

情報処理概論

第1回 本講義について

情報基盤研究開発センター 谷本 輝夫

今回の内容

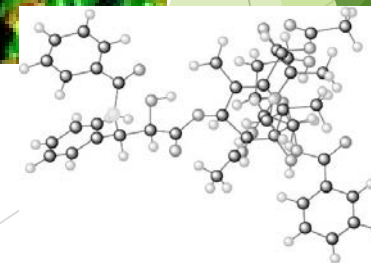
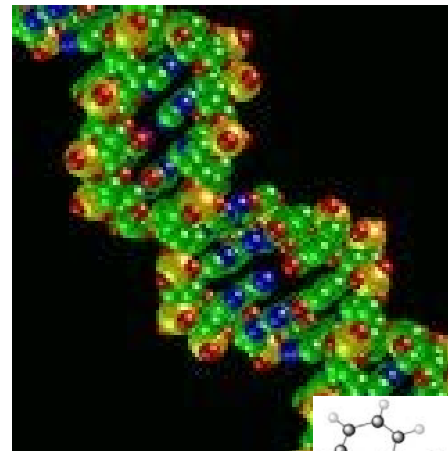
- ▶ 講義の目的
- ▶ 講義の基本情報
- ▶ 講義予定
- ▶ プログラムの作成手順
- ▶ レポート提出の練習

講義の目的

- ▶ コンピュータを使って問題を解決する手段として、
自分でプログラムを作り、実行する
ための知識を身につける

- ▶ 問題？

- ▶ 膨大な分子の組み合わせの中から、
目的に合った機能を持ちそうなもの
を選び出したい
- ▶ 明日の天気を出来るだけ正確に知りたい
- ▶ もっと燃費の良いエンジンを開発したい
- ...



この講義で習得すること

- ▶ プログラミングの基礎
- ▶ プログラムを記述するための“言語”
 - ▶ 本講義では Fortran90 を習得
- ▶ プログラムを編集、管理、実行するための道具の使い方
 - ▶ プログラムの作成、実行
 - ▶ ファイルの管理
- ▶ コンピュータの基本知識

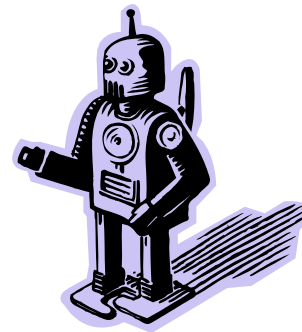
```
program sample1
implicit none
integer :: i, j, n

write(*, *) 'Enter N : '
read(*, *) n
if (n <= 0) then
write(*, *) 'Error: N must be > 0'
else
do i = 1, n
do j = 1, n
write(*, *) i, ' * ', j, ' = ', i * j
end do
end do
end if
stop
end program
```



コンピュータとプログラム

- ▶ コンピュータ
 - ▶ 与えられた手順 (=プログラム) の通りに処理を行う機械
- ▶ コンピュータの機械 (ハードウェア) としての計算機能
 - ▶ 四則演算
 - ▶ 条件判断 (値の大小)
- ▶ プログラム
 - ▶ 問題を解決するための処理の手順



プログラムがなければ、コンピュータはただの箱

プログラムの例

```
program sample1
implicit none
integer :: i, j, n

write(*, *) 'Enter N :'
read(*, *) n
if (n<= 0) then
  write(*, *) 'Error: N must be > 0'
else
  do i = 1, n
    do j = 1, n
      write(*, *) i, ' x', j, ' = ', i * j
    end do
  end do
end if
stop
end program
```

