コンピュータ利用の手引き (2019年度版)

1 はじめに

このコンピュータ演習では、プログラミング言語の一つである FORTRAN を使って、材料工学の問 題に取り組む際に助けになるような計算プログラムを作れるようになることを目指す。世の中にはあま たのプログラミング言語があるので、それらを使う時にも役に立つように、FORTRAN 言語特有の文 法事項に触れることは最小限に止め、プログラミング言語が共通に持つ考え方に焦点を合せる。また、 プログラムの作成や実行は、教育用計算機センターの端末にインストールされている cygwin という環 境上で行なう。この資料では、プログラミングを始める前に必要になる計算機の使い方を述べる。

2 プログラム作成の手順

- 1. まずは、プログラムを作成、実行する環境である cygwin を起動する。
 - (a) 端末室のパソコンの電源を投入 (モニタ右脇下部にスイッチ)
 - (b) ログイン画面に user ID とパスワードを入力
 - → しばらく待つと Windows の画面になり、ウェブブラウザが開く
 - (c) Windows の「メニュー」の中から Cygwin をクリック
 - → 再びしばらく待つと cygwin のターミナル (コマンドを入力する窓) が開く
 - (d) cygwin のターミナル (背景色黒) 上で「 startxwin 」と打ち込む
 → 白い背景のターミナル (xterm) が現れたら準備完了
- 2. プログラムコードの作成と実行。
 - (a) 白い背景のターミナル上で、「emacs prog1.f」と打ち込む。
 "prog1.f" の部分はファイルの名前で、自分で好きな名を付けてよい。
 ただし、ファイル名の末尾は ".f" で終るようにする。
 - (b) 新しく開いたウィンドウ上にプログラムコードを打ち込む。例えば最初の例題

uuuuuuprintu*,u'Hello'

ULLLL

を打ち込む。ただしここで「」」は半角スペースを示す記号である。

- (c) 入力が終ったら、Ctrlを押しながらxキーを押し、引き続いて Ctrlを押しながらsと押す。
 (「Ctrlを押しながらxキーを押す」と言うのは長いので以下 "C-x" 等と略記)
 - → emacs のウィンドウ下部に "Wrote /home/s10201/prog1.f" などと表示される。 これで打ち込んだプログラムがディスクに保存される。
- (d) 次に C-x, C-c と打ち込んで emacs を終了する。
- (e) xterm のウィンドウに戻って、「gfortran prog1.f」と打ち込む。 \rightarrow 入力したプログラムが機械語に翻訳 (コンパイル) される。
- (f) xterm 上で「./a.exe」と打ち込むとプログラムは実行される。

コンピュータが期待した通りの動作をすれば、プログラムは完成。うまく行かない時は、上の(a) から (f) を繰返してプログラムを修正する。

- 3. 演習に用いる端末は再起動されるとデータが全てリセットされるので、演習の最後にその日の仕 事を保存する必要がある。保存には USB のメモリースティックを使っても良いし、google ドラ イブも利用できる。
 - なお、cygwin 上で作成したファイルは [ボリューム (C:)] > [Users] > (自分の ID) にある。
 - (a) ログイン後に最初に現われたブラウザ (ELMS のホームページが表示されている) 画面の右 カラムのメニューから「ファイル共有」を選択
 → google ドライブが開く
 - (b) 画面左側にある (+新規) ボタンをクリックし、「ファイルのアップロード」を選択。
 - (c) 自分の ID 名のフォルダから保存したいファイルを選び、google ドライブに保存。
 - (d) ファイルの復元時は、同じく google ドライブを開き、復元したいファイル上でマウスを右 クリックしてダウンロードを選択。
 - (e) ブラウザ下部に現れるメニューに対して [保存] を選ぶ。
 - (f) 次に現れるメニューでは[フォルダを開く]を選択すると、google ドライブに保存したファイ ルが見えるので、cygwin のディレクトリに drag and drop
 - (g) googleドライブ上に「コンピュータ演習」等と名付けたフォルダを作って、その中に関係ファ イルを全て入れておくと良い
- 4. 演習で作成したプログラムは ELMS の授業支援システムを利用して提出する。成績評価は提出 された課題に基いて行われるので、プログラムが完成したらサッサと提出すると良い。
 - (a) ELMS ポータルのトップページ上段のメニューの内、[Group] を選択する。
 - (b)時間割から金曜2限のコンピュータ演習を選択

