

## 課題 4：シミュレーションとデータ解析超入門

## 講義ノート

様々な現象はコンピュータによって仮想的に実現され解析されることが多い。その場合、現象を計算によって「模倣」(シミュレーション, simulation) していることが多い。この課題では、現象をどのようにして計算として表わすか、そしてその実行結果をどのように解析するのか、について、そのほんの「さわり」を経験することを目指す。技術的には gnuplot を用いたデータ解析やスクリプトによる実験のプログラム化の手法を学ぶ。

まずは、一般的なデータ解析の基本を、データ解析用のソフトの 1 つである gnuplot を使いながら学ぼう。

## 1. gnuplot 入門

gnuplot はグラフの表示や最小二乗法に基づく関数パラメータの推定計算など、データ解析のための道具を提供するソフトである。この課題で gnuplot の基本的な使い方を学ぼう。

## (1) gnuplot の基本的な使い方

まず、gnuplot の起動する。それには Terminal 画面の上で gnuplot とタイプすればよい。そうすると gnuplot の世界に入る。以下は、その世界での操作方法である。

関数のグラフを表示させるには、

```
gnuplot > plot x+x**2+log(x)
```

データを表示させるには、

```
gnuplot > plot "file1"
```

「file1」にファイルを指定する。このファイルには  $(x, y)$  の値を次のように入れておく (小数も可)。

```
# 表示したいデータ x, y の組 ← # で始まる行は無視される
1 4
2 6
:
```

さらに、プロットした点同士を線で結びたい場合には、

```
gnuplot > plot "file1" with line
```

二つ以上の関数やデータを表示させたい場合には、たとえば

```
gnuplot > plot "file1" with line, "file2" with line
```

```
gnuplot > plot "file1" with line, x+0.5*x**2
```

```
gnuplot > plot "file1" with line, f(x)
```

データが 2 つより多くの列 (欄) から成る場合に, その 1 列目を x 軸に, 3 列目を y 軸として表示させるには,

```
gnuplot > plot "file1" using 1:3 with line
```

## (2) 出力

グラフを印刷するには, ...

画面のスクロールバーの file をマウスでクリックする 印刷メニューがでる.

## (3) 最小二乗法による係数の求め方

まず, パラメータを使って関数を定義する.

```
gnuplot > f(x)=a*x+b*x**2
```

そして fit というコマンドを使って, データファイルのデータに関数をもっとも合うようにパラメータを選ばせる.

```
gnuplot > fit f(x) "data1" via a,b
```

パラメータ (例:  $a$ ,  $b$ ) を適当な初期値から始めて, 何度か調整しながら, 適当な精度 (最小二乗誤差の意味で) が得られるまで, あるいは精度が上がらなくなるまで繰り返す. 途中にいろいろと表示されるが, 結果は, たとえば次のように出力される.

Final set of parameters	68.3% confidence interval (one at a time)
=====	=====
a = 0.5	+/- 2.31063e-16
b = -0.5	+/- 2.7763e-15

注意! パラメータの値がすでに何かに定義されている場合, それが初期値になるので注意が必要 (もしかしたら, 非常に悪い初期値かもしれないから). それを防ぐには, 関数を定義する際に, 今まで使わなかったパラメータ名を使えばよい. 逆に, このことを利用して, パラメータの初期値を自分で適当なものに決めることもできる.

たとえば,

```
gnuplot > g(x)=a*x+b*x**2
gnuplot > a=3.5
gnuplot > fit g(x) "data1" via a,b
```

(4) その他, よく利用するコマンド

$x$  軸,  $y$  軸の表し方に対する操作

$x$  軸の範囲を  $[-5, +5]$  にする      `set xrange [-5:5]`

$y$  軸の範囲を  $+4.3$  以下にする      `set yrange [:4.3]`

$y$  軸を対数目盛にする      `set logscale y`

$y$  軸を普通目盛にする      `unset logscale y`