ディスプレイにメッセージを表示

変数 n の値をキーボードから入力

変数 n が 0 以下の場合

エラーメッセージ

そうでなければ

繰り返し i = 1 ~ n

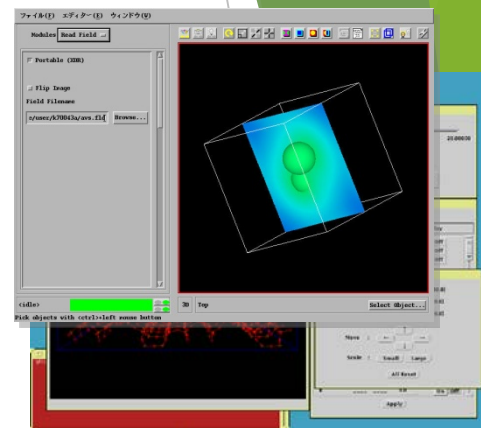
繰り返し j = 1 ~ n

ディスプレイに
1 x 1 = 1
のように i x j の計算結果を表示

そもそも、 何故自分でプログラムを作る？

- ▶ 例えば分子シミュレーション
 - ▶ 既に数多くのプログラムが市販されている
 - ▶ 分子軌道法 (Gaussian, MOPAC, GAMESS等)
分子動力学法 (MASPHYC等)、...
 - ▶ データを入力して実行するだけなので、簡単、便利

- ▶ しかし、最新の研究に対応できない
 - ▶ 新しい理論
 - ▶ 新しい手法
 - ▶ 未知の現象



今回の内容

- ▶ 講義の目的
- ▶ 講義の基本情報
- ▶ 講義予定
- ▶ プログラムの作成手順
- ▶ レポート提出の練習

講義に用いる資料

- ▶ 講義資料：moodleに毎回掲載
 - ▶ <https://moodle.s.kyushu-u.ac.jp/>
 - ▶ コースを検索する「情報処理概論」
 - ▶ 「2019年度夏学期・水3水4・情報処理概論（谷本 輝夫）」
 - ▶ 「私を登録する」をクリック
- ▶ 参考資料
 - ▶ Fortran90プログラミング: 富田博之著
 - ▶ <https://web.s.kyushu-u.ac.jp/~2167047393/F90/sec0.html>
 - ▶ 書籍は新しい版になっている
 - ▶ Fortran90/95プログラミング 富田 博之, 齋藤 泰洋 (著)
- ▶ Fortran90 で Web 検索すれば、幾らでも解説がある

成績評価

- ▶ 出席（moodle）：開始10分以降は遅刻 → 出席点は半分
- ▶ レポート：プログラム作成 → moodleで提出
 - ▶ ほぼ毎週の課題あり
 - ▶ レポートとして、大きめのプログラム提出（2～3回程度）
- ▶ 筆記試験：期末（1回）
 - ▶ 試験内容
 - ▶ 授業内容に含まれる UNIX, Fortran の基礎
 - ▶ レポート等で作成したプログラムに関する問題
- ▶ 採点
 - ▶ 基本点（出席とレポート）30点 + 試験の点数（70点）
 - ▶ レポートをまともに提出していない場合は 不合格 になり得る

質問・問い合わせ先

- ▶ 口頭で質問
 - ▶ 講義中、随時
 - ▶ 講義前後の休み時間
- ▶ 公開しにくい質問はメールでもOK
 - ▶ 情報基盤研究開発センター 谷本 輝夫 (たにもと てるお)
E-mail: tteruo@kyudai.jp
- ▶ 但し、反応は良くないかも・・・

今回の内容

- ▶ 講義の目的
- ▶ 講義の基本情報
- ▶ 講義予定
- ▶ プログラムの作成手順
- ▶ レポート提出の練習

講義予定

第1回	本講義について	プログラムの翻訳と実行
第2回	Fortran の基本 1	Fortran の基本 2
第3回	制御文	配列 1
第4回	配列 2	ファイル入出力
第5回	ここまでのおさらい	関数
第6回	サブルーチン	演習 1
第7回	プログラムの高速化	演習 2
第8回	演習 3	演習 4

