task to be finished. Gauge configurations are not the only data that could be shared by ILDG members, for instance quark propagators and hadron correlator. The MDWG is considering how to extend QCDml to such data.

REFERENCES

1. <http://www.lqcd.org/ildg/tiki-index.php?page=MetaData>
2. A.C. Irving, R.D. Kenway, C.M. Maynard and T. Yoshié, Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 129 (2004) 159
3. <http://www.lqcd.org/ildg>
4. <http://www.w3.org/XML>
5. <http://www.w3.org/XML/Schema>
6. <http://www.w3.org/TR/xpath>
7. <http://www.w3.org/TR/xpath20/>

9 仕様ドキュメント

9.1 QCDml draft v4.0

9.2 QCDml Ensemble Schema

9.3 QCDml Ensemble Schema sample

9.4 QCDml Ensemble Schema documentation

9.5 QCDml Configuration Schema

9.6 QCDml Configuration Schema sample

9.7 QCDml Configuration Schema documentation

9.8 ILDG file format v1.1

9.9 Meta Data Catalog specification

9.1 QCDml draft v4.0

QCDML: QCD Markup Language
draft ver-4.0 (July 8 2003)

ILDG, Metadata Working Group

1 Introduction

International Lattice Data Grid (ILDG) is a grid for sharing QCD configurations worldwide. Following the action plan decided at the first workshop in Edinburgh in December 2002, the metadata working group¹ was organised in mid-January 2003. This document summarises proposals of the working group for 1) QCDML (QCD Markup Language) which is an XML schema for the ILDG, and 2) standard binary format for exchanging configurations.

2 QCDML

2.1 Overview

2.1.1 What is QCDML

Collaborations planning to submit QCD configurations to the ILDG will mark up information in an XML instance document (ID) according to the QCDML XML schema for each configuration. The QCDML documents will be stored in databases. Researchers can query these databases and obtain information about the configurations such as simulation parameters. The QCDML document includes a pointer to the actual configuration, which enables researchers to retrieve configurations using an ftp-like protocol. In the namespace of ILDG each file has a name which identifies it and to which collaboration it belongs. This is known as the Logical File Name (LFN). It can be implemented as a Universal Resource Indicator (URI). Details of the retrieval procedure will be discussed and proposed by the middleware working group of the ILDG project.

2.1.2 What is defined in QCDML

A minimal set of XML elements is defined which are necessary for exchanging configurations. This includes information that researchers would search

¹Current working group members are: Giuseppe Andronico (INFN), Paul Coddington (Adelaide), Robert Edwards (Jefferson Lab.), Balint Joo (Edinburgh), Chris Maynard (Edinburgh), Dirk Pleiter (NIC/DESY), Jim Simone (FNAL), Tomoteru Yoshie (Tsukuba).

on and other information which is necessary to understand what the configuration is. For example, fundamental parameters such as the gauge coupling β are included, since these are directly related to physics. Other run-time parameters, like the random number seed are not needed to make measurements on a given gauge configuration, and hence are not included.

QCDML is an XML schema, and is thus extensible. Each collaboration can extend QCDML for their own purposes. For example, one may want to record the compiler name and the compile options of a program to generate the configuration. These elements are not included in the QCDML, because there would be little commonality between collaborations and in general this would not be information used in a search of available configurations. However, such information may be useful in reproducing the configuration, and so may be recorded in an extension to QCDML.

QCDML itself may be extended to cover other lattice data besides gauge configurations in the future, but that is beyond the scope of the original project. However, the design of the schema is such that it can be easily extended to other lattice data.

2.1.3 QCDML design strategy

An important design goal of QCDML is to provide a unique description of information recorded in the QCDML XML ID. Standards of notation and terminology are required to implement this. For example, suppose that an ensemble of quenched QCD configurations is generated with Wilson's plaquette action. The name of the action may be recorded as *plaquette_action*, or *wilson_action*. A query is issued with the name *plaquette_action*, would not be able to retrieve configurations with the action recorded as *wilson_action*.

In QCDML, uniqueness is ensured by using Object Oriented (OO) ideas, of abstract object and inheritance. In the general schema an abstract element *general_action* defines the properties of actions, but cannot occur in an XML ID. A specific action is then substituted for the abstract action in the schema. This specific action inherits the properties of the *general_action* which can then be *extended* or *restricted*. This ensures that the action and the name of the action is unique.

In XML schema, elements, that is XML tags, have OO functionality whereas attributes, properties of the XML tags, do not. In general this means that there is nothing that can be done with attributes, that cannot be achieved with elements, but this is not true the other way around. There is no hard and fast rule for when an element should be used, or an attribute instead. In QCDML will use elements in general, and only use attributes

and values of elements if there is a specific reason for a particular datum. Returning to the example of gauge actions, QCDML will use

```
<plaquette_gauge_action>
```

instead of

```
<action name="plaquette_gauge">
```

or

```
<action>
  plaquette_gauge
</action>
```

Another feature of XML schema is that it is modular. This means that the main schema contains the general structure and abstract elements. Substitution elements that describe specific instances of the abstract elements are contained in a separate *module* and are embedded in the main schema with the *include* instruction. QCDML will comprise of the main schema and modules with substitution elements for the more common actions. For example, `<plaquette_gauge_action>`, would have the following XML chunk in an ID.

```
<plaquette_gauge_action>
  <plaquette_operator>
    <field>link_gluon</field>
    <coupling>
      <beta>5.2</beta>
    </coupling>
  </plaquette_operator>
</plaquette_gauge_action>
```

(See sec. 2.3.4 for details.) When we markup configurations generated with the plaquette action, we include the module and change the value of `<beta>`. We propose to use modules for describing action and fields.

QCDML should be consistent with general usage, and critically, extensibility to data other than gauge configurations such as hadron correlators. This is not to say that the schema covers other data, but rather the structure is sufficiently general that further extension is quick and easy.

2.1.4 QCDML Glossary

Although XML is flexible and powerful to markup structured information, XML does not allow us to define mathematics, such as the action. QCDML will use the OO features of XML schema to define the general structure and unique names. We propose to prepare a glossary of definitions for the unique names that appear in the substitution modules of the action and the fields and put them on the ILDG web page.

2.2 Structure of QCDML

We propose the following structure of QCDML. The following is pseudo-XML, i.e. it cannot be validated, but demonstrates the general structure. A graphical representation of the schema is shown in figure 1 generated by the software package XMLspy.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<gauge_configuration>
  <management>
  </management>

  <implementation>
  </implementation>

  <markov_step>

    <markov_chain>
      <physics>
      </physics>
      <algorithm>
      </algorithm>
      <precision></precision>
    </markov_chain>

    <series> </series>
    <updates> </updates>
    <pointers>
    </pointers>

  </markov_step>
```

</gauge_configuration>

In the <management> section, we describe information necessary to manage the QCDML ID and configuration itself. The <implementation> section describes machine and simulation code information. <markov_step> includes information for each configuration. It is subdivided into that which is general to the ensemble and that for a particular configuration. The first one contains physics, algorithm and precision of simulation and is described in <markov_chain>. It can be replaced with a URI rather than repeat the information for each configuration. Elements for a particular configuration are placed just under the markov_step section. They are <series>, <updates> and <pointers>. The details of each section are explained in the subsequent text.

2.3 The physics section

The physics section describes lattice gluon and quark fields and boundary conditions of them, action and coupling parameters in the action, and lattice size. This section is a part of markov_step/markov_chain part. Physics part is complicated, because it has rich structure.

2.3.1 Lattice size

The lattice size is common to both gluon and quarks, and is independent from our choice of lattice actions. Therefore we describe it independently from other parts. Although lattice QCD is defined on a four-dimensional hyper-cubic lattice, we design this part so that extension to other dimensionality is easy. We also allow axes to have different names. In general the spatial axis would be X,Y, and Z. A fourth dimension would be T (for Time) or Temp for Temperature.

It would be natural to think of ordering this information as a one dimensional array, but there is no provision for arrays in XML schema. However, as we intend to use BinX (Binary description XML - see sec. 3.4) for describing the file format, we propose to adopt the dataBinX format for arrays. What follows is a pseudo-XML chunk for the size of a lattice.

```
<size>
  <fixedArray>
    <dim>
      <struct>
        <length>16</length>
```

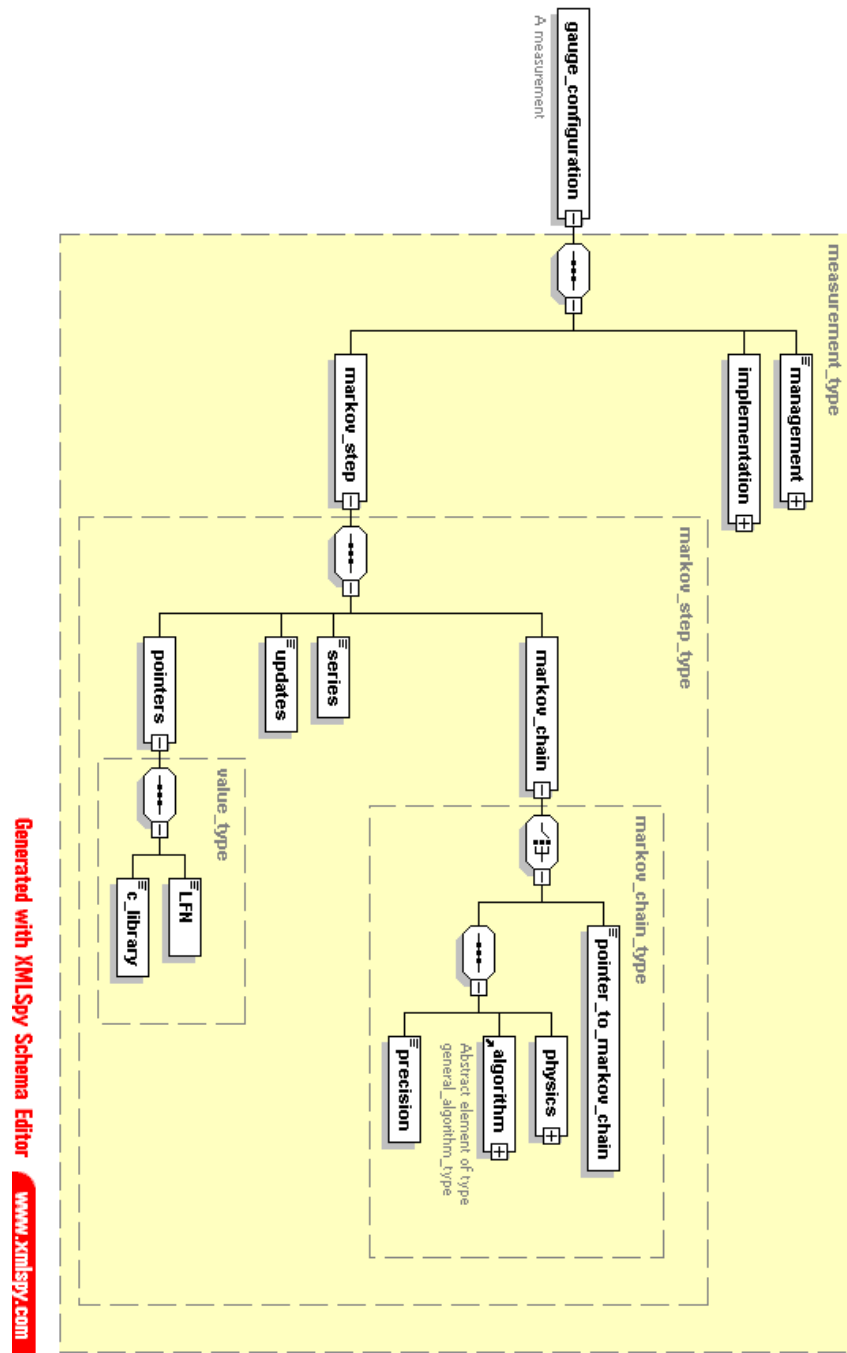



Figure 1: A graphical representation of the XML schema

```

        <name>X</name>
    </struct>
</dim>
<dim>
    <struct>
        <length>16</length>
        <name>Y</name>
    </struct>
</dim>
<dim>
    <struct>
        <length>16</length>
        <name>Z</name>
    </struct>
</dim>
<dim>
    <struct>
        <length>32</length>
        <name>T</name>
    </struct>
</dim>
</fixedArray>
</size>

```

There are several points to be explained here. We adopt the dataBinX conventions as it is possible for slices of arrays to be extracted from binary files and displayed in an XML ID in this format. This will be useful for marking up hadron correlators in the future. The elements `<fixedArray>` denotes that what follows is an array of fixed size. The number of members of the array is obtained by counting the repetitions of `<dim>` element. `<dim>` is the dataBinX element for enclosing an array member. Multidimensional arrays are nested. `<struct>` is dataBinX construction for complex data types, in this case an integer and a string.

Note that this array structure quickly becomes rather verbose as the number of dimensions of the array increases, but arrays are not a natural construction for a hierarchical language such as XML, which is presumably why they do not feature in W3C XML schema.

We also note for the domain wall quark action that the length of the (unphysical) extra-dimension should be recorded as a parameter in the quark action. The gluonic part of the action is defined on a four dimensional lattice.

2.3.2 Fields

The lattice gluon and quark fields are ideally independent from our choice of lattice actions. For example, the Wilson-type quarks are used in the standard Wilson quark action and clover quark action, and the gluon link variable is common for the plaquette action and improved gluon actions. We therefore describe the fields independently from the lattice actions.

Boundary conditions, which are properties associated with the fields, are also described in this section. For example, a chunk of pseudo-XML would look like:

```
<fields>
  <link_gluon>
    <fixedArray>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
    </fixedArray>
  </link_gluon>
  <wilson_quark>
    <norm>sqrt_2_kappa</norm>
    <fixedArray>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
    </fixedArray>
  </wilson_quark>
</fields>
```

```

        <bc>antiperiodic</bc>
    </dim>
</fixedArray>
</wilson_quark>
</fields>

```

<norm> in the <wilson_quark> is the normalisation of quark fields. Note that we will prepare modules for each type of quark/gluon fields.

2.3.3 The action and structure

The mathematical definition of what each action name means in the ILDG namespace is written in the glossary. This being so, it may be sufficient to list coupling name and value pairs in QCDML. However, we propose to keep more structure of the action in the QCDML, as this will enable more flexible searches on metadata. For example, suppose one wanted to search for configurations that have improved glue. By keeping more structure, a search can be made for actions that have the plaquette and at least one other operator, rather than having list all the names of improved actions. This choice also makes the structure of the action be more apparent from QCDML IDs. Finally, keeping some structure in the definition of action will allow QCDML to be extended to hadron correlators in the future, without having to re-write the schema in such a way that QCDML gauge configuration documents have to be re-written.

The action is divided into of a gluon part and a quark part, each of which is a sum of operators, which in turn consist of fields and coupling parameters. The structure looks like

```

gluon/quark action -> operators -> field-1, field-2
                                -> coupling-1, coupling-2

```

The action is divided into a pure gluonic part and a quark part including interaction with gluons: the QCD action is always written in the form

$$S_{\text{QCD}} = S_g + \bar{\psi} D \psi. \quad (1)$$

We will prepare “modules” for specific gluon actions and quark actions separately. Then the structure of the action part of the QCDML is

```

<action>
  <gluon>
    . . . . .

```

```

    </gluon>
    <quark>
        .....
    </quark>
</action>

```

2.3.4 The gluon action

The gluon part of the action includes gluon operators and couplings associated with the operators. Wilson's plaquette gauge action would look like

```

<gluon>
  <plaquette_gauge_action>
    <plaquette_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <coupling>
        <beta>5.2</beta>
      </coupling>
    </plaquette_operator>
  </plaquette_gauge_action>
</gluon>

```

The gluon field `link_gluon` defined in `fields/gluon` section is used for `<field>` element in the `<plaquette_operator>`.

In the general schema the `<action>`, `<operator>`, `<field>` and `<coupling>` are all abstract elements for which specific elements such as `<plaquette_gauge_action>` are substituted. The specific instances of these elements for each action will be defined in modules.

It is more difficult to describe improved gluonic actions systematically because many of the improved actions that have been proposed and used in simulations, often have similar mathematical structure, but in principle are different. Consider an improved gauge action including terms up to six link loops. A lot of improved actions belong to this category, such as Symanzik's improved action and its tadpole improved version, Wilson's renormalisation group (RG) improved action, Iwasaki's RG improved action, and DBW2 action.

Instead of grouping them all into one category of *improved_six_link_action*, we classify them based on physics idea resulting in the improved action. This strategy is taken, because researchers then can easily search configurations generated with the particular action. Namely, we prepare modules for `<symanzik_gluon_action>`, `<wilson_RG_gluon_action>`, `<iwasaki_RG_gluon_action>`,

etc. Coefficients are often modified using independent physics ideas such as tadpole improvement. An extra element is required to specify this idea.

For example, we markup a tadpole improved symanzik action as follows.

```
<gluon>
  <symanzik_gluon_action>
    <coupling>
      <beta>6.8</beta>
    </coupling>
    <plaquette_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <coupling>
        <c0>1.66667</c0>
      </coupling>
    </plaquette_operator>
    <rectangular_loop_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <coupling>
        <c1>-0.10994</c1>
        <determination>tadpole</determination>
      </coupling>
    </rectangular_loop_operator>
  </symanzik_gluon_action>
</gluon>
```

The coupling `<c1>` has an additional element which identifies its determination. The value of `<determination>` could be NP, tadpole, etc. What NP and tadpole etc mean can be listed in the glossary, with a reference to a paper if necessary. We believe that this is a better idea than listing up only parameter name and value pairs.

2.3.5 The quark action

The most important information in the quark action section is the number of dynamical quarks. This is a separate element.

For quenched QCD configurations, the mark up would be

```
<quark>
  <n_sea_quarks>0</n_sea_quarks>
</quark>
```

For full QCD, we have to consider the case where we use different quark action for different flavors. For example, for Nf=4 QCD, one may want to use the domain wall action for the u,d,s quarks because chiral symmetry is important, while one uses the clover quark action for the c quark. For Nf=2+1 ($m_u = m_d \neq m_s$) QCD with clover quarks, the (κ, c_{sw}) pair are the same for the u and d quarks, while it is in general different for the s quark.

We classify flavors into a group if the action and coupling parameters are the same with each other, and mark up for each group. For example, we mark up for Nf=2+1 flavor QCD as

```
<quark>
  <n_sea_quarks>3</n_sea_quarks>
  <sw_quark_action>
    <n_quarks>2</n_quarks>
    <wilson_fermi_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <field>wilson_quark</field>
      <coupling>
        <kappa>0.1350</kappa>
      </coupling>
    </wilson_fermi_operator>
    <sw_fermi_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <field>wilson_quark</field>
      <coupling>
        <c_sw>2.02</c_sw>
        <determination>NP</determination>
      </coupling>
    </sw_fermi_operator>
  </sw_quark_action>
  <sw_quark_action>
    <n_quarks>1</n_quarks>
    <wilson_fermi_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <field>wilson_quark</field>
      <coupling>
        <kappa>0.1340</kappa>
      </coupling>
    </wilson_fermi_operator>
    <sw_fermi_operator>
```

```

    <field>link_gluon</field>
    <field>wilson_quark</field>
    <coupling>
      <c_sw>2.02</c_sw>
      <determination>NP</determination>
    </coupling>
  </sw_fermi_operator>
</sw_quark_action>
</quark>

```

The first `<sw_quark_action>` section describes degenerate quarks (`<n_quarks>2</n_quarks>`) and the second is for the heavier flavour (`<n_quarks>1</n_quarks>`). The sum of values of `<n_quarks>` must be equal to the value of `<n_sea_quarks>`. The equality should be guaranteed by contributor of configurations. The repetition of `<sw_quark_action>` is required for this case, but this makes clear the association of the various action pieces.

In XML there is no mechanism to link `<n_sea_quarks>` information to the number of repetitions of another element, *i.e.* the number of times the mass parameter (kappa, or mass etc) occurs in the document. The number of dynamical quarks could be determined by counting the mass parameters in the quark section, but there could be other operators such as improvement operators, which should not be counted. Unless the mass parameters are labelled as such (possibly with an attribute) it will be difficult to distinguish which couplings should be counted. The problem would be worse for staggered quarks, where the number of mass parameters does not correspond to the number of dynamical flavours. The `<n_sea_quarks>` element is a practical solution.

For Nf=2 QCD with $m_u = m_d$, we drop the second part and mark up as

```

<quark>
  <n_sea_quarks>2</n_sea_quarks>
  <sw_quark_action>
    <n_quarks>2</n_quarks>
    <wilson_fermi_operator>
      <field>link_gluon</field>
      <field>wilson_quark</field>
      <coupling>
        <kappa>0.1350<kappa>
      </coupling>
    </wilson_fermi_operator>
  </sw_fermi_operator>
</quark>

```



```

    <field>link_gluon</field>
    <field>wilson_quark</field>
    <coupling>
      <c_sw>2.02</c_sw>
      <determination>NP</determination>
    </coupling>
  </sw_fermi_operator>
</sw_quark_action>
</quark>

```

QCDML will have some conventions of naming coupling constants in an action. For example, we use “kappa” for the mass parameter in the Wilson’s quark action. Having unique names is important, because if each group uses different naming such as “kappa” and “K”, we will have some difficulty in searching configuration using the condition $\text{kappa}(=K)=0.1350$. In order to avoid this, the metadata working group will propose “standard” naming of couplings, and use it to prepare a module for each action.

2.4 Algorithm Part

A hierarchical description of all QCD algorithms may be desirable, but it is less critical than the hierarchical description of the action. However, some information is required in QCDML. Moreover, because there are many variants of similar algorithms, it is quite difficult to describe an algorithm precisely. Even for a particular algorithm, there are a lot of parameters ranging from important ones (e.g. molecular dynamics step size of hybrid monte carlo) to less important ones (e.g. convergence criterion of solvers).

With this situation, we take a slightly different strategy for the algorithm part than for others. Namely, we propose to devolve responsibility for the description of the algorithm to the collaborations. This is realized by using elements in a “collaboration namespace”, which is explained below.

A sample QCDML document for this part looks like:

```

<algorithm>
  <name> polynomial-hybrid-monte-carlo </name>
  <reference> PRD ... </reference>
  <exact>true</exact>
  <parameters>
    <groupA:delta_tau> 0.01 </groupA:delta_tau>
    <groupA:number_of_MD_steps> 100 </groupA:number_of_MD_steps>
    <groupA:unit_trajectory> 1 </groupA:unit_trajectory>
  </parameters>
</algorithm>

```

```

    <groupA:polynomial_order>
      <groupA:s_quark> 80 </groupA:s_quark>
    </groupA:polynomial_order>
    <parameters>
  </algorithm>

```

In this part, QCDML defines only four elements `<name>`, `<reference>`, `<exact>` and `<parameters>`. The `<exact>` element shows whether the algorithm is exact (true) or not (false). If the algorithm is already described by a paper, the `<reference>` quotes the paper as shown above. If not, the working group asks the contributor to write a glossary document for the details of the algorithm and information on the parameter names, and to put it on the ILDG webpage. For the latter case, `<reference>` looks like

```

<reference> http://www.lqcd.org/ildg/algorithm/
a-new-alg.htm</reference>

```

Parameters of the algorithm are described in `<parameters>` section. Elements in this section depend on collaborations. The prefix “groupA:” is the XML namespace prefix in the above example. This means that `<groupA:delta_tau>` can have a different meaning to `<groupB:delta_tau>`. Rather than try and enforce standard terminology and unique names where none exist, this flexibility allows different collaborations to continue to use their own terminology. The parameters that are to be listed depends on the algorithms and the contributor. Whilst this approach is not without its drawbacks it is a very practical solution. The working group proposes to list at least basic and important parameters. When the glossary has been prepared by a contributor, the QCDML ID includes the XML elements accordingly. If the algorithm is already published as a paper, contributors are asked to use elements whose meaning is apparent without explanation.

2.5 The precision section

The `<precision>` element in the `<markov_chain>` section indicates whether the simulation is carried out in “single” or “double” precision. If parts of the calculations are carried out in single and other parts in double precision the value “mixed” should be used. This element may be of interest for those researchers who, for instance require that hybrid monte carlo simulations should be performed in double precision and want to exclude configurations which have not entirely been generated that way.

A sample of this part is

```

<precision>double</precision>

```

2.6 series part and updates part

In the markov_step part, there are two important elements `<series>` and `<updates>`. The latter specifies trajectory or sweep number in a series of the Markov chain. We may execute simulations in parallel with the same parameter set. Therefore, only the `<updates>` tag is not sufficient to identify the configuration. The `<series>` tag distinguishes different runs.

A sample of these part is

```
<series> A </series>
<updates> 0880 </updates>
```

2.7 Pointers Part

Tags in the pointers part in the markov_step section show where you can find the configuration, and how you translate the binary format (see also Sec. 3). This part depends on proposals by the middleware working group on how we manage and transfer configurations. Our current proposal is shown by a sample

```
<pointers>
  <LFN>srm://xxx.foo.bar.edu:/NF3/RC16x32.b1.90_csw1.715
    _kud0.1355_ks0.1354-A/0880.DIME </LFN>
  <c_library> ftp://zzz.foo.bar.edu/NF3/
    Translation/ToSTDConf.c </c_library>
</pointers>
```

2.8 Implementation Part

Implementation part consists of machine and code parts. A primary purpose of elements in this part is to facilitate backtracking problems which occurred during data production and which have only been detected later.

For various reasons it is hard (or even impossible) to describe all machines used for lattice gauge theory calculations with only a few parameters:

1. A “machine” might not be a well-defined entity (consider PC-farms).
2. It is possibly subject to relatively frequent changes.
3. It might be built from heterogeneous components (this can even be the case for a Cray/T3E).

We therefore concentrate on information that would allow the person, who submitted a particular configuration, to identify the machine used to generate that configuration. This could be achieved by providing information shown by the following sample.

```
<machine>
  <name> apcc </name>
  <institution> Bar Physics Center </institution>
  <type> Alpha PC Cluster </type>
  <comment> PU32 partition (optional) </comment>
</machine>
```

The `<type>` element shows machine hardware type, such as Hitachi SR8000, QCDOC, apeNEXT, PC-cluster. The optional `<comment>` tag is used to give supplementary information such as the used partition.

Detail of simulation code will also not be necessary, because it will be used for backtracking by a contributor of the configuration. We propose to use the following;

```
<code>
  <name> PHMC_HMC </name>
  <version> ver5.41-SR_21.0 </version>
  <date> 2003-03-01 </date>
</code>
```

2.9 Management Part

The management part of the QCDML plays two important roles. One is for traceability and validation of the configuration. The other is to give the most important information of the “collaboration” name and the “project name”

The elements belonging to the second category are shown by an example

```
<collaboration> ABC Collaboration </collaboration>
<project> Nf=2+1 full QCD with RG and NP csw </project>
<reference> hep-lat/0000000 (optional) </reference>
```

When researchers in the lattice QCD community wish to obtain access to configurations, they may well know who generated the configurations (`<collaboration>`) and why or how the configurations were generated (`<project>`). They probably have read a paper (`<reference>`) and are interested in using these configurations. Therefore these elements are most frequently searched

for. (Researchers do not have to remember collaboration name and project name. User interface of the search engine can be designed in a way to show a list of collaboration names first, then project names of the collaboration.)

The optional reference is used to provide researchers with information which is not suitable to be recorded in the QCDML. For example, suppose that one generates configurations by the hybrid Monte Carlo, store them each 10 trajectory, and put them all to the ILDG. These configurations may not be well decorrelated. One may be interested in expected auto-correlation-time so that one wants to retrieve only uncorrelated configurations. Such information is not suitable to be recorded in the QCDML document, because it is information for a set of configurations. Moreover, auto-correlation depends on physical quantities. In QCDML, we do not include details of simulation such as a convergence criterion of quark propagator solver. Researchers can get such information from the reference. Therefore, we strongly recommend that a reference is quoted. The contributor doesn't have to list all references. One or two basic references are sufficient.

The rest of tags in this part of the QCDML is for traceability. For any configuration provided in ILDG, it should be possible to trace its history and the persons involved in generating and handling of the data. We should foresee the possible case where a configuration or other data provided in ILDG turn out to be corrupted (e.g. due to hardware defects on the machine used for the simulation or program bugs). In these cases configurations will have to be replaced or withdrawn, that might already have been used by others.

Thus our aim is to be able to trace the generation of any configuration, its submission to ILDG and all possible later changes. Each of these operations can be described the following triplet of information:

1. What kind of operation (generation, submission, change, withdrawal)?
2. Who executed this operation (name, institution)?
3. When was this operation executed?

A sample QCDML document looks like

```
<action type="insert">
  <actor>
    <name> A. Foo </name>
    <institution> Bar Physics Center </institution>
```

```

    </actor>
    <date> 2003-04-09 </date>
    <comment> First submission (optional) </comment>
</action>

```

Values of `<action>` tags are one of “generate” to indicate generation of configuration (this is optional), “insert” to indicate submission of configuration (required), “update” to replace the configuration (required when appropriate) and “withdraw” to remove the configuration from the ILDG (required when appropriate). When a contributor changes the configuration, `<action>` part has to be added without removing predecessors of `<action>` part. Note that we use *attribute* for the action type.

In order to maintain the version number of the QCDML document, we use `<revision>` tag. Starting from 1 (one), we add one to the value of this tag when the document is changed. For example,

```
<revision> 2 </revision>
```

means that the document is changed once. QCDML documents will be stored in several databases. The `<revision>` tag might be used to keep consistency among databases.

The last element in this section `<crc32>` is a checksum of the configuration calculated by the 32-bit cyclic redundancy code (CRC) algorithm. The CRC we use is defined by the sum of the expressions

$$\begin{aligned}
 \text{sum} &= x^{32} + x^{26} + x^{23} + x^{22} + x^{16} + x^{12} + x^{11} + x^{10} \\
 &+ x^8 + x^7 + x^5 + x^4 + x^2 + x^1 + x^0,
 \end{aligned} \tag{2}$$

over bytes x of the configuration file and truncating it to a 32-bit value.

We are planning to distribute configurations in DIME encapsulated file of configuration itself and the corresponding QCDML documents. We also allow to use different binary format of configurations group by group. (See Sec.3 for details.) The checksum is calculated for the configuration part of the DIME file. We do not use checksums for QCDML document parts of the DIME file².

²One may think that a checksum for the DIME file should be calculated, because the DIME file is distributed via the ILDG. However the checksum for the DIME file can be calculated only after we pack a configuration and corresponding QCDML ID's and the checksum should then be stored the (encapsulated) QCDML ID. We do not know how to do that: The situation is “a can opener in a can”. The same reason disables us to calculate and record the checksum of the QCDML ID.

2.10 Sample QCDML document

Here we show a sample of a complete QCDML document. This example is taken from “Nf=2+1 full QCD simulation with a DBW2 gauge action and non-perturbatively improved clover quark action, and with a polynomial hybrid monte carlo algorithm”.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<gauge_configuration>

  <management>
    <revision> 2 </revision>
    <crc32> 2032724658 </crc32>
    <collaboration> ABC Collaboration </collaboration>
    <project> Nf=2+1 full QCD with RG and NP csw </project>
    <reference> hep-lat/0000000 (optional) </reference>
    <action type="generate">
      <actor>
        <name> A. Foo </name>
        <institution> Bar Physics Center </institution>
      </actor>
      <date> 2003-04-08 </date>
      <comment> Test configuration generated </comment>
    </action>
    <action type="insert">
      <actor>
        <name> A. Foo </name>
        <institution> Bar Physics Center </institution>
      </actor>
      <date> 2003-04-09 </date>
      <comment> First submission (optional) </comment>
    </action>
    <action type="update">
      <actor>
        <name> A. Foo </name>
        <institution> Bar Physics Center </institution>
      </actor>
      <date> 2003-04-10 </date>
      <comment> Replaced 'cause file was broken (optional) </comment>
    </action>
  </management>
```

```

<implementation>
  <machine>
    <name> apcc </name>
    <institution> Bar Physics Center </institution>
    <type> Alpha PC Cluster </type>
    <comment> PU32 partition (optional) </comment>
  </machine>
  <code>
    <name> PHMC_HMC </name>
    <version> ver5.41-SR_21.0 </version>
    <date> 2003-03-01 </date>
  </code>
</implementation>

<markov_step>

  <markov_chain>
    <physics>

      <size>
        <fixedArray>
          <dim>
            <struct>
              <length>16</length>
              <name>X</name>
            </struct>
          </dim>
          <dim>
            <struct>
              <length>16</length>
              <name>Y</name>
            </struct>
          </dim>
          <dim>
            <struct>
              <length>16</length>
              <name>Z</name>
            </struct>
          </dim>

```



```

<dim>
  <struct>
    <length>32</length>
    <name>T</name>
  </struct>
</dim>
<fixedArray>
</size>
<fields>
  <link_gluon>
    <fixedArray>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
    </fixedArray>
  </link_gluon>
  <wilson_quark>
    <norm>sqrt_2_kappa</norm>
    <fixedArray>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>periodic</bc>
      </dim>
      <dim>
        <bc>antiperiodic</bc>
      </dim>

```

```

    </fixedArray>
  </wilson_quark>
</fields>

<action>
  <gluon>
    <DBW2_gluon_action>
      <coupling>
        <beta>1.9</beta>
      </coupling>
      <plaquette_operator>
        <field>link_gluon</field>
        <coupling>
          <c0>12.25488</c0>
        </coupling>
      </plaquette_operator>
      <rectangular_loop_operator>
        <field>link_gluon</field>
        <coupling>
          <c1>-1.40686</c1>
        </coupling>
      </rectangular_loop_operator>
    </DBW2_gluon_action>
  </gluon>

  <quark>
    <n_sea_quarks>3</n_sea_quarks>
    <sw_quark_action>
      <n_quarks>2</n_quarks>
      <wilson_fermi_operator>
        <field>link_gluon</field>
        <field>wilson_quark</field>
        <coupling>
          <kappa>0.1350</kappa>
        </coupling>
      </wilson_fermi_operator>
      <sw_fermi_operator>
        <field>link_gluon</field>
        <field>wilson_quark</field>
        <coupling>

```

```

        <c_sw>2.02</c_sw>
        <determination>NP</determination>
    </coupling>
</sw_fermi_operator>
</sw_quark_action>
<sw_quark_action>
    <n_quarks>1</n_quarks>
    <wilson_fermi_operator>
        <field>link_gluon</field>
        <field>wilson_quark</field>
        <coupling>
            <kappa>0.1340</kappa>
        </coupling>
    </wilson_fermi_operator>
</sw_fermi_operator>
    <field>link_gluon</field>
    <field>wilson_quark</field>
    <coupling>
        <c_sw>2.02</c_sw>
        <determination>NP</determination>
    </coupling>
</sw_fermi_operator>
</sw_quark_action>
</quark>

</action>

</physics>

<algorithm>
    <name> polynomial-hybrid-monte-carlo </name>
    <reference> PRD ... </reference>
    <exact>true</exact>
    <parameters>
        <groupA:delta_tau> 0.01 </groupA:delta_tau>
        <groupA:number_of_MD_steps> 100 </groupA:number_of_MD_steps>
        <groupA:unit_trajectory> 1 </groupA:unit_trajectory>
        <groupA:polynomial_order>
            <groupA:s_quark> 80 </groupA:s_quark>
        </groupA:polynomial_order>
    </parameters>
</algorithm>

```

```

        <parameters>
    </algorithm>

    <precision>double</precision>

</markov_chain>

<series> A </series>

<updates> 0880 </updates>

<pointers>
    <LFN>srm://xxx.foo.bar.edu:/NF3/RC16x32.b1.90_csw1.715
        _kud0.1355_ks0.1354-A/0880.DIME </LFN>
    <c_library> ftp://zzz.foo.bar.edu/NF3/
        Translation/ToSTDConf.c </c_library>
</pointers>

</markov_step>

</gauge_configuration>

```

3 Standard Binary Format

3.1 Strategy

The “standard format” of QCD configuration is an abstract format for exchanging QCD configurations. Several collaborations have already archived a lot of configurations with different formats. Each format is usually chosen for convenience. Collaborations may well want to continue to use their own format. It is not realistic to convert huge amount of data to some specific format; otherwise each site may have to store configurations in their own format and in the “standard format”.

