

Tieteellinen laskenta I (Scientific Computing I)

Lauri Jetsu, Fysiikan laitos, Helsingin yliopisto

koodi: FYS 1013, laajuus: 5 op

Johdanto

Johdanto (kuva:@work.chron.com)

- ▶ Klikkaa tätä | [www](#) | merkkiä
⇒ Pääset siinä mainitun aiheen www-sivulle
- ▶ Kurssin [kotisivu](#) | [www](#) |
- ▶ Kurssin [aikataulu](#) | [www](#) |
- ▶ [Luennot](#),
Physicum D101
- ▶ [Laskuharjoitukset](#),
Physicum D208
- ▶ [Luennoija](#)
Lauri Jetsu (lauri.jetsu@helsinki.fi)
- ▶ [Assistenttien](#)
yhteystiedot löytyvät [täältä](#) | [www](#) |
- ▶ Mahdolliset muut assistentit ilmoitetaan myöhemmin kotisivulla



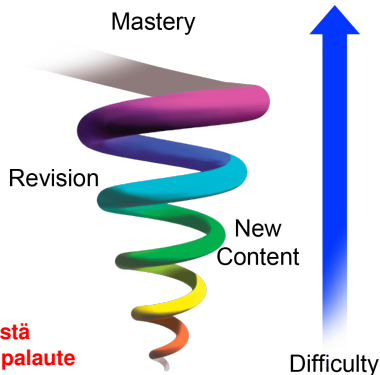
Lähtökohta ja suorittaminen

Lähtökohta (kuva:@skoolbo.com)

- ▶ Törmäätte tähän ensi kertaa
- ▶ Aloitetaan aivan alusta
- ▶ Keskitytään tekemiseen
- ▶ Määrä ei korvaa laatua
- ▶ Parempi oppia vähän, mutta perusteellisesti
- ▶ **Vaara**: Saman kurssin vaatimukset kasvavat sitä mukaan, kun luennoitsija itse ymmärtää asioita
- ▶ Pienryhmät (2015 ennen) ⇒ **Palaute yksilöllistä**
Massaopetus (2015 jälkeen) ⇒ **Toisenlainen palaute**

Suorittaminen: 5 op

- ▶ Luennot/harjoitukset: Vapaaehtoiset, Asioita **kokeillaan: Oma kone mukaan!**
- ▶ Samat rutiinit ⇔ **Oma kone** ⇔ **Jokainen** oppii “perusteiden perusteet”
- ▶ **6 laskuharjoitusta H1–H6**: “Spiraali” eri tasoilla **kaikkeaa** yhdistäen ...



Palaute

Palaute (Kuva: @www.pinterest.com)

Aiempi palaute: ⇒ **Muutoksia**

1. Moni suorittaa ilman luennoilla käyntiä
⇒ **Supplementary Material** | www |
2. “Paljon pieniä” **python** tehtäviä” ⇒
Suurin osa **python** laskuharjoituksista
tehdään, palautetaan ja tarkistetaan
Test My Code (**TMC**) ympäristössä
3. Muut **linux**, **emacs**, **L^AT_EX**, ...
laskuharjoitukset palautetaan omalle
assistentille e-mail liitetiedostona
4. **Lähiohjaus 5h/viikko**:
laskupajoissa & harjoituksissa ⇒
Osallistukaa, Kysykää, ...
5. **Osa luennoista** kerrataan ⇒ Enemmän
opetusta vaikeampien harjoitusten tekoon
Palautteen pohjalta **ei tehtyjä** muutoksia:
– “monta käskyä samalla ohjelman rivillä”
– “jouduimme etsimään netistä”



Suoritusten arvostelu

Laskurahoitukset

- ▶ Neljä erilaista laskuharjoitus tyyppiä

1. Helpommat **python** tehtävät

- ▶ Suoritetaan, palautetaan ja tarkistetaan automaattisesti **TMC**:ssä
 - 1p = Oikein = Palautus onnistui
 - 0p = Väärin = Palautus epäonnistui

2. **linux**, **emacs** tai **L^AT_EX**

- ▶ Palautetaan assistentille sähköpostin liitetiedostona
 - 2p = Oikein tai lähes oikein
 - 1p = Jotain tolkkua
 - 0p = Ei mitään tolkkua