今回の内容

- ▶ 講義の目的
- ▶ 講義の基本情報
- ▶ 講義予定
- ▶ プログラムの作成手順
- ▶ レポート提出の練習

プログラム作成の環境

ah.s.kyushu-u.ac.jp

- ▶ 教育用システムのアプリケーションサーバ
 - ▶ 主にプログラム開発を目的としたサーバ
 - ▶ 商用パブリッククラウド（AWS）
 - ▶ 論理CPUコア数 128、メモリ 2TB、
 - ▶ ストレージ 3TB（ホーム領域）,1TB（共有領域）
 - ▶ 端末ソフトからsshアクセス：ah.s.kyushu-u.ac.jp
 - ▶ Webブラウザからhttpsアクセス：web.s.kyushu-u.ac.jp
- ▶ PCからネットワーク経由で接続して利用
 - ▶ MacOSの「ターミナル」
 - ▶ Windowsの「Tera Term」、「Putty」等

UNIX とは

- ▶ サーバやスーパーコンピュータで使われているOS
 - ▶ 1 台の計算機を複数のユーザで同時利用させるのが得意
- ▶ OS = Operating System
 - ▶ 計算機の基本的な動作を担当
 - ▶ ユーザとのやりとり、計算機の管理、 ...
 - ▶ OSの種類：UNIX, Windows, MacOS, (Android, iOS) ...
- ▶ UNIX と Windows や MacOS との違い：
 - ▶ 主にキーボードで操作・・・だったが、殆ど違いなし
 - ▶ キーボード（コマンド）で操作できる
(⇔ Windows や MacOS ではマウス操作が主)

九州大学の凄いコンピュータ

▶ スーパーコンピュータ ITO

- ▶ <https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/ITO/>
- ▶ 総CPUコア数： 76608 コア
- ▶ 総理論演算性能： 10.43 PFLOPS
- ▶ 総メモリ容量： 433 TB
- ▶ 共有ストレージ容量： 24.6 PB

▶ 研究用

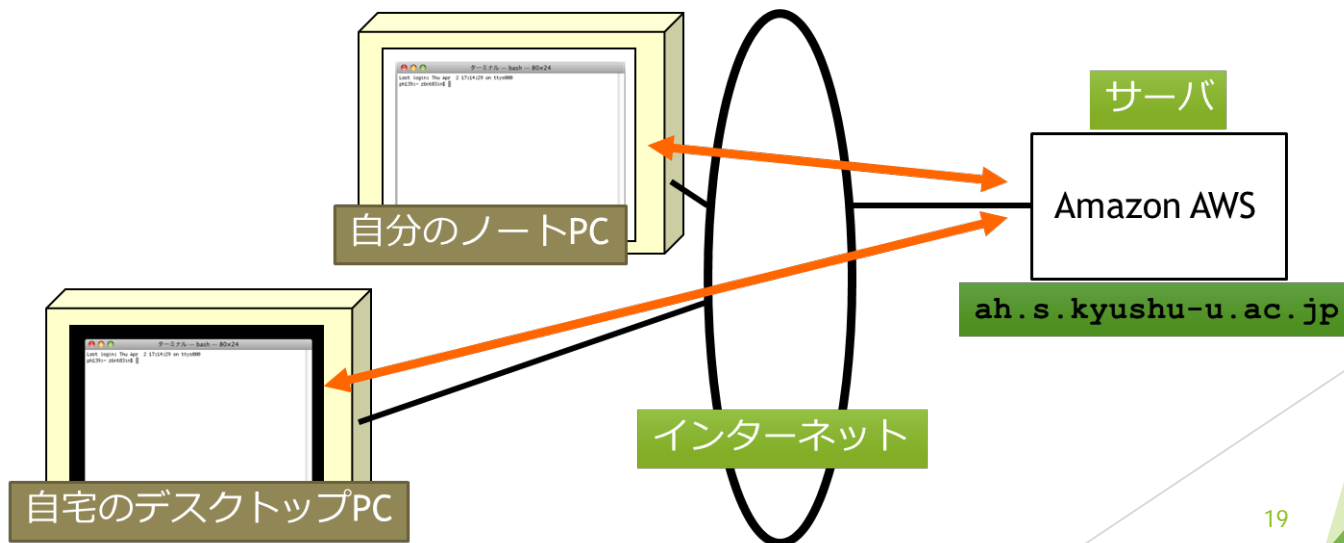
- ▶ 全国の研究者（教員， 研究員， 学生）が利用
- ▶ みなさんは， 研究室配属後に利用申請すると利用可能
- ▶ 講義で習得する UNIX や Fortran の知識があれば活用可能