The metadata working group regulates the standard format as a reference format and proposes two methods to convert a configuration in one format to the one in the standard format via C-library (see Sec. 3.3), and from one format to the other using BinX technology (see Sec. 3.4).

3.2 Standard format of QCD configuration

A gauge configuration is a set of $SU(3)$ matrices assigned to the links of a four dimensional hypercube. If $x(n)$ is a value of a quark field at site $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$,

$$x^\dagger(n)U_\mu(n)x(n+\hat{\mu}) \equiv \sum_{i,j=1}^3 [x^\dagger(n)]_i [U_\mu(n)]_{ij} [x(n+\hat{\mu})]_j \quad (3)$$

is gauge invariant.

Standard format of a QCD configuration is a sequence of 8-byte double precision real numbers coded in 64-bit IEEE numerical format. The endianness is fixed to big. A sample routine changing little into big endian is provided in section 3.6.

The order of data is specified by the C statement

```
double U[t][z][y][x][mu][i][j][ri] ;
in U[NT][NZ][NY][NX][4][2][3][2]
```

The last index [ri] refers to real(ri=0)/imaginary(ri=1) part of the complex number, [i][j] corresponds to the definition above, and mu=1,2,3,4 refer to x , y , z , and t directions respectively. We store only the first 2 rows of the 3x3 matrix. The third row can be calculated from the unitarity condition. The format is equivalent to the fortran-77 notation

```
complex*16 U(3,2,4,NX,NY,NZ,NT)
```

To put the format concretely,

1. 2x3 matrix data are stored in the following order:
Re U_{11} , Im U_{11} , U_{12} , U_{13} , U_{21} , U_{22} , U_{23}
(We subtract 1 from indices in actual C-program.)
2. Data at the link in $\mu = 1$ direction appear first, then $\mu = 2, 3$ and 4 follow. (We subtract 1 from indices in actual C-program.)
3. Space-time direction x moves faster, followed by y , z , t directions. (In actual C-program, x runs from 0 to NX-1. Other directions are similar.)

Note that each configuration file transferred from ILDG may have other header information such as group name, ID, checksums and simulation parameters. The “Standard format” does not regulate such information, because the header information is different from group to group (some groups may not have included any information in the binary file). Instead we propose a method to supply such information. See Sec. 3.5.

3.3 C interface to the standard format

Each collaboration planning to donate configurations to the ILDG is asked to provide a small C library to read configurations in the standard format. The library consists of a single routine “ILDG_read_conf”:

```
void  ILDG_read_conf(file, NX,ix0,ix1,
                    NY,iy0,iy1,
                    NZ,iz0,iz1,
                    NT,it0,it1,
                    config)

char* file ;
int NX,NY,NZ,NT ;
int ix0,ix1,iy0,iy1,iz0,iz1,it0,it1 ;
double* config ;
{
    int my_data_is_big = 1 ;
    /* it is hard coded, =0 if my data is little */

    /* open file */

    /* read config */

    if (big_endian() != my_data_is_big) byte_swap(...) ;

    /* set config */

    /* close file */
}
```

This routine is used to read link variables in a hypercubic region $(ix0-ix1)*(iy0-iy1)*(iz0-iz1)*(it0-it1)$. In this example we assumed the configuration was stored using big endian numbers, i.e. byte swapping is required when this routine is called on a machine where the endianness is little.

As an example, calling this routine as

```
main()
{
    int NX=8,NY=8,NZ=8,NT=16 ;
    double U[8][4][4][4][4][2][3][2] ;
```

```

        ILDG_read_conf("test-file", NX,0,3,
                        NY,4,7,
                        NZ,4,7,
                        NT,0,15,
                        U)
    }

```

reads link variables in the region $(0-3)*(4-7)*(4-7)*(0-15)$ of the whole lattice $(0-7)*(0-7)*(0-7)*(0-15)$ and stores them in the array $U[8][4][4][4][2][3][2]$. Note that for an array $A[N]$ in C, the index runs from 0 to $N-1$.

We note that the endian refers to the endianness of the machine reading a configuration. If the endian which a contributor use is different from the user request, conversion of endian should be carried out in the C library. Therefore each contributor has to write an endian conversion routine. In other words, conversion program is provided by a contributor (a sample program will be given by the working group), while the conversion is performed in a user side³.

The pointer to the C library is stored in `<c_library>` element of the `<pointers>` section of the QCDML ID, as explained in sec. 2.7.

Researchers who want to use the configuration may have to write a short program to convert the configuration in the standard format to their own favorite format, if necessary.

A possible drawback of the C interface above is that the conversion program requires huge memory of order of configuration size to twice the configuration size, e.g. $\approx 350\text{MB}$ to 700MB for a $24^3 \times 48$ lattice. This issue may cause a memory bottleneck, but cannot be avoided if one wants to convert data between two arbitrary formats. Extension of the C interface may be necessary for parallel computers constructed with nodes with small memory. However, we propose the C interface above, because it is simple and expected size of full QCD configurations public to the ILDG will be smaller than $32^3 \times N_t$ for forthcoming several years, which can be handled by high-end PC with memory of ≈ 2 GBytes.

3.4 BinX description of the format

BinX is an XML schema to describe the format of binary file and has been developed recently by the edikt project (e-science Data information and

³This strategy is taken, because 1) we think that contributors in general have more experience on computers than users, and 2) users do not have to know how to convert endianness. However, user or user program has to know/identify the endianness of the machine reading a configuration.

knowledge transfer - www.edikt.org). A first prototype version of this software to convert one binary format to the other became available in May, 2003. The metadata working group has decided to employ this technology to describe binary formats of QCD configurations, which enables us to convert formats without referring the standard format. A further development, known as dataBinX, is a schema for marking up data in an XML document. This may well be useful in the future when considering other data such as hadron correlators. dataBinX has an array type. QCDML adopts the convention used in dataBinX for marking up arrays.

There are essentially two threads to BinX. The first is an XML schema for describing binary data. This schema has been completed and is part of the version one release. The second thread is a c++ library which runs on top of the *Xerces* library. The BinX library has various methods which allows one to read in files described by a BinX XML ID and then the data can be manipulated. In this first version it is not possible to control this manipulation with a BinX XML ID for the output, but the BinX library makes these manipulations rather easy. The BinX library will also write out a BinX XML ID for the new ordering of the data.

BinX has a number of “primitive” data types defined, such as `<Float-32>` which is self describing. In addition, more complicated data structures can be defined in an XML ID and then the BinX library can manipulate them. This is a very useful concept for QCD data. A complex data type can be defined, and from that the $SU(3)$ matrices, defined as 3×3 , 2×3 or 3×2 arrays. QCD configurations are then just five dimensional (X, Y, Z, T, μ) arrays of these matrices.

The BinX library can be used to construct various operations on the data, such as

- double \leftrightarrow single precision
- byte swapping *i.e* big \leftrightarrow little endian
- $\{2 \times 3, 3 \times 2\} \leftrightarrow 3 \times 3$ matrix operations
- Change the order of X, Y, Z, T, μ
- Combine timesliced files, split single files.

This set of operations allows the conversion from one collaborations data format to another.

Each collaboration donating configurations to the ILDG will need to describe their own format in a BinX XML ID. The metadata working group

will provide examples of transformation operations for the above operations, as well as some standard transformations such as byte swap or combine timesliced files.

The BinX description of the standard format is

```
<binx xmlns="http://www.edikt.org/binx/2003/06/binx">
  <definitions>
    <defineType typeName="complexDouble">
      <struct>
        <Double-64 varName="Real"/>
        <Double-64 varName="Imaginary"/>
      </struct>
    </defineType>
    <defineType typeName="matrix2x3">
      <arrayFixed>
        <useType typeName="complexDouble"/>
        <dim name="row" indexTo="1">
          <dim name="column" indexTo="2"/>
        </dim>
      </arrayFixed>
    </defineType>
  </definitions>
  <dataset src="sample.configuration" byteOrder="bigEndian">
    <arrayFixed varName="GaugeConfigStandard">
      <useType typeName="matrix2x3"/>
      <dim name="t" indexTo="31">
        <dim name="z" indexTo="15">
          <dim name="y" indexTo="15">
            <dim name="x" indexTo="15">
              <dim name="mu" indexTo="3"/>
            </dim>
          </dim>
        </dim>
      </dim>
    </arrayFixed>
  </dataset>
</binx>
```

The following is an example of a c++ routine which uses the BinX library, and reads in two timeslices of a gauge configuration, in single precision

and 2×3 format and then write them out in the QCDML “standard” format. The two XML IDs, gauge_cfgT01(2).xml, describe the binary file format, in this case in UKQCD format.

```
#include <BxBinxFileReader.h>

int main(int argc, char *argv[])
{
    // create output file to save data

FILE * fo = fopen("gauge_cfgT01T02", "wb");

    // all N filenames in an array of strings

    const char * files[] = { "gauge_cfgT01.xml", "gauge_cfgT02.xml" };

    // loop to process all files

    for (int i=0; i<2; i++)
    {

        // create a BinX file reader for the current BinX file

        BxBinxFileReader * pReader1 = new BxBinxFileReader(files[i]);

        // Obtain a pointer to the dataset from it

        BxDataset * pData1 = pReader1->getDataset();

        // Obtain a pointer to the array from the dataset, we know it's an array

        BxArrayFixed * pArray = (BxArrayFixed*)pData1->getArray(0);

        // Traverse all dimensions but in reverse order for transform.
        // And we know how many elements each dimension has

        for (int z=0; z<pArray->getCount(0); z++)
        {
            for (int y=0; y<pArray->getCount(1); y++)
            {
```

```

for (int x=0; x<pArray->getCount(2); x++)
{
    // for (int mu=0; mu<4; mu++)//
    for (int mu=0; mu<pArray->getCount(3); mu++)
    {
        // Obtain the data element

        BxDataObject * pData = pArray->get(mu,x,y,z);

        if (pData != NULL)
        {
// Save this data element to our output file

pData->toStreamBinary(fo);

// Delete it before reuse

delete pData;
        } // if
    } // for (mu
} // for (x
    } // for (y
    } // for (z

    delete pReader1;

} // (for i

fclose(fo);

return 0;
}

```

3.5 Distributing configurations

When we share configurations, identification is an important issue. In particular, each configuration should be accompanied with fundamental parameters such as lattice size and checksums of the configuration. We do not

include such information into the standard binary format, because such information will be described in the QCDML document for the configuration.

In order to keep identification of the configuration, we encapsulate the configuration and the QCDML document into one file and distribute it via ILDG. DIME (Direct Internet Message Encapsulation) is a candidate to do this, because file size is not increased by the encapsulation and one does not have to unpack files before reading binary file.

DIME is a record oriented protocol, for transmitting information. It is backed by industry leaders such as Microsoft and IBM.

A DIME message consists of a sequence of DIME records. Each record consists of a short header segment followed by the payload data, which is considered to be a “binary black box” from the point of view of DIME. In other words it can be *any* sequence of bytes. From the point of view of QCDML, distinct records may contain either XML data such as a schema ID, or binary data such a gauge configuration or other binary data.

While the DIME payload can be any binary data, the header portion of the record consists of state information pertaining to the current (possibly part of a multiple chunk) record. In particular it contains flags to signify whether the current record is the first or last of a message, whether it is a continuation of a multiple chunk record, as well as a DIME Type string and an optional ID. The optional ID is always a URL, whereas the DIME type can be either a URL, or a string similar to a MIME TYPE such as “dime/gauge-configuration”.

The DIME standard currently imposes a maximum record length of 2 GBytes, but does allow “chunking” – the splitting of data over several records. As a point of reference, a $V=32 \times 32 \times 32 \times 64$ gauge configuration, with each floating point number being 64bits (double precision) long in the two row compressed form has a size of 750 MBytes.

Currently there exist C and C++ interfaces to DIME, written as part of the SciDAC collaboration. The C interface attempts to mimic a publicly available Java interface. Once a data stream is opened, one can either read the current record, or skip to the next one. The data from a record can be read byte by byte – there is no need to read the entire record in one go – allowing for parts of a record to be distributed on a multi processor system before the following parts are read. Seeking the next record skips over the current one. There is also a DIME writer allows the writing of records and headers.

Both these interfaces are somewhat low level, working at the level of DIME records. It is presumed that eventually higher level Application Programming Interfaces (API's) will be layered on top of this low level interface.

For example the C interface to read a gauge field or part of a gauge field, described earlier could be built on top of the current C or C++ interfaces. Another example is the forthcoming IO interface from SciDAC, which should completely hide the underlying DIME implementation. It must be emphasised that DIME is a particularly simple standard and it is not much effort to implement new API's to DIME.

3.6 Sample routine for byte swapping

Below are two example routines taken from the file *byteorder.c* from the SZIN software system.

The first example shows how to determine whether a given machine is big endian or not. The second routine shows an example of implementing byte swapping on a linear array of data items.

void ptr* the pointer to the start of the array of data

size_t size the size (in bytes) of each datum

size_t nmemb the number of data items in the array

```
.
/*
 * $Id: byteorder.c,v 13.5 2002/05/31 21:39:54 dgr Exp $
 *
 * Determine the byte order of a platform
 *
 * returns
 *   1 = big-endian    (alpha, intel linux, etc.)
 *   2 = little-endian (sun, ibm, hp, etc)
 */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
typedef unsigned short int  n_uint16_t;
typedef unsigned int       n_uint32_t;
typedef unsigned long int   n_uint64_t;

/* Determine whether the machine is big endian or not */
int big_endian()
{
    union {
        int  l;
```

```

    char c[sizeof(int)];
} u;

u.l = 1;
return (u.c[sizeof(int) - 1] == 1);
}

/* Swap bytes in an array */
void byte_swap(void *ptr, size_t size, size_t nmemb)
{
    int j;

    char char_in[8];          /* characters used in byte swapping */

    char *in_ptr;
    double *double_ptr;      /* Pointer used in the double routines */

    switch (size)
    {
    case 4: /* 4 byte objects */
    {
        int foo;
        n_uint32_t *w = (n_uint32_t *)ptr;
        register n_uint32_t old, new;

        for(j=0; j<nmemb; j++)
        {
            old = w[j];
            new = old >> 24 & 0x000000ff;
            new |= old >> 8 & 0x0000ff00;
            new |= old << 8 & 0x00ff0000;
            new |= old << 24 & 0xff000000;
            w[j] = new;
        }
    }
    break;

    case 1: /* n_uint8_t: byte - do nothing */
        break;

    case 8: /* 8byte - 64bit objects */
    {
        for(j = 0, double_ptr = (double *) ptr;
            j < nmemb;

```

```

        j++, double_ptr++){

in_ptr = (char *) double_ptr; /* Set the character pointer to
                                point to the start of the double */

/*
 * Assign all the byte variables to a character
 */

char_in[0] = in_ptr[0];
char_in[1] = in_ptr[1];
char_in[2] = in_ptr[2];
char_in[3] = in_ptr[3];
char_in[4] = in_ptr[4];
char_in[5] = in_ptr[5];
char_in[6] = in_ptr[6];
char_in[7] = in_ptr[7];

/*
 * Now just swap the order
 */

in_ptr[0] = char_in[7];
in_ptr[1] = char_in[6];
in_ptr[2] = char_in[5];
in_ptr[3] = char_in[4];
in_ptr[4] = char_in[3];
in_ptr[5] = char_in[2];
in_ptr[6] = char_in[1];
in_ptr[7] = char_in[0];
    }
}
break;

case 2: /* 16 bit -- 2 byte -- objects */
{
    n_uint16_t *w = (n_uint16_t *)ptr;
    register n_uint16_t old, new;

    for(j=0; j<nmemb; j++)
    {
        old = w[j];
        new = old >> 8 & 0x00ff;
        new |= old << 8 & 0xff00;
    }
}

```

```
        w[j] = new;
    }
}
break;

default:
    fprintf(stderr, "byte_swap: unsupported word size = %d\n", nmemb);
    exit(1);
}
}
```


9.2 QCDml Ensemble Schema

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
<!-- edited with XMLSpy v2006 U
(http://www.altova.com) by Chris Maynard (EPCC) -->
<!-- QCDml revision 1.3.0 -->
- <xs:schema
  xmlns:xs="http://www.w3.org/2001/XMLSchema"
  xmlns="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensemble1.3"
  targetNamespace="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensei
  elementFormDefault="qualified"
  attributeFormDefault="unqualified">
- <xs:complexType name="arrayType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>SciDAC array
    definition</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="elem"
      type="xs:anySimpleType"
      maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="action">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The action XML
    chunk</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      - <xs:element name="gluon">
        - <xs:complexType>
          - <xs:sequence>
            <xs:element
              ref="generalGluonAction"
              maxOccurs="unbounded" />
            </xs:sequence>
          </xs:complexType>
        </xs:element>
      - <xs:element name="quark"
        minOccurs="0">
        - <xs:complexType>

```

```

- <xs:sequence>
  <xs:element
    ref="generalQuarkAction"
    maxOccurs="unbounded" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
</xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:simpleType name="boundaryConditionType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Enumeration of possible
      BCs</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
    <xs:enumeration value="periodic" />
    <xs:enumeration value="antiperiodic" />
    <xs:enumeration value="dirichlet" />
  </xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:simpleType name="representationType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Enumeration of possible
      representations of
      groups</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
    <xs:enumeration value="fundamental" />
    <xs:enumeration value="adjoint" />
  </xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:simpleType name="gaugeGroupType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Enumeration of possible
      gauge groups</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:restriction base="xs:token">
    <xs:enumeration value="SU(3)" />
    <xs:enumeration value="SU(2)" />

```

```

    <xs:enumeration value="SU(4)" />
    <xs:enumeration value="SU(5)" />
    <xs:enumeration value="SU(6)" />
    <xs:enumeration value="U(1)" />
  </xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:element name="quarkField">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Describes the quark field
    normalisation and boundary
    conditions</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element name="normalisation" />
      <xs:element ref="boundaryCondition" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:element name="gluonField">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Contains the properties
    of the gluon field, e.g. gauge group and
    representation</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element name="gaugeGroup"
        type="gaugeGroupType" />
      <xs:element name="representation"
        type="representationType" />
      <xs:element ref="boundaryCondition" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:element name="array" type="arrayType"
  abstract="true">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The SciDAC array
    definition</xs:documentation>

```

```

    </xs:annotation>
  </xs:element>
- <xs:element name="numberOfFlavours"
  type="xs:integer">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The number of flavours of
      quarks that have the action defined by the
      following couplings</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="boundaryCondition">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>An array of
      boundaryConditionType</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element name="elem"
        type="boundaryConditionType"
        maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:complexType name="couplingsType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>General complex type
      contains more than one
      coupling</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="nCoupings"
      type="couplingType"
      maxOccurs="unbounded" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:simpleType name="couplingType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>All couplings are of this
      type, essentially a
      double</xs:documentation>

```

```

    </xs:annotation>
    <xs:restriction base="xs:double" />
  </xs:simpleType>
- <xs:complexType name="quarkCouplingsType">
-   <xs:annotation>
      <xs:documentation>Contaings N couplings
        plus integer
        numberOfFlavours</xs:documentation>
    </xs:annotation>
-   <xs:sequence>
      <xs:element ref="numberOfFlavours" />
      <xs:element name="nCouplings"
        type="couplingType"
        maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
- <xs:complexType name="generalQuarkActionType">
-   <xs:annotation>
      <xs:documentation>Has the general
        properties of the quark
        action</xs:documentation>
    </xs:annotation>
-   <xs:sequence>
      <xs:element name="glossary"
        type="xs:anyURI" />
      <xs:element ref="quarkField" />
      <xs:element ref="numberOfFlavours" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="generalQuarkAction"
  type="generalQuarkActionType" abstract="true">
-   <xs:annotation>
      <xs:documentation>Has the general
        properties of the quark action, i.e. the
        number of quark flavours and the
        properties of the fields</xs:documentation>
    </xs:annotation>
  </xs:element>
- <xs:complexType name="generalGluonActionType">
-   <xs:annotation>

```

```

    <xs:documentation>Has the general
    properties of the gluon
    action</xs:documentation>
  </xs:annotation>
- <xs:sequence>
    <xs:element name="glossary"
      type="xs:anyURI" />
    <xs:element ref="gluonField" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:element name="generalGluonAction"
  type="generalGluonActionType" abstract="true">
- <xs:annotation>
    <xs:documentation>Has the general
    properties of the gloun action, i.e. the
    gluon field and the glossary
    XML</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType
  name="iwasakiRGGluonActionType">
- <xs:complexContent>
    <xs:extension
      base="sixLinkGluonActionType" />
  </xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="iwasakiRGGluonAction"
  type="iwasakiRGGluonActionType"
  substitutionGroup="sixLinkGluonAction">
- <xs:annotation>
    <xs:documentation>This six-link action has
    three couplings</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType
  name="plaquetteGluonActionType">
- <xs:complexContent>
- <xs:extension
  base="generalGluonActionType">
- <xs:sequence>
    <xs:element name="beta"

```

```

        type="couplingType" />
      </xs:sequence>
    </xs:extension>
  </xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:complexType name="sixLinkGluonActionType"
  abstract="true">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension
      base="plaquetteGluonActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="c0"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c1"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c2"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c3"
          type="couplingType" />
      </xs:sequence>
    </xs:extension>
  </xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="sixLinkGluonAction"
  type="sixLinkGluonActionType" abstract="true"
  substitutionGroup="plaquetteGluonAction">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Abstract class of all six
    link gluon action. Doesn't fix the
    couplings.</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="plaquetteGluonAction"
  type="plaquetteGluonActionType"
  substitutionGroup="generalGluonAction">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The Wilson plaquette
    action, has a coupling
    beta</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>

```


- <xs:complexType name="DBW2GluonActionType">
 - <xs:complexContent>
 - <xs:extension
 - base="sixLinkGluonActionType" />
 - </xs:complexContent>
- </xs:complexType>
- <xs:element name="DBW2GluonAction"
 - type="DBW2GluonActionType"
 - substitutionGroup="sixLinkGluonAction">
 - <xs:annotation>
 - <xs:documentation>DBW2 is a six link action
 - with specific couplings</xs:documentation>
 - </xs:annotation>
- </xs:element>
- <xs:complexType
 - name="treelevelSymanzikGluonActionType">
 - <xs:complexContent>
 - <xs:extension
 - base="sixLinkGluonActionType" />
 - </xs:complexContent>
- </xs:complexType>
- <xs:element name="treelevelSymanzikGluonAction"
 - type="treelevelSymanzikGluonActionType"
 - substitutionGroup="sixLinkGluonAction">
 - <xs:annotation>
 - <xs:documentation>The treelevel Symanzik
 - action is a six link action with specific
 - couplings</xs:documentation>
 - </xs:annotation>
- </xs:element>
- <xs:complexType
 - name="LuescherWeiszGluonActionType">
 - <xs:complexContent>
 - <xs:extension
 - base="sixLinkGluonActionType" />
 - </xs:complexContent>
- </xs:complexType>
- <xs:complexType
 - name="tpLuescherWeiszGluonActionType">
 - <xs:complexContent>
 - <xs:extension

```

base="LuescherWeiszGluonActionType">
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="u0"
      type="couplingType" />
    </xs:sequence>
  </xs:extension>
</xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="LuescherWeiszGluonAction"
  type="LuescherWeiszGluonActionType"
  substitutionGroup="sixLinkGluonAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The Luescher-Weisz
    gluon action is a six link
    action</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="tpLuescherWeiszGluonAction"
  type="tpLuescherWeiszGluonActionType"
  substitutionGroup="sixLinkGluonAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The Luescher-Weisz
    gluon action with tadpole-improved
    coefficients is a six link
    action</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType name="wilsonQuarkActionType">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension
      base="generalQuarkActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="kappa"
          type="couplingType" />
        </xs:sequence>
      </xs:extension>
    </xs:complexContent>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="wilsonQuarkAction"
  type="wilsonQuarkActionType"
  substitutionGroup="generalQuarkAction">

```

```

- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The wilson quark action,
    has a coupling kappa</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType name="cloverQuarkActionType"
  abstract="true">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension
      base="wilsonQuarkActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="cSW"
          type="couplingType" />
        </xs:sequence>
      </xs:extension>
    </xs:complexContent>
  </xs:complexType>
- <xs:complexType name="tpCloverQuarkActionType">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension
      base="cloverQuarkActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="u0"
          type="couplingType" minOccurs="1"
          maxOccurs="1" />
        </xs:sequence>
      </xs:extension>
    </xs:complexContent>
  </xs:complexType>
- <xs:complexType
  name="npCloverQuarkActionType">
  - <xs:complexContent>
    <xs:extension
      base="cloverQuarkActionType" />
    </xs:complexContent>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="cloverQuarkAction"
  type="cloverQuarkActionType" abstract="true"
  substitutionGroup="wilsonQuarkAction">
  - <xs:annotation>

```

```

    <xs:documentation>The generic clover wilson
    action type. It is abstract because there
    are different definitions of CSW that are all
    clover actions</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="npCloverQuarkAction"
  type="npCloverQuarkActionType"
  substitutionGroup="cloverQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The Clover Wilson quark
  action where the coefficient has been
  determined non-
  perturbatively</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="tpCloverQuarkAction"
  type="tpCloverQuarkActionType"
  substitutionGroup="cloverQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The Clover Wilson quark
  action where the coefficient has been
  determined by tadpole improved
  perturbation theory</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType
  name="wilsonTmQuarkActionType">
- <xs:complexContent>
- <xs:extension
  base="wilsonQuarkActionType">
- <xs:sequence>
  <xs:element name="mu" />
</xs:sequence>
</xs:extension>
</xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="wilsonTmQuarkAction"
  type="wilsonTmQuarkActionType"
  substitutionGroup="wilsonQuarkAction">
- <xs:annotation>

```

```

    <xs:documentation>The Wilson twisted mass
    quark action</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType name="KSQuarkActionType">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension
      base="generalQuarkActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="mass"
          type="couplingType" />
        </xs:sequence>
      </xs:extension>
    </xs:complexContent>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="KSQuarkAction"
  type="KSQuarkActionType" abstract="true"
  substitutionGroup="generalQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The basic KS action.
  Abstract</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType name="asqTadQuarkActionType">
  - <xs:complexContent>
    - <xs:extension base="KSQuarkActionType">
      - <xs:sequence>
        <xs:element name="cNaik"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c1Link"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c3Link"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c5LinkChair"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="c7LinkTwist"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="cLepage"
          type="couplingType" />
        <xs:element name="u0"
          type="couplingType" minOccurs="1"

```

```

        maxOccurs="1" />
      </xs:sequence>
    </xs:extension>
  </xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="asqTadQuarkAction"
  type="asqTadQuarkActionType"
  substitutionGroup="KSQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>A specific improved KS
    quark action</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="generalOverlapQuarkAction"
  type="generalOverlapQuarkActionType"
  abstract="true"
  substitutionGroup="generalQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The abstract Overlap
    quark operator</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType
  name="generalOverlapQuarkActionType">
- <xs:complexContent>
- <xs:extension
  base="generalQuarkActionType">
- <xs:sequence>
- <xs:element name="mass"
  type="couplingType">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The quark
    mass for this
    operator</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="kernelMass"
  type="couplingType">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The mass
    that goes into the kernel.

```

Sometimes called the domain wall height. Sometimes given a negative sign convention. This is NOT enforced here.

