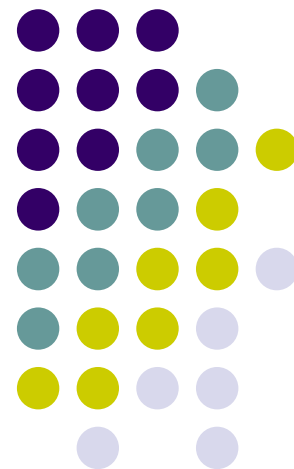


情報処理概論

工学部 物質科学工学科
応用化学コース
機能物質化学クラス

第1回

2005年 4月14日

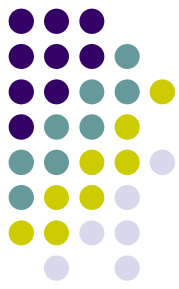




○ 本講義の背景

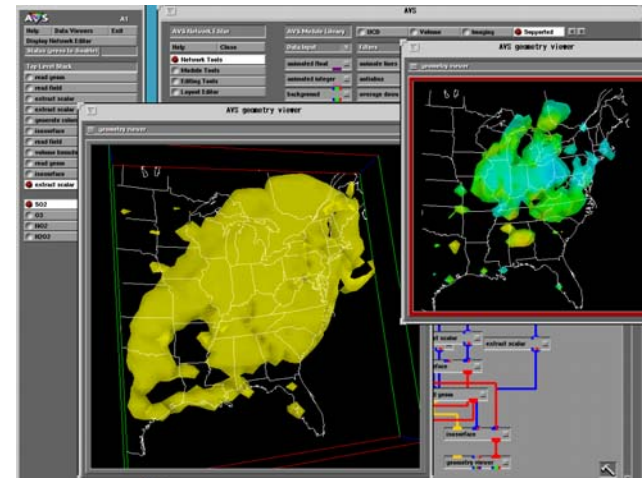
- 講義に関する情報
- 演習,レポート作成で利用する計算機環境
- レポート提出の練習

科学技術分野における コンピュータの役割



● シミュレーション

- 実験の限界(観測手段, 条件の設定, 時間)
 - 予測の重要性(環境問題, 気象等)
 - コンピュータを利用して法則から現象を予測
- 例) 計算化学:
分子動力学法, 分子軌道法等を用いて
新素材の開発, 観測困難な現象解析
- 例) 大気シミュレーション:
気象学, 流体力学等を用いた
汚染物質の拡散範囲の予測



科学技術分野における コンピュータの役割

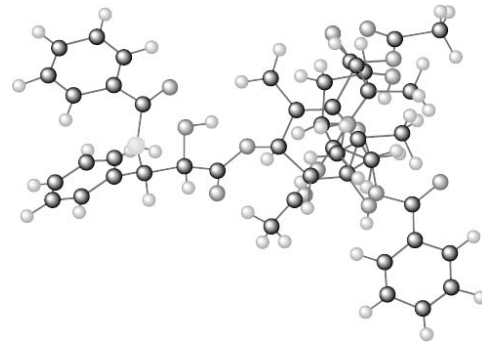
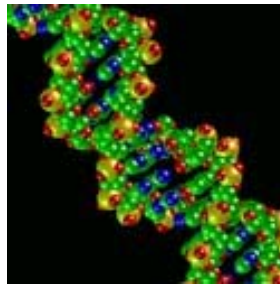


- データ解析

- 大量なデータから研究上意味のある情報を抽出

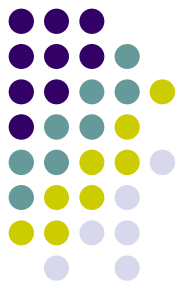
例) 電子顕微鏡の画像解析:

電子回折図から結晶構造や表面構造を解析



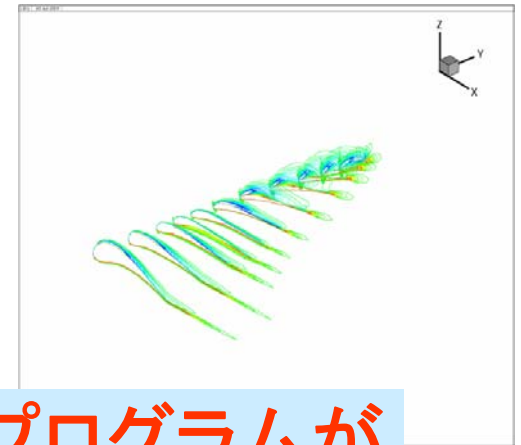
例) 古典和歌の解析

約45万首から歌人の特徴パターンを抽出し、
歌人同士の関係類推を援助



コンピュータの利用形態

- オリジナル・プログラム
 - 特殊な条件や新しい理論に基づいたシミュレーションや解析については、まだアプリケーションが開発されていない。
 - 自分でプログラム作成



