数値計算法概論: No.1

1　講義の目的

当講義では、プログラム言語 Fortran 90 を用い、プログラミングの初歩と、数値計算について学ぶ。すでに C,C++ などのプログラミング言語を知っている者がいれば、そちらを使っても構わない。数値計算としては、2 次方程式の解、数値積分、収束加速法、ニュートン法などを扱う。

成績評価はレポート (数回) による。

2　プログラム言語の参考図書

Fortran 90 の言語の入門書として次のものを上げておく。

「Fortran 90 入門」 新井 親夫 著、森北出版 (2800 円)。

生協書籍部に 45 部注文している。(すでに他の Fortran, C, C++ などの文法書を揃えている人を除き) この本を購入し、講義の際に必ず持ってくるようにすること。

3　一般的注意

Unix でのコマンド、エディターとしての mule (emacs)、電子メール (Mew など) の使い方は「九州大学情報処理教育センター利用の手引」を熟読すること。以下の URL

http://www.cse.ec.kyushu-u.ac.jp/manual/

から見ることもできる。

教育センターの使用時間は月ー金の 8:30-20:00, 土日休み。講義優先。

4　ワークステーションの利用法

利用の手引 8 章 UNIX ワークステーション参照。

4.1　ssh (利用の手引 8.3)

PC のデスクトップから TELNET と表記されているアイコンをダブルクリックする。すると利用の手引の図 8.3 のような TTSSH の接続画面が表示されるので、これに ユー

ザー ID、パスワードを入力する。
ワークステーションを終了するには、logout (または exit) と打ち込む。

4.2 mule (エディター) (利用の手引 8.5)

プログラムや、文書作成に使うツールがエディターである。フリーソフトである mule を使う。文字列のカット & ペーストなど、エディターの機能を有効に使うと作業能率が大幅に向上する。

4.3 X Window System: ASTEC-X (利用の手引 8.6)

gnuplot,tgif など、図表を扱うツールを使うには、X Window System を使うと楽である。PC から UNIX の X Window System を使うには、ASTEC-X を通して入る。

5 簡単なプログラム

5.1 プログラムの作成

次のプログラムを test.f(xyz.f のように .f で終っていれば何でも良い) のファイル名で作成する。まず、
%mule test.f
でエディターを起動し、以下のプログラムを作成する。

```
      real a,b,c,d,e,f
c
      a=5.0
      b=2.0
c
      c=a+b
      d=a*b
      e=a/b
      f=a**b
      write(*,*) "a,b ",a,b
c
      write(*,*) c,d,e,f
c
      end
```

[Ctrl]-x [Ctrl]-c でエディターを終了する。
% ls でファイル一覧を見て test.f のプログラムが出来ている事を確認。
% cat test.f でファイルの中身を見ることができる。

5.2 プログラムのコンパイル、実行

%frt test.f

とすると a.out*(実行形式のファイル) ができる (コンパイル[1])。その後

%a.out [Return]

とするとプログラムが実行される。

プログラムに誤りがあればエラーメッセージが出るので、必要に応じプログラムを修正する (デバッグ)。計算結果がおかしい時にも修正して実行し直す。

なお、

% a.out > out.data

とすると、画面に出ていたデータを out.data といった別のファイルに保存できる。

5.3 簡単な説明

1. a*b は積、a/b は割算、a**b は冪乗 a^b を表す。
2. a=2.0 は 変数 a に 2.0 という数字を代入することを意味する。
3. プログラムの最後は必ず end 文で終る。
4. Fortran では 1 行 72 文字 (桁) までである。1 桁目に c(または C,*,!) があると注釈行とみなし、実行しない。2 桁目から 5 桁目の数字は文番号で、別の文からその文を参照するのに使う。6 桁目の文字は、継続行を意味する。7 桁目から 72 桁目の間に実際に実行すべき文を書く (TAB キーを使うと mule が自動的に設定する)。
5. 1 行目の real a,b,c は変数が実数型であることの宣言文 (Fortran に限らず、一般に変数の実数型と整数型では扱いが異なる)。

例 次のプログラムを実行してみよ (integer は整数型の宣言)。

```
      integer i,j,k
c
      i=5
      j=3
c
      k=i/j
      write(*,*) "i,j",i,j
c
      write(*,*) k
c
      end
```

割算が切捨てとなる。

[1] フリーのコンパイラーとして g77 もある。

6　講義のプリント

講義のプリントを次の URL に置いておいた。
http://maya.phys.kyushu-u.ac.jp/~knomura/
この中の

数値計算法概論（2004 年度；3 年前期 ）

から参照すること。
また、レポート提出者の一覧、その他の掲示もこの URL を使う。

7　連絡先

質問は、講義中に積極的にすること、講義後に疑問がある場合は、直接以下の部屋に訪れても良いし、e-mail を使っての質問も受け付ける。

野村 2641 号室 (knomura@stat.phys.kyushu-u.ac.jp)
村島 (TA) 2632 号室 (murasima@stat.phys.kyushu-u.ac.jp)