```

</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="N5"
  type="couplingType">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The degree
    of the approximation for the
    square root or equivalently
    the size of the fifth
    dimension</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
</xs:sequence>
</xs:extension>
</xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:complexType
  name="domainWallQuarkActionType">
- <xs:complexContent>
  <xs:extension
    base="generalOverlapQuarkActionType" />
  </xs:complexContent>
</xs:complexType>
- <xs:element name="domainWallQuarkAction"
  type="domainWallQuarkActionType"
  substitutionGroup="generalOverlapQuarkAction">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The domain Wall quark
    action. 4D is Wilson and the approx is
    tanh</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="size">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>The simulation size, for

```

each dimension, as well as the order of the
dimensionoos</xs:documentation>

</xs:annotation>

- <xs:complexType>

- <xs:sequence>

<xs:element name="elem"

type="dimensionType"

maxOccurs="unbounded" />

</xs:sequence>

</xs:complexType>

</xs:element>

- <xs:complexType name="dimensionType">

- <xs:annotation>

<xs:documentation>**The name of the**

dimension and its size</xs:documentation>

</xs:annotation>

- <xs:sequence>

<xs:element name="name" type="xs:Name" />

<xs:element name="length"

type="xs:integer" />

</xs:sequence>

</xs:complexType>

- <xs:element name="observables">

- <xs:annotation>

<xs:documentation>**Observables calculated
on configurations of this
ensemble**</xs:documentation>

</xs:annotation>

- <xs:complexType>

- <xs:sequence maxOccurs="unbounded">

<xs:element name="elem"

type="observableType" />

</xs:sequence>

</xs:complexType>

</xs:element>

- <xs:complexType name="observableType">

- <xs:annotation>

<xs:documentation>**Definition of**

observalbes</xs:documentation>

</xs:annotation>

- <xs:sequence>
 - <xs:element name="name" type="observableNameType" />
 - <xs:element name="val" type="xs:double" />
 - <xs:element name="err" type="xs:double" />
 - <xs:element name="glossary" type="xs:anyURI" />
- </xs:sequence>
- </xs:complexType>
- <xs:simpleType name="observableNameType">
 - <xs:annotation>
 - <xs:documentation>Enumeration of possible observable names</xs:documentation>
 - </xs:annotation>
 - <xs:restriction base="xs:string">
 - <xs:enumeration value="ampi" />
 - <xs:enumeration value="amrho" />
 - <xs:enumeration value="mpi/mrho" />
 - <xs:enumeration value="r0/a" />
 - <xs:enumeration value="r1/a" />
 - </xs:restriction>
- </xs:simpleType>
- <xs:element name="physics">
 - <xs:annotation>
 - <xs:documentation>Contains the physics information</xs:documentation>
 - </xs:annotation>
 - <xs:complexType>
 - <xs:sequence>
 - <xs:element ref="size" />
 - <xs:element ref="action" />
 - <xs:element ref="observables" minOccurs="0" />
 - </xs:sequence>
 - </xs:complexType>
- </xs:element>
- <xs:element name="markovChain">
 - <xs:annotation>
 - <xs:documentation>Also known as ensemble XML. below this level the XML is static

```

across an ensemble of
  data.</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:complexType>
  - <xs:sequence>
    <xs:element ref="markovChainURI" />
    <xs:element ref="management" />
    <xs:element ref="physics" />
    <xs:element name="algorithm"
      type="algorithmType" />
    <xs:element name="cLibrary"
      type="xs:anyURI" minOccurs="0" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:element name="data" type="xs:anyURI">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The Logical file name on
      the grid of the data file
      itself</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="markovChainURI"
  type="xs:anyURI">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The URI which identifies
      the of the ensemble</xs:documentation>
  </xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:complexType name="algorithmType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The type for
      algorithms</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="name" type="xs:Name" />
    <xs:element name="glossary"
      type="xs:anyURI" />
    <xs:element name="reference"
      type="xs:string" />

```

```

    <xs:element name="exact"
      type="xs:boolean" />
  - <xs:element name="parameters"
    minOccurs="0">
  - <xs:complexType>
    - <xs:complexContent>
      <xs:extension
        base="parameterType" />
      </xs:complexContent>
    </xs:complexType>
  </xs:element>
  <xs:any namespace="##other" minOccurs="0"
    maxOccurs="unbounded" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:complexType name="parameterType">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>Contains a name and a
    value</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:sequence minOccurs="0"
  maxOccurs="unbounded">
  <xs:element name="name" type="xs:Name" />
  <xs:element name="value"
    type="xs:anySimpleType" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:element name="management">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>Contains information
    about who, what, and when the data was
    done</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:complexType>
  - <xs:sequence>
    - <xs:element name="revisions"
      type="xs:nonNegativeInteger"
      minOccurs="0">
    - <xs:annotation>
      <xs:documentation>The number of

```

```

times the entry for this ensemble
has been
revised</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
<xs:element name="collaboration"
  type="xs:normalizedString" />
<xs:element name="projectName"
  type="xs:normalizedString" />
<xs:element name="ensembleLabel"
  type="xs:normalizedString"
  minOccurs="0" />
<xs:element name="reference"
  type="xs:normalizedString"
  minOccurs="0" />
- <xs:element name="archiveHistory">
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element name="elem"
        type="managementActionType"
        minOccurs="0"
        maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:element>
</xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:complexType name="managementActionType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Management action such
      as add to the catalogue, withdraw from
      the catalogue</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="revision"
      type="xs:nonNegativeInteger"
      minOccurs="0" />
    <xs:element name="revisionAction"
      type="revisionActionType" />
  - <xs:element name="participant">

```

```

- <xs:annotation>
  <xs:documentation>Who made this
  revision</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:complexType>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="name"
      type="xs:string" />
    <xs:element name="institution"
      type="xs:string" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
<xs:element name="date"
  type="xs:dateTime" />
<xs:element name="comment"
  type="xs:string" minOccurs="0" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:simpleType name="revisionActionType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>An enumeration of
    revision actions</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
    - <xs:enumeration value="add">
      - <xs:annotation>
        <xs:documentation>add a new
        ensemble</xs:documentation>
      </xs:annotation>
    </xs:enumeration>
    - <xs:enumeration value="replace">
      - <xs:annotation>
        <xs:documentation>replace ensemble
        document</xs:documentation>
      </xs:annotation>
    </xs:enumeration>
    - <xs:enumeration value="remove">
      - <xs:annotation>
        <xs:documentation>remove

```

```
    ensemble</xs:documentation>
    </xs:annotation>
  </xs:enumeration>
</xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:simpleType name="negativeCouplingType">
  - <xs:restriction base="couplingType">
    <xs:maxExclusive value="0.0" />
  </xs:restriction>
</xs:simpleType>
</xs:schema>
```

9.3 QCDml Ensemble Schema sample

- <markovChain
 - xmlns="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensemble1.3"
 - xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
 - xsi:schemaLocation="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ens
 http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensemble1.3/QCDmlEn
 <markovChainURI>mc://JLDG/CP-
 PACS/RCNF2/RC24x48-
 B2100K013820C1470</markovChainURI>
- <management>
 - <revisions>1</revisions>
 - <collaboration>CP-PACS</collaboration>
 - <projectName>RCNF2 (Nf=2 full QCD with
 iwasaki RG gauge and tadpole improved
 clover quark action)</projectName>
 - <ensembleLabel>B2100</ensembleLabel>
 - <reference>Phys.Rev. D65 (2002) 054505 (hep-
 lat/0105015), Erratum-ibid. D67 (2003)
 059901</reference>
- <archiveHistory>
 - <elem>
 - <revision>1</revision>
 - <revisionAction>add</revisionAction>
 - <participant>
 - <name>T.Yoshie</name>
 - <institution>Center fof Computational
 Sciences, University of
 Tsukuba</institution>
- <physics>
 - <size>
 - <elem>
 - <name>X</name>
 - <length>24</length>


```

    <name>Y</name>
    <length>24</length>
  </elem>
- <elem>
    <name>Z</name>
    <length>24</length>
  </elem>
- <elem>
    <name>T</name>
    <length>48</length>
  </elem>
</size>
- <action>
  - <gluon>
    - <iwasakiRGGluonAction>

      <glossary>http://www.lqcd.org/ildg/actionGloss
    - <gluonField>
      <gaugeGroup>SU(3)
      </gaugeGroup>

      <representation>fundamental</representation>
    - <boundaryCondition>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
    </boundaryCondition>
  </gluonField>
  <beta>2.100</beta>
  <c0>3.648</c0>
  <c1>-0.331</c1>
  <c2>0.0</c2>
  <c3>0.0</c3>
  </iwasakiRGGluonAction>
</gluon>
- <quark>
  - <tpCloverQuarkAction>

    <glossary>http://www.lqcd.org/ildg/actionGloss

```

```

- <quarkField>

    <normalisation>sqrt2kappa</normalisation>
  - <boundaryCondition>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
    </boundaryCondition>
  </quarkField>

  <numberOfFlavours>2</numberOfFlavours>
  <kappa>0.13820</kappa>
  <cSW>1.470</cSW>
  <u0>0.8302</u0>
</tpCloverQuarkAction>
- <tpCloverQuarkAction>

  <glossary>http://www.lqcd.org/ildg/actionGloss
- <quarkField>

    <normalisation>sqrt2kappa</normalisation>
  - <boundaryCondition>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
      <elem>periodic</elem>
    </boundaryCondition>
  </quarkField>

