

クレジット:

Mathematics and Informatics Center 計算機実験I 2020 藤堂眞治

ライセンス:

利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。



本講義資料内に掲載している外部へのリンク先の著作物の利用に関しては、リンク先のそれぞれの権利者の定めるところに従ってください。

計算機実験 I (第 1 回)

藤堂眞治

2020/04/22

- 1 講義・実習の概要
- 2 環境整備
- 3 数値誤差
- 4 ニュートン法
- 5 二分法

環境整備がすでに終わっている人は…

- 「計算機実験ハンドブック」の第 2 章「C 言語入門」を自習
- 「計算機実験のための環境整備」(<https://utphys-comp.github.io>) で抜けているところ (特に、Windows 環境でのコンパイラの利用、SSH アクセスなど) を作成
- 「計算機実験ハンドブック」の 1.3 節に Emacs 以外のエディタの説明 (vi (vim)、nano) を追加
- 「計算機実験ハンドブック」の第 2 章「C 言語入門」の C++ 言語版を追加
- Slack で困っている人をサポート
-
-

講義・実習の目的

- 理論・実験を問わず、学部～大学院～で必要となる現代的かつ普遍的な計算機の素養を身につける
- UNIX 環境に慣れる (シェル、ファイル操作、エディタ)
- ネットワークの活用 (リモートログイン、共同作業)
- プログラムの作成 (C 言語、コンパイラ、プログラム実行)
- 基本的な数値計算アルゴリズム・数値計算の常識を学ぶ
- 科学技術文書作成に慣れる (\LaTeX , グラフ作成)

身に付けて欲しいこと

- ツールとしてないものは自分で作る (物理の伝統)
- すでにあるものは積極的に再利用する (車輪の再発明をしない)
- 数学公式と数値計算アルゴリズムは別物
- 刻み幅・近似度合いを変えて何度か計算を行う
- グラフ化して目で見てみる
- 計算量 (コスト) のスケーリング (次数) に気をつける
- (計算機は指示したことを指示したようにしかやってくれないということ認識する)

講義・実習内容

- UNIX 操作・ネットワーク
- プログラミング: C 言語、数値計算ライブラリの利用
- ツール: エディタ、コンパイラ、 \LaTeX 、gnuplot
- 数値計算の基礎
- 常微分方程式の解法
- 連立一次方程式の解法
- 行列の対角化
- 線形回帰

質問がある場合には…

- 1 オンライン授業 (Webex) のチャット
- 2 計算機実験 Slack
- 3 ITC-LMS 「担当教員へのメッセージ」
- 4 メール

質問するときに注意すべきこと

- (メールの場合) Subject をきちんとつける、きちんと名乗る
- 実行環境を明示する
- 問題を再現する手順を明記する
- 関連するファイル (C や \LaTeX のソースコード等) を添付する
- エラーメッセージを添付する

計算機実験に必要な環境整備

- 「**計算機実験ハンドブック**」に書いてあることが、自宅の PC でも一通り試せるような環境を準備する
 - ▶ プログラミング (オフライン・リモート利用)
エディタ、コンパイラ (C, C++, Fortran, BLAS/LAPACK, MPI/OpenMP)
 - ▶ 計算結果のプロット (オフライン利用)
gnuplot (python/matplotlib, MATLAB でも可)
 - ▶ 文書 (レポート、論文) の作成 (オフライン・クラウド利用)
L^AT_EX (TeX Live あるいは Overleaf)
 - ▶ ネットワークの利用 (ECCS などの大学の計算機にリモートアクセスできる環境)
ターミナル、SSH
 - ▶ インタプリタ環境 (オフライン・クラウド利用)
MATLAB、Python 2/3
- 「**計算機実験のための環境整備**」 (<https://utphys-comp.github.io>) を参考に、各自必要な環境を整備する