3. Vaativammat **python** tehtävät

- ▶ Viimeinen viikko
- ▶ Palautetaan assistentille sähköpostin liitetiedostona
 - 2p = Oikein tai lähes oikein
 - 1p = Jotain tolkkua
 - 0p = Ei mitään tolkkua

4. “Pakollinen” palaute

- 2p = Vastattu
- 0p = Ei vastattu
- ▶ Palautusaikataulu **löytyy täältä** | [www](#) |
- ▶ Arvosteluasteikko **löytyy täältä** | [www](#) |

Laskupajat

Laskupajat

- ▶ **Ei koetta** ⇒ Kurssi suoritetaan laskuharjoituksilla
 - Kurssi muistuttaa ajokortin suorittamista. Perusteiden hallinta helpottaa opintoja
 - Rohkaistaan opiskelijoiden väliseen yhteistyöhön, mutta ei “yksi yhteen kopiointiin”
 - Kysymällä assistentilta oppii: laskuharjoitukset ja laskupajat
- ▶ **Laskupaja**
 - Aikataulu [täältä](#) | [www](#) |
 - Assistentit päivystävät **kaksi tuntia joka viikko**
 - **Ohjausta** laskuharjoitusten tekoon
- ▶ **Laskuharjoitukset H1-H6**
 - Henkilökohtainen laskuharjoitus assistentti: Aakkosten mukaan [kotisivulla](#) | [www](#) |
 - Laskuharjoitukset arvostellaan ensin
 - Malliratkaisut esitetään seuraavan viikon laskuharjoituksissa
 - Malliratkaisujen aikataulu löytyy [täältä](#) | [www](#) |
 - Malliratkaisuja ei julkaista ja/tai laiteta kotisivulle
 - **Ohjausta** seuraavien laskuharjoitusten tekoon myös laskuharjoituksissa

Periaatteista ja asenteesta

Periaatteista ja asenteesta (kuva:@adamcrymble.blogspot.com)

- ▶ **Supplementary Material** | www |
- ▶ **1. Principle:** *“Memorizing is not learning, but doing is.”*
- ▶ **2. Principle:** *“Solving any problem once is enough, twice is too much.”*
- ▶ **3. Principle:** *“Nearly all problems have already been solved, one only has to find out where?”*
- ▶ **Asenne**
 - **1. Principle:** Kukaan ei voi olla “elävä manuaali”
 - **1. Principle:** Käytännön harjoittelua **mistä tahansa** löytyvistä esimerkeistä
 - **2. Principle:** En muista miten? Kerran ratkaistu OK!
 - **3. Principle:** En tiedä miten? Otan itse selvää!
 - Perusteet opittu:
Voi valita “oman tiensä”



Miksi suurin osa työajasta tietokoneen ääressä?

Tietokoneet: tutkimus & opetus

(kuva:<https://xkcd.com/1319/>)

► Havainnot & mittaukset

- Suunnittelu, tekeminen, käsittely, simulointi, ...

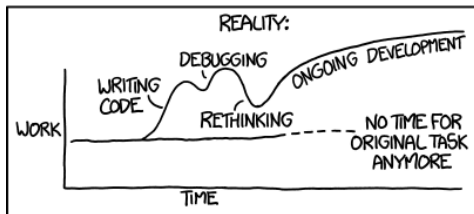
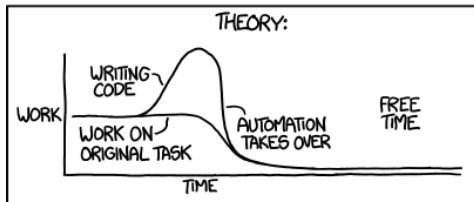
► Teoria

- Mallintaminen, simulointi, “numeron murskaus”, ...

► Julkaisut, Oppimateriaali

- Laadinta, tiedonhankinta, tietokannat, ...
- Perusteet tunnettava
- Käyttöympäristö (**linux**)
- Editointi (**emacs**)
- Julkaisun laadinta (**L^AT_EX**)
- Ohjelmointi (**python**)
- Tietokannat (**ADS**, **SIMBAD**...)