最先端の研究では、オリジナル・プログラムが必要となることが多い。

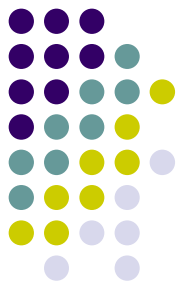


- 本講義の背景
- 講義に関する情報
 - 演習,レポート作成で利用する計算機環境
 - レポート提出の練習



情報処理概論の目標

- Fortranを用いたプログラム作成法の習得
 - UNIXの利用法
 - プログラムを編集し, 実行する方法
 - Fortranによる基本的なプログラム作成法
 - Fortranの文法
 - プログラムの設計
- 数値計算プログラム作成に必要な基礎知識



資料

- Webページに毎回の講義資料を掲載
<http://www.s.kyushu-u.ac.jp/~z5nt02in/>
 - PPT(PowerPoint)版はいったんダウンロードして参照
 - Internet Explorerでは右クリック後「対象をファイルに保存」
 - プリントアウトにはPDF版を利用する
- 参考資料
 - 利用の手引き
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/ec/manual/Tebiki2005/>
 - Fortran90プログラミング: [富田博之](#)著: 培風館
ISBN4-563-01409-5
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/htomita/sec0.html>
 - [ザ・Fortran90/95](#) 戸川隼人著: [サイエンス社](#)
ISBN4-7819-0913-2



単位認定

- レポート
 - プログラム作成（2回）
 - メールに添付して提出
宛先: z5nt02in@s.kyushu-u.ac.jp
- 筆記試験
 - 期末（1回）
 - 主にレポートで作成したプログラムについて出題



利用上の注意(1)

- 施設利用上の注意
 - 他講義中の講義室の入室
 - 無駄なプリンタ出力の禁止
 - 建物内での飲食禁止
 - エレベーターの利用は原則的に禁止
 - 二輪車は駐輪場に



利用上の注意(2)

- 教育用システム利用上の注意
 - 不正行為の禁止
 - 営利・宣伝行為の禁止
 - セキュリティへの配慮
 - エチケットの遵守



問い合わせ先

- 講義内容について
 - 情報基盤センター 6階 618号室 南里
E-mail: z5nt02in@s.kyushu-u.ac.jp
Tel: 092-642-2298 (情報基盤センター研究部)
- 教育用システムについて
 - プログラム相談員
 - 平日午後
 - 情報基盤センター 4階 マルチメディア機器管理掛
教育用システム受付
E-mail: uketuke@s.kyushu-u.ac.jp



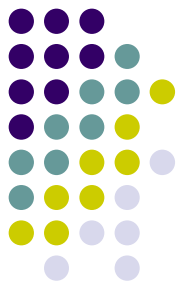
- 本講義の目標
- 講義に関する情報
- 演習,レポート作成で利用する計算機環境
- レポート提出の練習

実習環境:

ah.s.kyushu-u.ac.jp

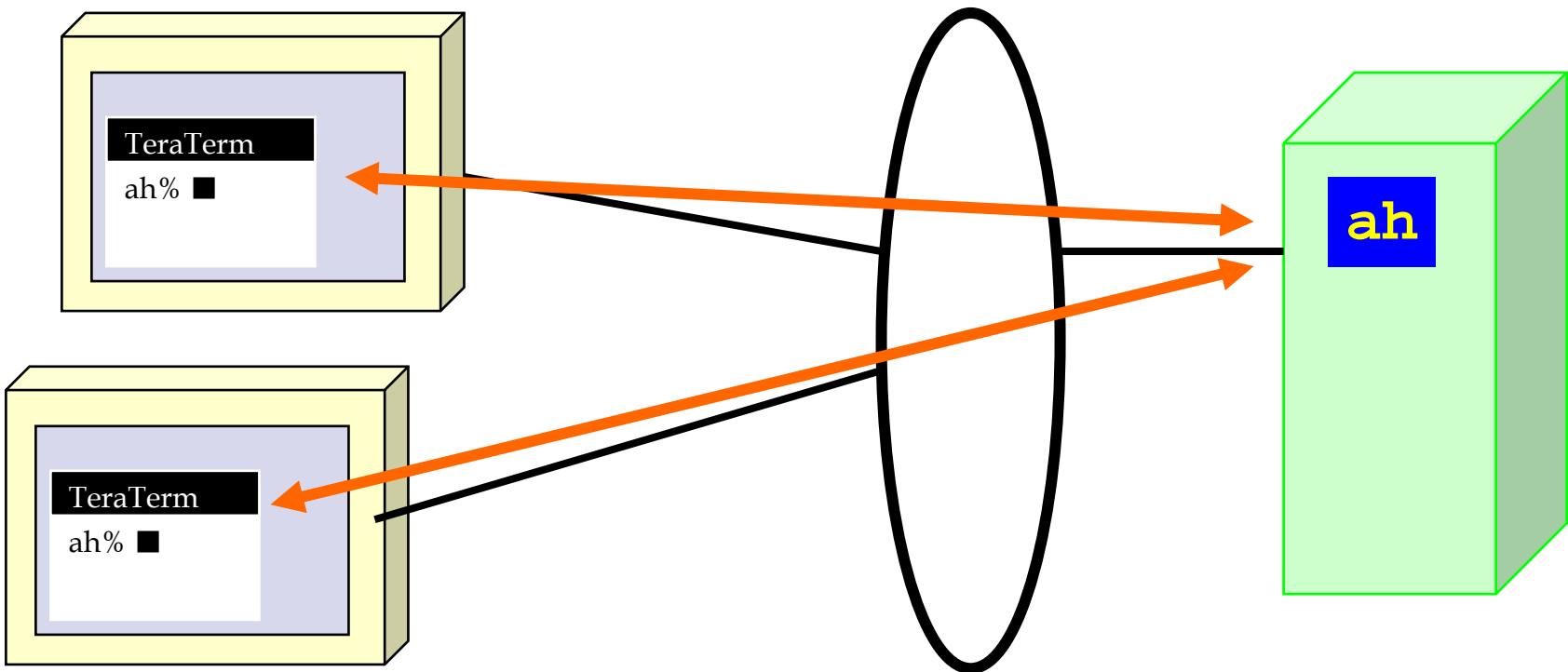


- 教育用システムのアプリケーションサーバ
 - 主にプログラム開発を目的としたサーバ
 - PCからネットワーク経由で接続して利用
 - Tera Term, Astec-X 等
 - OS(オペレーティングシステム): UNIX



サーバと端末

- PCの画面を通じてサーバを操作
 - 画面への入力 = サーバへの入力
 - 画面への出力 = サーバからの出力





UNIX の特徴

- マルチユーザー
 - 同時に複数のユーザーが同じ計算機を利用可能
- マルチタスク
 - (見かけ上)同時に複数の処理を実行可能
- 主にコマンドによる操作
 - キーボードから入力



パスワード

- パスワードの管理
 - 他人に知られないようにする
 - パスワードの変更: スルーPASS
もしくは **passwd** コマンド
 - メモ等, 他人が読める形で残さない
 - 類推が容易なパスワードは避ける
 - 6文字以上8文字以下
 - 2つ以上の英字および1つ以上の数字・特殊文字
 - 英数字以外の文字も使う




ahへのアクセス手段

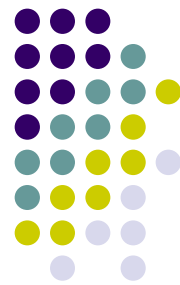
- インターネット
 - Windows, UNIX, MacOS 等から
端末エミュレータ (Tera Term 等)
 - 電話回線の場合は, プロバイダに接続後
- X端末ソフト
 - 講義室・自習室のPCで利用可能
 - 情報サロンでは利用不可

詳細は「利用の手引き」参照

<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/ec/manual/Tebiki2005/>

Tera Term による接続手順

- Windows のデスクトップで [Telnet]アイコンをダブルクリック
- 
- A small blue square icon with a white border. Inside the square, there is a yellow padlock icon with a blue keyhole, and below it, the word "Telnet" is written in white. There is also a small white icon of a computer monitor with a blue arrow pointing to the right.
- Tera Term 新規接続 ウィンドウで
 - ホストに ah.s.kyushu-u.ac.jp を入力
 - サービス の SSH をチェックして [OK]
 - セキュリティ警告 ウィンドウがでたら
 - 「このホストを ... 」をチェックして [Continue]
 - エラーが出ても慌てず [OK]
 - SSH 認証ウィンドウで
 - ユーザ名, パスワードを入力
 - 「プレーンテキストを使う」 をチェックして[OK]



セッション: 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後, セッション開設
- 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
 - セッション終了



UNIXのコマンド入力

- プロンプト = コマンド入力待ち

```
% █
```

- 基本的なコマンドの形式

コマンド名	オプション	引数
<code>pwd</code>		
<code>cd</code>		<code>test</code>
<code>ls</code>	<code>-l</code>	<code>test</code>