  <numberOfFlavours>1</numberOfFlavours>
  <kappa>0.13828</kappa>
  <cSW>1.470</cSW>
  <u0>0.8302</u0>
</tpCloverQuarkAction>
</quark>
</action>
</physics>
- <algorithm>
  <name>CP-PACS-hybrid-monte-carlo</name>

```

<glossary>http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/ILDG/CP
-PACS/CP-PACS-hybrid-monte-
carlo.pdf</glossary>
<reference>Phys.Rev. D65 (2002) 054505 (hep-
lat/0105015), Erratum-ibid. D67 (2003)
059901</reference>
<exact>true</exact>
</algorithm>
</markovChain>

9.4 QCDml Ensemble Schema documentation

Schema QCDmlEnsemble1.3.0.xsd

schema location: <C:\Documents and Settings\yoshie\My Documents\ILDG\QCDML1.3.0\QCDmlEnsemble1.3.0.xsd>
targetNamespace: <http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/ensemble1.3>

Elements

[action](#)
[array](#)
[asqTadQuarkAction](#)
[boundaryCondition](#)
[cloverQuarkAction](#)
[data](#)
[DBW2GluonAction](#)
[domainWallQuarkAction](#)
[generalGluonAction](#)
[generalOverlapQuarkAction](#)
[generalQuarkAction](#)
[gluonField](#)
[iwasakiRGGluonAction](#)
[KSQuarkAction](#)
[LuescherWeiszGluonAction](#)
[management](#)
[markovChain](#)
[markovChainURI](#)
[npCloverQuarkAction](#)
[numberOfFlavours](#)
[observables](#)
[physics](#)
[plaquetteGluonAction](#)
[quarkField](#)
[sixLinkGluonAction](#)
[size](#)
[tpCloverQuarkAction](#)
[tpLuescherWeiszGluonAction](#)

Complex types

[algorithmType](#)
[arrayType](#)
[asqTadQuarkActionType](#)
[cloverQuarkActionType](#)
[couplingsType](#)
[DBW2GluonActionType](#)
[dimensionType](#)
[domainWallQuarkActionType](#)
[generalGluonActionType](#)
[generalOverlapQuarkActionType](#)
[generalQuarkActionType](#)
[iwasakiRGGluonActionType](#)
[KSQuarkActionType](#)
[LuescherWeiszGluonActionType](#)
[managementActionType](#)
[npCloverQuarkActionType](#)
[observableType](#)
[parameterType](#)
[plaquetteGluonActionType](#)
[quarkCouplingsType](#)
[sixLinkGluonActionType](#)
[tpCloverQuarkActionType](#)
[tpLuescherWeiszGluonActionType](#)
[treelevelSymanzikGluonActionType](#)
[wilsonQuarkActionType](#)
[wilsonTmQuarkActionType](#)

Simple types

[boundaryConditionType](#)
[couplingType](#)
[gaugeGroupType](#)
[negativeCouplingType](#)
[observableNameType](#)
[representationType](#)
[revisionActionType](#)

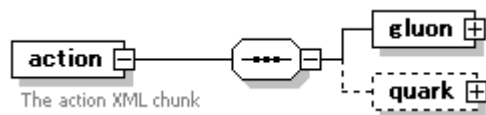
[treelevelSymanzikGluonAction](#)

[wilsonQuarkAction](#)

[wilsonTmQuarkAction](#)

element **action**

diagram



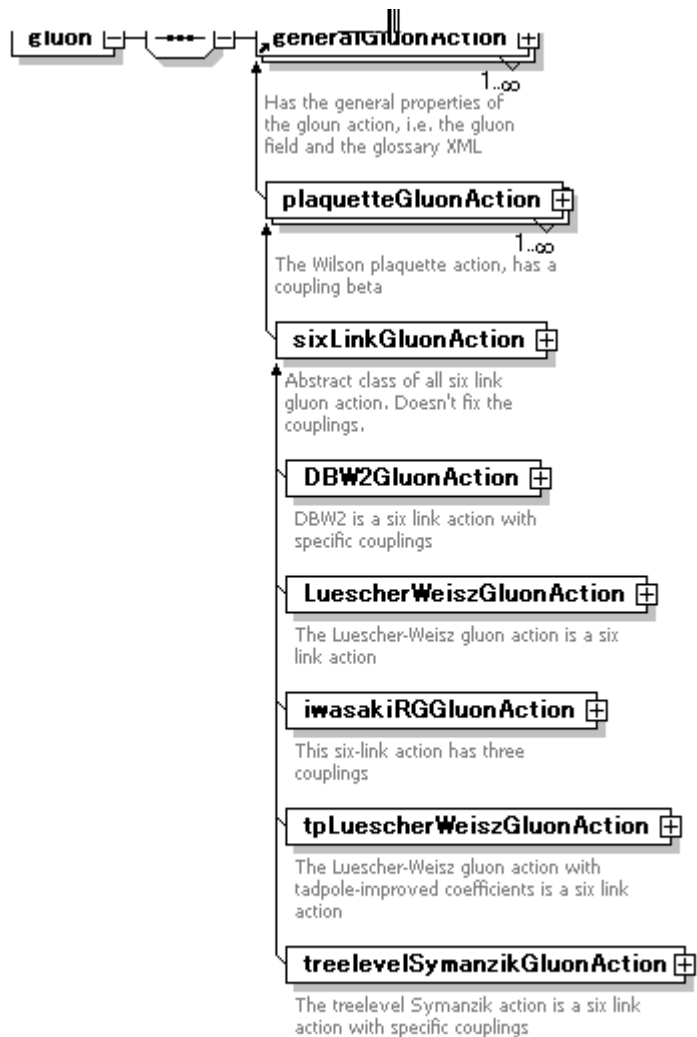
children [gluon](#) [quark](#)

used by element [physics](#)

annotation documentation The action XML chunk

element action/gluon

diagram



children [generalGluonAction](#)

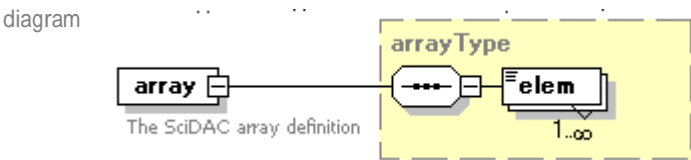
element action/quark

diagram



children [generalQuarkAction](#)

element **array**

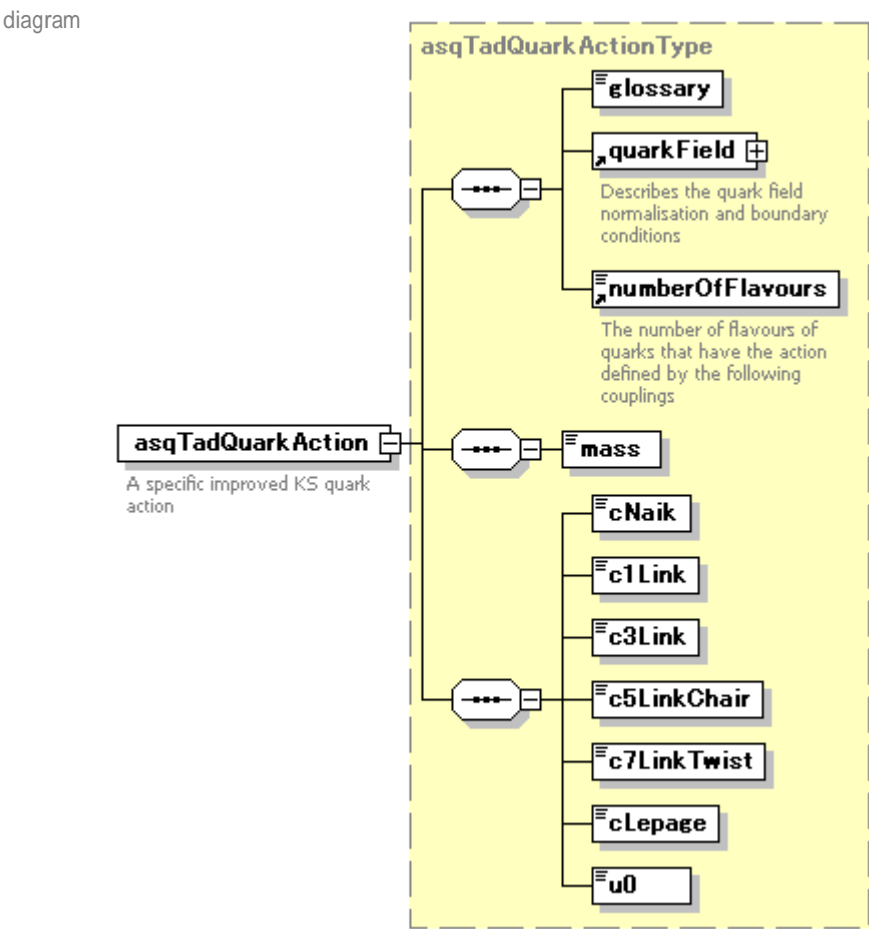


type [arrayType](#)

children [elem](#)

annotation documentation The SciDAC array definition

element **asqTadQuarkAction**



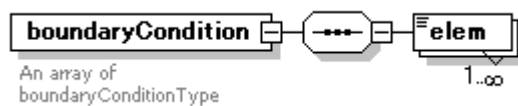
type [asqTadQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [cNaik](#) [c1Link](#) [c3Link](#) [c5LinkChair](#) [c7LinkTwist](#) [cLepage](#) [u0](#)

annotation documentation A specific improved KS quark action

element **boundaryCondition**

diagram



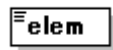
children [elem](#)

used by elements [gluonField](#) [quarkField](#)

annotation documentation An array of boundaryConditionType

element **boundaryCondition/elem**

diagram



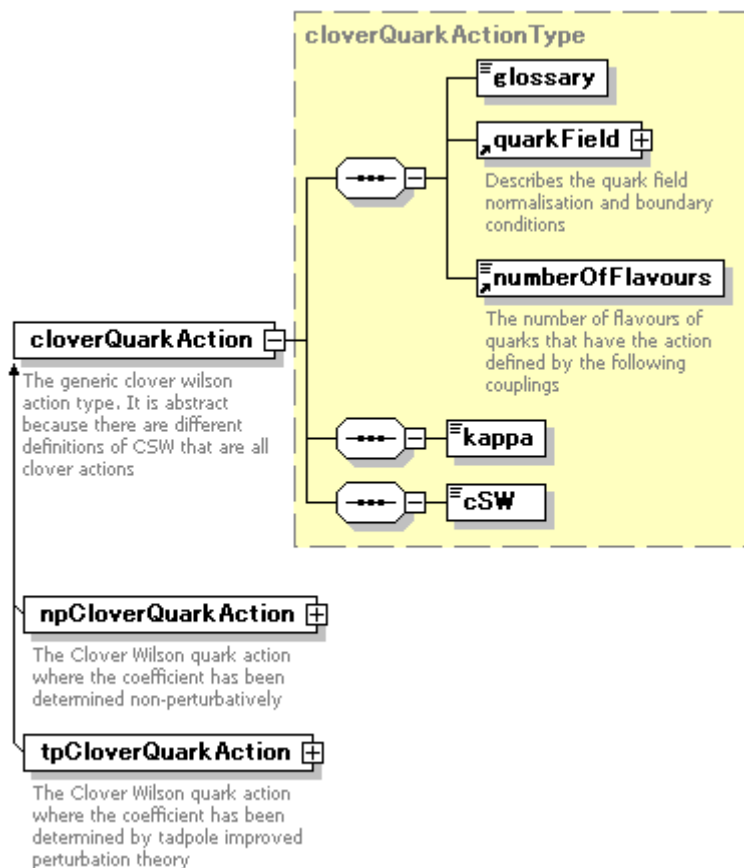
type [boundaryConditionType](#)

facets

enumeration	periodic
enumeration	antiperiodic
enumeration	dirichlet

element cloverQuarkAction

diagram



type [cloverQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#)

annotation documentation The generic clover wilson action type. It is abstract because there are different definitions of CSW that are all clover actions

element data

diagram

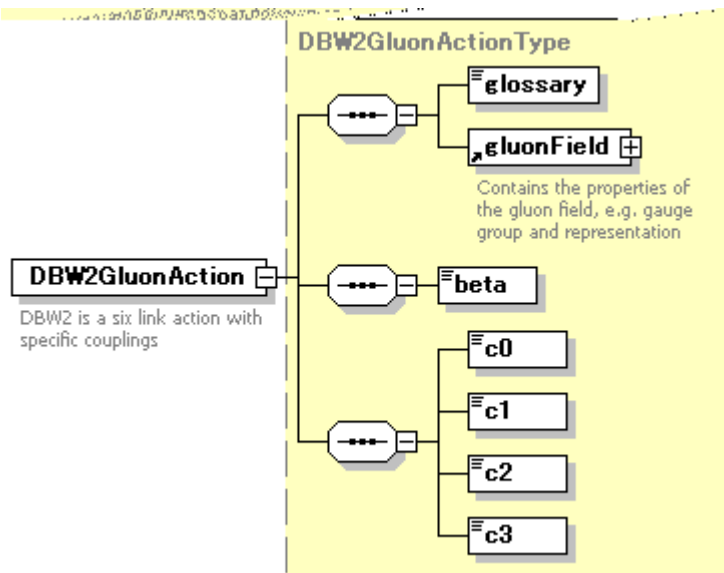


type **xs:anyURI**

annotation documentation The Logical file name on the grid of the data file itself

element **DBW2GluonAction**

diagram



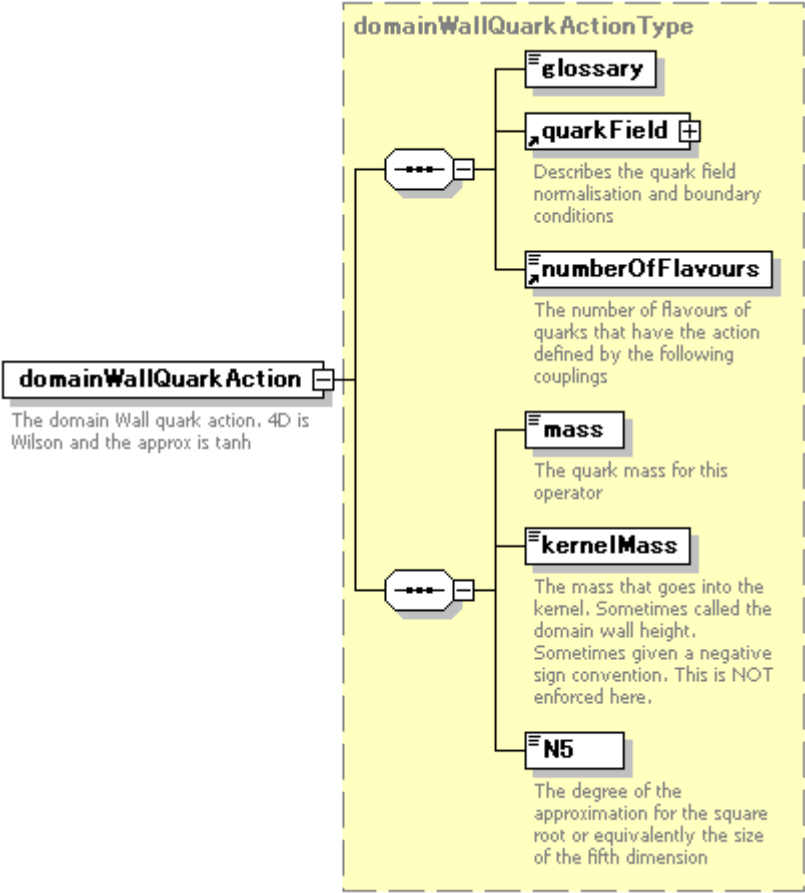
type [DBW2GluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

annotation documentation DBW2 is a six link action with specific couplings

element **domainWallQuarkAction**

diagram



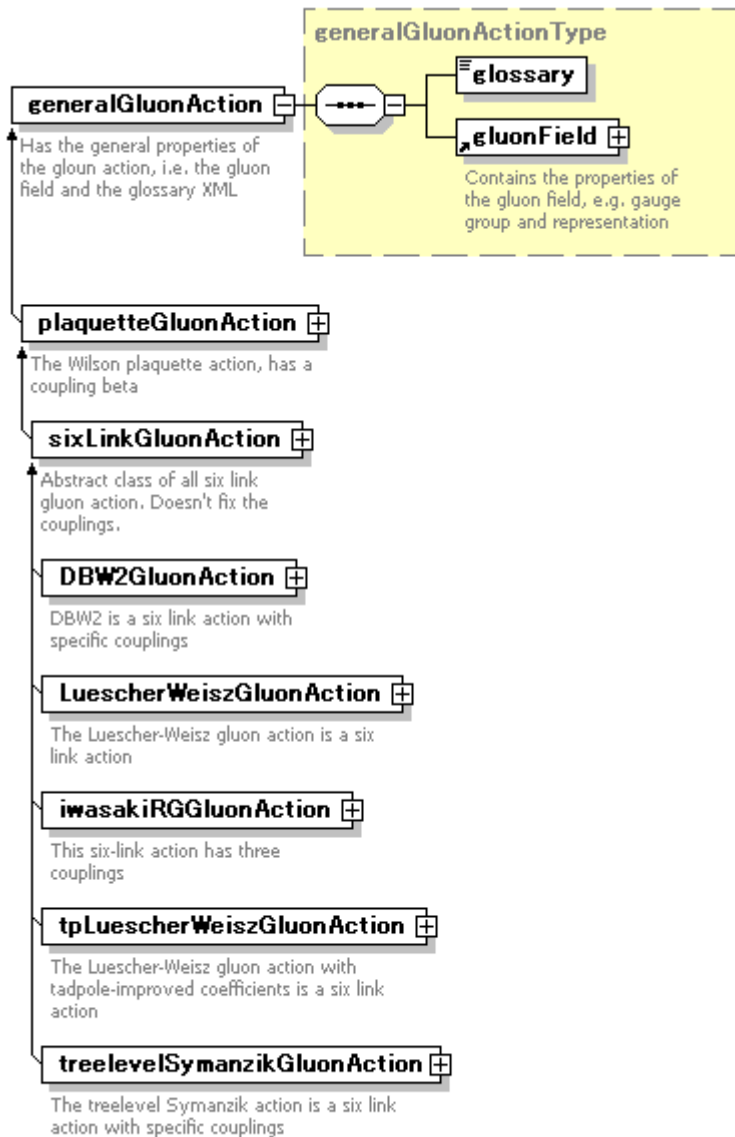
type [domainWallQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [kernelMass](#) [N5](#)

annotation documentation The domain Wall quark action. 4D is Wilson and the approx is tanh

element **generalGluonAction**

diagram



type [generalGluonActionType](#)

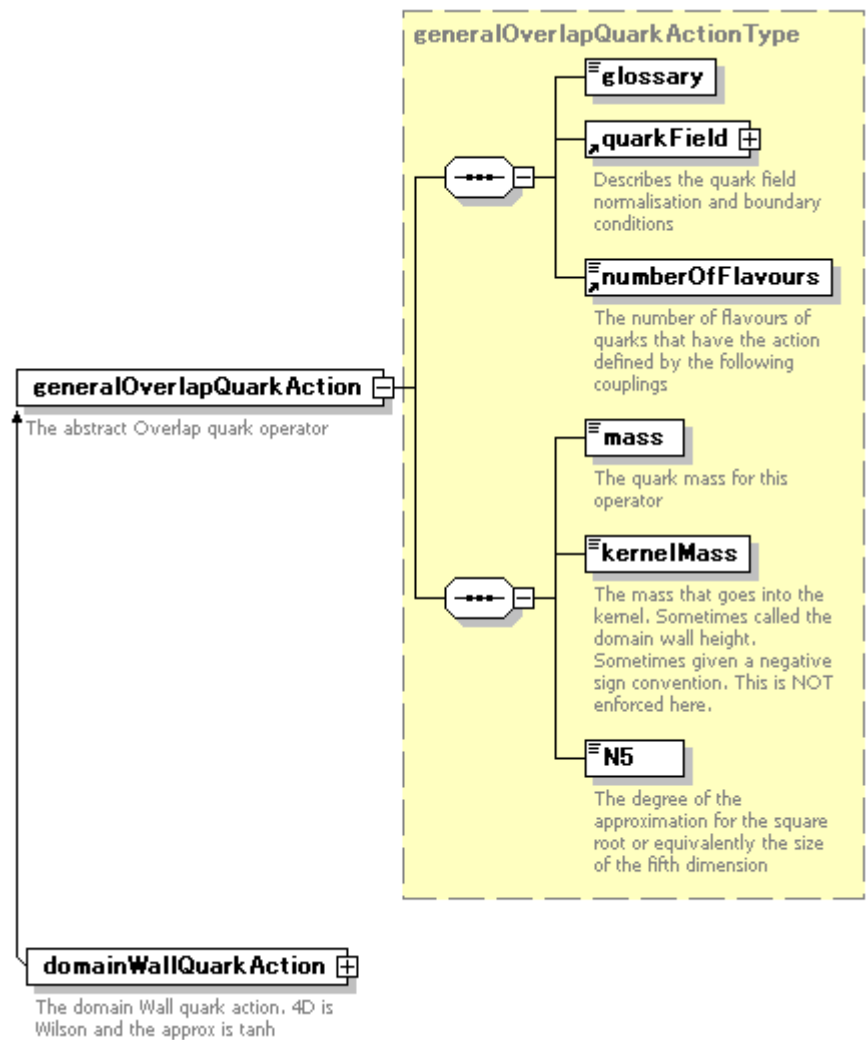
children [glossary](#) [gluonField](#)

used by element [action/gluon](#)

annotation documentation Has the general properties of the gluon action, i.e. the gluon field and the glossary XML

element **generalOverlapQuarkAction**

diagram



type [generalOverlapQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [kernelMass](#) [N5](#)

annotation documentation The abstract Overlap quark operator

element **generalQuarkAction**

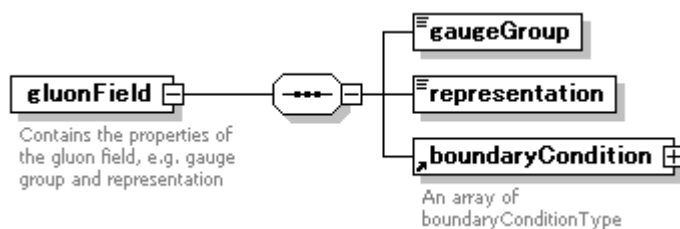
diagram



type	generalQuarkActionType	
children	glossary quarkField numberOfFlavours	
used by	element	action/quark
annotation	documentation	Has the general properties of the quark action, i.e. the number of quark flavours and the properties of the fields

element **gluonField**

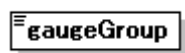
diagram



children	gaugeGroup representation boundaryCondition	
used by	complexType	generalGluonActionType
annotation	documentation	Contains the properties of the gluon field, e.g. gauge group and representation

element **gluonField/gaugeGroup**

diagram



type	gaugeGroupType	
facets	enumeration	SU(3)
	enumeration	SU(2)
	enumeration	SU(4)
	enumeration	SU(5)
	enumeration	SU(6)
	enumeration	U(1)

element **gluonField/representation**

diagram

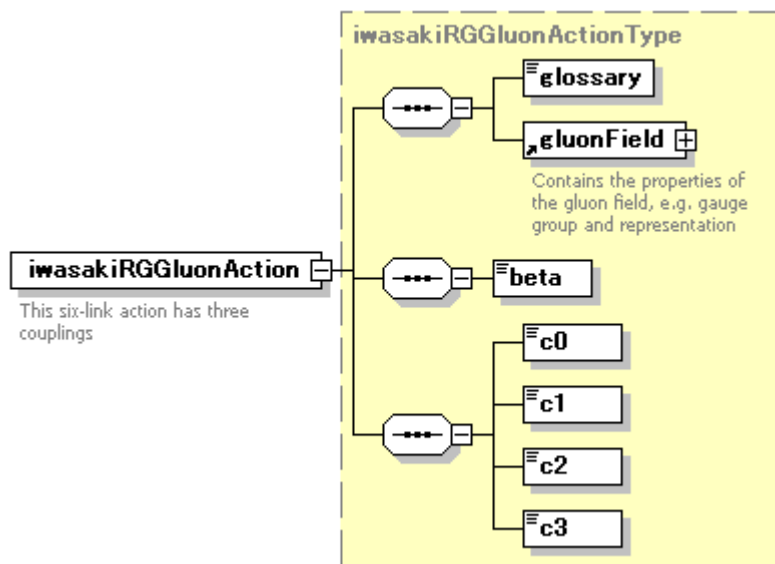


type [representationType](#)

facets enumeration fundamental
 enumeration adjoint

element **iwasakiRGGluonAction**

diagram



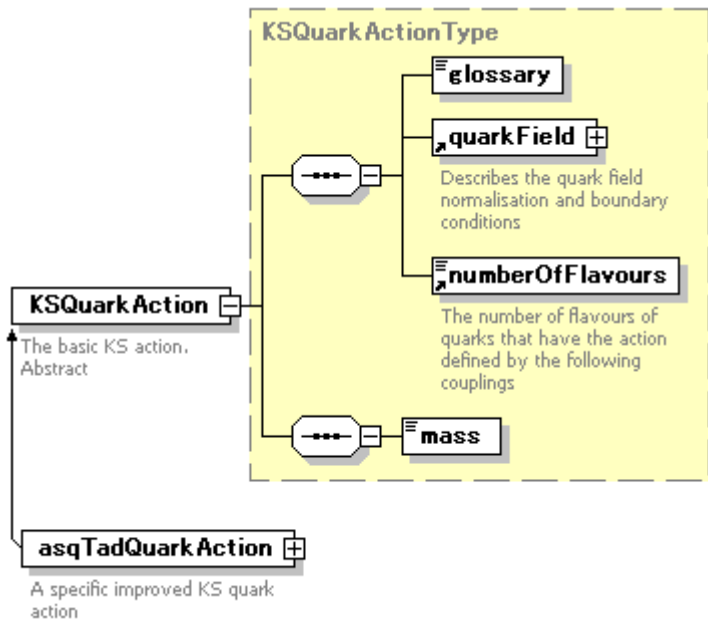
type [iwasakiRGGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

annotation documentation This six-link action has three couplings

element **KSQuarkAction**

diagram



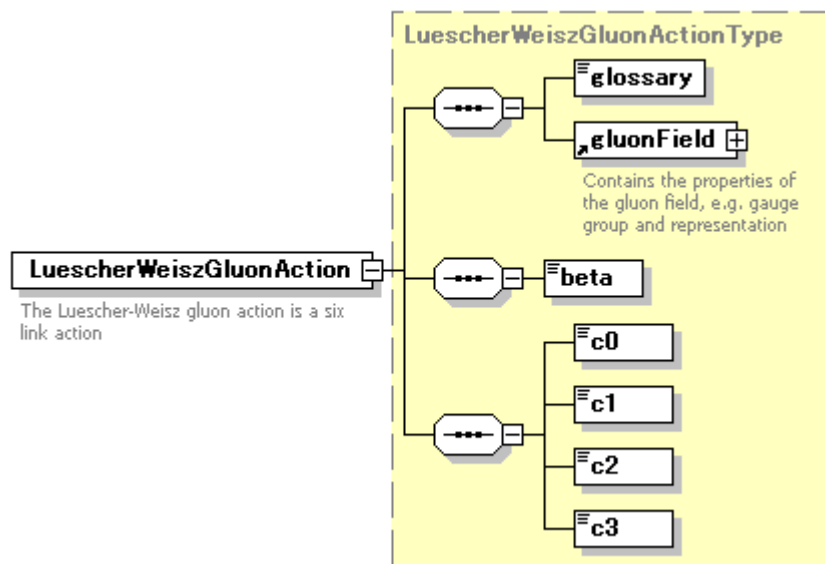
type [KSQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#)

annotation documentation The basic KS action. Abstract

element LuescherWeiszGluonAction

diagram



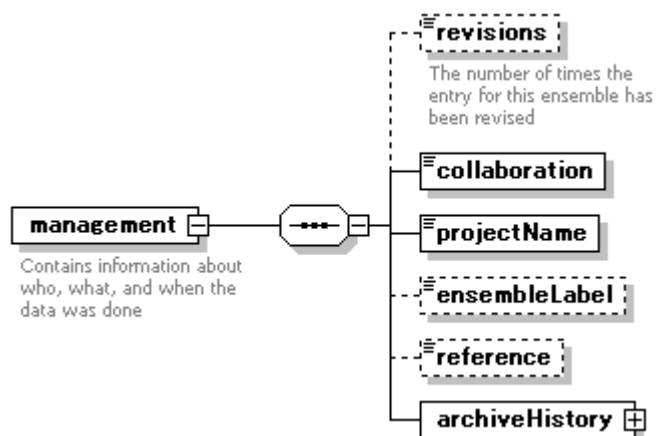
type [LuescherWeiszGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

annotation documentation The Luescher-Weisz gluon action is a six link action

element management

diagram




children [revisions](#) [collaboration](#) [projectName](#) [ensembleLabel](#) [reference](#) [archiveHistory](#)

used by element [markovChain](#)

annotation documentation Contains information about who, what, and when the data was done

element **management/revisions**

diagram 
The number of times the entry for this ensemble has been revised

type **xs:nonNegativeInteger**

annotation documentation The number of times the entry for this ensemble has been revised

element **management/collaboration**

diagram 


type **xs:normalizedString**

element **management/projectName**

diagram 

type **xs:normalizedString**

element **management/ensembleLabel**

diagram 

type **xs:normalizedString**

element **management/reference**

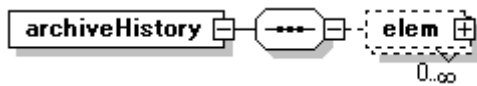
diagram



type **xs:normalizedString**

element **management/archiveHistory**

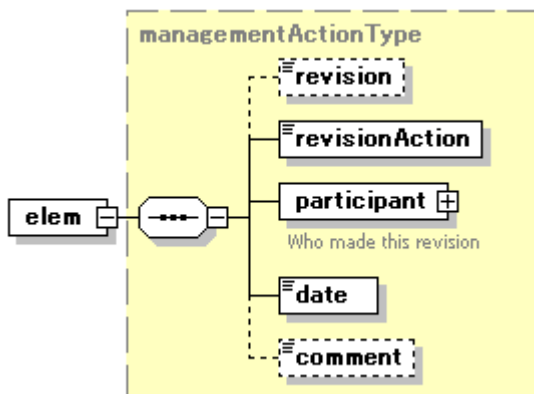
diagram



children [elem](#)

element **management/archiveHistory/elem**

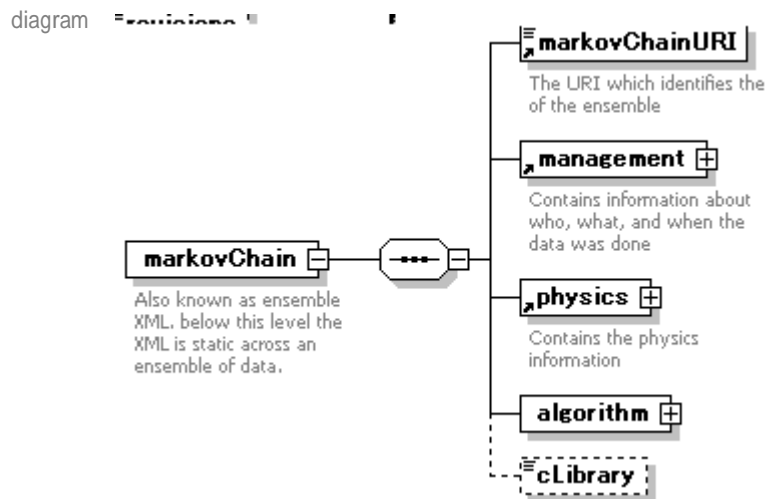
diagram



type [managementActionType](#)

children [revision](#) [revisionAction](#) [participant](#) [date](#) [comment](#)

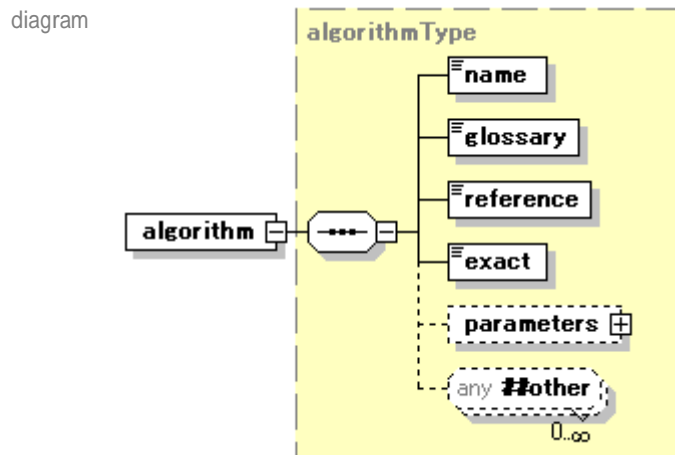
element markovChain



children [markovChainURI](#) [management](#) [physics](#) [algorithm](#) [cLibrary](#)

annotation documentation Also known as ensemble XML. below this level the XML is static across an ensemble of data.

element markovChain/algorithm



type [algorithmType](#)

children [name](#) [glossary](#) [reference](#) [exact](#) [parameters](#)

element **markovChain/cLibrary**

diagram



type **xs:anyURI**

element **markovChainURI**

diagram



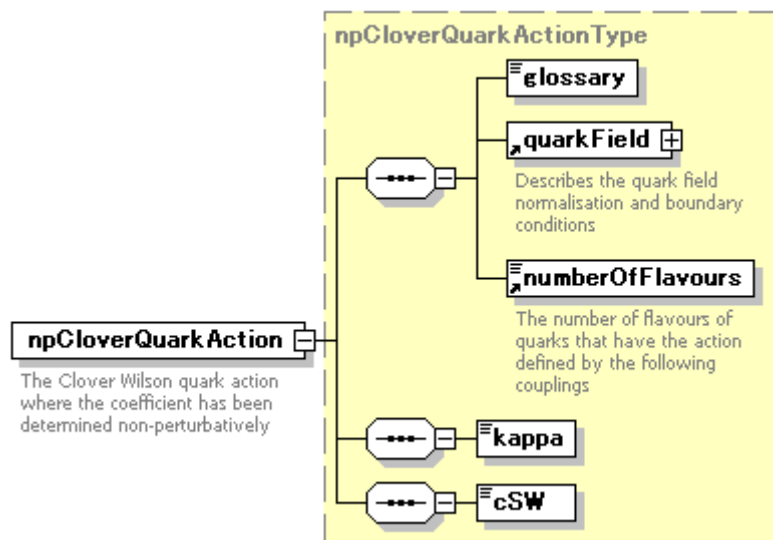
type **xs:anyURI**

used by element [markovChain](#)

annotation documentation The URI which identifies the of the ensemble

element **npCloverQuarkAction**

diagram

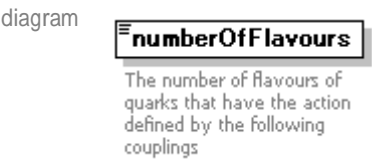


type [npCloverQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#)

annotation documentation The Clover Wilson quark action where the coefficient has been determined non-perturbatively

element **numberOfFlavours**

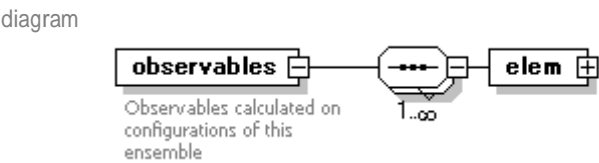


type **xs:integer**

used by complexTypes [generalQuarkActionType](#) [quarkCouplingsType](#)

annotation documentation The number of flavours of quarks that have the action defined by the following couplings

element **observables**

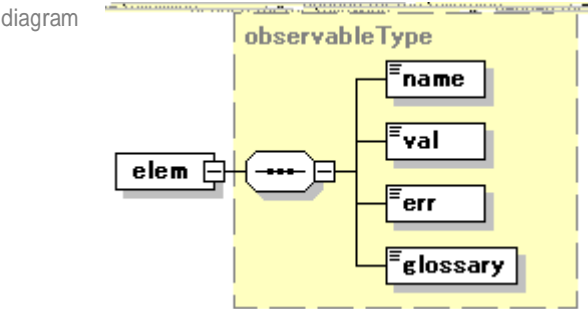


children [elem](#)

used by element [physics](#)

annotation documentation Observables calculated on configurations of this ensemble

element **observables/elem**

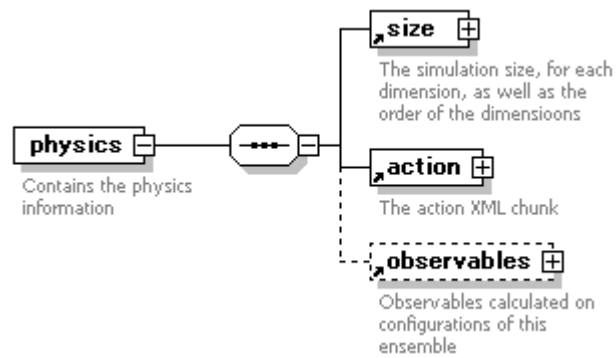


type [observableType](#)

children [name](#) [val](#) [err](#) [glossary](#)

element **physics**

diagram



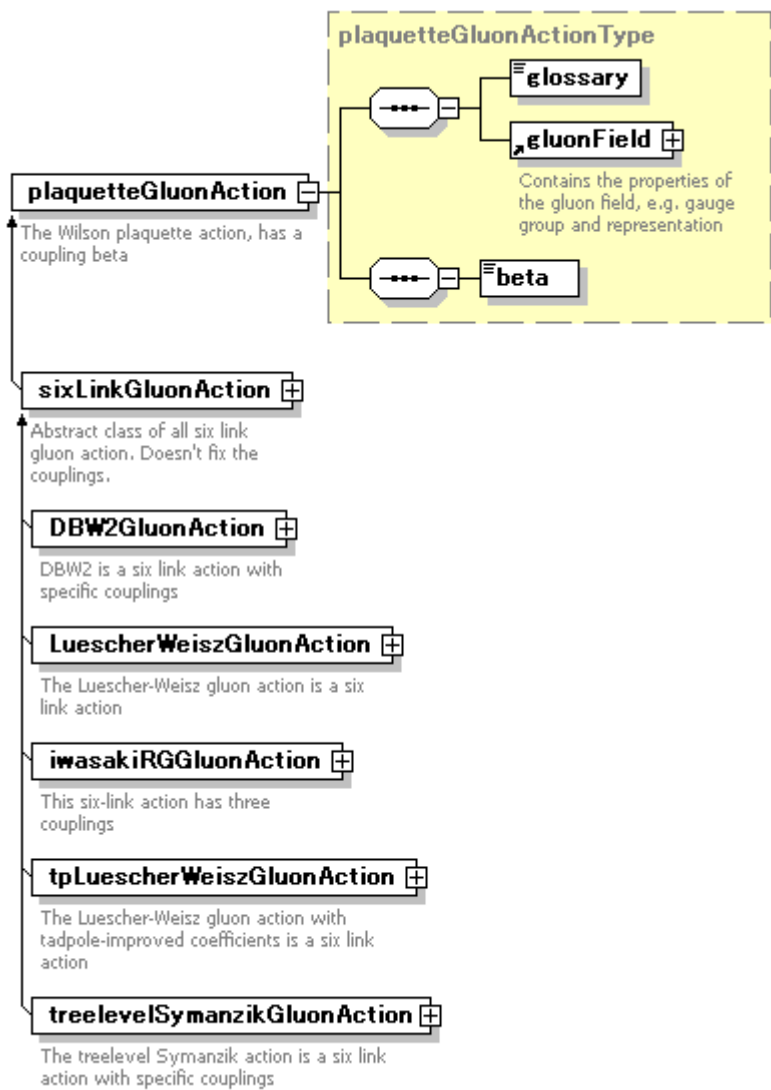
children [size](#) [action](#) [observables](#)

used by element [markovChain](#)

annotation documentation Contains the physics information

element **plaquetteGluonAction**

diagram



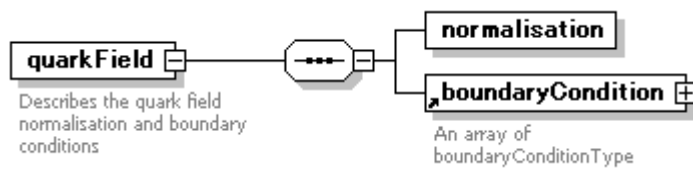
type [plaquetteGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#)

annotation documentation The Wilson plaquette action, has a coupling beta

element **quarkField**

diagram



children [normalisation](#) [boundaryCondition](#)

used by complexType [generalQuarkActionType](#)

annotation documentation Describes the quark field normalisation and boundary conditions

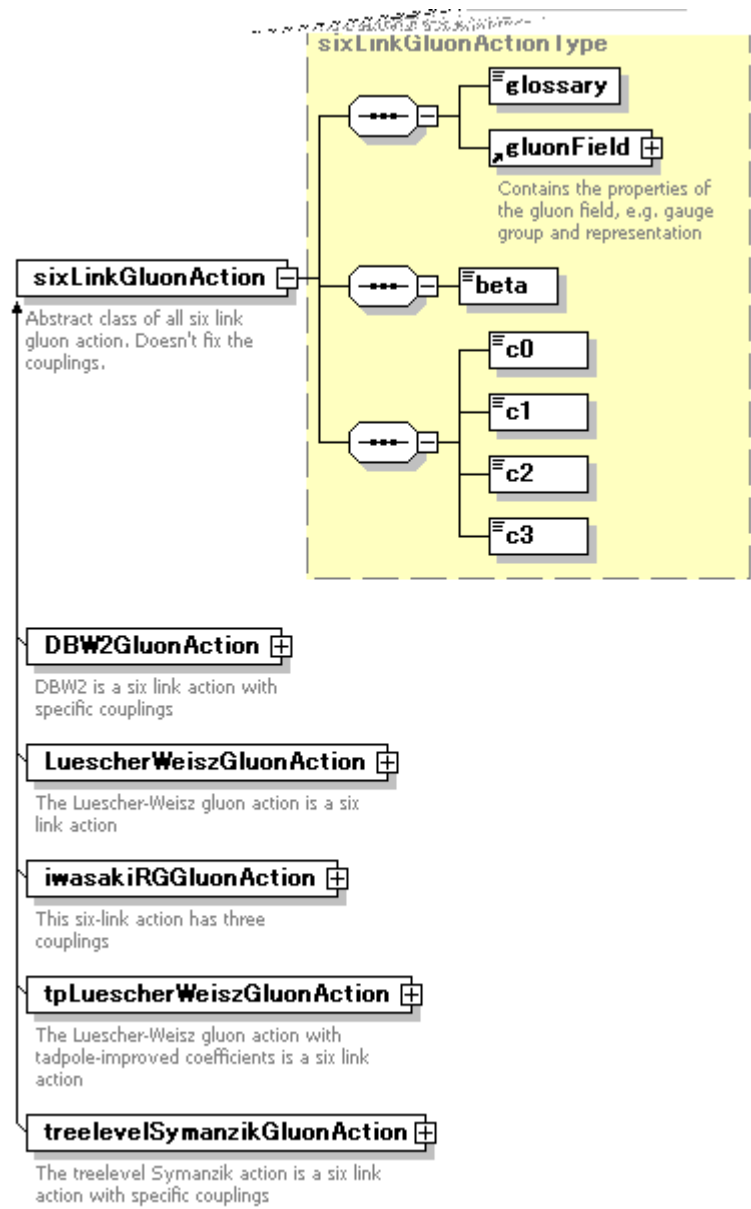
element **quarkField/normalisation**

diagram



element **sixLinkGluonAction**

diagram



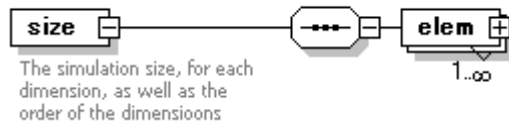
type [sixLinkGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

annotation documentation Abstract class of all six link gluon action. Doesn't fix the couplings.

element **size**

diagram



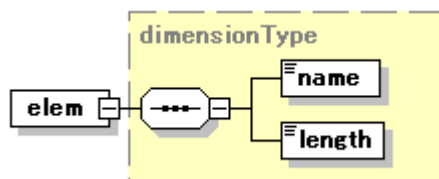
children [elem](#)

used by element [physics](#)

annotation documentation The simulation size, for each dimension, as well as the order of the dimensions

element **size/elem**

diagram

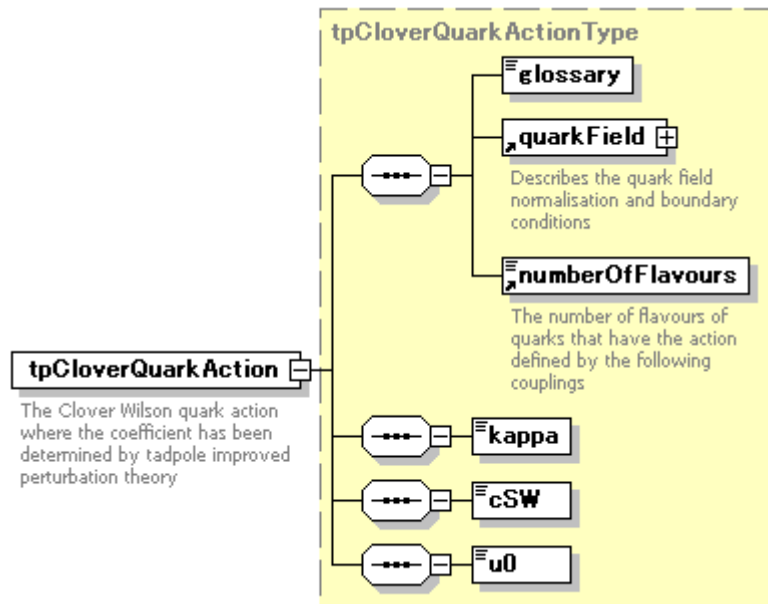


type [dimensionType](#)

children [name](#) [length](#)

element **tpCloverQuarkAction**

diagram



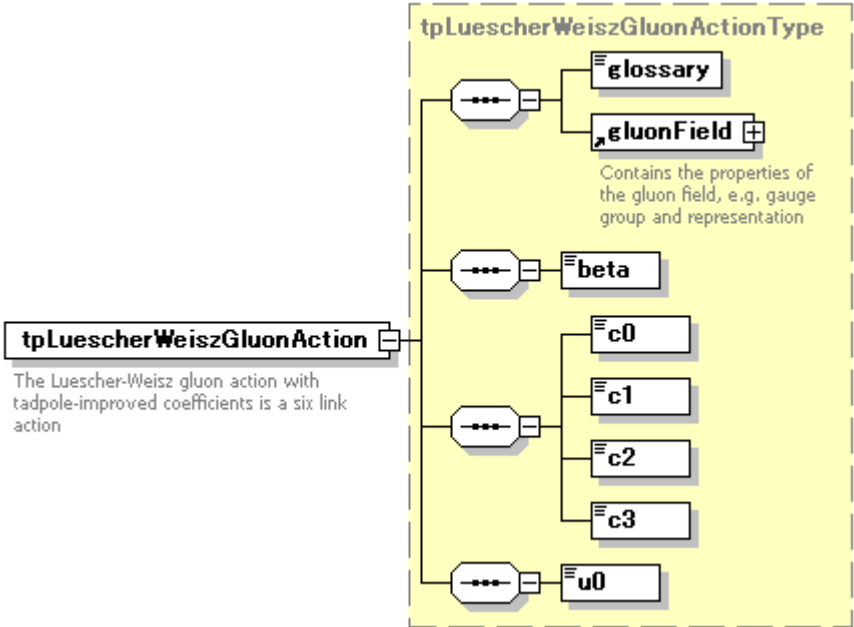
type [tpCloverQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#) [u0](#)

annotation documentation The Clover Wilson quark action where the coefficient has been determined by tadpole improved perturbation theory

element **tpLuescherWeiszGluonAction**

diagram



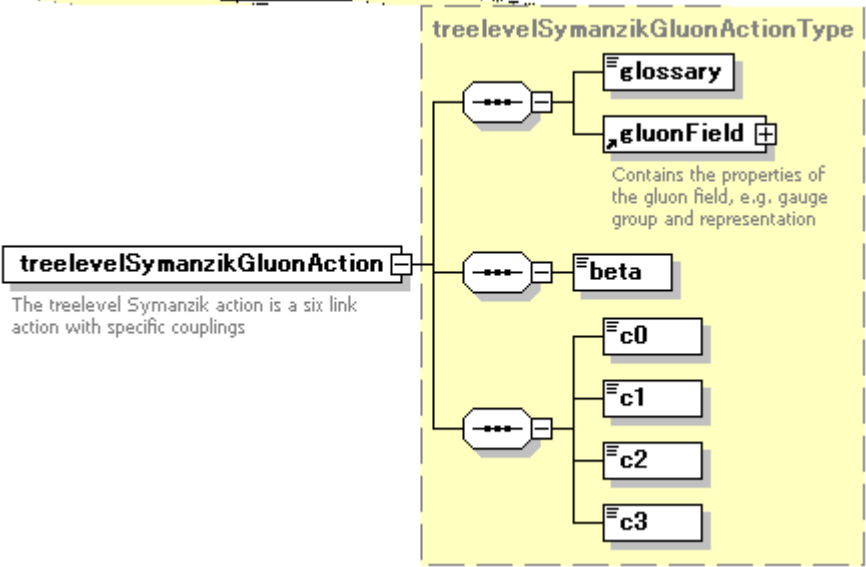
type [tpLuescherWeiszGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#) [u0](#)

annotation documentation The Luescher-Weisz gluon action with tadpole-improved coefficients is a six link action

element **treelevelSymanzikGluonAction**

diagram



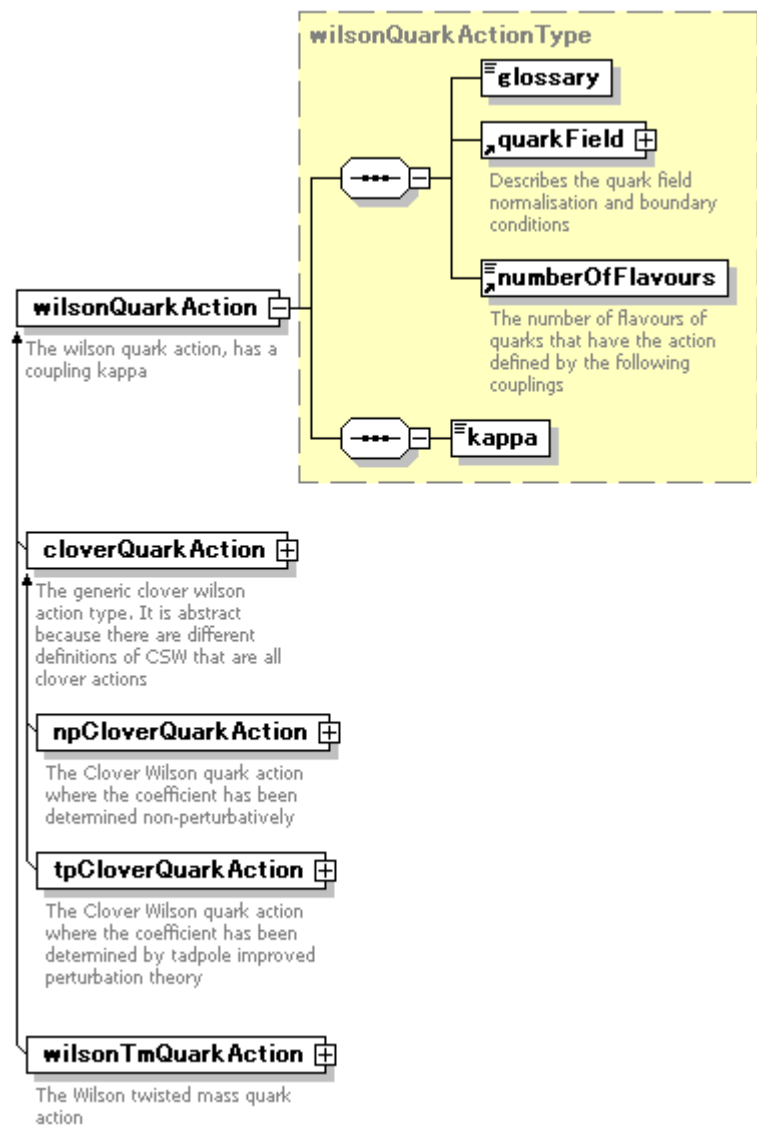
type [treelevelSymanzikGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

annotation documentation The treelevel Symanzik action is a six link action with specific couplings

element **wilsonQuarkAction**

diagram



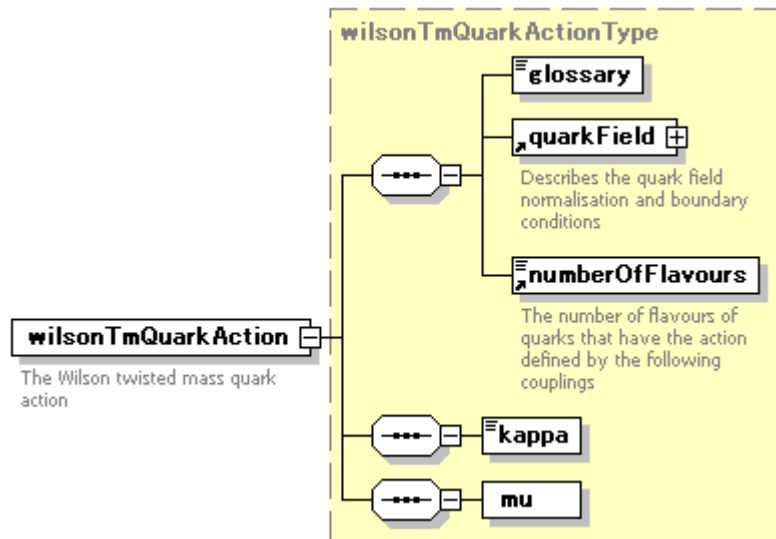
type [wilsonQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#)

annotation documentation The wilson quark action, has a coupling kappa

element **wilsonTmQuarkAction**

diagram



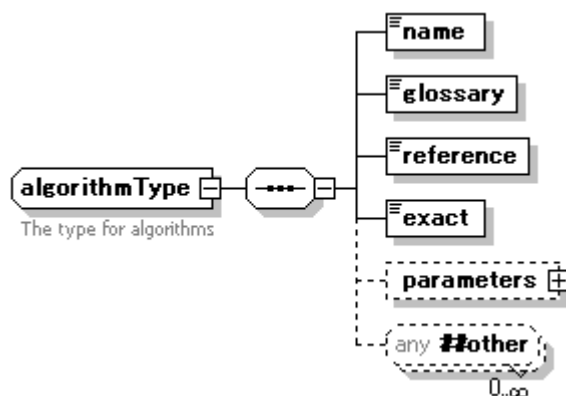
type [wilsonTmQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [mu](#)

annotation documentation The Wilson twisted mass quark action

complexType **algorithmType**

diagram



children [name](#) [glossary](#) [reference](#) [exact](#) [parameters](#)

used by element [markovChain/algorithm](#)

annotation documentation The type for algorithms

element **algorithmType/name**



type **xs:name**

element **algorithmType/glossary**



type **xs:anyURI**

element **algorithmType/reference**



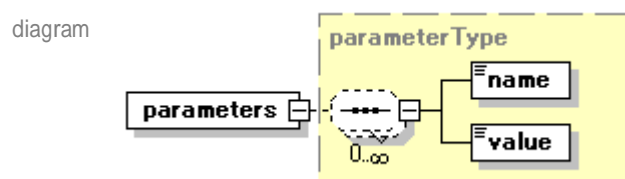
type **xs:string**

element **algorithmType/exact**



type **xs:boolean**

element **algorithmType/parameters**



type extension of [parameterType](#)

children [name value](#)

complexType **arrayType**



children [elem](#)

used by element [array](#)

annotation documentation SciDAC array definition

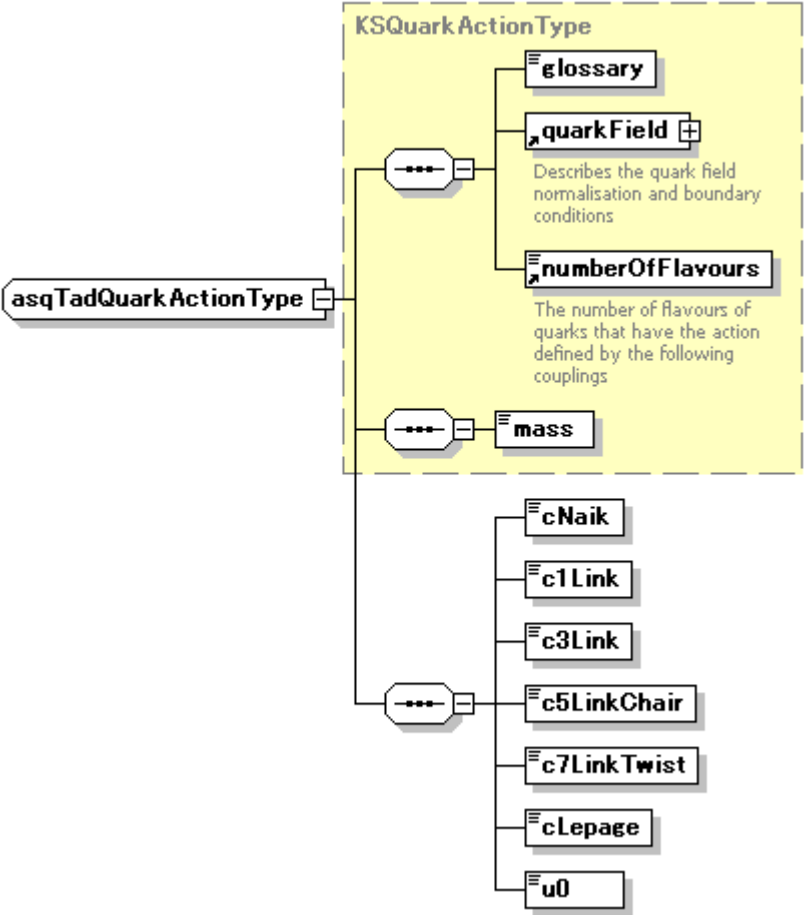
element **arrayType/elem**



type **xs:anySimpleType**

complexType **asqTadQuarkActionType**

diagram