UNIX の利用開始から終了まで

- ▶ サーバへのログイン
 - ▶ パスワードによる認証
- ▶ 作業
 - ▶ ファイル操作、プログラム作成・翻訳・実行等
- ▶ サーバからのログアウト

サーバへのログイン

- ▶ PC上で接続用ソフトウェア（端末エミュレータ）を使いネットワーク上のサーバに接続
 - ▶ あたかも、サーバを直接操作しているように操作可能
 - ▶ 同時に複数の利用者が利用可能



ahへのアクセス手段

▶ ahのシェルへの接続

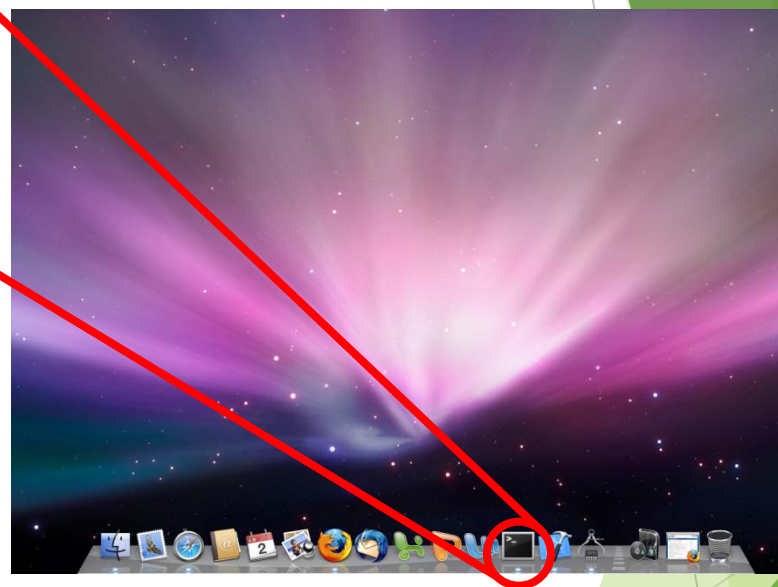
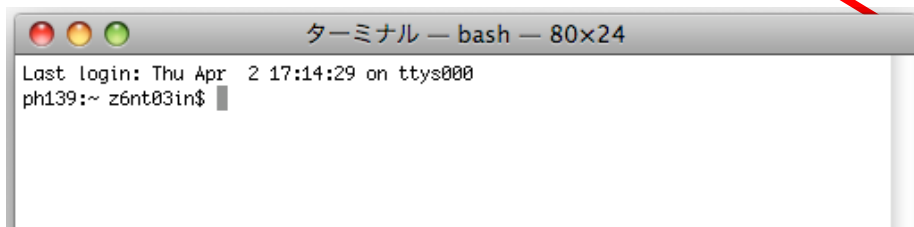
- ▶ Mac: 端末エミュレータ「ターミナル」を使用
- ▶ Win: Tera Term あるいは Putty を使用
 - ▶ Tera Term の入手 : <https://ja.osdn.net/projects/ttssh2/>
 - ▶ Putty の入手 : <https://www.putty.org/>

▶ ahとのファイル転送 次のソフトをインストール

- ▶ Mac: FileZilla <https://filezilla-project.org/>
 - ▶ 使い方 : <https://techacademy.jp/magazine/2447>
- ▶ Win: WinSCP <https://winscp.net/eng/docs/lang:jp>
 - ▶ 使い方 : <https://techacademy.jp/magazine/2567>

