# パソコンを使ったグラフのかき方 Mathematica編\*

※二次配布禁止※

「減衰振動の測定」担当 TA: 奈須田 祐大<sup>†</sup>

Ver. 1.1.0

## 目 次

1	導入	1							
	1.1 Mathematica とは	1							
	1.2 インストール方法	2							
2	Mathematica を用いたグラフのかき方・fitting の方法 ①	<b>2</b>							
	2.1 データの整理	2							
	2.2 グラフのかき方	3							
	2.3 fitting の方法 ① (線形の場合)	6							
	2.4 完成形	7							
3	Mathematica を用いた fitting の方法 ②								
	3.1 fittingの方法②(非線形 fitting)	8							
4	おわりに	10							

## 1 導入

### 1.1 Mathematica とは

Mathematicaは、Wolfram Research社が開発・販売する数式処理ソフト.種々の計算を実行 し結果を描画するという一連の流れが、全てMathematica上で行えるため、非常に便利である. また、解析的な計算や数値計算、グラフの描画のみならず、画像処理や音声データの処理もで きる.Mathematicaもまた、IFT<sub>E</sub>X同様、物理屋の必需品である.機能の幅広さゆえ、物理に限 らず様々な研究・開発の場面でも用いられている(例えば、地政学や金融、言語学などのデー タも取り扱うことが可能).

<sup>\*</sup>他にも,「gnuplot 編」があります. 筆者の考えでは, MS Excel は, グラフを描画するためのソフトではあり ません. 少なくとも, 筆者の研究分野及びその周辺では, 論文に MS Excel でかかれたグラフを載せる例は見たこ とがないです. せっかく大学で物理を学んでいるのだから, Mathematica や gnuplot など, 物理屋の道具を使っ てみてはいかが?

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup>Email: 6221702@ed.tus.ac.jp

### 1.2 インストール方法

本学は、Wolfram Research 社とのライセンス契約を結んでおり、本学所属の学生は、在学中、無 償で個人のPCにインストールして使うことができる(台数制限あり). 詳しくは、「東京理科大学 IT サービスのご案内 (https://tus.app.box.com/notes/774402903612?v=it-service-guide)」 の「3. 在学中に利用可能なソフトウェア」から「【学生向け】Mathematica 利用マニュアル」 を参照.

参考までに,2021年10月現在で,利用可能なバージョンは,12.2.0である.ただし,以下の 説明ではバージョン12.1.1用いる(おそらく大差はない筈).また,筆者が使っている OS は, Windows 10 (の Pro)である.

## **2** Mathematica を用いたグラフのかき方・fitting の方法 ①

この章では、物理学実験1-Aの第3講「最小二乗法・グラフの書き方」でグラフのかき方や最 小二乗法の計算練習に用いたデータ「金属試料の長さと温度の関係」を例に、Mathematicaの 使い方を説明してゆく.つまり、既に学んだことと全く同じことを"手"ではなく Mathematica でやる方法を説明する、ということだ(何か新しいことを学ぶ際に、既に知っていることをそ の新しい方法でもできるか、ということを確かめるのは、理解を確かめる上で非常に重要なこ とである).

### 2.1 データの整理

本稿では、元データが「data.xlsx」という Excel ファイルに保存されているとする(ファイ ル名は何でもよいのだが、日本語(全角文字)を使うべきではない). これを Mathematica に 読み込ませて、グラフの描画や最小二乗法の計算を行うのだが、まずは、Mathmatica が読み 込みやすいような形に、データを整理する.

「data.xlsx」に、「dataA3」というシートを作成し、以下のようにデータを並べる(A列が 温度  $t/^{\circ}$ C, B列が金属棒の長さ l/m のデータである).

	А	В	С	D	E	F
1	10	1.00021				
2	20	1.00036				
3	30	1.00053				
4	40	1.00074				
5	50	1.00091				
6	60	1.00106				
7						
8						
9						
10						

データの入力が終わったら, Excel ファイルを保存する.また, このファイルが保存されている 場所を覚えておくこと.尚,保存場所は,例えばWindowsなら,「プロパティ」から調べること ができる.以下の説明では,「data.xlsx」が「C:\Users\admin\Documents\Mathematica」<sup>1)</sup> に保存されているとする.

### 2.2 グラフのかき方

#### 2.2.1 データの読み込み

Mathematica を開いてから、まず初めに、作業ディレクトリを、前小節で作った Excel ファ イルが保存されているフォルダ「C:\Users\admin\Documents\Mathematica」に変更する.