type extension of [KSQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [cNaik](#) [c1Link](#) [c3Link](#) [c5LinkChair](#) [c7LinkTwist](#) [cLepage](#) [u0](#)

used by element [asqTadQuarkAction](#)

element **asqTadQuarkActionType/cNaik**

diagram



type [couplingType](#)

element **asqTadQuarkActionType/c1Link**

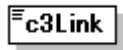
diagram



type [couplingType](#)

element **asqTadQuarkActionType/c3Link**

diagram



type [couplingType](#)

element **asqTadQuarkActionType/c5LinkChair**

diagram



type [couplingType](#)

element **asqTadQuarkActionType/c7LinkTwist**

diagram



type [couplingType](#)

element **asqTadQuarkActionType/cLepage**

diagram



type [couplingType](#)

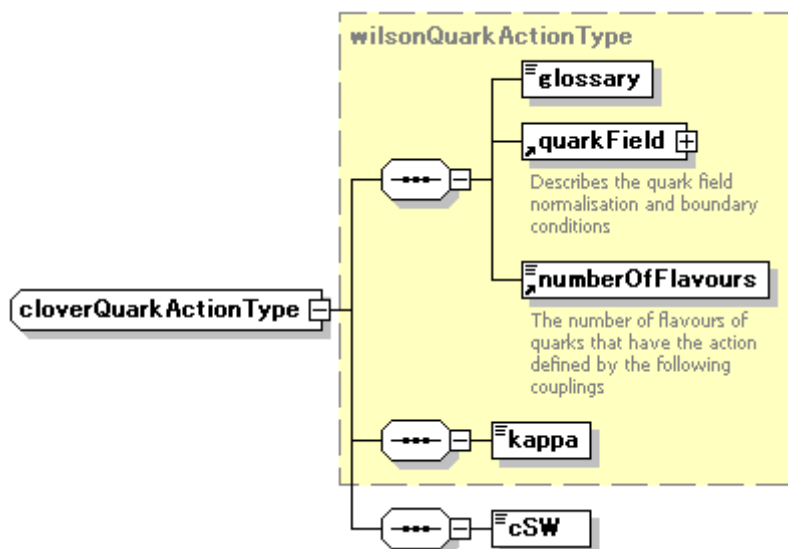
element **asqTadQuarkActionType/u0**



type [couplingType](#)

complexType **cloverQuarkActionType**

diagram



type extension of [wilsonQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#)

used by element [cloverQuarkAction](#)

complexTypes [npCloverQuarkActionType](#) [tpCloverQuarkActionType](#)

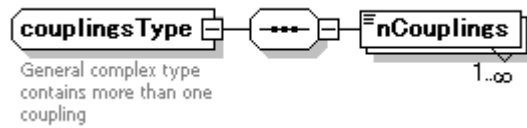
element **cloverQuarkActionType/cSW**



type [couplingType](#)

complexType **couplingsType**

diagram



children [nCouplings](#)

annotation documentation General complex type contains more than one coupling

element **couplingsType/nCouplings**

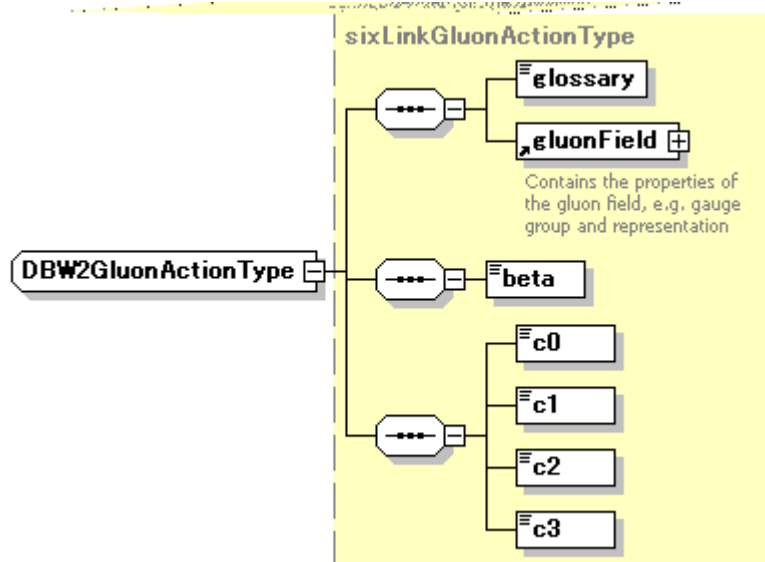
diagram



type [couplingType](#)

complexType **DBW2GluonActionType**

diagram



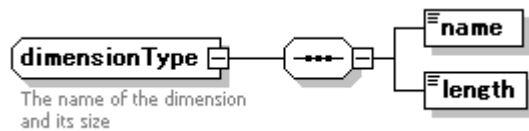
type extension of [sixLinkGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

used by element [DBW2GluonAction](#)

complexType **dimensionType**

diagram



children [name](#) [length](#)

used by element [size/elem](#)

annotation documentation The name of the dimension and its size

element **dimensionType/name**

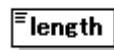
diagram



type **xs:Name**

element **dimensionType/length**

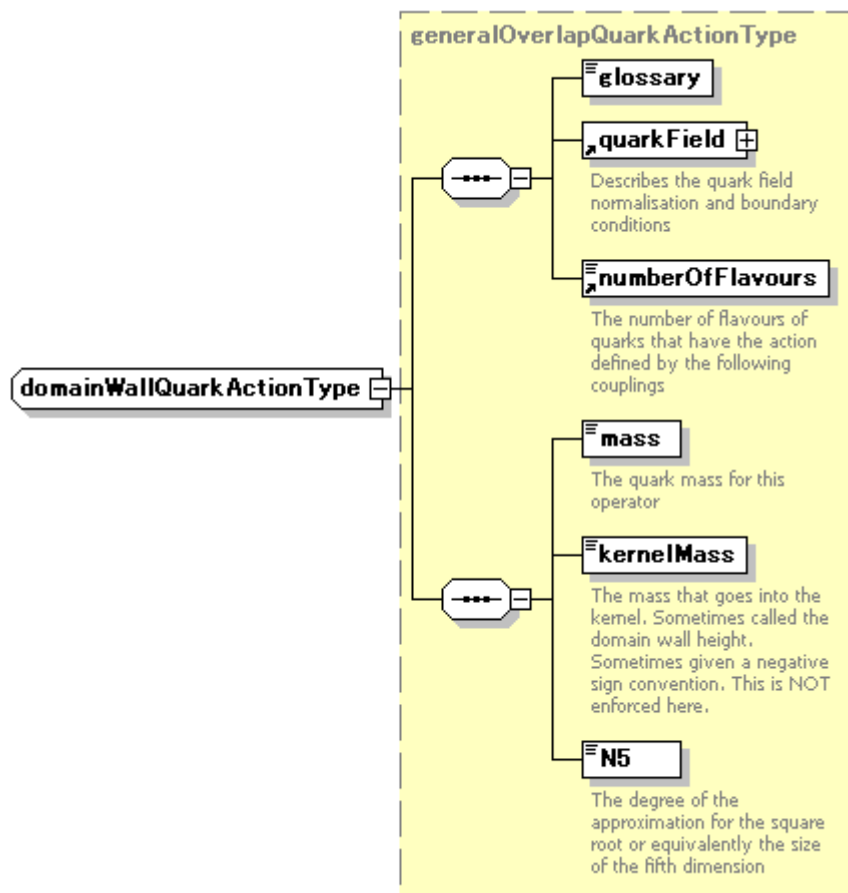
diagram



type **xs:integer**

complexType **domainWallQuarkActionType**

diagram



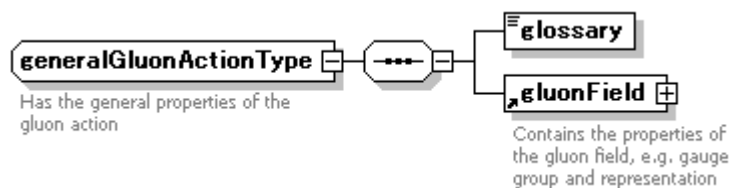
type extension of [generalOverlapQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [kernelMass](#) [N5](#)

used by element [domainWallQuarkAction](#)

complexType **generalGluonActionType**

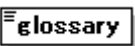
diagram



children [glossary](#) [gluonField](#)

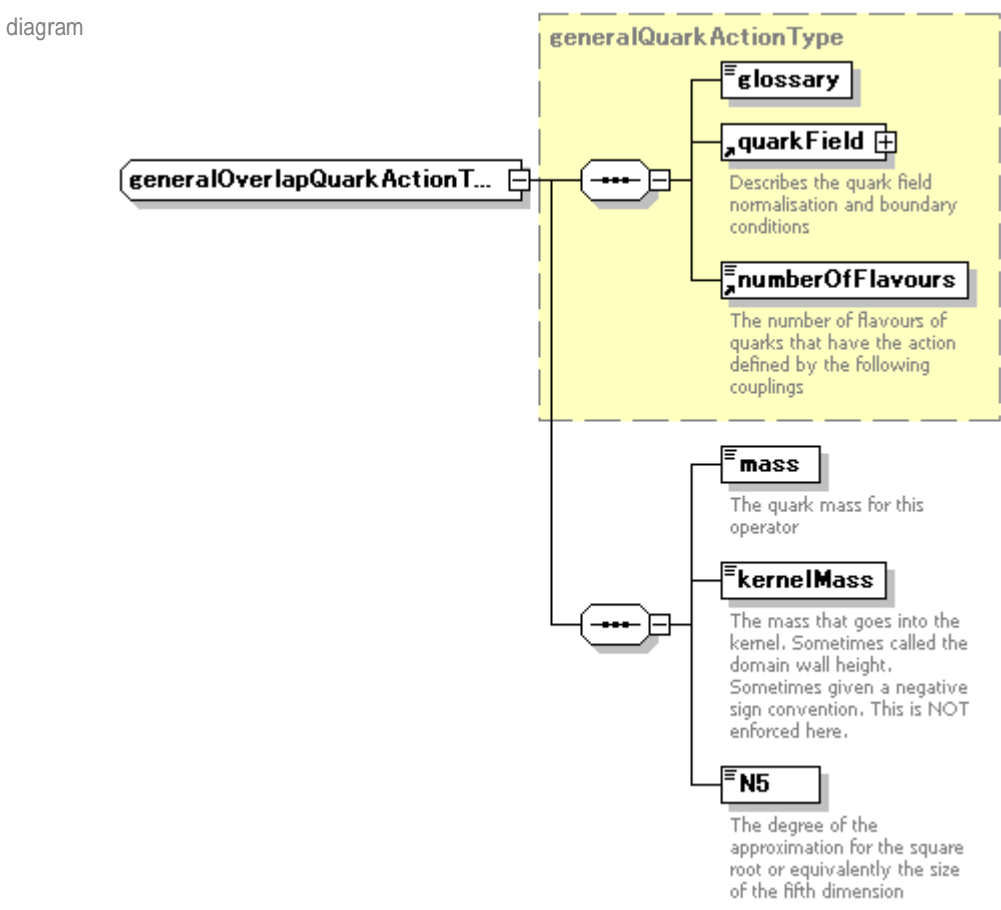
used by	element	generalGluonAction
	complexType	plaquetteGluonActionType
annotation	documentation	Has the general properties of the gluon action

element **generalGluonActionType/glossary**

diagram 

type **xs:anyURI**

complexType **generalOverlapQuarkActionType**



type extension of [generalQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#) [kernelMass](#) [N5](#)

used by element [generalOverlapQuarkAction](#)
 complexType [domainWallQuarkActionType](#)

element **generalOverlapQuarkActionType/mass**

diagram The quark mass for this operator

type [couplingType](#)

annotation documentation The quark mass for this operator

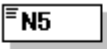
element **generalOverlapQuarkActionType/kernelMass**

diagram The mass that goes into the kernel. Sometimes called the domain wall height. Sometimes given a negative sign convention. This is NOT enforced here.

type [couplingType](#)

annotation documentation The mass that goes into the kernel. Sometimes called the domain wall height. Sometimes given a negative sign convention. This is NOT enforced here.

element **generalOverlapQuarkActionType/N5**

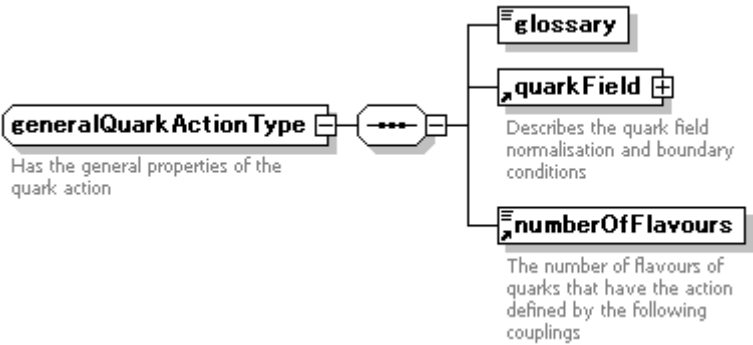
diagram The degree of the approximation for the square root or equivalently the size of the fifth dimension

type [couplingType](#)

annotation documentation The degree of the approximation for the square root or equivalently the size of the fifth dimension

complexType **generalQuarkActionType**

diagram



children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#)

used by element [generalQuarkAction](#)

complexType [generalOverlapQuarkActionType](#) [KSQuarkActionType](#) [wilsonQuarkActionType](#)

annotation documentation Has the general properties of the quark action

element **generalQuarkActionType/glossary**

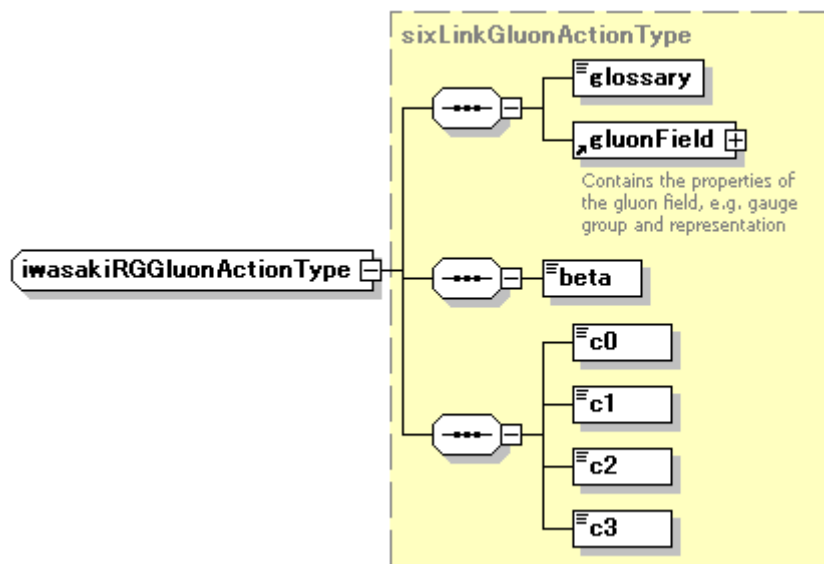
diagram



type **xs:anyURI**

complexType **iwasakiRGGluonActionType**

diagram



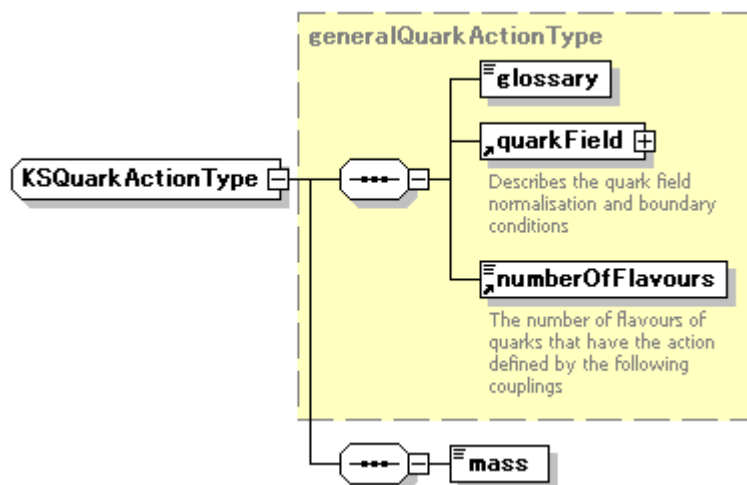
type extension of [sixLinkGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

used by element [iwasakiRGGluonAction](#)

complexType **KSQuarkActionType**

diagram



type extension of [generalQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [mass](#)

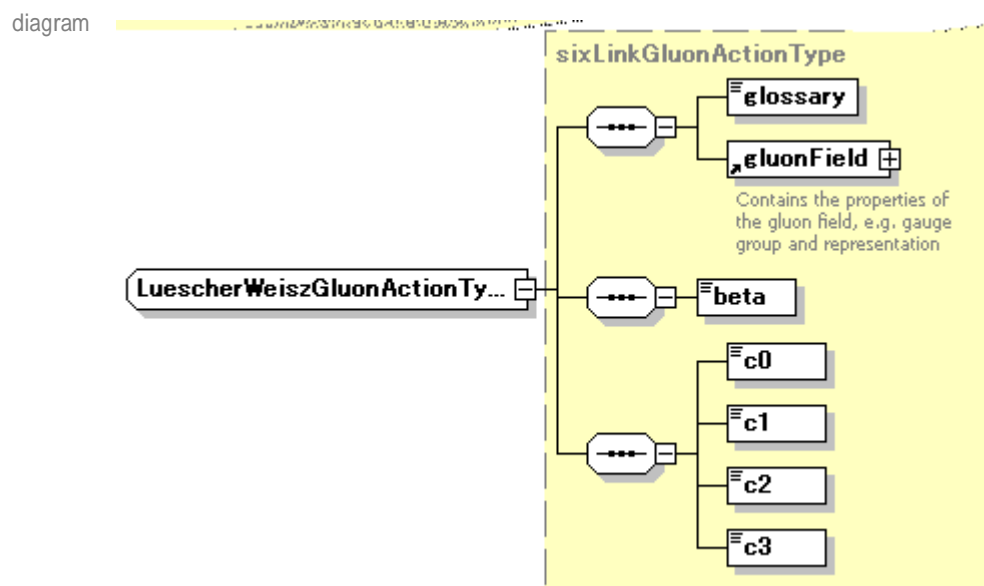
used by
element [KSQuarkAction](#)
complexType [asqTadQuarkActionType](#)

element **KSQuarkActionType/mass**

diagram 

type [couplingType](#)

complexType **LuescherWeiszGluonActionType**

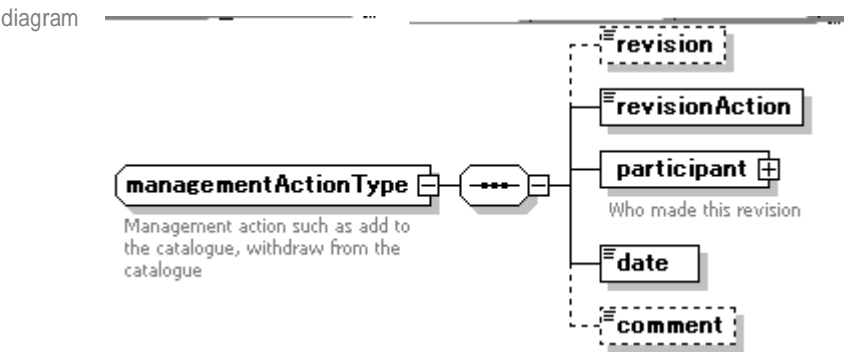


type extension of [sixLinkGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

used by
element [LuescherWeiszGluonAction](#)
complexType [tpLuescherWeiszGluonActionType](#)

complexType **managementActionType**



children [revision](#) [revisionAction](#) [participant](#) [date](#) [comment](#)

used by element [management/archiveHistory/elem](#)

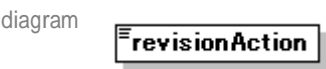
annotation documentation Management action such as add to the catalogue, withdraw from the catalogue

element **managementActionType/revision**



type **xs:nonNegativeInteger**

element **managementActionType/revisionAction**



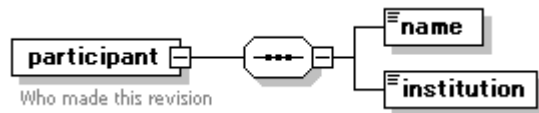
type [revisionActionType](#)

facets

- enumeration add
- enumeration replace
- enumeration remove

element `managementActionType/participant`

diagram

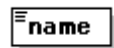


children [name](#) [institution](#)

annotation documentation Who made this revision

element `managementActionType/participant/name`

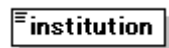
diagram



type `xs:string`

element `managementActionType/participant/institution`

diagram



type `xs:string`

element `managementActionType/date`

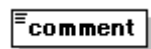
diagram



type `xs:dateTime`

element `managementActionType/comment`

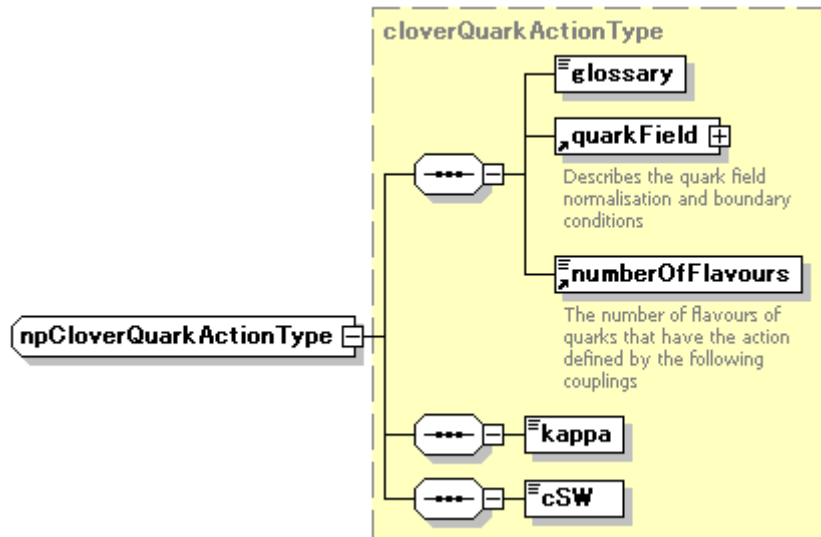
diagram



type `xs:string`

complexType `npCloverQuarkActionType`

diagram



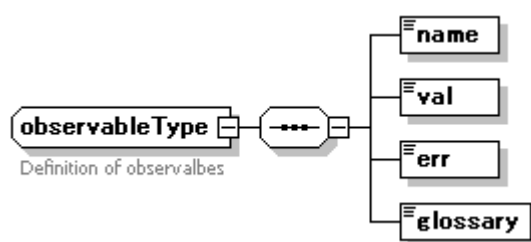
type extension of [cloverQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#)

used by element [npCloverQuarkAction](#)

complexType `observableType`

diagram



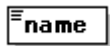
children [name](#) [val](#) [err](#) [glossary](#)

used by element [observables/elem](#)

annotation documentation Definition of observables

element **observableType/name**

diagram



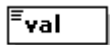
type [observableNameType](#)

facets

enumeration	ampi
enumeration	amrho
enumeration	mpi/mrho
enumeration	r0/a
enumeration	r1/a

element **observableType/val**

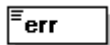
diagram



type **xs:double**

element **observableType/err**

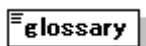
diagram



type **xs:double**

element **observableType/glossary**

diagram



type **xs:anyURI**

complexType **parameterType**

diagram



children [name](#) [value](#)

used by element [algorithmType/parameters](#)

annotation documentation Contains a name and a value

element **parameterType/name**

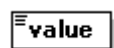
diagram



type **xs:Name**

element **parameterType/value**

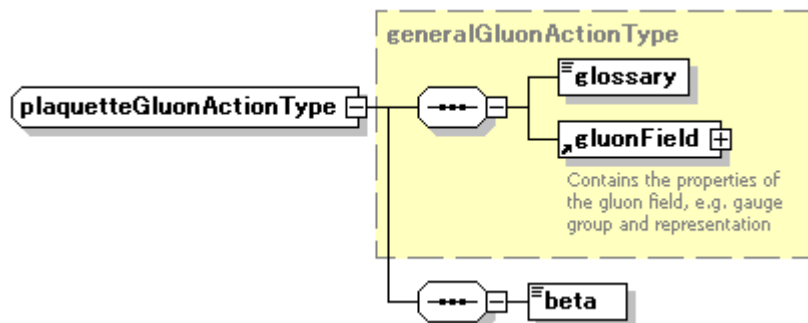
diagram



type **xs:anySimpleType**

complexType **plaquetteGluonActionType**

diagram



type extension of [generalGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#)

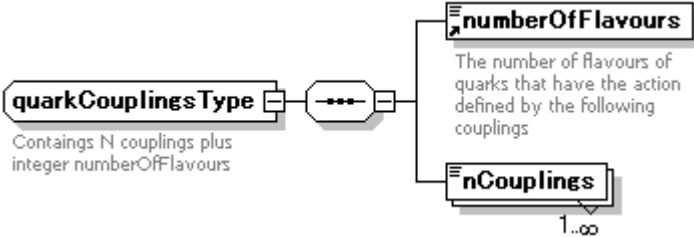
used by
element [plaquetteGluonAction](#)
complexType [sixLinkGluonActionType](#)

element `plaquetteGluonActionType/beta`

diagram 

type [couplingType](#)

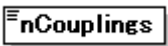
complexType `quarkCouplingsType`

diagram 

children [numberOfFlavours](#) [nCouplings](#)

annotation documentation Contains N couplings plus integer numberOfFlavours

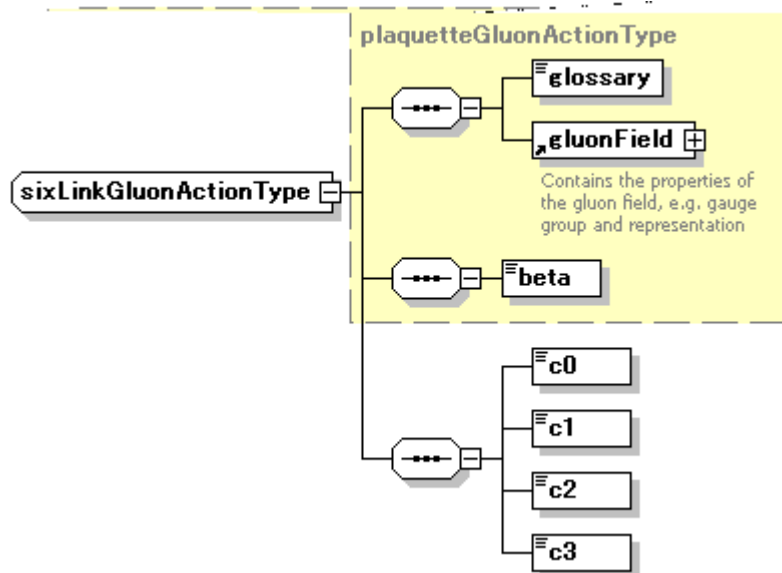
element `quarkCouplingsType/nCouplings`

diagram 

type [couplingType](#)

complexType **sixLinkGluonActionType**

diagram



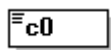
type extension of [plaquetteGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

used by element [sixLinkGluonAction](#)
complexType [DBW2GluonActionType](#) [iwasakiRGGluonActionType](#) [LuescherWeiszGluonActionType](#) [treelevelSymanzikGluonActionType](#)

element **sixLinkGluonActionType/c0**

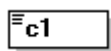
diagram



type [couplingType](#)

element **sixLinkGluonActionType/c1**

diagram



type [couplingType](#)

element **sixLinkGluonActionType/c2**



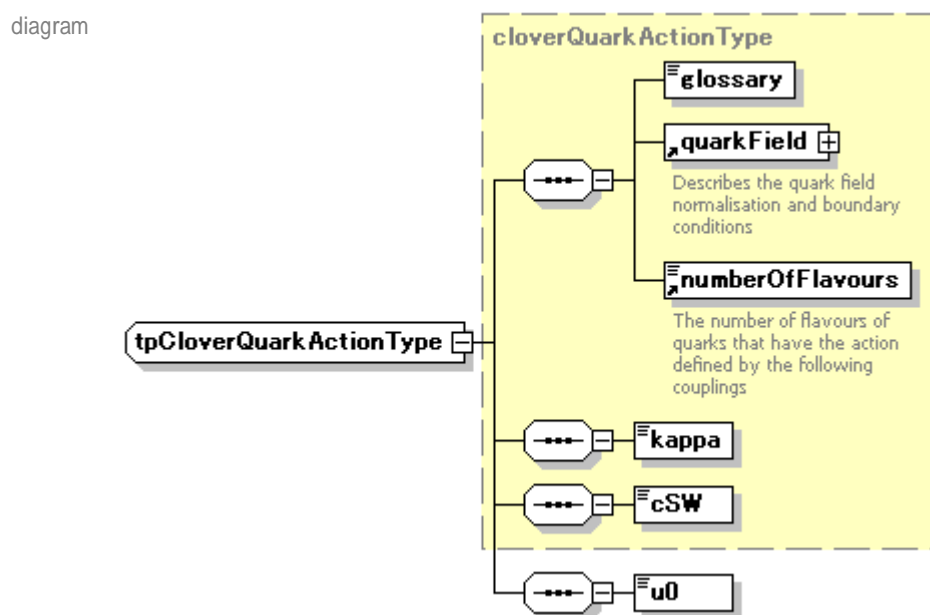
type [couplingType](#)

element **sixLinkGluonActionType/c3**



type [couplingType](#)

complexType **tpCloverQuarkActionType**



type extension of [cloverQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [cSW](#) [u0](#)

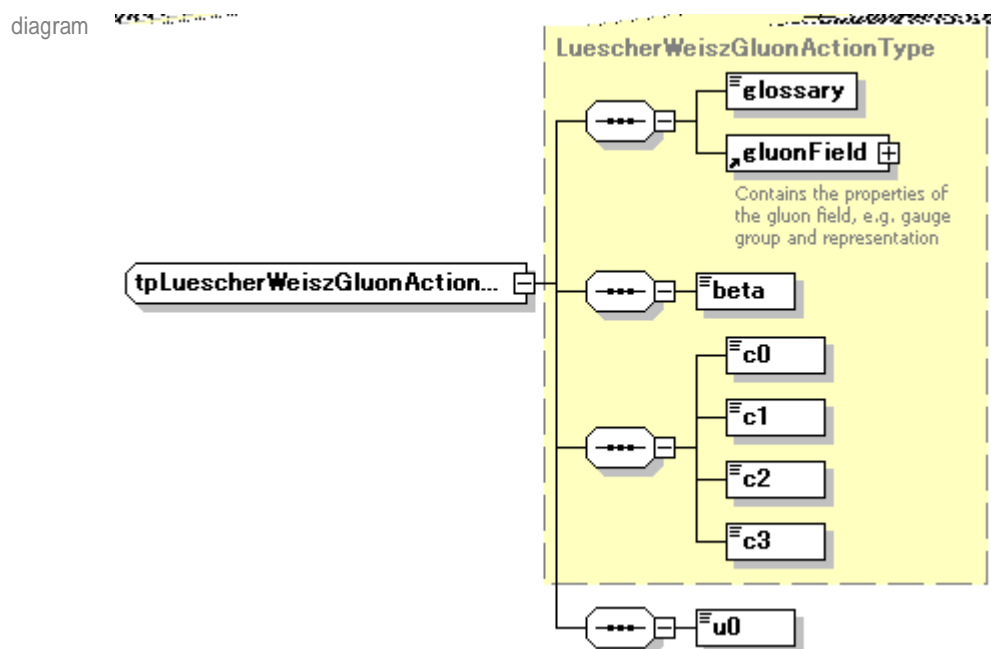
used by element [tpCloverQuarkAction](#)

element **tpCloverQuarkActionType/u0**



type [couplingType](#)

complexType **tpLuescherWeiszGluonActionType**



type extension of [LuescherWeiszGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#) [u0](#)

used by element [tpLuescherWeiszGluonAction](#)

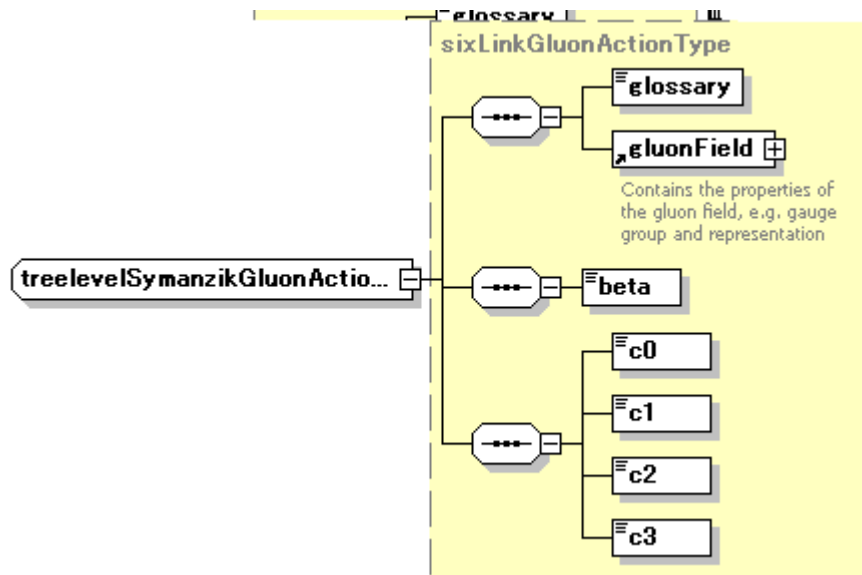
element **tpLuescherWeiszGluonActionType/u0**



type [couplingType](#)

complexType **treelevelSymanzikGluonActionType**

diagram



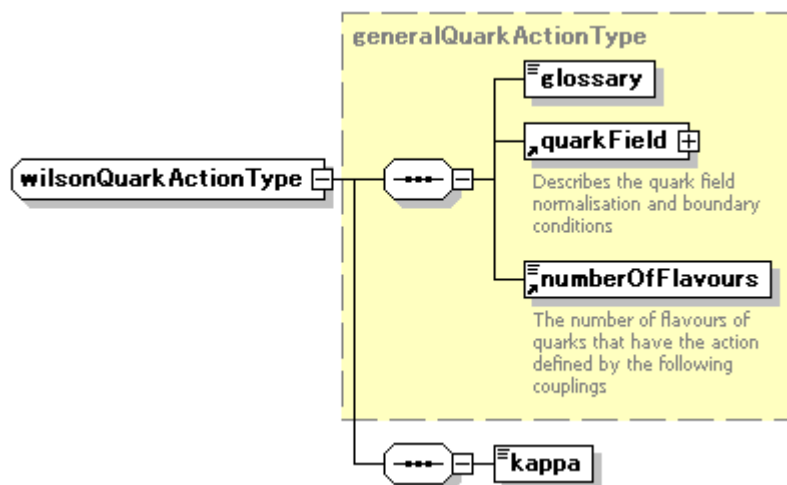
type extension of [sixLinkGluonActionType](#)

children [glossary](#) [gluonField](#) [beta](#) [c0](#) [c1](#) [c2](#) [c3](#)

used by element [treelevelSymanzikGluonAction](#)

complexType **wilsonQuarkActionType**

diagram



type extension of [generalQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#)

used by element [wilsonQuarkAction](#)

complexTypes [cloverQuarkActionType](#) [wilsonTmQuarkActionType](#)

element **wilsonQuarkActionType/kappa**

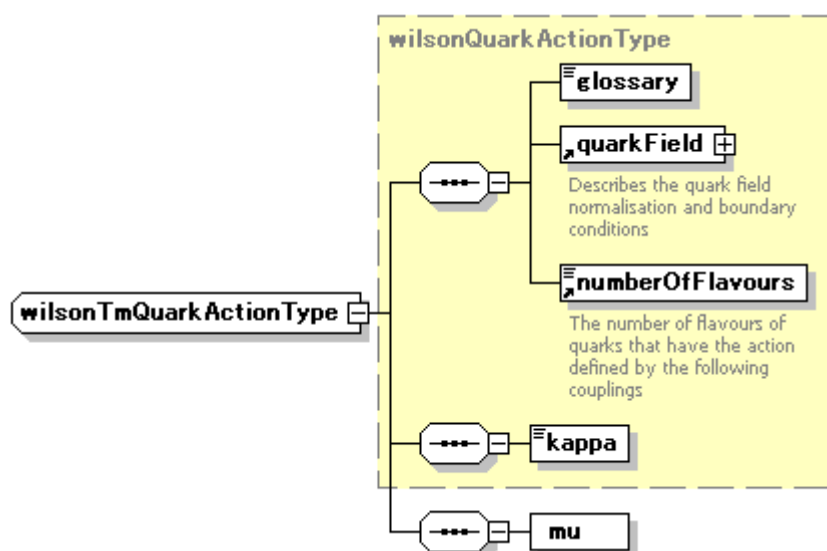
diagram



type [couplingType](#)

complexType **wilsonTmQuarkActionType**

diagram



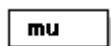
type extension of [wilsonQuarkActionType](#)

children [glossary](#) [quarkField](#) [numberOfFlavours](#) [kappa](#) [mu](#)

used by element [wilsonTmQuarkAction](#)

element **wilsonTmQuarkActionType/mu**

diagram



simpleType **boundaryConditionType**

type	restriction of xs:NMTOKEN	
used by	element	boundaryCondition/elem
facets	enumeration	periodic
	enumeration	antiperiodic
	enumeration	dirichlet
annotation	documentation	Enumeration of possible BCs

simpleType **couplingType**

type	xs:double	
used by	elements	plaquetteGluonActionType/beta sixLinkGluonActionType/c0 sixLinkGluonActionType/c1 asqTadQuarkActionType/c1Link sixLinkGluonActionType/c2 sixLinkGluonActionType/c3 asqTadQuarkActionType/c3Link asqTadQuarkActionType/c5LinkChair asqTadQuarkActionType/c7LinkTwist asqTadQuarkActionType/cLepage asqTadQuarkActionType/cNaik cloverQuarkActionType/cSW wilsonQuarkActionType/kappa generalOverlapQuarkActionType/kernelMass KSQuarkActionType/mass generalOverlapQuarkActionType/mass generalOverlapQuarkActionType/N5 quarkCouplingsType/nCouplings couplingsType/nCouplings tpCloverQuarkActionType/u0 asqTadQuarkActionType/u0 tpLuescherWeiszGluonActionType/u0
	simpleType	negativeCouplingType
annotation	documentation	All couplings are of this type, essentially a double

simpleType **gaugeGroupType**

type	restriction of xs:token	
used by	element	gluonField/gaugeGroup
facets	enumeration	SU(3)
	enumeration	SU(2)
	enumeration	SU(4)

	enumeration	SU(5)
	enumeration	SU(6)
	enumeration	U(1)
annotation	documentation	Enumeration of possible gauge groups

simpleType **negativeCouplingType**

type	restriction of couplingType	
facets	maxExclusive	0.0

simpleType **observableNameType**

type	restriction of xs:string	
used by	element	observableType/name
facets	enumeration	ampi
	enumeration	amrho
	enumeration	mpi/mrho
	enumeration	r0/a
	enumeration	r1/a
annotation	documentation	Enumeration of possible observable names

simpleType **representationType**

type	restriction of xs:NMTOKEN	
used by	element	gluonField/representation
facets	enumeration	fundamental
	enumeration	adjoint
annotation	documentation	Enumeration of possible representations of groups

simpleType **revisionActionType**

type	restriction of xs:NMTOKEN	
------	----------------------------------	--

used by	element	managementActionType/revisionAction
facets	enumeration	add
	enumeration	replace
	enumeration	remove
annotation	documentation	An enumeration of revision actions

XML Schema documentation generated with [XMLSPY](http://www.altova.com/xmlspy) Schema Editor <http://www.altova.com/xmlspy>

9.5 QCDml Configuration Schema


