テーマ１：シミュレーション超入門

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．このテーマでは，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標とする．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]．

(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
```

[1] gnuplot については先行の情報リテラシ科目群で学んだはずだが，ここでは再び基本から復習することにする．

```
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，次のように使う.

```
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 loscale y`