[Mac] ターミナルによる接続手順

- ▶ デスクトップでアイコンをクリック
- ▶ この画面が出てくる



- ▶ \$ の後ろに、右のコマンドを入力して改行

```
ssh -l <SSO-KID> ah.s.kyushu-u.ac.jp
```

- ▶ Password: と表示されたら SSO-KID のパスワードを入力

[Win] Tera Term による接続手順

Tera Term: New connection

TCP/IP Host: ah.s.kyushu-u.ac.jp

History

Service: Telnet TCP port#: 22

SSH SSH version: SSH2

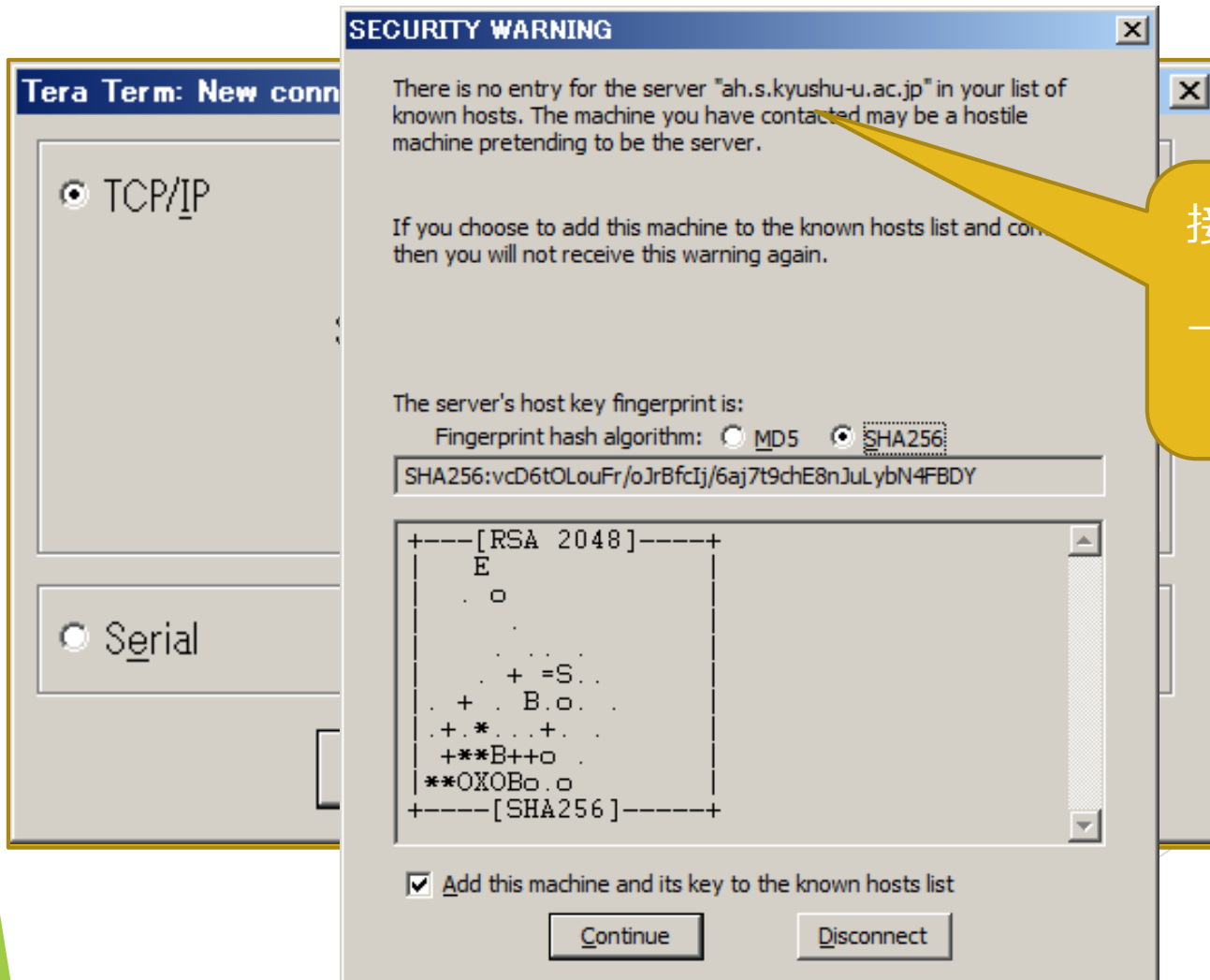
Other Protocol: UNSPEC

Serial Port: COM1: 通信ポート (COM1)