```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
<!-- edited with XMLSpy v2006 U
(http://www.altova.com) by Chris Maynard (EPCC) -->
<!-- QCDml revision 1.3.0 -->
- <xs:schema
  xmlns="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3"
  xmlns:xs="http://www.w3.org/2001/XMLSchema"
  targetNamespace="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3"
  elementFormDefault="qualified"
  attributeFormDefault="unqualified">
- <xs:complexType name="arrayType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>SciDAC array
    definition</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="elem"
      type="xs:anySimpleType"
      maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
- <xs:element name="gaugeConfiguration">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>The root of
    QCDML</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element ref="management" />
      <xs:element ref="implementation" />
    - <xs:element name="algorithm">
      - <xs:complexType>
        - <xs:sequence>
          <xs:element
            name="parameters"
            type="parameterType"
            minOccurs="0" />
          <xs:any namespace="##other"
            minOccurs="0"
            maxOccurs="unbounded" />
        </xs:sequence>

```

```

        </xs:complexType>
    </xs:element>
    <xs:element name="precision"
        type="precisionType" />
    <xs:element ref="markovStep" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
- <xs:element name="array" type="arrayType"
    abstract="true">
- <xs:annotation>
    <xs:documentation>The SciDAC array
    definition</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
- <xs:element name="markovStep">
- <xs:annotation>
    <xs:documentation>Also known as
    configuration XML. Contains the
    markovStep</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:complexType>
- <xs:sequence>
    <xs:element ref="markovChainURI" />
    <xs:element name="series"
        type="xs:token" />
    <xs:element name="update"
        type="xs:anySimpleType" />
- <xs:element name="avePlaque"
    type="xs:double">
- <xs:annotation>
    <xs:documentation>The value of
    the average plaquette on this
    configuration</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:element>
    <xs:element ref="dataLFN" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>

```

- `<xs:element name="dataLFN" type="xs:anyURI">`
 - `<xs:annotation>`
 - `<xs:documentation>`**The Logical file name on the grid of the data file itself**`</xs:documentation>`
- `</xs:element>`
- `<xs:element name="markovChainURI" type="xs:anyURI">`
 - `<xs:annotation>`
 - `<xs:documentation>`**The URI of the ensemble to which this configuration belongs**`</xs:documentation>`
- `</xs:element>`
- `<xs:element name="management" type="managementType">`
 - `<xs:annotation>`
 - `<xs:documentation>`**Contains information on when and by whom the data was produced as well as possible use conitions**`</xs:documentation>`
- `</xs:element>`
- `<xs:element name="implementation" type="implementationType">`
 - `<xs:annotation>`
 - `<xs:documentation>`**Contains information on how the data was produced, i.e. code, machine etc**`</xs:documentation>`
- `</xs:element>`
- `<xs:simpleType name="precisionType">`
 - `<xs:annotation>`
 - `<xs:documentation>`**Enumeration of precision types, single(32 bit) or double (64 bit)**`</xs:documentation>`
- `</xs:annotation>`
- `<xs:restriction base="xs:NMTOKEN">`
 - `<xs:enumeration value="single" />`
 - `<xs:enumeration value="double" />`

```

    <xs:enumeration value="mixed" />
  </xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:complexType name="managementActionType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Management action such
      as generate data, add to the catalogue,
      withdraw from the catalogue. generate is
      the zeroeth revision, as add has to be
      number 1. One can generate data without
      submitting to ILDG</xs:documentation>
  </xs:annotation>
  - <xs:sequence>
    <xs:element name="revision"
      type="xs:nonNegativeInteger"
      minOccurs="0" />
    <xs:element name="revisionAction"
      type="revisionActionType" />
    - <xs:element name="participant">
      - <xs:annotation>
        <xs:documentation>Who made this
          revision</xs:documentation>
      </xs:annotation>
      - <xs:complexType>
        - <xs:sequence>
          <xs:element name="name"
            type="xs:string" />
          <xs:element name="institution"
            type="xs:string" />
        </xs:sequence>
      </xs:complexType>
    </xs:element>
    <xs:element name="date"
      type="xs:dateTime" />
    <xs:element name="comment"
      type="xs:string" minOccurs="0" />
  </xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:complexType name="managementType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Contains the

```

```

management information</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:sequence>
  <xs:element name="revisions"
    type="xs:nonNegativeInteger"
    minOccurs="0" />
  <xs:element name="reference"
    type="xs:string" minOccurs="0" />
  <xs:element name="crcChecksum"
    type="xs:NMTOKEN" />
- <xs:element name="archiveHistory">
  - <xs:complexType>
    - <xs:sequence>
      <xs:element name="elem"
        type="managementActionType"
        maxOccurs="unbounded" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:element>
</xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:complexType name="implementationType">
  - <xs:sequence>
    - <xs:element name="machine">
      - <xs:complexType>
        - <xs:sequence>
          <xs:element name="name"
            type="xs:string" />
          <xs:element name="institution"
            type="xs:string" />
          <xs:element name="machineType"
            type="xs:string" />
          <xs:element name="comment"
            type="xs:string"
            minOccurs="0" />
        </xs:sequence>
      </xs:complexType>
    </xs:element>
    - <xs:element name="code">
      - <xs:complexType>

```

```

- <xs:sequence>
  <xs:element name="name"
    type="xs:string" />
  <xs:element name="version"
    type="xs:string" />
  <xs:element name="date"
    type="xs:dateTime" />
  <xs:element name="comment"
    type="xs:string"
    minOccurs="0" />
</xs:sequence>
</xs:complexType>
</xs:element>
</xs:sequence>
</xs:complexType>
- <xs:simpleType name="revisionActionType">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>An enumeration of
revision actions</xs:documentation>
</xs:annotation>
- <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
- <xs:enumeration value="generate">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>generate new
configuration</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:enumeration>
- <xs:enumeration value="add">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>add new
configuration to
ILDG</xs:documentation>
</xs:annotation>
</xs:enumeration>
- <xs:enumeration value="replace">
- <xs:annotation>
  <xs:documentation>replace
configuration metadata or
binary</xs:documentation>
</xs:annotation>

```

```

</xs:enumeration>
- <xs:enumeration value="remove">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>remove
      configuration</xs:documentation>
    </xs:annotation>
  </xs:enumeration>
</xs:restriction>
</xs:simpleType>
- <xs:complexType name="parameterType">
  - <xs:annotation>
    <xs:documentation>Contains a name and a
      value</xs:documentation>
    </xs:annotation>
  - <xs:sequence minOccurs="0"
    maxOccurs="unbounded">
    <xs:element name="name" type="xs:Name" />
    <xs:element name="value"
      type="xs:anySimpleType" />
    </xs:sequence>
  </xs:complexType>
</xs:schema>

```

9.6 QCDml Configuration Schema sample


```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
- <gaugeConfiguration
  xmlns="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-
  instance"
  xsi:schemaLocation="http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/cor
  http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3/QCDmlConfig
- <management>
  <revisions>1</revisions>
  <crcChecksum>3045103677</crcChecksum>
- <archiveHistory>
  - <elem>
    <revision>0</revision>
    <revisionAction>generate</revisionAction>
  - <participant>
    <name>R.Burkhalter</name>
    <institution>Center fof Computational
      Physics, University of
      Tsukuba</institution>
    </participant>
    <date>2000-04-19T12:00:00Z</date>
    </elem>
  - <elem>
    <revision>1</revision>
    <revisionAction>add</revisionAction>
  - <participant>
    <name>T.Yoshie</name>
    <institution>Center fof Computational
      Sciences, University of
      Tsukuba</institution>
    </participant>
    <date>2004-11-24T12:00:00Z</date>
    </elem>
  </archiveHistory>
</management>
- <implementation>
  - <machine>
    <name>CP-PACS</name>
    <institution>CCS Tsukuba</institution>
    <machineType>MPP</machineType>

```

```

    <comment>PU512-partition</comment>
  </machine>
- <code>
    <name>CP-PACS HMC</name>
    <version>v4.3</version>
    <date>1998-06-04T12:00:00Z</date>
  </code>
</implementation>
- <algorithm>
  - <parameters>
    <name>CP-PACS_Nf2_delta_tau</name>
    <value>0.00750000</value>
    <name>CP-
      PACS_Nf2_number_of_MD_steps</name>
    <value>133</value>
    <name>CP-
      PACS_Nf2_unit_trajectory</name>
    <value>0.99750000</value>
  </parameters>
</algorithm>
<precision>double</precision>
- <markovStep>
  <markovChainURI>mc://JLDG/CP-
    PACS/RCNF2/RC24x48-
    B2100K013820C1470</markovChainURI>
  <series>C</series>
  <update>01265</update>
  <avePlaquette>0.500</avePlaquette>
  <dataLFN>Ifn://JLDG/CP-
    PACS/RCNF2/RC24x48-B2100K013820C1470-
    C-01265</dataLFN>
</markovStep>
</gaugeConfiguration>

```

9.7 QCDml Configuration Schema documentation

Schema QCDmlConfig1.3.0.xsd

schema location: <C:\Documents and Settings\yoshie\My Documents\ILDG\QCDML1.3.0\QCDmlConfig1.3.0.xsd>

targetNamespace: <http://www.lqcd.org/ildg/QCDml/config1.3>

Elements

[array](#)

[dataLFN](#)

[gaugeConfiguration](#)

[implementation](#)

[management](#)

[markovChainURI](#)

[markovStep](#)

Complex types

[arrayType](#)

[implementationType](#)

[managementActionType](#)

[managementType](#)

[parameterType](#)

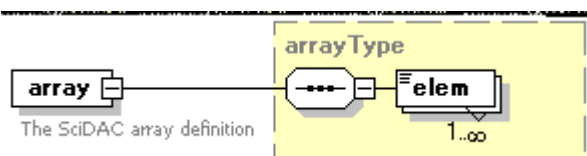
Simple types

[precisionType](#)

[revisionActionType](#)

element **array**

diagram



type [arrayType](#)

children [elem](#)

annotation documentation The SciDAC array definition

element **dataLFN**

diagram



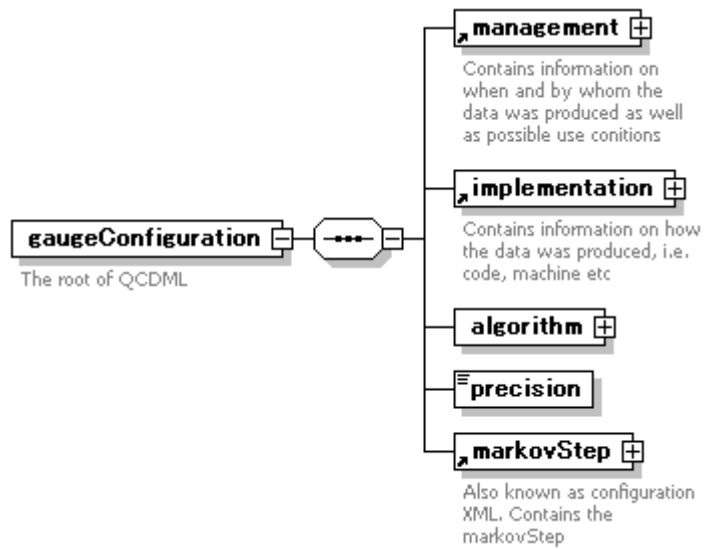
type **xs:anyURI**

used by element [markovStep](#)

annotation documentation The Logical file name on the grid of the data file itself

element gaugeConfiguration

diagram

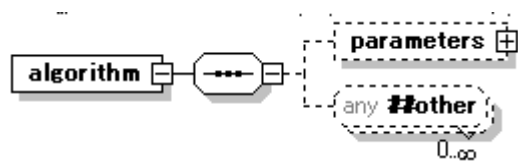


children [management](#) [implementation](#) [algorithm](#) [precision](#) [markovStep](#)

annotation documentation The root of QCDML

element gaugeConfiguration/algorithm

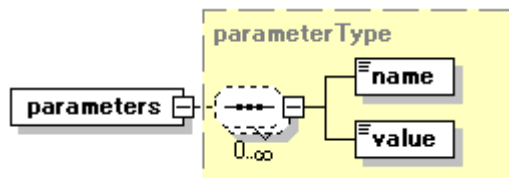
diagram



children [parameters](#)

element `gaugeConfiguration/algorithm/parameters`

diagram

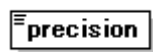


type [parameterType](#)

children [name](#) [value](#)

element `gaugeConfiguration/precision`

diagram



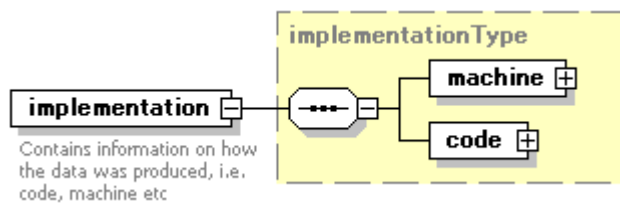
type [precisionType](#)

facets

enumeration	single
enumeration	double
enumeration	mixed

element `implementation`

diagram



type [implementationType](#)

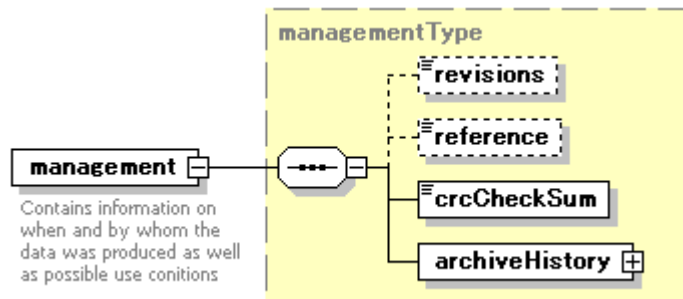
children [machine](#) [code](#)

used by element [gaugeConfiguration](#)

annotation documentation Contains information on how the data was produced, i.e. code, machine etc

element **management**

diagram



type [managementType](#)

children [revisions](#) [reference](#) [crcChecksum](#) [archiveHistory](#)

used by element [gaugeConfiguration](#)

annotation documentation Contains information on when and by whom the data was produced as well as possible use conitions

element **markovChainURI**

diagram



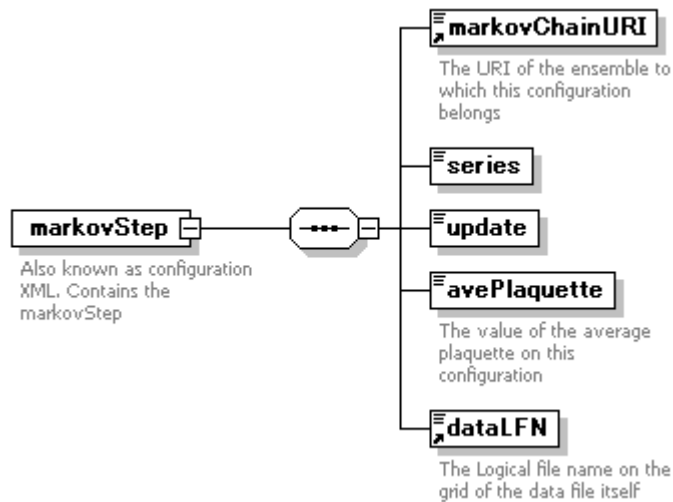
type **xs:anyURI**

used by element [markovStep](#)

annotation documentation The URI of the ensemble to which this configuration belongs

element **markovStep**

diagram



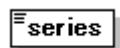
children [markovChainURI](#) [series](#) [update](#) [avePlaquette](#) [dataLFN](#)

used by element [gaugeConfiguration](#)

annotation documentation Also known as configuration XML. Contains the markovStep

element **markovStep/series**

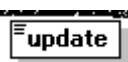
diagram



type **xs:token**

element **markovStep/update**

diagram



type **xs:anySimpleType**

element **markovStep/avePlaquette**



type **xs:double**

annotation documentation The value of the average plaquette on this configuration

complexType **arrayType**



children [elem](#)

used by element [array](#)

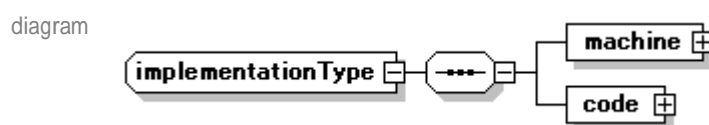
annotation documentation SciDAC array definition

element **arrayType/elem**



type **xs:anySimpleType**

complexType **implementationType**

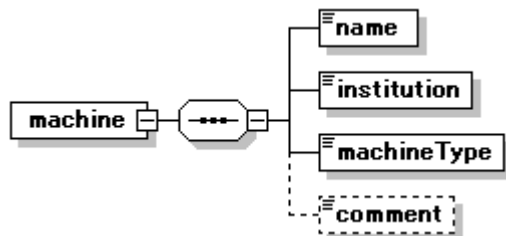


children [machine](#) [code](#)

used by element [implementation](#)

element `implementationType/machine`

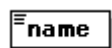
diagram



children [name](#) [institution](#) [machineType](#) [comment](#)

element `implementationType/machine/name`

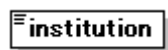
diagram



type `xs:string`

element `implementationType/machine/institution`

diagram



type `xs:string`

element `implementationType/machine/machineType`

diagram



type `xs:string`

element **implementationType/machine/comment**

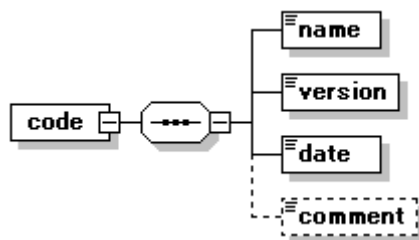
diagram



type **xs:string**

element **implementationType/code**

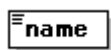
diagram



children [name](#) [version](#) [date](#) [comment](#)

element **implementationType/code/name**

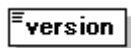
diagram



type **xs:string**

element **implementationType/code/version**

diagram



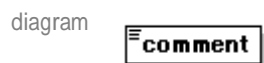
type **xs:string**

element `implementationType/code/date`



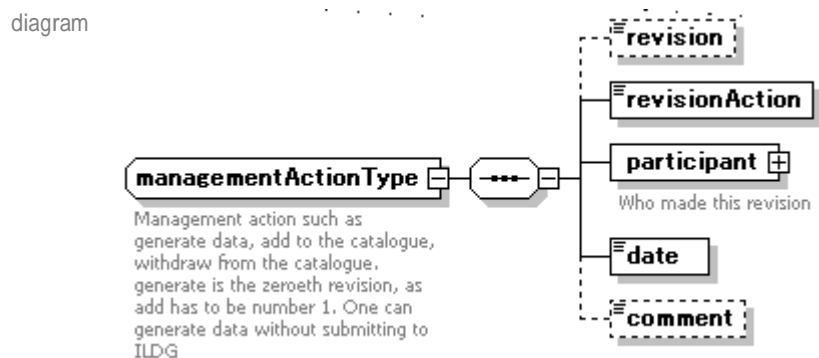
type `xs:dateTime`

element `implementationType/code/comment`



type `xs:string`

complexType `managementActionType`



children [revision](#) [revisionAction](#) [participant](#) [date](#) [comment](#)

used by element [managementType/archiveHistory/element](#)

annotation documentation Management action such as generate data, add to the catalogue, withdraw from the catalogue. generate is the zeroeth revision, as add has to be number 1. One can generate data without submitting to ILDG

element `managementActionType/revision`



type `xs:nonNegativeInteger`

element `managementActionType/revisionAction`

diagram



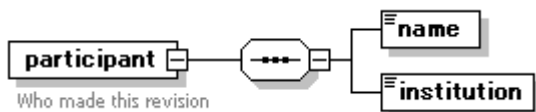
type [revisionActionType](#)

facets

enumeration	generate
enumeration	add
enumeration	replace
enumeration	remove

element `managementActionType/participant`

diagram



children [name](#) [institution](#)

annotation documentation Who made this revision

element `managementActionType/participant/name`

diagram



type `xs:string`

element `managementActionType/participant/institution`

diagram



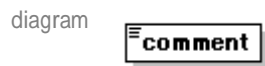
type `xs:string`

element **managementActionType/date**



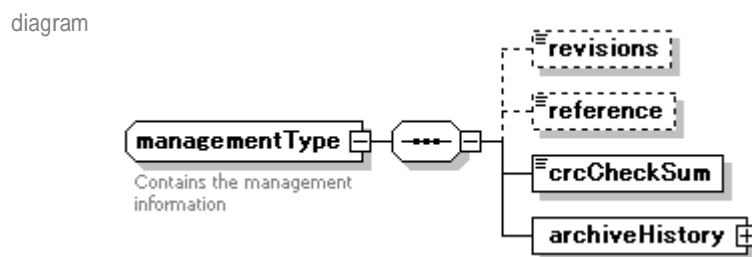
type **xs:dateTime**

element **managementActionType/comment**



type **xs:string**

complexType **managementType**



children [revisions](#) [reference](#) [crcChecksum](#) [archiveHistory](#)

used by element [management](#)

annotation documentation Contains the management information

element **managementType/revisions**



type **xs:nonNegativeInteger**

element **managementType/reference**

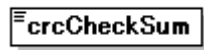
diagram



type **xs:string**

element **managementType/crcChecksum**

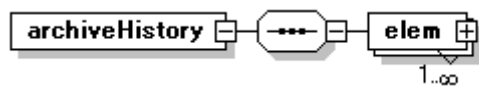
diagram



type **xs:NMTOKEN**

element **managementType/archiveHistory**

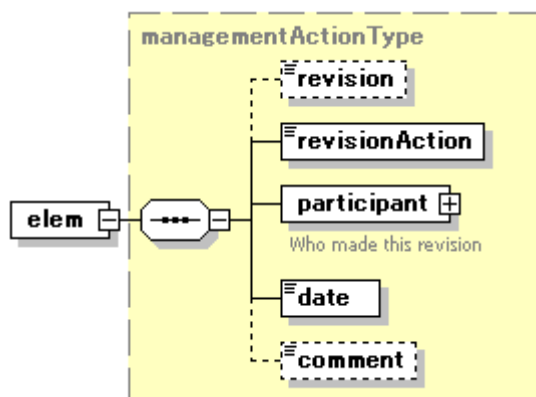
diagram



children [elem](#)

element **managementType/archiveHistory/elem**

diagram

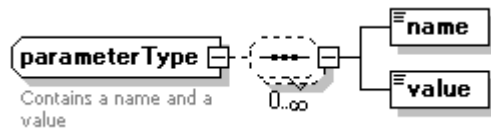


type [managementActionType](#)

children [revision](#) [revisionAction](#) [participant](#) [date](#) [comment](#)

complexType **parameterType**

diagram



children [name](#) [value](#)

used by element [gaugeConfiguration/algorithm/parameters](#)

annotation documentation Contains a name and a value

element **parameterType/name**

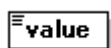
diagram



type **xs:Name**

element **parameterType/value**

diagram



type **xs:anySimpleType**

simpleType **precisionType**

type restriction of **xs:NMTOKEN**

used by element [gaugeConfiguration/precision](#)

facets
enumeration single
enumeration double
enumeration mixed

annotation documentation Enumeration of precision types, single(32 bit) or double (64 bit)

simpleType **revisionActionType**

type	restriction of xs:NMTOKEN	
used by	element	managementActionType/revisionAction
facets	enumeration	generate
	enumeration	add
	enumeration	replace
	enumeration	remove
annotation	documentation	An enumeration of revision actions

9.8 ILDG file format v1.1

ILDG Binary File Format (Rev. 1.1)

ILDG Metadata Working Group

15 December 2005

This document specifies the file format which is used to exchange binary files within ILDG.

1 Overview

For sharing binary files which contain, e.g., gauge field configurations, ILDG adopted the strategy of defining a real file format. All providers of configurations have to provide their configurations using this file format. The goal was to to define a structured file format which allows to encapsulate, in an extensible way, binary data and meta data within a single file. While currently only exchange of binary files containing gauge field configurations is foreseen, in future also other kind of binary data, e.g. different kind of propagators, may be exchanged.

2 Specification

2.1 Packaging

The ILDG binary file format consists of several parts which are packaged using the LIME file format. LIME stands for “Lattice QCD Interchange Message Encapsulation” and has been developed by SciDAC [1]. It allows to encapsulate one or more *records* containing ASCII or binary data. One or more records can be packaged into one *message*. A LIME file may consist of several messages.

2.2 File structure

The ILDG binary file has the following structure:¹

¹Numbering of messages and records is 1, 2, ...

message	record	LIME record type
#1
...
#n
	#i	ildg-format

	#j	ildg-binary-data

...
#m	#1	ildg-data-lfn
...

Where

- Groups are free to introduce their own messages/records and insert them in the locations indicated by '...'.
- The records/messages indicated by '...' may not exist.
- The first part of the LIME type strings, i.e. all characters until the first dash ('-'), identifies a namespace.
- Each group introducing their own records should have a unique namespace. These namespaces should be registered with ILDG to avoid name clashes.
- The order of the messages #n and #m is not fixed, i.e. both #n<#m and #m<#n are allowed.
- The record ildg-format has to precede the record ildg-binary-data, the order of the two records is fixed to #i<#j.
- Matching of LIME record times is performed case sensitive.

2.3 Record ildg-format

This record consists of a XML document which contains a minimal set of non-mutable parameters needed to read the binary data. The document has to conform to the schema provided in the appendix. Here an example document:

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<ildgFormat xmlns="http://www.lqcd.org/ildg"
            xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
            xsi:schemaLocation="http://www.lqcd.org/ildg/filefmt.xsd">
  <version> 1.0 </version>
  <field> su3gauge </field>
  <precision> 32 </precision>
  <lx> 20 </lx> <ly> 20 </ly> <lz> 20 </lz> <lt> 64 </lt>
</ildgFormat>
```

2.4 Record `ildg-binary-data`

This record may contain different kind of fields or other data. Currently, only storing SU(3) gauge fields is foreseen. The record consists of a sequence of IEEE floating point numbers. The precision is defined in the `ildg-format` record. The endianness is fixed to big.

2.4.1 SU(3) gauge configurations

A SU(3) gauge configuration is a set of SU(3) matrices assigned to the links of a four dimensional hypercube. If $x(n)$ is a value of a quark field at site $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$,

$$x^\dagger(n)U_\mu(n)x(n+\hat{\mu}) \equiv \sum_{a,b=1}^3 [x^\dagger(n)]_a [U_\mu(n)]_{ab} [x(n+\hat{\mu})]_b \quad (1)$$

is gauge invariant.

The configuration is stored as 8 (or 7) dimensional array of floating point numbers (or complex numbers). The dimensions ordered from slowest to fastest running index are (in brackets: C-style index):

1. Site index in time-direction t (`t=0, ..., NT-1`).
2. Site index in space-direction z (`z=0, ..., NZ-1`).
3. Site index in space-direction y (`y=0, ..., NY-1`).
4. Site index in space-direction x (`x=0, ..., NX-1`).
5. Direction index μ (`mu=0, ..., 3`, where $0 \leftrightarrow x$, $1 \leftrightarrow y$, $2 \leftrightarrow z$, $3 \leftrightarrow t$).
6. Colour index a (`a=0, 1, 2`).
7. Colour index b (`b=0, 1, 2`).
8. [Index referencing real (0)/imaginary (1)part (`ir=0, 1`).]

The corresponding definition of such an array in C (i.e. the rightmost index runs fastest) is:

```
double U[NT][NZ][NY][NX][NDIMENSION][NCOLOR][NCOLOR][2];
```

For FORTRAN (i.e. the leftmost index runs fastest) the equivalent statement is:

```
complex U(NCOLOR,NCOLOR,NDIMENSION,NX,NY,NZ,NT)
```

2.5 Record `ildg-data-lfn`

This record contains a single string with the logical filename (LFN) used for storing the binary file in the Grid. The content must be identical to the element `<dataLFN>` of the corresponding configuration metadata document.

Appendix

2.6 Schema for ildg-format document

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<xs:schema targetNamespace="http://www.lqcd.org/ildg"
  xmlns:xs="http://www.w3.org/2001/XMLSchema"
  xmlns="http://www.lqcd.org/ildg"
  elementFormDefault="qualified"
  attributeFormDefault="unqualified">
  <xs:simpleType name="fieldType">
    <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
      <xs:enumeration value="su3gauge"/>
    </xs:restriction>
  </xs:simpleType>
  <xs:simpleType name="precisionType">
    <xs:restriction base="xs:NMTOKEN">
      <xs:enumeration value="32"/>
      <xs:enumeration value="64"/>
    </xs:restriction>
  </xs:simpleType>
  <xs:element name="ildgFormat">
    <xs:complexType>
      <xs:sequence>
        <xs:element name="version" type="xs:string"/>
        <xs:element name="field" type="fieldType"/>
        <xs:element name="precision" type="precisionType"/>
        <xs:element name="lx" type="xs:integer"/>
        <xs:element name="ly" type="xs:integer"/>
        <xs:element name="lz" type="xs:integer"/>
        <xs:element name="lt" type="xs:integer"/>
      </xs:sequence>
    </xs:complexType>
  </xs:element>
</xs:schema>
```

References

- [1] SciDAC Software Coordinating Committee, “LIME (Version 1.1),”
<http://www.physics.utah.edu/~detar/scidac>

9.9 Meta Data Catalog specification

ILDG MDC definition

Definition in WSDL

- [ILDG MDC.wsdl](#)

Update (2006 March)

- Raw queries (doEnsembleQuery and doConfigurationQuery) are dropped, because of ambiguity between XML databases.
- soapenc:string should be xsd:string.

Agenda

- Name space of ILDG MDC. The current name space is "mdc.ildg.lqcd.org".

Definition in Java

```
/* query results data structure */
class QueryResults {
    String statusCode; /* status code */
    String queryTime; /* time Stamp when query is executed */
    int totalResults; /* total number of matched ensembles */
    int startIndex; /* same as input */
    int numberOfResults; /* # of matched query results */
    String[] results; /* the array of matched XML in string*/
                    /* or, the array of EnsembleURI/dataLFN in string*/
};

/*
StatusCode is one of these:
"MDC_SUCCESS"
"MDC_INVALID_REQUEST"
"MDC_NO_DATA"
*/

/* Query for Ensemble data, returns the array of EnsembleURIs of
   matched ensembles. */
QueryResults doEnsembleURIQuery(
    String queryFormat, /* Xpath, or SQL, or ALL */
    String queryString, /* Xpath expression or SQL expression */
    int startIndex, /* the start index to be returned */
    int maxResults /* maximum # of to be returned */
);

/* Query for Ensemble data, returns the array of configuration
   data LFN of matched metadata */
QueryResults doConfigurationLFNQuery(
    String queryFormat, /* Xpath, or SQL, or ALL */
    String queryString, /* Xpath expression or SQL expression */
    int startIndex, /* the start index to be returned */
);
```



```

        int maxResults      /* maximum # of to be returned */
    );

    class MetadataResult {
        String statusCode; /* status code */
        String document;   /* XML documents in string */
    };

    MetadataResult getConfigurationMetadata(
        String configurationLFN; /* LFN of requested data */
    );

    MetadataResult getEnsembleMetadata(
        String ensembleURI; /* URI of requested data */
    );

    class MDCinfo {
        String version; /* version supported in this MDC */
        String queryTypes[]; /* supported query formats */
        String groupName; /* group name running this MDC */
        String groupURL; /* group info URL */
        /* .... ? ... more ? */
    };

    /* get MDC information and status */
    MDCinfo getMDCinfo();

```

Comments

- Have both raw query and LFN/URI query. As we discussed, the raw query supports general query interface by Xpath or SQL, and LFN/URI query returns the array of configurationLFN or ensembleURI.
- Change the names of the functions for raw query and LFN/URI query to make them more clear.
- It would be useful to have the function to retrieve the metadata XML documents by configurationLFN or ensembleURL. It is possible to do this by this raw query, but it is sometimes costly.
- Have the functions to get the status and information of MDC. It may return the version and the query format supported by the MDC. Especially, the version info will be useful to extend our MDC services.
- Add the time stamp field in queryResults.

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
- <wsdl:definitions targetNamespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org"
  xmlns:apachesoap="http://xml.apache.org/xml-soap"
  xmlns:impl="urn:mdc.ildg.lqcd.org" xmlns:intf="urn:mdc.ildg.lqcd.org"
  xmlns:soapenc="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
  xmlns:wsdl="http://schemas.xmlsoap.org/wsdl/"
  xmlns:wsdlsoap="http://schemas.xmlsoap.org/wsdl/soap/"
  xmlns:xsd="http://www.w3.org/2001/XMLSchema">
- <wsdl:types>
  - <schema targetNamespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org"
    xmlns="http://www.w3.org/2001/XMLSchema">
    <import
      namespace="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/" />
    - <complexType name="ArrayOf_xsd_string">
      - <complexContent>
        - <restriction base="soapenc:Array">
          <attribute ref="soapenc:arrayType"
            wsdl:arrayType="xsd:string[]" />
          </restriction>
        </complexContent>
      </complexType>
    - <complexType name="QueryResults">
      - <sequence>
        <element name="statusCode" nillable="true"
          type="xsd:string" />
        <element name="queryTime" nillable="true"
          type="xsd:string" />
        <element name="totalResults" type="xsd:int" />
        <element name="startIndex" type="xsd:int" />
        <element name="numberOfResults" type="xsd:int" />
        <element name="results" nillable="true"
          type="impl:ArrayOf_xsd_string" />
      </sequence>
    </complexType>
    - <complexType name="MetadataResult">
      - <sequence>
        <element name="document" nillable="true" type="xsd:string" />
        <element name="statusCode" nillable="true"
          type="xsd:string" />
      </sequence>
    </complexType>
    - <complexType name="MDCinfo">
      - <sequence>
        <element name="groupName" nillable="true"
          type="xsd:string" />
        <element name="groupURL" nillable="true" type="xsd:string" />
        <element name="queryTypes" nillable="true"
          type="impl:ArrayOf_xsd_string" />
        <element name="version" nillable="true" type="xsd:string" />
      </sequence>
    </complexType>
  </schema>
</wsdl:types>
- <wsdl:message name="getConfigurationMetadataRequest">
  <wsdl:part name="configurationLFN" type="xsd:string" />
</wsdl:message>
- <wsdl:message name="getConfigurationMetadataResponse">