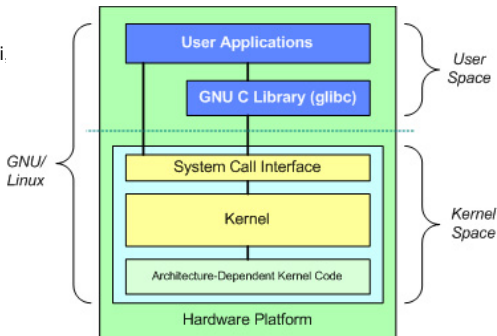
“I SPEND A LOT OF TIME ON THIS TASK.
I SHOULD WRITE A PROGRAM AUTOMATING IT!”



linux

Mikä on **linux**? | www | (kuva:@mepis.org)

- ▶ Kehittynyt unix-käyttöjärjestelmästä (Linus Torvalds, 1991: **linux**-ydin, engl. kernel)
- ▶ **linux** "kotisivulla" | www | löytyy kaikenlaista tarpeellista tietoa
- Lähdekoodi vapaa, kehitetään jatkuvasti. säästää rahaa, aikaa ja vaivaa
- Ilmaiset ohjelmointityökalut: Suosittu luonnontieteissä
- Supertietokoneet: **linux** tai unix
⇒ Tärkeää osata ohjelmoida
- Monia tutkimuksessa tarvittavia ohjelmapaketteja ei saa Windows:lle
- Haittaohjelmia on vähän
- Käyttäjän tila rajattu: ei pääse koneen muiden käyttäjien tiedostoihin
- Opiskelijoille hankittujen tietokoneiden käyttöjärjestelmä on **linux**



- ▶ **Kurssilla opetellaan linux:n käyttöä!** **Kone päälle 1 kerran: Avataan komentotulkki!**

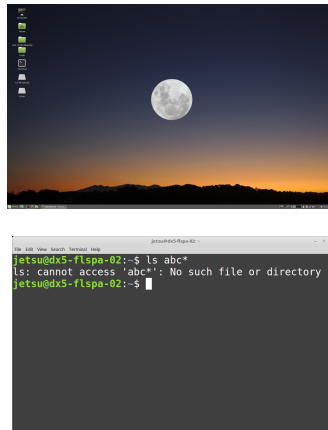
- ▶ Kotisivuilta voi hakea tarvittavia tiedostoja: **Harjoitellaan wget komentoa!**

linux

Mikä on Komentotulkki ? | www |

(kuva:@i.wikipedia.org)

- ▶ Miten avataan omalla koneella?
 - Lähes kaikki tehdään komentotulkissa ja loput “hiirellä” tms...
- ▶ Avataan nyt luenolla fuksiläppärissä
 - **linux** sirkus: Miten avataan muissa
- ▶ Komentotulkissa ohjataan käyttöjärjestelmää
 - **linux** komennot
 - **emacs** editointi
 - **python** ohjelmointi
 - **L^AT_EX** ladontaohjelma
- ▶ Toimiva **linux** komentotulkki
 - ⇒ Voit suorittaa **laskuhajarjoitukset**
 - **TMC** tietoa tänään luennon lopussa
- **Ottakaa kone mukaan luennoille**
- **Kopioikaa etukäteen** tulevan luennon tiedostot kotisivulta koneellenne



emacs

Mikä on **emacs**? | [www](#) | ([emacs](#) kotisivu | [www](#) |)

- ▶ **Tekstieditori**, jolla editoitte **emacs**:lla tällä kurssilla erityisesti: **L^AT_EX** tekstitiedostoja ***.tex**, **python** ohjelmätiedostoja ***.py**, missä ***** on tiedoston nimi
- ▶ **TAPA 1:** Editoidaan **emacs jotain.py** Return ⇒ **Komentotulkki ei jäänyt käyttöön**
 Kirjoitetaan tiedostoon **jotain.py** ensimmäinen rivi: **print('jotain')**
 Tallennetaan tiedoston sisältö: ctrl + x , ctrl + c ⇒ Vastataan **y**
 Ajetaan ohjelma komentotulkissa komennolla **python3 jotain.py** Return
- ▶ **TAPA 2:** Editoidaan **emacs jotain.py &** Return ⇒ **Komentotulkki jäi käyttöön**
 Kirjoitetaan tiedostoon **jotain.py** toinen rivi: **a=1 ; print(a)**
 Tallennetaan tiedoston sisältö: ctrl + x , ctrl + s ⇒ **Editori jäi käyttöön**
 Ajetaan ohjelma komentotulkissa komennolla **python3 jotain.py** Return
 Käyttämällä **TAPA 2**:ta voidaan jatkaa ohjelman **jotain.py** editointia toivottuun muotoon ja välillä testata ohjelman toimivuutta ajamalla sen viimeisintä tallennettua versiota
- ▶ **Milloin** kannattaa tiedostoa tallennettaessa ctrl + x ”, ctrl + c ⇒ kannattaakin vastata **n?**
- ▶ Tallennetaan **vahingossa** väärä versio ***.*** ⇒ Etsitään **aiempi** tallennettu versio ***.*~**
- ▶ Eräs **emacs** pikaopas | [www](#) |, missä M = Alt ja C = Ctrl