OK Cancel Help

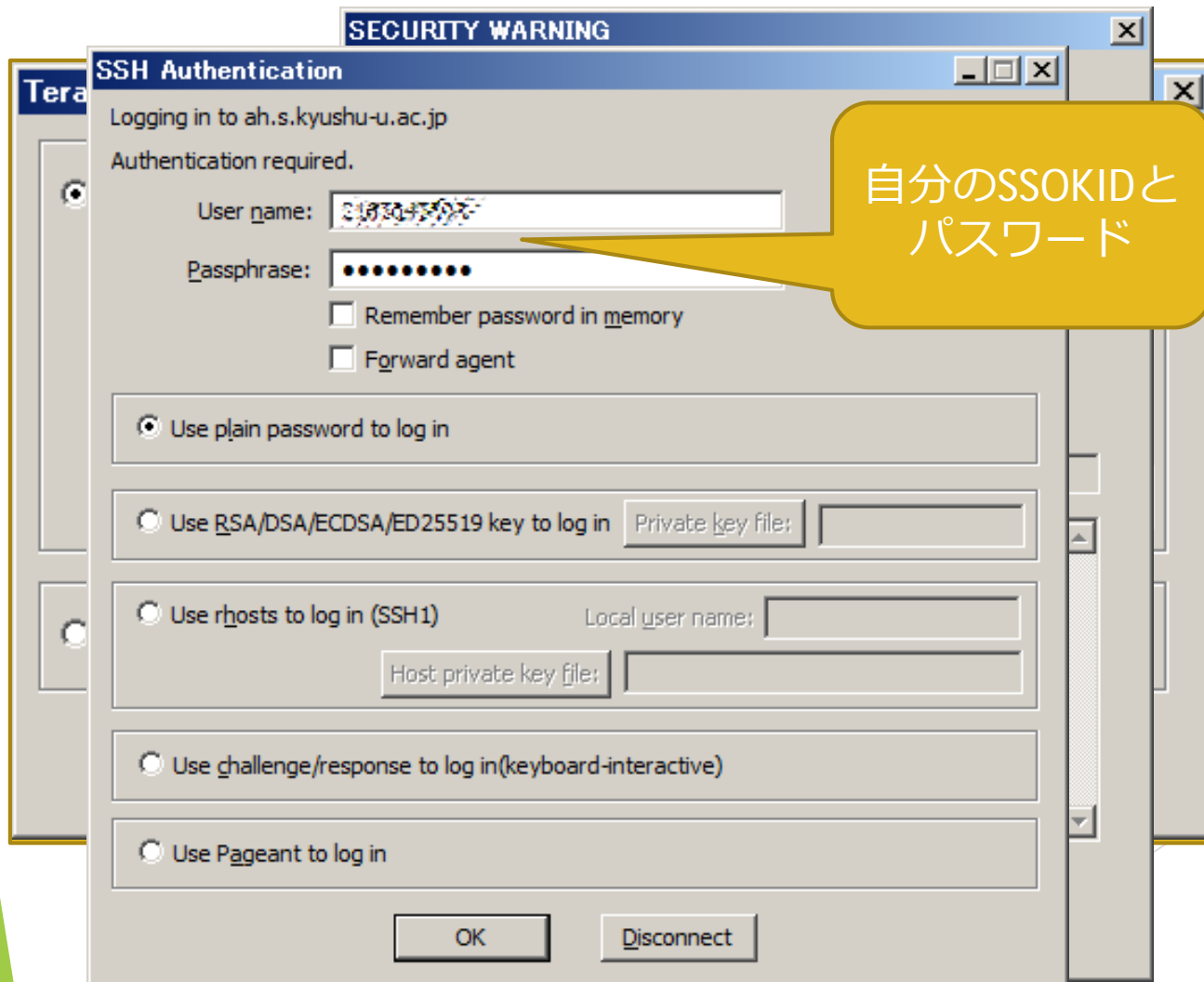
接続先アドレス

[Win] Tera Term による接続手順

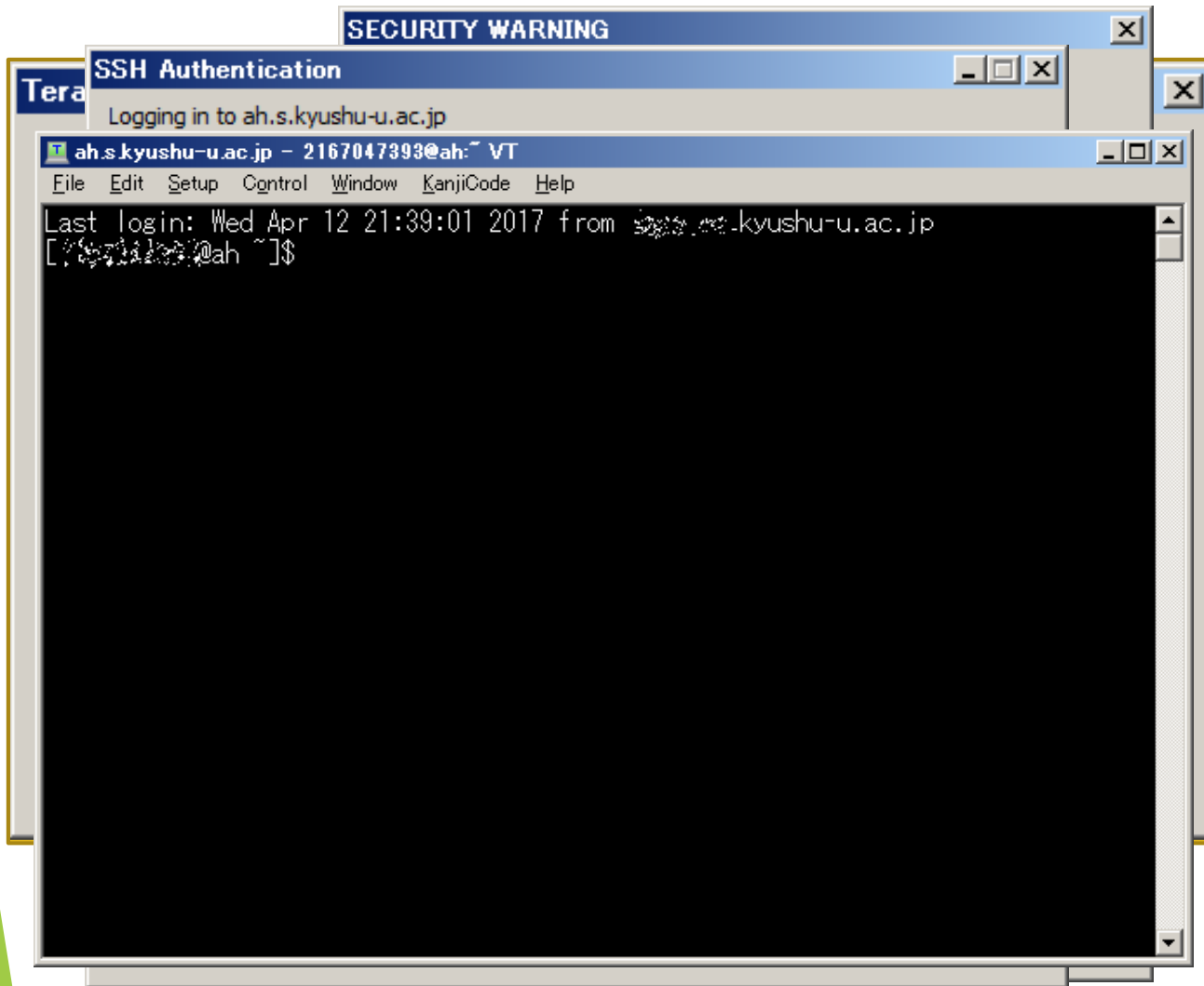


接続先アドレスの
確認として、
一度だけこの画面
が表示される

[Win] Tera Term による接続手順



[Win] Tera Term による接続手順



UNIXのコマンド入力

- ▶ プロンプトが表示されている = コマンド入力 OK
 - ▶ 講義資料では、これ以降は \$ と表記する
- ▶ 基本的なコマンドの形式
コマンド名 (オプション) (ファイル名やディレクトリ名)
 - ▶ 例) `$ pwd` `$ ls -l` `$ less test.f90`
 - ▶ 入力が終わったら、改行キーで実行
- ▶ 打ち間違えたら
 - ▶ deleteで一文字消去
 - ▶ C-u (controlキーを押しながらuを押す) で一行消去

コマンド入力時の便利な操作

キー操作	機能
→	カーソルを一つ右に移動
←	カーソルを一つ左に移動
C-a	左端に移動
C-e	右端に移動
C-u	全部削除
C-k	カーソルから右側を切り取り
C-y	直前に切り取った部分を貼り付け