```

```

    <wsdl:part name="getConfigurationMetadataReturn"
      type="impl:MetadataResult" />
  </wsdl:message>
  <wsdl:message name="getMDCinfoRequest" />
- <wsdl:message name="getEnsembleMetadataResponse">
  <wsdl:part name="getEnsembleMetadataReturn"
    type="impl:MetadataResult" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="doConfigurationLFNQueryResponse">
  <wsdl:part name="doConfigurationLFNQueryReturn"
    type="impl:QueryResults" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="doEnsembleURIQueryRequest">
  <wsdl:part name="queryFormat" type="xsd:string" />
  <wsdl:part name="queryString" type="xsd:string" />
  <wsdl:part name="startIndex" type="xsd:int" />
  <wsdl:part name="maxResults" type="xsd:int" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="getEnsembleMetadataRequest">
  <wsdl:part name="ensembleURI" type="xsd:string" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="doEnsembleURIQueryResponse">
  <wsdl:part name="doEnsembleURIQueryReturn"
    type="impl:QueryResults" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="doConfigurationLFNQueryRequest">
  <wsdl:part name="queryFormat" type="xsd:string" />
  <wsdl:part name="queryString" type="xsd:string" />
  <wsdl:part name="startIndex" type="xsd:int" />
  <wsdl:part name="maxResults" type="xsd:int" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:message name="getMDCinfoResponse">
  <wsdl:part name="getMDCinfoReturn" type="impl:MDCinfo" />
  </wsdl:message>
- <wsdl:portType name="MDCInterface">
  - <wsdl:operation name="doEnsembleURIQuery"
    parameterOrder="queryFormat queryString startIndex maxResults">
    <wsdl:input message="impl:doEnsembleURIQueryRequest"
      name="doEnsembleURIQueryRequest" />
    <wsdl:output message="impl:doEnsembleURIQueryResponse"
      name="doEnsembleURIQueryResponse" />
    </wsdl:operation>
  - <wsdl:operation name="doConfigurationLFNQuery"
    parameterOrder="queryFormat queryString startIndex maxResults">
    <wsdl:input message="impl:doConfigurationLFNQueryRequest"
      name="doConfigurationLFNQueryRequest" />
    <wsdl:output message="impl:doConfigurationLFNQueryResponse"
      name="doConfigurationLFNQueryResponse" />
    </wsdl:operation>
  - <wsdl:operation name="getEnsembleMetadata"
    parameterOrder="ensembleURI">
    <wsdl:input message="impl:getEnsembleMetadataRequest"
      name="getEnsembleMetadataRequest" />
    <wsdl:output message="impl:getEnsembleMetadataResponse"
      name="getEnsembleMetadataResponse" />
    </wsdl:operation>
  - <wsdl:operation name="getConfigurationMetadata"

```

```

parameterOrder="configurationLFN">
  <wsdl:input message="impl:getConfigurationMetadataRequest"
    name="getConfigurationMetadataRequest" />
  <wsdl:output message="impl:getConfigurationMetadataResponse"
    name="getConfigurationMetadataResponse" />
</wsdl:operation>
- <wsdl:operation name="getMDCinfo">
  <wsdl:input message="impl:getMDCinfoRequest"
    name="getMDCinfoRequest" />
  <wsdl:output message="impl:getMDCinfoResponse"
    name="getMDCinfoResponse" />
</wsdl:operation>
</wsdl:portType>
- <wsdl:binding name="mdcSoapBinding" type="impl:MDCInterface">
  <wsdlsoap:binding style="rpc"
    transport="http://schemas.xmlsoap.org/soap/http" />
- <wsdl:operation name="doEnsembleURIQuery">
  <wsdlsoap:operation soapAction="" />
- <wsdl:input name="doEnsembleURIQueryRequest">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:input>
- <wsdl:output name="doEnsembleURIQueryResponse">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:output>
</wsdl:operation>
- <wsdl:operation name="doConfigurationLFNQuery">
  <wsdlsoap:operation soapAction="" />
- <wsdl:input name="doConfigurationLFNQueryRequest">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:input>
- <wsdl:output name="doConfigurationLFNQueryResponse">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:output>
</wsdl:operation>
- <wsdl:operation name="getEnsembleMetadata">
  <wsdlsoap:operation soapAction="" />
- <wsdl:input name="getEnsembleMetadataRequest">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:input>
- <wsdl:output name="getEnsembleMetadataResponse">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:output>
</wsdl:operation>
- <wsdl:operation name="getConfigurationMetadata">
  <wsdlsoap:operation soapAction="" />

```

```

- <wsdl:input name="getConfigurationMetadataRequest">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:input>
- <wsdl:output name="getConfigurationMetadataResponse">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:output>
</wsdl:operation>
- <wsdl:operation name="getMDCinfo">
  <wsdlsoap:operation soapAction="" />
- <wsdl:input name="getMDCinfoRequest">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:input>
- <wsdl:output name="getMDCinfoResponse">
  <wsdlsoap:body
    encodingStyle="http://schemas.xmlsoap.org/soap/encoding/"
    namespace="urn:mdc.ildg.lqcd.org" use="encoded" />
</wsdl:output>
</wsdl:operation>
</wsdl:binding>
</wsdl:definitions>

```

10 2004 年度 ~ 2005 年度格子 QCD 論文リスト

10.1 学術雑誌発表論文

1. Vector meson masses in 2+1 flavor Wilson Chiral Perturbation Theory
S. Aoki, O. Baer and S. Takeda
hep-lat/0601019 (2006)
2. Pseudo scalar meson masses in Wilson Chiral Perturbation Theory for 2+1 flavors
S. Aoki, O. Baer, T. Ishikawa and S. Takeda
Phys. Rev. D73 (2006) 014511
3. Nonperturbative $O(a)$ improvement of the Wilson quark action with the RG-improved gauge action using the Schrödinger functional method
CP-PACS and JLQCD Collaborations: S. Aoki, M. Fukugita, S. Hashimoto, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, S. Takeda, Y. Taniguchi, N. Tsutsui, A. Ukawa, N. Yamada, T. Yoshie
Phys.Rev. D73 (2006) 034501
4. Neutron electric dipole moment from lattice QCD
E. Shintani, S. Aoki, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kikukawa, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D72 (2005) 014504
5. $I=2$ Pion Scattering Length from Two-Pion Wave Functions
CP-PACS Collaboration: S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yamazaki, T. Yoshie
Phys.Rev. D71 (2005) 094504
6. Perturbative determination of mass dependent renormalization and improvement coefficients for the heavy-light vector and axial-vector currents with relativistic heavy and domain-wall light quarks
N. Yamada, S. Aoki and Y. Kuramashi
Nucl. Phys. B713 (2005) 407-437
7. A scaling study of the step scaling function in $SU(3)$ gauge theory with improved gauge actions
CP-PACS Collaboration: S. Takeda, S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 074510
8. Non-perturbative $O(a)$ -improvement of Wilson quark action in three-flavor QCD with plaquette gauge action
CP-PACS and JLQCD Collaborations: N.Yamada, S.Aoki, M.Fukugita, S.Hashimoto, K-I.Ishikawa, N.Ishizuka, Y.Iwasaki, K.Kanaya, T.Kaneko, Y.Kuramashi, M.Okawa, Y.Taniguchi,

N.Tsutsui, A.Ukawa, T.Yoshie
Phys.Rev. D71 (2005) 054505

9. Non-perturbative renormalization of meson decay constants in quenched QCD for a renormalization group improved gauge action
CP-PACS Collaboration: K. Ide, S. Aoki, R. Burkhalter, M. Fukugita, S. Hashimoto, K.-I. Ishikawa, T. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, V. Lesk, M. Okawa, Y. Taniguchi, T. Umeda, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 074502
10. Perturbative determination of mass dependent $O(a)$ improvement coefficients for the vector and axial vector currents with a relativistic heavy quark action
S. Aoki, Y. Kayaba and Y. Kuramashi
Nucl. Phys. B689 (2004) 127-156
11. A perturbative determination of mass dependent $O(a)$ improvement coefficients in a relativistic heavy quark action
S. Aoki, Y. Kayaba, Y. Kuramashi
Nucl. Phys. B697 (2004) 271-301
12. Light hadron spectroscopy in two-flavor QCD with small sea quark masses
CP-PACS Collaboration: Y. Namekawa, S. Aoki, M. Fukugita, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, V. I. Lesk, M. Okawa, A. Ukawa, T. Umeda, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 074503
13. Lattice QCD calculation of the proton decay matrix element in the continuum limit
CP-PACS and JLQCD Collaborations: N. Tsutsui, S. Aoki, M. Fukugita, S. Hashimoto, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, T. Onogi, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 111501
14. $I=2$ $\pi\pi$ Scattering Phase Shift with two Flavors of $O(a)$ Improved Dynamical Quarks
CP-PACS Collaboration: T. Yamazaki, S. Aoki, M. Fukugita, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 074513
15. Non-perturbative calculation of Z_V and Z_A in domain-wall QCD on a finite box
CP-PACS Collaboration: S. Aoki, M. Fukugita, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshie
Phys.Rev. D70 (2004) 034503

10.2 国際会議プロシーディングス

10.2.1 招待総合報告

1. Akira Ukawa
Hadron Spectrum from Lattice QCD
Talk given at the International Conference on QCD and Hadronic Physics, Beijing, June 16-20, 2005
To appear in the Proceedings (hep-lat/0509142).
2. Akira Ukawa
Lattice QCD: Status and Prospect
Talk given at the XXVth Physics in Collision, Prague, Czech Republic, 6-9 July, 2005
To appear in the Proceedings
3. Sinya Aoki
QCD Phases in Lattice QCD
Talk given at the International Conference on QCD and Hadronic Physics, Beijing, 16-20 June, 2005
To appear in the Proceedings

10.2.2 原著発表

1. The PACS-CS Project
PACS-CS Collaboration: S. Aoki, K.-I. Ishikawa, T. Ishikawa, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kuramashi, M. Okawa, K. Sasaki, Y. Taniguchi, N. Tsutsui, A. Ukawa, T. Yoshie
talk presented at Lattice 2005 (algorithm and machines), Trinity College, Dublin, Ireland, 25-30 Jul 2005
PoS LAT2005 (2005) 111
2. Light hadron spectrum and quark masses in 2+1 flavor QCD
CP-PACS and JLQCD Collaborations: T. Ishikawa, S. Aoki, O. Baer, M. Fukugita, S. Hashimoto, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, N. Tsutsui, A. Ukawa, T. Yoshie
PoS LAT2005 (2005) 057
3. Neutron electric dipole moment on the lattice Eigo Shintani, S. Aoki, N. Ishizuka, K. Kanaya, Y. Kikukawa, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yoshie
talk presented at Lattice 2005 (Chiral fermions), Trinity College, Dublin, Ireland, 25-30 Jul 2005
PoS LAT2005 (2005) 128
4. Light hadron spectrum in 2+1 flavor full QCD by CP-PACS and JLQCD Collaborations
T. Ishikawa, S. Aoki, M. Fukugita, S. Hashimoto, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, T. Onogi, N. Taniguchi, N. Tsutsui, A.

- Ukawa, T. Yoshie
 Talk presented at Lattice2004(spectrum), Fermilab, June 21-26, 2004
 Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 140 (2005) 225-227
5. A scaling study of the step scaling function of quenched QCD with improved gauge actions
 CP-PACS Collaboration: S. Takeda, S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, Y. Taniguchi, A. Ukawa, T. Yoshie
 Talk presented at Lattice2004(improved), Fermilab, June 21-26, 2004
 Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 140 (2005) 740-742
6. Charmed meson spectra and decay constants with one-loop $O(a)$ improved relativistic heavy quark action
 Y. Kayaba, S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yoshie
 Talk presented at Lattice2004(heavy), Fermilab, June 21-26, 2004
 Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 140 (2005) 479-481
7. Status of International Lattice Data Grid – An Overview –
 Akira Ukawa
 talk presented at Lattice2004(ILDG), Fermilab, June 21-26, 2004
8. I=2 Pion Scattering Length from Two-Pion Wave Function
 CP-PACS Collaboration: S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, T. Yamazaki, T. Yoshie
 Talk presented at Lattice2004(spectrum), Fermilab, June 21-26, 2004
 Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 140 (2005) 305-307
9. Chiral extrapolations with small sea quark mass data in two-flavor lattice QCD
 CP-PACS Collaboration: Y. Namekawa, S. Aoki, M. Fukugita, K-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko, Y. Kuramashi, V.I. Lesk, M. Okawa, A. Ukawa, T. Umeda, T. Yoshie
 Talk presented at Lattice2004(spectrum), Fermilab, June 21-26, 2004
 Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 140 (2005) 314-316

11 ILDG Workshop プログラム及び参加者リスト

11.1 First ILDG Workshop 19-20 December 2002

Organized by

National e-Science Center, Edinburgh, UK

Attended by

UK: University of Edinburgh

USA: Jefferson National Accelerator Facility

Japan: Center for Computational Physics, University of Tsukuba

Program

Thursday 19 December

0900 Introduction : Richard Kenway

0930 Grid Activities in Japan : Tomoteru Yoshie

1100 Gauge Connection : Jim Hetrick

1200 LATFOR : Karl Jansen

1300 lunch

1400 Grid Activities at Jefferson Lab : Chip Watson

1500 UK QCDgrid Project : Chris Maynard and Balint Joo

1930 dinner at the Chapterhouse

Friday 20 December

0900 Summary : Richard Kenway

1000 Middleware : Alan Irving

1130 Metadata : Tony Kennedy

1300 lunch

1400 Opportunities for Collaboration : Christine Davies

1500 Actions : Richard Kenway

1600 Finish

11.2 Second ILDG Workshop 2 May 2003

Organized by

National e-Science Center, Edinburgh UK

Attended by

Cyprus, Edinburgh, FNAL, JLab, Teikyo, Tsukuba

Program

0930 introduction (Kenway)

0945 XML refresher course (Joo)

1000 QCDML: strategy and standard configuration format (Yoshie)
1020 QCDML: physics (Maynard)
1040 QCDML: machine and management (Pleiter)
1100 discussion and recommendations for metadata working group
1145 data binding (McNeile)
1200 break
1300 getting data out of XML documents (Joo)
1330 I/O and the US SciDAC API for lattice QCD pdf (Edwards)
1400 middleware working group report (Jackson)
1430 discussion and recommendations for middleware working group
1515 plans for Lat03 and next ILDG workshop
1600 close

11.3 Third ILDG Workshop 5 December 2003

Organized by

National e-Science Center, Edinburgh UK

Attended by

Utah, Fermilab, Boston, JLab, Edinburgh, Zeuthen, Tsukuba

Program

12:00 ILDG Organisation (Kenway)
 appointment of co-convenors for the Middleware WG
 establishment of the ILDG Board
 issues for the Board, eg guidelines for data sharing, access policy
12:30 Report of the Middleware WG (Joo/Sato)
 status
 issues
 plan for the next phase
13:30 Report of the Metadata WG (Yoshie/Maynard)
 progress and status
 summary of current discussions
 discussions including comments from SciDAC
14:30 Demonstrations
 prototype middleware components (Neilsen)
 metadata services (Andronico)
 CP-PACS browser (Sato)
 QCDgrid (Maynard)
15:15 Discussion
 objectives for Lat04
 approval of WG plans
16:00 end

Summary Note by R. Kenway

- **ILDG Board**

This was established with one member from each country to decide policy and oversee the working groups. The initial membership is Brower (US), Jansen (Germany), Kenway (UK), Ukawa (Japan).

The chairperson will rotate on an annual basis, changing at the Lattice Conference. Kenway, having effectively acting as chairperson for the past year, handed the chair to Ukawa at the end of the meeting.

The Board is charged with expanding the membership, seeking the allocation of resources from their national projects, and considering the access policy for ILDG data and guidelines for data sharing.

The chairperson is responsible for organising the 6 monthly workshops, thereby spreading time-zone discomfort.

- **Middleware WG**

The WG should be reactivated with Joo, Sato and Watson as co-convenors, plus the current membership.

The WG should discuss and agree first the architecture, then submit to the ILDG Board a workplan together with the resources available or required to carry it out.

Joo will circulate a note about DIME encapsulation to both working groups for its consideration as a standard.

- Considerable progress was reported towards agreement with SciDAC on the gauge configuration schema. The first priority of the working group is to confirm this standard. The second priority is to specify a standard gauge configuration file format and demonstrate a working implementation. The third priority is to consider schemas and standard file formats for derived data.

11.4 Fourth ILDG Workshop May 21 2004

Organized by

Center for Computational Sciences, University of Tsukuba

Attended by

Fermilab, Boston, Jlab, Edinburgh, Zeuthen, Tsukuba

Program

19:00-19:05 Opening

19:05-20:05 Report of the Metadata WG (Yoshie/Maynard)

Report from the WG C. Maynard

Discussions

20:05-21:05 Report of the Middleware WG (Watson/Joo/Sato)

Status report/SRM/Jlab replica Catalog C. Watson
 Use cases and FNAL prototype E. Neilsen
 CCS proposal for metadata catalog interface M. Sato
 Future plans
 Discussions
 21:05-21:15 break
 21:15-21:45 "format" issues
 What are the issues? T. Yoshie
 Discussions 20 minutes
 21:45-22:15 Report of ILDG-related activities
 - status of domestic resource sharing -
 USA: SciDAC R. Brower
 UK: UKQCD R. Kenway
 Germany: LatFor K. Jansen
 Japan: HEPNET-J/sc S. Hashimoto
 Discussions
 22:00-22:45 Discussions
 International LFT Network activity plan S. Aoki
 Planning for the next phase
 Toward Lattice 2004
 Closing 23:00
 Next ILDG workshop

Summary Note by A. Ukawa

- Metadata WG

QCDML v1.0 was presented and agreed upon. The WG will proceed to complete documentation by Lat04, and release it.

The issue of "reference" was discussed. It was concluded that a reference to a published paper is recommended but not required when submitting configurations to ILDG.

It was suggested, and agreed upon, that an informal tutorial be scheduled at Lat04 so that people in the community learn about QCDML and begin to use it.
- Middleware WG

Present status of the components development was presented. This included metadata catalog, replica catalog, SRM and others.

ILDG use cases and FNAL prototype was presented and discussed.

CCS proposal of metadata catalog was presented and discussed. It was agreed that the WG proceeds with the current plan of development.
- Format issues

Status of resource sharing in USA/UK/Germany/Japan was reported. Issues related to

international data sharing were discussed. It was agreed upon that these points be reported at Lat04 to the community to get back responses and comments.

- Toward Lat04
LOC provides 60 minutes to ILDG. Plan 15 minutes for general report, 15 minutes for QCDML v1.0, 15 minutes for middleware development, and 15 minutes to get a feedback from audience. Schedule an informal tutorial on QCDML.
- Next Workshop
December 3rd (Fri) 19:00-23:00 Japan time (GMT+9). Use only VRVS for the workshop.

11.5 Fifth ILDG Workshop December 3, 2004

Organized by

Center for Computational Sciences, University of Tsukuba

Attended by

Edinburgh, Liverpool, Zeuthen, Marseille, Orsay, Boston, Jlab, FNAL, Utah, Addelaide, Tsukuba

Program

19:00-19:05 Opening

19:05-19:15 Metadata WG

Status report T.Yoshie (Tsukuba)

Discussions

19:15-20:15 Middleware WG (chair M. Sato)

Status report B. Joo (Edinbufgh)

Discussions

20:15-21:15 Data format (chair T. Yoshie)

Status report C. Watson (JLAB)

Discussions 30 minutes

21:15-21:30 Break

21:30-22:30 ILDG Implementation status (chair A. Ukawa)

Germany D. Pleiter (Zeuthen)

England C. Maynard (Edinburgh)

USA C. DeTar (Utah)

Japan M. Sato (Tsukuba)

Discussions (incl. issues of CA)

22:30-23:00 Status of data generation and sharing (chair A. Ukawa)

Germany K. Jansen (Zeuthen)

England R. Kenway (Edinburgh)

USA R. Brower(Boston)

Japan T. Yoshie (Tsukuba)

Discussions

23:00-23:25 Planning for 2005 (chair A. Ukawa)

target for 2005
ILDG Board chair for 2005
schedule of the 6th ILDG Workshop
Closing 23:25-23:30

Summary Note by A. Ukawa

- Metadata WG

QCDml is now v1.1. It was suggested that the WG discuss possible extension of QCDml to include observables.

- Middleware WG

It was agreed that the WG works upon the following premises: The task of the WG is to standardise services and client/server interfaces. Client/Application writing is a local implementation issue left to collaborations. If a collaboration A replicates configurations from the site of another collaboration B, it is the task of the collaboration A to inform this to the Replica Catalogue of collaboration B.

Progress in detailing the middleware which was made at the WG meeting in Edinburgh (25-27 October) was presented. The WG suggested, and the Workshop consented, that the target date for production of middleware is optimistically to be December 2005, and realistically to be June 2006.

Another WG meeting is planned between May and December 2005, possibly in Japan. This is expected to be a small meeting of those actively participating in the work.

It was requested, and the WG consented, that the ILDG middleware specifications be written up as a document.

- Data Format issue

Discussions of the Metadata and Middleware WG 's on the data format was presented, and a proposal to explore a consensus along LIME was made.

It was proposed, and agreed upon, that the two WG 's continue work along this line, and reach data format version 1.0 by the end of February, 2004.

- ILDG implementation status

Germany, UK, USA and Japan presented the status of implementation. Germany now has prototype MDC and 4 Storage Elements set up. UK is modifying its QCDGrid to ILDG standards. In USA, JLAB implemented SRMv2 and a running RC, FNAL has a prototype MDC running and SRMv1 (to be updated to v2), BNL will install SRMv2. In Japan, prototype MDC and RC are being built.

Concerning CA, Germany uses GridKA, UK uses e-Science, USA uses DOE Science Grid , and Japan is considering several alternatives.

- Data generation and sharing

Germany, UK, USA and Japan presented the status of data generation. See the presentation materials for details.

Issues of data sharing were discussed. Ongoing effort to coordinate configuration generation on the three QCDOC machines in UK and USA was mentioned. Discussions within SciDAC on possible guidelines was reported. The importance of international point of view was stressed. It was agreed upon that discussion on this issue to be continued at the ILFTNetwork meeting in Edinburgh in March 2005.

- Target for 2005

It was agreed that the following be the target for 2005:

The Middleware and Metadata WG's should reach data format version 1.0 by the end of February 2004.

Collaborations should produce middleware optimistically by December 2005, and realistically by June 2006.

Invite other countries to ILDG.

- ILDG Board Chair for 2005

Akira Ukawa handed the chair to Richard Brower at the end of the meeting

- Next Workshop

12 May, 2005. Time to be determined.

11.6 Sixth ILDG Workshop May 12, 2005

Organized by

Center for Computational Sciences, Boston University

Attended by

Tsukuba, Marseille, Boston, FNAL, Zeuthen, Juelich, Chicago, Utah, Tirana, Liverpool, Indiana, Edinburgh, Moscow, Orsay, Yale

Program

7:00-7:05 Opening

7:05-7:40 Metadata WG(chair T. Yoshie)

Status report D. Pleiter

Discussions

7:40-8:15 Middleware WG (chair C. Watson)

Status report C. Watson

Discussions on Schedule and Documentation

8:15-8:50 ILDG Implementation status(chair D. Holmgren)

Germany D. Pleiter (Zeuthen)

England C. Maynard (Edinburgh)

USA C. DeTar (Utah)

Japan M. Sato (Tsukuba)

Discussions on readiness to Write/Read ILDG files

9:15-9:30 Break

9:30-10:05 Plans for data generation and archiving on ILDG (chair A. Ukawa)

Germany K. Jansen (Zeuthen)

England R. Kenway (Edinburgh)

USA C. DeTar(Utah)

Japan T. Yoshie (Tsukuba)

Discussions

10:05-10:25 Planning (chair R. Brower)

Lattice 2005 Presentation

Targets for 2005

schedule of the 7th ILDG Workshop

10:25-10:30 Closing

Minutes of the Meeting note by C. Detar

Pleiter presentation of binary format:

Discussion

Watson: Who will use this format?

Edinburgh: UKQCD will use it.

Tsukuba: We plan to use it.

Utah: SciDAC will use it, of course.

Brower: It would be good to have a working example.

Brower: Should we be converting lattices already in the NERSC archive?

DeTar: Do we have a volunteer to do this?. Certainly lattices that

are being generated now should be put in the ILDG format.

Ensembles that are still being grown should be converted. This
is just a matter of labor.

Watson presentation of middleware effort

(See the updated version of his talk to get links to an Adelaide
demonstration of a replica catalog implementation.)

Sato: Can the metadata have a GFN?

Watson: I think it can.

Sato: It needs some identifier.

Watson: If you ask for a GFN in an ensemble query, you would get the
GFN for the XML metadata document?

Watson: My preference would be not to support the retrieval of the
metadata through the replica catalog.

Ernst (DESY): How does the group membership work? Where is the
membership file kept?

Watson: X.509 certificates are used to verify membership.

When the file is added to the repository, the group ownership is registered. Anyone can create a group. There is no master list. When someone wants to access the file, the certificates are checked.

Ernst: How are replicas tracked?

Watson: We are creating the interface. Anyone can implement it as they wish.

Ernst: These tools already exist. Would Adelaide share their work, for example?

Watson: I was told, yes. We should put up a web page with sharable implementations.

Brower: Yes, that is a good idea. But we should have one gold-plated, recommended implementation. Variety is the enemy of simplicity.

Dirk Pleiter

Chris Maynard Implementation plans

C. DeTar

M. Sato

Watson: Dirk, are you using SRM-1?

Pleiter: We are using the FNAL version, which should be up-to-date

Zeuthen: Have we agreed to return the whole XML and not just a fragment?

Watson: This is under discussion. There will be a face-to-face meeting.

Brower: Is October a good time?

Edinburgh: We found the Indice database ran very slowly and are now using Exist.

Watson: Could you please post details to the working group?

Karl Jansen

Chris Maynard

C. DeTar presentation of data generating and sharing plans

Tomoteru Yoshie

Gottlieb: What is the lattice spacing for the DWF set?

Maynard: $(1.8 \text{ GeV})^{-1}$

Ukawa: Where are the configurations being generated?

Maynard: Both Riken and UKQCD

Jansen: What about staggered fermion cfigs?

Maynard: Yes

Maynard: Will MILC be using the RHMC algorithm?

DeTar: We are considering it and eagerly awaiting results of your experience.

Ukawa: How many trajectories are planned?

DeTar: We would like to generate 3000 time units.

(i.e. a few hundred lattices)

Brower: We need a systematic way to posting with ILDG the plans for generating lattices in advance of submission. This would help planning.

Ukawa: It was agreed in a previous ILDG meeting that collaborations would put this information on the ILDG web site.

Brower: We should start doing this. Should we also be integrating this information into the database?

Ukawa: Isn't it easier to just look it up on the web site?

Maynard: If the QCDML is already available, in principle it can be done.

File format discussion

Ukawa: We need to adopt formally the proposed file format.

Brower: Can we have a show of hands?

[The format adoption was unanimous.]

Lattice '05 presentation

Brower: Should we have another Lattice presentation?

Jansen: I think it is important to tell our colleagues what we are doing, both with middleware and file format.

Brower: I am told we will have an evening session.

Ukawa: We had a one hour slot last time and about 45 min for a tutorial.

Brower: I will pass it on to McNeile.

Ukawa: It would be better to use the plenary session room.

Brower: I will try.

Grid coordination

Ernst (DESY): We need a concerted effort to coordinate.

Watson: Starting from the ISDL we produced, we can start developing from the existing interfaces. The October meeting will be a good time to coordinate.

Ernst: The timetable is quite aggressive. How will it be reached?

My feeling is that the existing documentation isn't sufficient to allow implementers to join the effort.

Watson: Let's look at how Adelaide did it. They used the existing documentation.

Please post your comments to the MW working group.

Edinburgh: I think the current documentation is not sufficient.
Sato: I also think we need to improve the documentation. Can you
 post the interface agreement reached at Edinburgh?
Watson: I can do it, including commentary.

Meeting adjourned 2 PM GMT.

Next meeting December 8, 2005 Starting at 7 AM US-EST.

11.7 Seventh ILDG Workshop Dec 8 2005

Organized by

Center for Computational Sciences, Boston University

Attended by

Boston, DESY Zeuthen, Edinburgh, Fermilab, Jefferson Lab, Julich, Liverpool, Orsay, Tsukuba,
Yale, U. Pacific

Program

6:30-6:35 Opening (Brower)
6:35-7:10 Metadata WG(chair Dirk Plieiter)
 Status report Tomoteru Yoshie
 Discussions
7:10-8:15 Middleware WG (chair Chip Watson)
 Status report Balint Joo
 Discussions
8:15-8:20 Status of Nat'l Grids and Readiness for ILDG(chair D. Holmgren)
 Australia (Coddington's slides posted)
 LatFor D. Plieiter
 UK C. Maynard
 USA Balint Joo
 Japan M. Sato
 Discussions
8:20-8:35 Break
8:35-9:10 Plans for data generation and archiving on ILDG (chair A. Ukawa)
 INFN (Tripiccione's note posted)
 LatFor Karl Jansen
 UK Chris Maynard
 USA Jim Simone
 Japan H. Matsufuru
 Discussions
9:10-9:25 Planning (new chair Karl Jansen)
 Lattice 2005 Presentation

Targets for 2005
Schedule of the 8th ILDG Workshop
9:25-9:30 Closing

Summary

Opening (Brower)

Metadata WG (chair D. Pleiter)

Status report T. Yoshie

Comment from D. Pleiter:

Request or feedback on QCDml-1.2 to see whether also those agree who did not follow the (lengthy) discussions on the mailing list. Since the comment was not very audible in the session, you can send your feedback to Dirk at <Dirk.Pleiter@DESY.de>

Middleware WG (chair C. Watson)

Status report B. Joo

Question from R. Brower expressing concern about metadata catalogs and replica catalogs located behind firewalls. C. Watson commented that this will not be a problem.

Status of Nat'l Grids & Readiness for ILDG (chair D. Holmgren)

Australia P. Coddington (not present, slides read aloud)

LatFor D. Pleiter

Question from C. Maynard: What does LFC mean?

Answer: LCG file catalog.

Plans for data generation and archiving on ILDG (chair A. Ukawa)

LatFor K. Jansen (not sending audio, presentation by D. Pleiter)

Question from R. Brower: Will twisted mass configs be generated primarily on apeNEXT machines? Answer was not heard.

UK C. Maynard

Suggestion from R. Brower: Tone of statement from first slide

"Data will not be available before six months after first publication." sounds too negative. Policy could be restated in more positive way: "Data will be available six months after first publication."

C. Maynard responded that UKQCD will be releasing first DWF configs in January, 2006 and all agreed that sounded positive.

Japan H. Matsufuru

T. Yoshie comment that Japanese policy will be to release configs to ILDG six months after first publication. There was a question if the clock started from date of submission to arXiv (hep-lat). This needs clarification.

Planning (new chair K. Jansen)

Since K. Jansen was not sending audio, R. Brower made a few closing

remarks. The next ILDG-8 meeting is May 11, 2006 at 0000 GMT.
ILDG will go live sometime in June, 2006.

