

2023 年度計算物理学 II 第 1 回レポート課題

データ処理・図の作成・TeX

提出締切：2023 年 11 月 17 日 (金)

講義のページにデータファイルを掲載しました。以下のコマンドによって tgz ファイルを Linux にダウンロードし、解凍してください。report1data ディレクトリができるのでそこに移動してください。(\$マークはプロンプトを意味するので入力しないように)

```
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-23/report/report1data.tgz
$ tar zxvf report1data.tgz
$ cd report1data/
$ ls
data1.dat data2.dat data3.dat data4.dat
```

データファイル data1.dat, data2.dat, data3.dat, data4.dat には順番はバラバラで、400 個の x の値での $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6$ の値が規則正しく記載されています。data1.dat の冒頭の例では

```
*****
x =   -4.94660
y1 =    0.0000037 y2 =   -0.0000255
y3 =    0.0001237 y4 =   -0.0004789
y5 =    0.0015681 y6 =   -0.0044773
*****
```

となっており、これらは $x = -4.94660$ での y_1, y_2, y_3, y_4, y_5 の値です。

- これら 4 つのファイルのすべての x の値を使って $y_1(x), y_2(x), y_3(x), y_4(x), y_5(x), y_6(x)$ を x の関数として gnuplot を用いて一枚のグラフに描いてください。グラフでは点でプロットせずに線でプロット (with lines) し、また $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6$ が判別できるように凡例を設ける、線種を変えるなど工夫をしてください。
- これらの関数は量子力学で出てくる関数ですが、関数の形を推測し、もう一枚図を用意し、わかる範囲で推測した関数と $y_i(x)$ を重ねて描画してください。

レポートは TeX で作成してください。データから作成した gnuplot の図と、推測した $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6$ (の一部) の関数形と図を描いて氏名と学籍番号を書いたレポートを pdf として manaba から提出してください。

ヒント

- Fortran や C のプログラムを書く必要はありません。第 4 回までの講義内容で回答できます。
- data1-4.dat は gnuplot で読み込める形になっていないので第 3 回のテキスト処理・リダイレクト・パイプラインなどを組み合わせて gnuplot で読むのに適した形に変換します。gnuplot で読み込むためには空白を区切り文字とした数値だけが並んだデータファイルに変換します。
- grep や awk を使って必要な数値を取り出すことを考えてください。

- 行単位でファイルの連結をするには paste コマンドを使います。例えば

```
$ cat a.txt
10 100
20 200
30 300
40 400
$ cat b.txt
11 101
21 201
31 301
41 401
$ paste a.txt b.txt
10 100 11 101
20 200 21 201
30 300 31 301
40 400 41 401
```

のように 2 つのファイルが各行ごとに連結されます。3 つ以上のファイルを連結することも可能です。
(paste a.txt b.txt c.txt のようにする)

- gnuplot での図の作り方、特にデータのプロットは第 4 回講義資料にあります。
- gnuplot で with lines とするとファイルに書いてある順番にデータ点が線で結ばれます。そのため順番がバラバラの場合は予めデータの順番を並び替えておく必要があります。
- TeX の書き方は第 4 回の講義資料を参照してください。
- gnuplot ではファイルの数値データのほか、指定した関数も同じ図に描画することができます。
- このレポートではデータ処理・図の作成・TeX による文章の作成ができるかどうかを評価します。どうしてもこのデータから図が作れない人は何か他の図を gnuplot で作って提出し、少なくとも gnuplot による図の作成と TeX による文章作成ができることを示してください。