↑ or C-p	実行したコマンド履歴の古い方へ
↓ or C-n	実行したコマンド履歴の新しい方へ
TABキー	コマンドやファイルの補完
C-g	コマンドのキャンセル

プログラムの作成 エディタ : emacs

- ▶ プログラムは、文書ファイルとして作成する。
- ▶ UNIX で文書ファイルを作成する方法 :

```
$ emacs ファイルの名前
```

- ▶ 指定したファイルが存在しなければ新規作成
- ▶ 存在すれば、読み込んで修正
- ▶ 例) test.f90 という名前でプログラムのファイルを作成

```
$ emacs test.f90
```

emacsの使い方

▶ カーソル移動

- ▶ → or C-f 右へ
- ▶ ← or C-b 左へ
- ▶ ↑ or C-p 一行上へ
- ▶ ↓ or C-n 一行下へ
- ▶ C-a 行頭へ
- ▶ C-e 行末へ

▶ 保存・終了

- ▶ 読込 C-x C-f
- ▶ 保存 C-x C-s
- ▶ 終了 C-x C-c
- ▶ 破棄 C-x k
- ▶ 別名保存 C-x C-w
- ▶ 一時的にコマンドへ C-x C-z

▶ Emacsの詳しい使い方、コマンド一覧、tips

- ▶ Googleなどで検索してください

▶ その他のエディタ (vimなど)

- ▶ 使いやすいものを使ってください

サーバからのログアウト

- ▶ exit コマンドによりセッション終了

```
$ exit
```

- ▶ PCのログオフやシャットダウン前に必ずサーバからログアウト
 - ▶ 実行中のプログラムがそのまま残る可能性あり

今回の内容

- ▶ 講義の目的
- ▶ 講義の基本情報
- ▶ 講義予定
- ▶ プログラムの作成手順
- ▶ レポート提出の練習

演習： プログラムの入力と提出

- ▶ 以下のプログラムを入力してファイルに保存

```
program test
  write(*, *) 'Hello, Fortran'
stop
end program
```

- ▶ 保存したファイルを Moodle で提出

演習の手順

- ▶ ah.s.kyushu-u.ac.jp にログインする
- ▶ test.f90 という名前でプログラムの作成開始
- ▶ 前ページのプログラムを入力する
- ▶ ファイルを保存して終了する
- ▶ ファイル転送アプリケーションのインストール
- ▶ ファイル転送アプリケーションで手元のPCに保存
- ▶ Moodle の課題提出リンクから提出

次回

- ▶ UNIXの基本操作
 - ▶ ディレクトリ（フォルダ）の作成
 - ▶ ファイルのコピー、移動、削除
- ▶ プログラムの実行手順