L^AT_EX

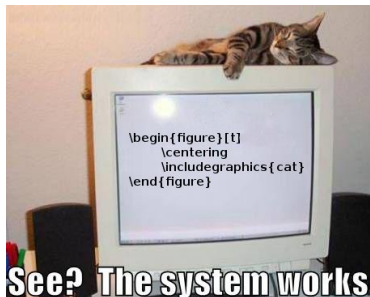
Mikä on L^AT_EX? | www | (L^AT_EX kotisivu | www) (kuva:@tex.stackexchange.com)

- ▶ **Ladontaohjelma:** Julkaisujen, kirjojen, ... tms materiaalin laadintaan
- ▶ `wget LatexAlkukesken.tex` kotisivulta
- ▶ Kirjoittaja editoi sisällön eli **substanssin**
`emacs LatexAlkukesken.tex &`
- ▶ Lopullinen ulkoasu **linux** komennoilla

joko: `latex LatexAlkukesken`
`dvips LatexAlkukesken -o`
 $\Rightarrow$ `LatexAlkukesken.ps` muoto

tai: `pdflatex LatexAlkukesken`
 $\Rightarrow$ `LatexAlkukesken.pdf` muoto

- Katsellaan lopputulosta `evince LatexAlkukesken.pdf &`
- ▶ Merkittävimmät julkaisusarjat käyttävät L^AT_EX:a (Esimerkkejä: [fysiikka](#) | [www](#), [tähtitiede](#) | [www](#))
- ▶ Tarkasti määritellyn “formaatiin” mukainen dokumentti: julkaisu, kirja, opinnäyte, ...
- ▶ Kaikki mahdolliset tekstin formaatit. Kaavat, taulukot, kuvat ja viitteet suhteellisen helposti
- ▶ Loputtomasti valmiita paketteja komennolla `\usepackage{paketin_nimi}` eri tehtäviin



- ▶ Julkaisusarjojen kotisivuilla valmiit $\text{\LaTeX}$ makrot (Esimerkiksi [American Geophysical Union: Latex Templates](#) | [www](#)).

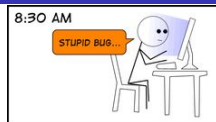


python

Mikä on **python**? | [www](http://www.python.org) | ([python](#) kotisivu | [www](#) |)

(kuva:@www.pinterest.com)

- ▶ Ilmainen **ohjelmointikieli**: Saatavilla kaikille yleisimmille käyttöjärjestelmille (**linux**, Windows, Mac, ...)
- ▶ Interaktiivinen komentotulkki **python3**
- ▶ Kurssilla: Editoidaan **emacs** ***.py** &
- ▶ Kurssilla: Ajetaan **python3 *.py**
- ▶ Suosittu fysiikassa, tähtitieteessä, ...
- ▶ Suhteellisen helppo selvittää kurssin **python** tehtävät ⇒ ~ **80-100 tuntia** "päättää seinään"
- ▶ Monipuolinen: paljon valmiita ohjelmistopaketteja **Numpy** | [www](#) |, **Scipy** | [www](#) |, **Pylab**, **ipython** | [www](#) |,
- ▶ Monissa ohjelmistoissa on **python**-rajapinta (engl. interface). Esimerkiksi **PyRAF** tähtitieteessä | [www](#) |
- ▶ **python** voidaan yhdistää muihin ohjelmointikieliin ⇒ Kovaa "numeron murskausta" vaativat laskennan osat ohjelmoidaan toisella tehokkaammalla ohjelmointikielellä, kuten C, FORTRAN, ...



STUFFTHATHAPPENS.COM BY ERIC BURKE