... 履修登録が済まないと、選択肢に上らないかも知れない。

- (c) 左フレームのメニューから授業支援システム [Moodle] を選択
- (d) 自分の解いている課題を選択。多分最初は「プログラミング入門」
- (e) [課題をプレビューする]を選択
- (f) cygwin 上で作成したプログラムファイルを設問の添付ファイル欄に drag and drop。
 課題の提出は添付ファイルにより行なう。
- (g) ファイルのアップロードの準備ができたら課題ページ最後の [次へ]
 → 課題は一時保存される。翌週の演習で再開できる。
- (h) 課題を全て解いたら、最後に [すべてを提出して終了する]
- 5. 終了操作。

cygwin ターミナル (背景色黒) や xterm(背景色白) を終了するには、「exit」というコマンドを入 力する。「startxwin」を入力したターミナルは、Cygwin/X というウィンドーシステムが稼動中 で busy 状態かも知れない。Cygwin/X を終わらせるには、デスクトップ画面の左上の X の文字 を意匠化したアイコンを右クリックして現われるメニューから exit を選ぶ。emacs を終わらせる には、既に述べたように「C-x C-c」を打鍵すればよい。

作業が全て終ったら、ログアウト(再起動)を忘れずに!

3 UNIXのコマンド

この演習で用いる cygwin は、UNIX と呼ばれる OS を Windows 上でシミュレートするソフトウェ アである。ファイル操作は Windows のファイラー (エクスプローラー) を用いて行うこともできるが、 最小限の UNIX のコマンドを覚えていると便利である。

3.1 ファイル操作のためのコマンドなど

- 1s ファイル名やディレクトリを表示
- 1s -1 ファイル作成日時などのより詳しい情報を表示
- rm (file) ファイルを削除。(file)の所には prog1.f など自分で付けたファイル名を書く。
- mv (*file1*) (*file2*) ファイル名を変更
- cp (file1) (file2) ファイルをコピー
- cat (*file*) ファイルの中身を画面に表示

FORTRAN のプログラムの中では「 end 」と書いても「 END 」と書いても同じことだが、UNIX で は大文字と小文字の入力を区別する。コマンドは一般に小文字が使われる。

ターミナル上でこのようなコマンドを打ち込むのは面倒至極に思われるので、cygwin 上には入力支 援の仕組みがある。その中から二つを紹介する。一つ目は「コマンド履歴」の記録機能で、コンピュー タは入力したコマンドを覚えているというものである。上向きカーソルキー(↑)を打鍵すると、この 履歴を遡ることができる。カーソルキーを打つたびに前のコマンドが順に出て来る。下向きカーソルキー (↓) で逆方向に履歴を辿ることもできる。同じコマンドを何度も打たなければならない時に、手間を 減らすことができる。もう一つは「ファイル名の補完」で、「cp program3.f program4.f」の様なコマ ンドを入力する際、「cp pro」と途中まで入力してからタブキー (Tab)を押すと、作業をしているディ レクトリの中から "pro" で始まるファイルを探して、「cp program」という具合にファイルの名前の残 りを補完する。program1.f や program2.f も存在するとどれを選んで良いかはコンピュータには分ら ないので、補完は cp programのところで止まるが、「3」を打ってから再び Tab キーを押すと残りも補 完されてファイル名が完成されるだろう。どの様に補完されるかは、その時点でディレクトリーにどん なファイルがあるかに依存する。コマンド名にもこの補完機能は適用されるので、「gfo」などと途中ま で打鍵してからタブを押すと、「gfortran.exe」とコマンド名の残りがターミナル上に現れるはずで ある。こちらもキーを押す回数を減らすのに役立つだろう。

