

Gnuplot:関数の可視化とデータ・プロット

長谷川 淳也

0. gnuplot を起動する

「すべてのプログラム」 / 「専門ソフト」 / 「gnuplot」 / 「wgnuplot.exe」

1. 関数をプロットする

plot sin(x) →sin(x)のプロット。

plot f(x) = sin(x*a), a = .2, f(x), a = .4, f(x) 。

→f(x)を sin(x*a)と定義し、a=0.2 と 0.4 の場合について、f(x)をプロットする。

plot sin(x) title "sin(x)" 。 →プロットした関数にタイトルをつける。

plot f(x) = sin(x*a), a = .2, f(x) title "a=0.2", a = .4, f(x) title "a=0.4" 。

→プロットした複数の関数にタイトルをつける。

plot [x=0:2*pi] [-1:1] sin(x) →横軸と縦軸の領域の指定。

2. データをプロットする

データファイル(HF_PEC.dat)のダウンロード：

長谷川の基礎情報処理演習サイトからダウンロードして、「メモ帳(Notepad)」で開く。

データファイルをデスクトップに置くと、gnuplot が読めないことがあるので、「マイドキュメント」に置くことを勧める。

ツールバーの「Plot」セクションで、順に「Plot」、「Simple Range」、「Data filename...」、「with Style (simple)」を実行し、コマンドを完成させて、。

プロットの平滑化：(cspline 関数を使う場合) “smooth csplines”を加える。

3. 離散データを関数にフィットする(線型関数へのフィッティング)

データファイル(Linear.dat)のダウンロード。

関数の定義： $f(x) = a * x + b$ 初期値の定義： $a=2.0$, $b=1.0$

一行のコマンドラインで複数のコマンドを実行する場合にはセミコロン「;」で区切る。

例： $>f(x)=a*x+b; a=2.0; b=1.0$

フィッティング： fit f(x) “データファイル名” via a, b

“データファイル名”のデータを使い、a, b をパラメータとして f(x)にフィットする。

“データファイル名”はツールバーの「Plot」 / 「Data filename..」から選択。

フィッティングした関数の表示： plot [x=0.0: 7.0] f(x), “データファイル名”

“[x=0.0: 7.0]”は「Plot」の「Named Range」を用いても入力できる。

4. 課題

データファイル(HF_PEC.dat)は、フッ化水素分子の結合長に伴うポテンシャルエネルギーの変化を量子化学計算により求めたものである。このデータをモース関数にフィットし、求めたパラメータとグラフをパワーポイントに貼り付けて提出する。

モース関数として $f(x) = a + b*(1-\exp(-c*(x-d)))^2$

初期値として $a=-100.4, b=0.3, c=2.0, d=1.0$

を用いよ。アクティブなウィンドウをコピーする方法は、 + .

注意点：大文字・小文字は区別される。

Gnuplot の graphical user interface(GUI)は手入力の補助。