12 セミナー プログラム及び参加者リスト

12.1 第1回セミナー "Lattice QCD via International Research Network"

12.1.1 プログラム

"Lattice QCD simulations via International Research Network"

September 21-24, 2004

Laforet-Shuzenji Hotel

Izu, Japan

=====

Tuesday, Sep. 21

Opening

9:00- 9:15 : A. Ukawa (Tsukuba)

welcome address

Session 1 --- chair: S. Aoki (Tsukuba)

9:15-10:00 : S. Gottlieb (Indiana)

MILC Physics Program: Now and in the Teraflop/s Era

10:00-10:30 : C. Aubin (Columbia)

Staggered chiral perturbation theory

Session 2 --- chair: S. Gottlieb (Indiana)

11:00-11:45 : T. Ishikawa (Tsukuba)

Light hadron spectrum in $N_f=2+1$ QCD (*)

11:45-12:30 : T. Izubuchi (Kanazawa)

Lattice QCD with Dynamical Domain Wall Fermions

Session 3 --- chair: I. Montvay (DESY)

14:00-14:45 : R. Kenway (Edinburgh)

Exploratory study of overlap valence quarks on a staggered sea

14:45-15:30 : T.W. Chiu (National Taiwan Univ)

Baryon Spectrum in Lattice QCD with Optimal Domain-Wall Fermion

Session 4 --- chair: M. Ilgenfritz (Humboldt)

16:00-16:45 : A. Kennedy (Edinburgh)

Accelerating Fermionic Molecular Dynamics

16:45-17:30 : A. Irving (Liverpool)

Singlet physics with improved staggered fermions

17:30-18:00 : H. Nakajima (Utsunomiya)

Lattice Landau gauge QCD simulation

=====

Wednesday, Sep. 22

Session 5 --- chair: K. Jansen (NIC/DESY)

9:00- 9:45 : R. Brower (Boston)

Mobius Fermions & SciDAC Software

9:45-10:15 : Y. Taniguchi (Tsukuba)

Schrodinger functional formalism with GW fermion

Session 6 --- chair: R. Brower (Boston)

10:45-11:15 : H. Fukaya (YITP)

$\bar{\psi}\gamma_5\psi$ condensates and topology fixing action

11:15-11:45 : S. Hashimoto (KEK)

Effects of low-lying fermion modes in the epsilon-regime

11:45-12:15 : R. Edwards (JLab)

The Pion Form-Factor on the Lattice

Session 7 --- chair: C. Sachrajda (Southampton)

13:45-14:30 : N. Ishizuka (Tsukuba)

I=2 Pion Scattering Length from Two-Pion Wave Function

14:30-15:00 : N. Christ (Columbia)

Status of QCD0C and Decays into Two Physical Pions

15:00-15:30 : J. Noaki (RBRC)

B_K from Quenched and Dynamical Domain-wall QCD

Session 8 --- chair: N. Christ (Columbia)

16:00-16:45 : C. Sachrajda (Southampton)

K $\rightarrow\pi\pi$ Decays and Final State Interactions

16:45-17:30 : W.J. Lee (Seoul)

epsilon'/epsilon with the HYP staggered fermion

17:30-18:00 : S. Ohta (KEK)

Nucleon Matrix Elements with DWF

=====

Thursday, Sep. 23

Session 9 --- chair: S. Hashimoto (KEK)

9:00- 9:45 : C. Davies (Glasgow)

Heavy quark physics results including light dynamical staggered quarks

9:45-10:30 : C. McNeile (Liverpool)

Heavy quark physics from unquenched clover calculations

Session 10 --- chair: P. Mackenzie (Fermilab)

11:00-11:45 : Y. Kuramashi (Tsukuba)

On-shell improvement of the massive Wilson quarks

11:45-12:15 : N. Yamada (RBRC)

Heavy-light Mesons with DWF

Session 11 --- chair: Y. Kuramashi (Tsukuba)

13:45-14:30 : P. Mackenzie (Fermilab)

D and B leptonic and semileptonic decays

14:30-15:00 : M. Nobes (Cornell)

One Loop Perturbation Theory for Heavy Quark Physics

15:00-15:30 : C. Maynard (Edinburg)

Charmed hadron spectrum and decay constants

16;00-18:30 : International Lattice Data Grid

Part I : Status reports (120 minutes; 10-20 minutes each
with 5-10 minutes discussions)

current working status of QCDGrid in UK	C. Maynard (Edinburgh)
UKQCD plans for QCDOC	R. Kenway (Edinburg)
Status of USA Columbia-Riken-BNL	N. Christ (Columbia)
Status of USA SciDAC	R. Brower (Boston)
Status of Japan	A. Ukawa (Tsukuba)
Status of Germany	K. Jansen (NIC/DESY)

Part II: Discussions (30 minutes)

=====

Friday, Sep. 24

Session 12 --- chair: A. Kennedy (Edinburgh)

9:00- 9:45 : K. Jansen (NIC/DESY)

Comparing overlap and Wilson twisted mass fermions

9:45-10:15 : A. Shindler (DESY)

Quenched Scaling tests of Wilson twisted mass fermions

Session 13 --- chair: R. Kenway (Edinburgh)

10:45-11:15 : M. Ilgenfritz (Humboldt)

The limits of the Aoki phase with $N_f=2$ Wilson fermions
at zero and finite temperature

11:15-12:00 : I. Montvay (DESY)

Dynamical Wilson twisted mass fermions

12:00- : A. Ukawa (Tsukuba) Closing remark

Informal workshop on "Twisted mass QCD and phase structure
of QCD with Wilson-type quarks" in the afternoon.

Sinya AOKI:

"Twisted mass QCD, $O(a)$ improvement and WCPT"

Shoji Hashimoto:

"Experiences at $N_f=3$ "

Karl Jansen:

"Scalling in the Schwinger model"

Istvan Montvay:

"More unquenched twisted mass quarks: twist angle, split doublets etc"

Andrea Shindler:

"GN model with the twisted mass Wilson fermion"

Akira Ukawa:

"Parity-broken phase : a new perspective on past experience"

12.1.2 参加者リスト

国外 22 名、国内 26 名、計 48 名

氏名	所属
Steven Gottlieb	Indiana University
Alan Irving	University of Liverpool
Paul Mackenzie	Fermi National Laboratory
Karl Jansen	NIC/DESY Zeuthen
Christine Davies	University of Glasgow
Chris Sachrajda	University of Southampton
Istvan Montvay	DESY Hamburg
Richard Brower	Boston University zu Berlin
Norman H. Christ	Columbia University
Ting-Wai Chiu	National Taiwan University
Ernst-M. Illgenfritz	Humboldt-Universitaet zu Berline
Andrea Shindler	NIC/DESY Zeuthen
Weonjong Lee	Seoul National University
Tilo Wettig	University of Regensburg
Christopher A. Aubin	Columbia University
Robert Edwards	Jefferson Laboratory
Matthew Nobes	Cornell University
Anthony D Kennedy	The University of Edinburgh
Richard Kenway	The University of Edinburgh
Craig McNeile	University of Liverpool
Christopher Maynard	The University of Edinburgh
山田憲和	理研 BNL 研究センター
筒井直人	KEK
太田滋生	KEK
金谷和至	筑波大学
青木慎也	筑波大学
橋本省二	KEK
梅田貴士	京大基研
小川兼司	KEK / 総合研究大学院大学
大川正典	広島大学
石川健一	広島大学
谷口裕介	筑波大学
野秋淳一	理研
中島日出雄	宇都宮大学
石塚成人	筑波大学
蔵増嘉信	筑波大学

吉江友照	筑波大学
松古栄夫	KEK
武田真滋	筑波大学
石川智己	筑波大学
宇川彰	筑波大学
関戸暢	金沢大学
加堂大輔	名古屋大学
中村庸介	筑波大学
深谷英則	京都大学
出淵卓	金沢大学
菊川芳夫	名古屋大学
Oliver Baer	筑波大学

12.2 第2回セミナー "From actions to experimentk"

12.2.1 プログラム

"From Actions to Experiment"

The 2nd International Lattice Field Theory Network Workshop

07 March - 10 March, 2005

e-Science Institute, 15, South College Street, Edinburgh, UK

=====

Monday 7 March

09:30 R Kenway

"Welcome & Introduction to the 2nd ILFTN Workshop"

Session 1 "Flavour physics and its experimental impact I"

Chairperson: R Kenway

09:45 S Hashimoto

"Pion and kaon form factors from unquenched QCD"

1:00 C Kim

"K \rightarrow pi pi decay calculation with two-pion final state"

11:45 J Noaki

"Kaon matrix elements of electroweak penguins with $N_f=2$ DWF"

Session 2 "Physics with chirally symmetric actions"

Chairperson: N Christ

14:00 C Maynard

"Early experiences with domain-wall QCD on QCDOC"

14:45 Y Taniguchi

"Schroedinger functional formalism with domain-wall fermion"

16:00 S Ohta

"RBC calculations of nucleon matrix elements with DWF"

16:45 S Aoki

"Neutron electric dipole moment with domain-wall QCD"

17:30 T Blum

"Domain wall fermion calculation of B_K and the neutron electric dipole moment"

=====

Tuesday 8 March

Session 3 "The improved staggered quark physics programme I"

Chairperson: P Mackenzie

09:00 E Follana

"Eigenvalues"

09:45 A Hart

"Topology"

10:00 G Akemann

"Dirac Operator Eigenvalues from Field Theory"

11:00 W Lee

" B_K , B_7 , B_8 and chiral Ward identities"

11:45 E Gregory

"Flavour Singlets"

Session 4 "Flavour physics and its experimental impact II"

Chairperson: S Hashimoto

14:00 T Kayaba

"Charmed mesons with relativistic heavy quark action in two-flavor full QCD"

14:30 C. Davies/P. Mackenzie

"Update on heavy quark physics results with dynamical improved staggered quarks"

16:00 N Yamada

"Perturbative renormalization of $\Delta B = 2$ four-fermi operator with a relativistic heavy quark action"

16:30 Y Kuramashi

"Scaling study of relativistic heavy quark action applied to b quark in quenched QCD"

17:15 N Christ

"Heavy Quark Physics without Perturbation Theory"

=====

Wednesday 9 March

Session 5 "Physics with chirally symmetric actions II"

Chairperson: K Bowler

09:00 T Izubuchi

"EM splitting in hadron spectrum and prospects for muon $g-2$ light-by-light calculation"

09:45 O Baer

"Ginsparg-Wilson quarks on a staggered sea"

Session 6 "The improved staggered quark physics programme II"

Chairperson: C Davies

11:00 D Richards

"Hadron spectrum from domain-wall valence quarks on a staggered sea"

11:30 G Fleming

"Hadron structure from domain-wall valence quarks on a staggered sea"

12:00 Q. Mason

"The determination of α_s "

Session 7 "Algorithms, machines and the datagrid"

Chairperson: D Richards

14:00 B Joo

"Continued fraction bag of tricks"

14:45 M Clark

"2+1 flavour simulations with RHMC"

16:00 P. Mackenzie

"Clusters for a dollar per Mflops"

16:45 P Boyle

"Status report on QCDOC"

17:30 T Yoshie

"Overview of lattice QCD data sharing"

=====

Thursday 10 March

Session 8 "The improved Wilson quark physics programme"

Chairperson: S Aoki

09:00 S Aoki

"Introduction"

09:15 T Ishikawa

"Update on the joint CP-PACS-JLQCD $N_f = 2+1$ program"

10:00 S Takeda

"Wilson chiral perturbation theory for $N_f=2+1$ "

11:30 A Ukawa

"The PACS-CS Project and the improved Wilson quark physics program"

12:15 D Richards

"Plans for the 3rd ILFTN Workshop"

=====

12.2.2 参加者リスト

日本から 18 名、その他 35 名、計 53 名

氏名 所属

Gernot Akemann	Brunel University
Ian Allison	University of Glasgow
David Antonio	University of Edinburgh
Sinya Aoki	University of Tsukuba
Oliver Baer	University of Tsukuba
Gunnar Bali	University of Glasgow
Tom Blum	University of Connecticut
Kenneth Bowler	University of Edinburgh
Barak Bringoltz	University of Oxford
Francis Bursa	Oxford University
Norman Christ	Columbia University
Michael Clark	University of Edinburgh
Nigel Cundy	University Wuppertal
Christine Davies	University of Glasgow
Chris Dawson	BNL
Alex Dougall	University of Glasgow
George Fleming	Yale University
Eduardo Dollana	University of Glasgow
Eric Gregory	University of Liverpool
Alistair Hart	University of Edinburgh
Shoji Hashimoto	KEK
Rodger Horsley	University of Edinburgh
Tomomi Ishikawa	University of Tsukuba
Ken-Ichi Ishikawa	Hiroshima University
Naruhito Ishizuka	University of Tsukuba
Taku Izubuchi	BNL
Balint Joo	University of Edinburgh
Andreas Juettnner	Southampton University
Kazuyuki Kanaya	University of Tsukuba
Yasuhisa Kayaba	University of Tsukuba
Richard Kenway	University of Edinburgh
Changhoan Kim	University of Southampton
Yoshinobu Kuramashi	University of Tsukuba
Weonjong Lee	Seoul National University
Quentin Mason	University of Cambridge
Hideo Matsufuru	KEK
Christopher Maynard	University of Edinburgh
Craig McNeile	University of Liverpool
Jun Noaki	University of Southampton
Shigemi Ohta	KEK
Masanori Okawa	Hiroshima University

David Richards	Jefferson Lab
Chris Sachrajda	University of Southampton
Zbigniew Sroczynski	University of Liverpool
Sinji Takeda	University of Tsukuba
Yusuke Taniguchi	University of Tsukuba
Naoto Tsutsui	KEK
Robert Tweedie	University of Edinburgh
Akira Ukawa	University of Tsukuba
Ruth Van de Water	Fermilab
Norikazu Yamada	KEK
Azusa Yamaguchi	University of Glasgow
Tomoteru Yoshie	University of Tsukuba

12.3 第3回セミナー "Towards physics at the physical quark masses"

12.3.1 プログラム

"Future Opportunities:

Ab Initio Calculations at the Physical Quark Masses"

3rd International Lattice Field Theory Network Workshop

October 3-6, 2005

Jefferson Lab, Newport News, USA

=====

MONDAY October 3rd

Electroweak and Heavy Quark Physics - I (Robert Edwards)

8:45 - 9:00 AM Anthony Thomas

Welcome

9:00 - 9:30 AM Christine Davies

Heavy Quark Physics with NRQCD

9:30 - 10:00 AM Matthew Nobes

Quark Masses from Lattice Perturbation Theory

10:00 - 10:30 AM John Laiho

Staggered Chiral Perturbation Theory for Heavy-light Form Factors

Electroweak and Heavy Quark Physics - II (Christine Davies)

11:00 - 11:45 AM Yoshinobu Kuramashi

Heavy Quark Physics with Relativistic Heavy Quarks

11:45 - 12:15 PM Norikazu Yamada

Perturbative $O(a)$ Improvement of 4-quark operators with
Relativistic Heavy Quarks

12:15 - 12:45 PM HueyWen Lin

Non-perturbative determination of the Fermilab parameters

Electroweak and Heavy Quark Physics - III (Paul Mackenzie)

2:15 - 2:45 PM Jozef Dudek

Radiative Transitions in Charmonium

2:45 - 3:15 PM Takeshi Yamazaki

$I = 3/2$ kaon weak matrix elements with non-zero total momentum

3:15 - 3:45 PM Shu Li

$N_f = 2$ DWF $I=1/2$ rule: Electroweak penguins

Electroweak/Formal Developments (Yoshinobu Kuramashi)

4:15 - 4:45 PM Saul Cohen

BK on 2+1 flavor DWF lattices

4:45 - 5:15 PM Yusuke Taniguchi

Two dimensional $N=(2,2)$ super Yang-Mills theory on the lattice
via dimensional reduction

5:15 - 5:45 PM Kit Wong

Perturbative expansions of Wilson Loops in Full QCD from MC Simulations

=====

TUESDAY October 4th

Chiral Behaviour - I

8:30 - 9:15 AM Sinya Aoki

Wilson ChPT and the Bending Phenomenon in Twisted-mass Lattice QCD

9:15 - 9:45 AM Brian Tiburzi

Twisting Form Factors out of Chiral Perturbation Theory

9:45 - 10:15 AM Ross Young

Partially-quenched chiral extrapolations of the vector meson

Chiral Behaviour - II (Rich Brower)

10:45 - 11:15 AM Chris Aubin

Staggered Chiral Perturbation Theory

11:15 - 12:30 PM

Report/Discussion on ILDG Developments

Ukawa, Detar/Watson, Jansen, Yoshie, Pleiter, Brower, Maynard

Machines - I (Bob Mawhinney)

2:45 - 3:15 PM Shoji Hashimoto

The next KEK machine

3:15 - 3:45 PM James Osborn

Lattice QCD on a Blue Gene/L

Machines - II (TBA)

4:15 - 5:00 PM Bob Mawhinney

Results from QCDOC
5:00 - 5:45 PM Chip Watson/Paul Mackenzie
US DOE Facilities Initiative
=====

WEDNESDAY October 5th
Hadronic and Nuclear Physics - I (Jimmy Juge)
8:30 - 9:00 AM Kiyoshi Sasaki
Excited Baryon Spectroscopy from Quenched Lattice QCD
9:00 - 9:30 AM Eric Gregory
Computation of Mass of Pseudoscalar Singlet Meson
9:30 - 10:00 AM Naoto Tsutsui
Kaon and Pion Form Factor in two-flavor QCD

Hadronic and Nuclear Physics - II (David Richards)
10:30 - 11:15 AM Silas Beane
Lattice QCD for Nuclear Physics
11:15 - 12:00 PM Anthony Thomas
Precise Determination of the Strangeness Electric Charge
Radius of the Proton

1:00 - 2:30 PM Laboratory Tour

Hadronic and Nuclear Physics - III (Balint Joo)
3:00 - 3:30 PM Dirk Pleiter
Nucleon Form Factors from $N_f = 2$ Clover Simulations
3:30 - 4:00 PM Eigo Shintani
Neutron electric dipole moment from lattice QCD

Hadronic and Nuclear Physics - IV (Karl Jansen)
4:30 - 5:00 PM David Lin
Lattice OPE and higher-moments of structure functions
and distribution amplitudes
5:00 - 5:30 PM Kostas Orginos
Hadron structure with domain wall fermions - I
5:30 - 6:00 PM George Fleming
Hadron structure with domain wall fermions - II
=====

THURSDAY October 6th
Algorithmic Opportunities - I (Mike Peardon)
8:30 - 9:00 AM Andrei Alexandru
Finite-density Simulations via Canonical Approach
9:00 - 9:30 AM Karl Jansen

Towards realistic Simulations of Lattice-QCD:
the Approach of Twisted Mass Fermions
9:30 - 10:00 AM Carsten Urbach
Comparison of twisted-mass vs. overlap dynamical simulations

Algorithmic Opportunities - II (Sinya Aoki)
10:30 - 11:00 AM Michael Clark
The RHMC Algorithm
11:00 - 11:30 PM Jimmy Juge
Computations of all-to-all Propagators
11:30 - 12:15 PM Rich Brower
New Algorithms in the Petaflop Era
12:15 PM Sinya Aoki
Closing Remarks and Announcement of 4th ILFTN Workshop,
Sokendai, Japan, March 8-11, 2006

12.3.2 参加者リスト

日本から 11 名、その他 35 名、計 46 名

氏名 所属

Jozef Dudek	Jefferson Lab
Kostas Orginos	Collage of William and Mary
Yoshinobu Kuramashi	University of Tsukuba
Naoto Tsutsui	KEK
Sinya Aoki	University of Tsukuba
Andrei Alexandru	University of Kentucky
Robert Edwards	Jefferson Lab
Dirk Pleiter	DESY
Eric Gregory	University of Liverpool
David Richards	Jefferson Lab
Paul Mackenzie	Fermilab
Norikazu Yamada	KEK
Eigo Shintani	University of Tsukuba
Takeshi Yamazaki	RBRC
Ross Young	Jefferson Lab
Matthew Nobes	Cornell University
HueyWen Lin	Columbia University
Meifeng Lin	Columbia University
Kiyoshi Sasaki	University of Tsukuba
Richard Brower	Boston University

Brian Tiburzi	Duke University
Saul Cohen	Columbia University
Tomoteru Yoshie	University of Tsukuba
Balint Joo	Jefferson Lab
Kit Yan Wong	University of Glasgow
Karl Jansen	NIC/DESY
Christopher Aubin	Columbia University
Michael Clark	Boston University
Chip Watoson	Jefferson Lab
Jimmy Juge	Carnegie Mellon University
Yusuke Taniguchi	University of Tsukuba
Carsten Urbach	University of Liverpool
George Fleming	Yale University
Hideo Matsufuru	KEK
Tomomi Ishikawa	University of Tsukuba
Christine Davies	University of Glasgow
James Osborn	Boston University
Shoji Hashimoto	KEK
John Laiho	Fermilab
Mike Peardon	Trinity College, Dublin
Anthony Thomas	Jefferson Lab
Silas Beane	Jefferson Lab/UNH
Hrayr Matevosyan	Jefferson Lab/LSU
Shu Li	Columbia University
Robbert Mawhinney	Columbia University
Hovhannes Grigoryan	Jefferson Lab/LSU

12.4 第4回セミナー "Lattice QCD via International Network"

12.4.1 プログラム

"Lattice QCD via International Research Network"

4th ILFTN Workshop

March 8(Wed) -- March 11(Sat), 2006

The Graduate University for Advanced Studies (Sokendai),
Shonan Village Center, Japan

=====

Wednesday 8 March

09:20-09:30 A. Ukawa

Welcome to Sokendai

Session 1 chair : S. Gottlieb

09:30-10:30 I. Montvay

QCD simulations with twisted-mass Wilson quarks
11:00-12:00 T. Ishikawa
Unquenched spectroscopy with dynamical up, down and strange quarks
Session 2 chair : K. Kanaya
14:00-15:00 M. Wingate
Heavy Flavor Physics with 2+1 Flavors of Improved Staggered Quarks
15:00-16:00 P. Mackenzie
Unitarity and the heavy quark expansion in fits of
semileptonic decay amplitudes on the lattice
16:30-17:30 H. W. Lin
Nonperturbatively determined Relativistic Heavy Quark Action
=====

Thursday 9 March
Session 3 chair : I. Montvay
09:30-10:30 C. Maynard
Physics from one year of QCDOC
11:00-12:00 S. Sasaki
Baryon semi-leptonic decay from lattice QCD with domain wall fermions
Session 4 chair : M. Okawa
14:00-15:00 S. Cohen
Zero-Temperature DWF Physics from QCDOC
15:00-16:00 T. Yamazaki
Study of bound state in compact scalar QED
16:30-17:30 R. Brower
The Pomeron and Gauge/String Duality
=====

Friday 10 March
Session 5 chair : R. Brower
09:00-10:00 C. Allton
Asymptotic Scaling and Lattice Artefacts
10:30-11:15 E. Shintani
Neutron EDM with external electric field
11:15-12:00 A. Tawfik
Hadron Properties on the Lattice
12:45-17:30 Excursion to Kamakura
=====

Saturday 11 March
Session 6 chair : P. Mackenzie
09:30-10:15 T. Kaneko
 $K_{\{13\}}$ semileptonic form factor with two flavors of
dynamical domain-wall quarks
10:15-11:15 A. Ukawa

Looking back and looking ahead
 - Lattice QCD in an international setting -
 11:45-12:45 S. Gottlieb
 Update on current status and future plans for MILC and
 FNAL/MILC projects

=====

12.4.2 参加者リスト

国外：13 名、国内 19 名、計 32 名

 氏名 所属

Chris Allton	University of Wales Swansea
Sinya Aoki	University of Tsukuba
Richard C. Brower	Boston University
Michael Clark	Boston University
Saul D. Cohen	Columbia University
Steven Gottlieb	Indiana University
Ken-Ichi Ishikawa	Hiroshima University
Tomomi Ishikawa	University of Tsukuba
Kazuyuki Kanaya	University of Tsukuba
Takashi Kaneko	KEK
Yoshinobu Kuramashi	University of Tsukuba
John Laiho	Fermilab
Huey-Wen Lin	Columbia University
Paul B. Mackenzie	Fermilab
Christopher Maynard	University of Edinburgh
Istvan Montvay	DESY
Keiko Murano	University of Tsukuba
Yousuke Nakamura	University of Tsukuba
Masanori Okawa	Hiroshima University
Kiyoshi Sasaki	University of Tsukuba
Shoichi Sasaki	RIKEN BNL Research Center / University of Tokyo
Eigo Shintani	University of Tsukuba
Tomohisa Takimi	Yukawa Institute
Yusuke Taniguchi	University of Tsukuba
Abdel Tawfik	Hiroshima University
Naoto Tsutsui	KEK
Akira Ukawa	University of Tsukuba
Ruth Van de Water	Fermilab
Matthew Wingate	University of Washington

Richard Woloshyn	TRIUMF
Norikazu Yamada	KEK
Takeshi Yamazaki	RIKEN BNL Research Center

13 共同研究 プログラム及び参加者リスト

13.1 筑波ワークショップ "Lattice QCD and Particle Phenomenology"

13.1.1 プログラム

ILFTNetwork Tsukuba Workshop

"Lattice QCD and Particle Phenomenology"

December 6-17, 2004

Monday, 6th, afternoon

Shoji Hashimoto (KEK)

Effects of low-lying eigenmodes in the epsilon regime of QCD

Tuesday, 7th, afternoon

Sinya Aoki (Tsukuba)

Neutron electric dipole moment

Wednesday, 8th, morning

Oliver Baer (Tsukuba)

O(a) improvement in twisted mass QCD for arbitrarily small quark masses

Wednesday, 8th, afternoon --- Physics Dept Seminar ---

Michael Creutz (BNL)

Quarks, gluons, and lattices

Thursday, 9th, morning (from 10:30)

Sinya Aoki (Tsukuba)

Discussion on "Universality of quenched QCD: Wilson vs. KS"

Thursday, 9th, afternoon

Tom Blum (BNL)

Nucleon dipole moments

Friday, 10th, morning

Chris MICHAEL (Liverpool)

Hadronic transitions from the lattice

Friday, 10th, afternoon

Christine Davies (Glasgow)

Heavy quark physics with NRQCD bs and light dynamical quarks

Saturday, December 11, 2004

Belle-lattice Vxb mini-workshop agenda

at KEK, Kenkyu-honkan, 3F seminar room

10:00-10:40 T. Iijima (Nagoya)

Overview of Super-KEKB

10:40-11:20 A. Kronfeld (Fermilab)

Introduction to LQCD, and $B \rightarrow D(*)$ l ν form factors: status and prospects

11:20-11:50 J. Shigemitsu (Ohio)

B \rightarrow π l ν form factors: status and prospects
 13:00-13:30 N. Parslow (Sydney)
 Measurement of $\pi(\rho)$ l ν w/ neutrino recon
 13:30-14:00 T. Hokuue (Nagoya)
 Measurement of $\pi(\rho)$ l ν w/ D^* l ν tag
 14:00-14:30 C. Davies (Glasgow)
 Heavy quark physics with NRQCD bs and ligh dynamical quarks
 14:30- discussions
 15:00- Belle tour

Monday, 13th, morning

Yoshinobu Kuramashi (Tsukuba)

On-shell improvement of the massive Wilson quark action

Monday, 13th, afternoon

Irina PUSHKINA (Hiroshima)

Taylor expansions of hadron screening masses in chemical potential

Tuesday, 14th, morning

Yusuke Taniguchi (Tsukuba)

Schrödinger functional formalism for domain-wall fermion

Tuesday, 14th, afternoon

Andreas Kronfeld (Fermilab)

Heavy-quark Physics in 2+1 Flavor QCD

Wednesday, 15th, morning

Chris Allton (Swansea)

Chiral Extrapolation of the Rho and Nucleon Masses

Wednesday, 15th, afternoon

Jonathan Flynn (Southampton)

Twisted Boundary Conditions

Thursday, 16th, morning (from 10:30)

Michael Creutz (BNL)

Spontaneous CP violation and quark mass ambiguities in
the strong interactions

Thursday, 16th, afternoon

Sadataka Furui (Teikyo)

Unquenched lattice Landau gauge QCD simulation

Friday, 17th, morning

Tomoteru Yoshie (Tsukuba)

Light Hadron Spectrum and Quark Masses in $N_f=3$ QCD

Friday, 17th, afternoon

Junko Shigemitsu (Ohio)

B Physics with NRQCD Heavy and AsqTad Light Quarks

13.1.2 参加者リスト

国外：8 名、国内 23 名、計 31 名

氏名	所属
Chris Michael	University of Liverpool
Michael Creutz	BNL
Junko Shigemitsu	Ohio State University
Andreas Kronfeld	Fermilab
Tom Blum	BNL
Jonathan Flynn	University of Southampton
Christine Davies	University of Glasgow
Chris Allton	University of Swansea
Irina Pushkina	Hiroshima University
Sadataka Furui	Teikyo University
Shigemi Ohta	KEK
Shoji Hashimoto	KEK
Takashi Kaneko	KEK
Naoto Tsutsui	KEK
Hideo Matsufuru	KEK
Norikazu Yamada	KEK
Sinya Aoki	University of Tsukuba
Kazuyuki Kanaya	University of Tsukuba
Akira Ukawa	University of Tsukuba
Naruhito Ishizuka	University of Tsukuba
Tomoteru Yoshie	University of Tsukuba
Yoshinobu Kuramashi	University of Tsukuba
Yusuke Taniguchi	University of Tsukuba
Oliver Baer	University of Tsukuba
Tomomi Ishikawa	University of Tsukuba
Yasuhisa Kayaba	University of Tsukuba
Shinji Takeda	University of Tsukuba
Kiyotomo Ide	University of Tsukuba
Eigo Shintani	University of Tsukuba
Ryuhei Suzuki	University of Tsukuba
Yousuke Nakamura	University of Tsukuba

13.2 奈良ワークショップ ”Perspectives in lattice QCD”

13.2.1 プログラム

October 31 (Monday)

09:15-10:15 Registration

10:15-10:30 Welcome to Nara

10:30-12:00 **Peter Hasenfratz** (Bern)

The fixed point action in QCD: from theory to applications (I)

12:00-14:00 Lunch

14:00-15:30 **Rainer Sommer** (DESY)

$O(a)$ improvement and the SF

November 1 (Tuesday)

09:30-11:00 **Peter Hasenfratz** (Bern)

The fixed point action in QCD: from theory to applications (II)

11:00-13:00 Lunch

13:00-14:30 **Rainer Sommer** (DESY)

Determining fundamental parameters of QCD

14:30-15:00 Coffee Break

15:00-16:00 **Chris Dawson** (BNL)

Dynamical domain wall fermions (I)

November 2 (Wednesday)

09:30-11:00 **Rainer Sommer** (DESY)

Non-perturbative renormalization of HQET

11:00-13:00 Lunch

13:00-14:30 **Peter Hasenfratz** (Bern)

The fixed point action in QCD: from theory to applications (III)

14:30-15:00 Coffee Break

15:00-16:00 **Chris Dawson** (BNL)

Dynamical domain wall fermions (II)

November 3 (Thursday)

09:30-11:00 **Yoshio Kikukawa** (Nagoya)

Ginsparg-Wilson fermions and chiral lattice gauge theories (I)

11:00-13:00 Lunch

13:00-14:30 **Yoshio Kikukawa** (Nagoya)

Ginsparg-Wilson fermions and chiral lattice gauge theories (II)

14:30-15:00 Coffee Break

15:00-16:00 **Leonardo Giusti** (CERN)

QCD applications for Ginsparg-Wilson fermions (I)

November 4 (Friday)

- 09:30-11:00 **Yoshio Kikukawa** (Nagoya)
Ginsparg-Wilson fermions and chiral lattice gauge theories (III)
- 11:00-13:00 Lunch

Free afternoon

November 7 (Monday)

- 10:00-11:00 **Stefan Sint** (Madrid)
Lattice QCD with a chiral twist (I)
- 11:00-13:00 Lunch
- 13:00-14:30 **Steve Sharpe** (Seattle)
Applications of chiral perturbation theory to lattice QCD (I)
- 14:30-15:00 Coffee Break
- 15:00-16:00 **Leonardo Giusti** (CERN)
QCD applications for Ginsparg-Wilson fermions (II)

November 8 (Tuesday)

- 09:30-11:00 **Tony Kennedy** (Edinburgh)
Algorithms for dynamical (chiral) fermions (I)
- 11:00-13:00 Lunch
- 13:00-14:30 **Steve Sharpe** (Seattle)
Applications of chiral perturbation theory to lattice QCD (II)
- 14:30-15:00 Coffee Break
- 15:00-16:00 **Leonardo Giusti** (CERN)
First results in full QCD with the domain decomposition algorithm

November 9 (Wednesday)

- 09:30-11:00 **Guido Martinelli** (Rome)
Phenomenology with lattice QCD (I)
- 11:00-13:00 Lunch
- 13:00-14:30 **Steve Sharpe** (Seattle)
Applications of chiral perturbation theory to lattice QCD (III)
- 14:30-15:00 Coffee Break
- 15:00-16:00 **Stefan Sint** (Madrid)
Lattice QCD with a chiral twist (II)

November 10 (Thursday)

09:30-11:00 **Guido Martinelli** (Rome)
Phenomenology with lattice QCD (II)

11:00-13:00 Lunch

13:00-14:30 **Tony Kennedy** (Edinburgh)
Algorithms for dynamical (chiral) fermions (II)

14:30-15:00 Coffee Break

15:00-16:00 **Stefan Sint** (Madrid)
Lattice QCD with a chiral twist (III)

November 11 (Friday)

09:30-11:00 **Tony Kennedy** (Edinburgh)
Algorithms for dynamical (chiral) fermions (III)

11:00-13:00 Lunch

13:00-14:30 **Guido Martinelli** (Rome)
Phenomenology with lattice QCD (III)

Farewell**13.2.2 参加者リスト**

国外 : 13 名、国内 : 32 名、計 45 名

氏名	所属
Aoki, Sinya	University of Tsukuba
Bae, Taegil	Seoul National University
Cossu, Guido	Scuola Normale Superiore, Pisa
Dawson, Chris	Brookhaven National Laboratory
de Beauce, Vivien	Hokkaido University
Fukaya, Hidenori	YITP, Kyoto University
Giusti, Leonardo	CERN
Hasenfratz, Peter	University of Bern
Hashimoto, Shoji	KEK
Ishikawa, Tomomi	University of Tsukuba
Kanamori, Issaku	Hokkaido University
Kanaya, Kazuyuki	University of Tsukuba
Kaneko, Takashi	KEK
Kennedy, Anthony D.	University of Edinburgh
Kikukawa, Yoshio	Nagoya University
Kim, Jongjeong	Seoul National University

Kuramashi, Yoshinobu	University of Tsukuba
Martinelli, Guido	Roma La Sapienza
Matsufuru, Hideo	KEK
Murano, Keiko	University of Tsukuba
Nakamura, Yousuke	University of Tsukuba
Namekawa, Yusuke	Nagoya University
Narita, Keisuke	University of Tsukuba
Negishi, Shunsuke	Kyoto University
Oanh, Nguyen Hoan	University of Tsukuba
Ogawa, Kenji	KEK
Okamoto, Masataka	KEK
Onogi, Tetsuya	YITP, Kyoto University
Pushkina, Irina	Hiroshima University
Sasaki, Kiyoshi	University of Tsukuba
Sekido, Toru	Kanazawa University
Sharpe, Stephen R.	University of Washington
Shinno, Yasuhiko	Saga University
Shintani, Eigo	University of Tsukuba
Sint, Stefan	Universidad Autonoma de Madrid
Sommer, Rainer	DESY
Tagliacozzo, Luca	Universidad de Barcelona
Taniguchi, Yusuke	University of Tsukuba
Tsutsui, Naoto	KEK
Ukawa, Akira	University of Tsukuba
Ukita, Naoya	University of Tsukuba
Witzel, Oliver	Humboldt Universitaet
Yamada, Norikazu	KEK
Yoneyama, Hiroshi	Saga University
Yoshie, Tomoteru	University of Tsukuba