3.2 emacs 中で用いるサブコマンド

プログラムを作成するのに用いた emacs は沢山の機能を持ったファイル編集ソフトである。こちら も幾つかのコマンドを覚えておくと便利であろう。ここでも、「 Ctrl キーを押しながら x キーを打つ」 と書くのが面倒なので、「 C-x 」などと略記する。↔ は Enter キーを押すという意味である。

- C-x C-f (*file*) ↔ (*file*) と言う名のファイルを開く
- C-x C-w (file) ↔ 編集内容を (file) という名のファイルに保存
- C-x C-s 編集内容をもとのファイルに保存
- C-g コマンドを間違えて打ち始めてしまった時に取り消す
- C-a 行の先頭に移動
- C-e 行の最後に移動

- C-k C-k 1行削除。内容はペーストバッファという所に貯める
- C-u (n) C-k ((n) は数字) n 行を削除してペーストバッファに貯める。
- C-y
 ペーストバッファの内容をカーソル位置に貼り付け。
 バッファの内容はそのまま保持されるので、何度もペーストできる
- C-_ 直前の削除や貼り付けを取り消す。(「_」は下線記号)
- C-x C-c emacsの終了

emacs 起動時にファイル名を与えて起動すると、ウィンドーが半分に分れて上半分しか使えないことがある。C-x1とするとウィンドー全体が使えるようになる。逆に一つのウィンドーを半分にして使うこともできて、C-x2とするとウィンドーが二つに分れて、ファイルの別々の場所を編集できる。長いプログラムを編集する際に便利な時もある使い方である。

3.3 ソースコードのコンパイル

計算機プログラムのソースコードは人間が理解できるような FORTRAN の文法で書かれているが、 このままではコンピュータで実行できない。コンピュータが理解できるように機械語に翻訳する操作を コンパイルと言う。cygwin 環境のターミナルで

gfortran ソースファイル名

と入力すると、a.exe という名前の実行ファイルが生成される。「./a.exe」とキーインするとプログ ラムを実行する。コンパイルのためのコマンド gfortran は、プログラムがどんな計算機言語で書か れているか判断する時にファイル名の尻尾の部分に着目する。それ故ソースコードのファイル名は".f" で終わるようにしなければならない。

選択問題の幾つかは、予め用意されたソースコードと自分のプログラムを合せて答を求めるようになっている。例えば、連立一次方程式を解く選択問題はゼロからプログラムするのは大変なので、連立方 程式を解くための手続きが書かれているファイル (gauss.f)をダウンロードできるようになっている。こ んな風にソースコードが大きくなってファイルが二つ以上に分れている時には、

gfortran prog10.f gauss.f

などとすると、自分で書いたプログラム「prog10.f」と外部関数を含むファイル gauss.f を一緒にコン パイルできる。ただ単にプログラムファイルの名前を並べるだけである。

3.4 入出力のリダイレクト

プログラム中で read *, A, B のように READ 文を実行すると計算に必要なデータをキーボード から入力できるようになる。プログラムが複雑になって入力データの量が増えると、データ入力が面倒 になって来る。データをあらかじめファイルに書いておき、このファイルからデータを読み取ることが できれば便利である。こうした時には

./a.exe < input.data</pre>

のようにキー入力する。ここで、./a.exe は前にも出たプログラムを実行するためのおまじないで、 "input.data" は自分で付けた入力ファイルの名前である。入力ファイルを準備する時にはターミナル 上で

emacs input.data

などと打ち込んで emacs を開き、./a.exe を実行した時と同じ順序でキーを打ち、最後に C-x, C-s で 入力データを保存、C-x, C-c で emacs を終了すれば良い。./a.exe を実行する時に Enter キーを押 す必要があるなら、emacs の中でも Enter を押すことを忘れずに。ファイルから入力データが読み込まれる、こうした機能を入力のリダイレクトと呼ぶ。