- 打ち間違えたら
 - BackSpace(後退), C-u (クリア) で訂正
(C-u は Controlキーを押しながら u を押す)
- 改行キーを押して実行

コマンド入力時の操作



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
↑	実行したコマンド履歴の古い方へ
↓	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



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
- Windowsのログオフやシャットダウンをする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



- 本講義の目標
 - 講義に関する情報
 - 演習,レポート作成で利用する計算機環境
- レポート提出の練習

プログラムを作成、編集するコマンド

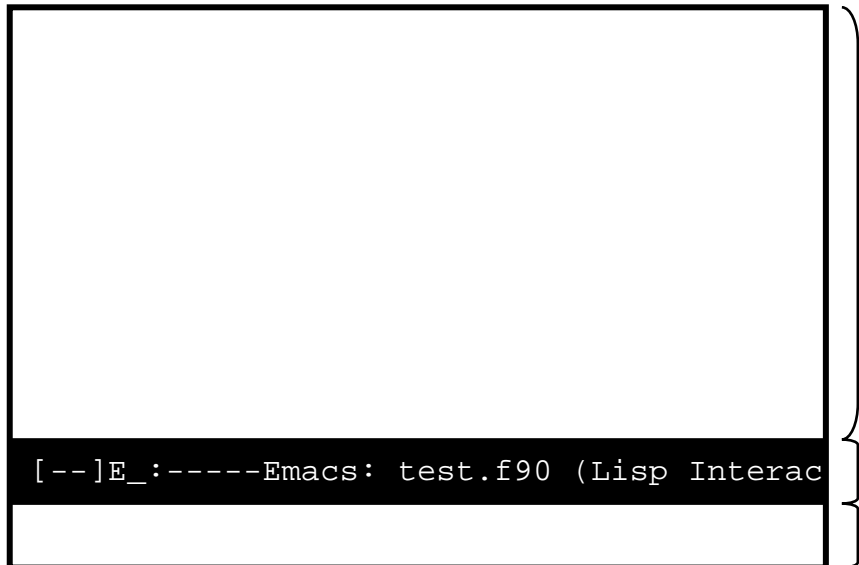
emacs



- 起動

```
% emacs ファイル名
```

- 画面の構成



テキストウィンドウ: 文書の編集を行う

モード行: ファイル名, 現在位置等を表示

ミニバッファ: 特殊コマンドの入力、
メッセージ表示



Emacsの操作

キー操作	意味
C-f または →	カーソルを右へ(Forward)
C-b または ←	カーソルを左へ(Backward)
C-n または ↓	カーソルを下へ(Next)
C-p または ↑	カーソルを上へ(Previous)
C-d	カーソル位置の文字消去
C-h	カーソル位置直前の文字消去
C-g	おまじない
C-x C-s	ファイルのセーブ
C-x C-c	Emacs の終了

C- は「Ctrl(Control)キーを押しながら」の意
例) C-x Ctrlキーを押しながら x キーを叩く



Emacsで変な画面になったときは

- まず C-g を数回押してみる
 - 元に戻ったら入力続ける
- 元に戻らなければ, 一旦 C-x C-c で Emacsを終了する
 - Save file ? には y を入力
 - その後あらためて

emacs さっき編集していたファイルの名前

でEmacsを起動

演習： サーバへのログイン, ログアウト,及びプログラム入力



- ah にログインし, Emacsで test.f90 を作成、編集する
 - 内容:

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

- 保存し, 終了
- ログアウト
- メールに添付して
z5nt02in@s.kyushu-u.ac.jp
に送信



GraceMailでのファイルの添付

- 通常のメールと同様に送信用メールを作成
- 「添付」
- 「参照」
- 添付するプログラムを探してクリックし「開く」
 - ah で作成したファイルは Zドライブの下
- 「一覧に追加」
 - attach file list にファイルが追加されたのを確認
- 「閉じる」
- 「送信」



第0回レポート

- Emacsで編集・保存したファイル test.f90 を z5nt02in@s.kyushu-u.ac.jp に送信
 - GraceMail 以外でも可
ただし教育用システム以外からの送信は不可
- 締切：4月8日(金)17時
- メールに所属, 氏名, 学生番号を明記
- 提出状況は web で適宜公開
<http://www.s.kyushu-u.ac.jp/~z4nt03in/>
 - 提出後, 必ず自分で確認する.
 - 来週になっても提出状態になってない場合はメール, 電話などで連絡すること.



次回

- UNIXのファイル管理
 - コピー, 移動, 削除, ディレクトリ操作
- Fortranプログラムの翻訳と実行