

物理実験 2013 年度:分子動力学 (1 回目)

1 プログラミングに慣れるための演習

計算プログラムで計算し、解析 (図示、平均値・積分値の計算) を行う手順

- (1) 編集ソフト (例えば、emacs) にて、計算 (ソース) プログラムを書く。 (ここでは、FORTRAN を用いる)
- (2) コンパイル (ソースプログラムを実行形式プログラムに変換する作業)
- (3) 計算実行
- (4) 数値データの図示あるいは、さらに平均値・積分値等の出力

2 計算 (ソース) プログラム

練習として下記のソースプログラムを編集し、exercise.f という名前で保存する。

```

c2--567--1-----2-----3-----4-----5-----6-----772
c
    program exercise
c
    copyright Tatsuki Oda (2008.04.14)
c
    implicit double precision (a-h,o-z)
    implicit integer (i-n)
c
    parameter (nx=10000)
c
    dimension y(nx)
c
    open(unit=11,file='data.in')
    open(unit=16,file='data.out')
c
c
c for input
c input data from (11)
c

```

```
      read(11,*) nperiod      ! number of period
c
      pi=datan(1d0)*4d0
      ndperperiod=100
      dx=2d0*pi/ndperperiod
c
      do 5 iperiod=1,nperiod
        do 6 id=1,ndperperiod
          in=(iperiod-1)*ndperperiod+id
c
          if(in.gt.nx)then
            write(06,*)' ##### error #####'
            write(06,*)' nx is too small      '
            stop
          endif
c
          x=(iperiod-1)*2d0*pi+(id-1)*dx
          y(in)=cos(x)
          n=in
        6 continue
      5 continue
c
c for output
c output data to (16)
c
      write(06,*)'n=',n
c
      do 10 in=1,n
        x=dx*(in-1)
        write(16,500)x,y(in)
500    format(e15.7,f10.5)
      10 continue
c
      stop
      end
```

3 コンパイル

コンパイルするためのコマンドは、`gfortran` という名前なので

```
%> gfortran -o exercise.x exercise.f
```

のように実行する。エラーが出なければコンパイルが一応成功。エラーが出たら、エラーを良く読みプログラムの間違いを見付けて再度コンパイルを行う。エラーが出なくなればコンパイル完了。

プログラムファイルが複数ある場合など複雑なコンパイルを行うために`make` というコマンドを使用すると便利である。それは用意されている。

```
%> make
```

というコマンドを実行することにより、コンパイルができるように`makefile` というファイルにコマンドが書かれている。

4 計算実行

今回のプログラムでは、`data.in` という名前の入力データファイルを作成する必要がある。その内容は、ファイルに自然数を1つ書いておくだけのものである。

`data.in` の中身

```
10
```

計算実行

```
%> ./exercise.x
```

これを実行すると、データが1行だけモニターに出力されて`data.out` という名前のファイルが作成され、そこに主な出力データが出力されている。

出力データ等を`more` コマンドや`emacs` コマンドで確認する。

```
%> emacs data.out &
```

5 出力データの図示

先に習ったgnuplotを用いてデータを図示する。data.in で与えた整数の周期の数だけの `cos` 曲線が描かれているはず。

この演習は、これで終了。フーリエ変換を行うときにこの演習が生きてくるとよいですが。