上の例ではデータの入力をファイルから行なったが、結果をファイルに出力したい場合には

./a.exe > result.data

のようにする。この場合では、プログラム a.exe の実行結果の出力が画面ではなく result.data とい う名前のファイルに書き込まれる。result.data という名のファイルがない場合には新たに作られる。 この機能を出力のリダイレクトと呼ぶ。リダイレクトでファイルに出力する場合、すでに存在するファ イル名を使うと、前の内容を消して新たな内容が書き込まれる(上書きされる)ので注意すること。

4 計算結果のグラフ化

計算機を使ってプログラムを実行させることができるようになると、沢山の数値が結果として出力さ れるが、数字の山を眺めていても余り多くのことは分らない。そこで、計算結果をグラフ化する方法に ついて補足をしておく。

4.1 グラフの描き方 (I) · · · 関数形が既知の場合

設問に $f(x) = e^x - 3x$ の解を求める問題があるが、この関数がどんな形をしているかを知っていれば、問題の見通しが良くなる。計算サーバ上で既知の関数をグラフ化するには、「gnuplot」と言うアプリケーションが便利である。cygwin を起動してから、(emacs や gfortran の代りに)「gnuplot」と打つと、プロンプトが "gnuplot>"と変わる。この状態で例えば、

gnuplot> set term x11

gnuplot> plot exp(x) - 3 * x

と打つと、 $y = \exp(x) - 3x$ のグラフが画面に表示される。このままだと、グラフを表示する *x*-軸や *y*-軸の範囲が自動で設定されているので、分りにくいグラフになるかも知れない。

gnuplot> set xrange [0:2]

gnuplot> replot

と打つと、*x*-軸の範囲を0から2までに変更できる。"replot"と言うのは描画し直す命令である。gnuplot を終了したい時には、

gnuplot> quit

で終了できる。詳しい使い方はインターネットを検索すれば沢山見付かる。gnuplot はフリーソフトウ ェアなので、自分のパソコンにもインストールすることもできる。

4.2 グラフの描き方 (II) ・・・ 数値データが与えられている時

微分方程式を解く問題で、0.1 刻みで解が求まった時に、解がどのような挙動をするか直感的に把握 できると理解が深まる。gnuplot でグラフ化することもできるが、得られた数値データをグラフにする なら、grace というアプリケーションを用いることもできる。各種設定がグラフィカルなメニューで指 定できるので、gnuplot よりも取っ付き易いかも知れない。グラフにしたいデータを生成するプログラ ムを a. exe とする。a. exe の出力は2カラムで、それぞれ *x*-軸のデータと *y*-軸のデータとなるように プログラムを書いておく。答を見易くするための飾りをつけないで、数字のみを出力するようしておく ことが重要である (図 1 参照)。計算結果を、

./a.exe > output.dat

とデータファイル "output.dat" にリダイレクトして、

xmgrace output.dat

とすると、結果をグラフとして表示することができる。勿論、ファイル名は output.dat でなくても、 何でも良い。毎回データファイルを作るのは面倒だという人は、

./a.exe | xmgrace -

としても良い。"|"(タテ棒)と"-"(マイナス記号)を組み合わせて、あるコマンドの出力を別のコマンドに渡すというのは、UNIX ではしばしば行なわれるテクニックである。

		x	exp(x)
0.00000000	1.00000000	0.0000000	1.00000000
0.400000006	1.49182475	0.20000003 0.40000006	1.22140276 1.49182475
0.60000024 0.80000012	1.82211888 2.22554088	0.60000024 0.80000012	1.82211888 2.22554088
1.00000000	2.71828175	1.00000000	2.71828175

図 1: 計算結果の出力の例。右の方が人間には見易いが、grace に食わせるには左の方が良い。