In[1]:= SetDirectory["C:\\Users\\admin\\Documents\\Mathematica"]

次に,前小節で作ったデータを Mathematica 上に読み込むには,

In[2]:= data = Import["data.xlsx", {"Data", "dataA3", All,1;;2}]

のように入力すればよい. これは、「data.xlsx」の「dataA3」というシートの1列目から2列 目まで(A列からB列)の全ての(all)データを読み込んで、このデータの集まりを「data」と 定義する、という意味である.

#### 2.2.2 データのプロット

次に、このデータをグラフ化する方法を述べる.

In[3]:= ListPlot[data]

とすれば、次のようなグラフを得る.

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup> 環境によっては、バックスラッシュ「\」ではなく、円記号「¥」になる.



#### 2.2.3 グラフの修正

ここまでで、データをプロットしたグラフをかくことができた.しかしながら、上の方法で かいたグラフには、以下の問題点がある.

- グラフタイトルがない
- グラフが枠で囲われていない
- 軸ラベルがない
- 近似直線を描いたときに l<sub>0</sub>の点が描画範囲外になってしまう
   (他にも場合によっては、データ点と枠が重なっていて見づらい/データが全てプロットされていない etc.)
- (• プロットの色を変えたい)
- (• 凡例を加えたい)

以下では、これらの解決方法を示してゆく.

#### ■ グラフタイトルの書き方

Mathematica で「PlotLabel」を使う手もあるが、ETEX で文書を書いていたり Beamer でス ライドを作成していたりする場合には figure 環境の「caption」で、MS PowerPoint でスライ ドを作成してる場合は「テキストボックス」で、グラフタイトルを書くのが一般的である.

#### ■ 枠の付け方

グラフを枠で囲むためには,

In[4]:= ListPlot[data, Frame -> True]

と、「Frame -> True」と書き加えればよい.

#### ■ 軸ラベルの付け方

軸ラベルを「Temperature [°C]」「Length [m]」のように付けるには,

In[4]:= ListPlot[data, Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature [°C]", "Length
 [m]"}]

と、「FrameLabel -> {"Temperature [°C]"、"Length [m]"}」と書き加えればよい. 縦軸の ラベルが「Temperature [°C]」となり、横軸のラベルが「Length [m]」となる. 軸ラベルを「Temperature, t/°C」「Length, l/m」のようにしたい場合には、

In[5]:= ListPlot[data, Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature,  $t/^{\circ}C$ ", "Length l/m"}]

とする.

更に、軸ラベルのフォントサイズを大きくしたいときは、

In[6]:= ListPlot[data, Frame -> True, FrameLabel -> {Style["Temperature [°C]", FontSize -> 14], Style["Length [m]", FontSize -> 14]}]

などとする (デフォルトは FontSize -> 10).

#### ■ 描画範囲の変更の仕方

グラフの描画範囲(横軸の範囲と縦軸の範囲)を指定するには、以下のようにすればよい.

In[7]:= ListPlot[data, PlotRange -> {{0,65}, {1.0000,1.0012}}, Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature [°C]", "Length [m]"}]

のように、「PlotRange -> {{0,65}, {1.0000,1.0012}}」と書き加えれば、横軸の最小値と最 大値がそれぞれ0と65、縦軸の最小値と最大値はそれぞれ1.0000と1.0012へと変更される.

#### ■ その他

今回の例のように、グラフに示すデータが1種類しかない場合、凡例を示す必要はない.た だし、凡例を示したい場合には、

In[8]:= ListPlot[Legended[data, "測 定 値"], PlotRange -> {{0,65}, {1.0000,1.0012}},
Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature [°C]", "Length [m]"}]

とすればよい.「Legended」というコマンドは、Legended[プロットするデータ名、"凡例に表示する文字列"]の型で使う.

プロットの色を、デフォルトの青色から黒色に変更するには、

In[9]:= ListPlot[data, PlotRange -> {{0,65}, {1.0000,1.0012}}, Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature [°C]", "Length [m]"}, PlotStyle -> Black]

と、「PlotStyle -> Black」を用いる。プロット点の種類やプロットの色は、これら以外にも 様々あるので、工夫して使い分けるとよい(どのような形や色が用意され、そのように指定す ればよいかは、適宜調べること).

#### 2.2.4 保存方法

プロットしたグラフを保存するには、グラフ上にカーソルを移動させ、右クリックして表示 されるコンテキストメニューから「**形式を選択してグラフィックスを保存**…」を選べばよい。そ の後の操作は、例えば MS Excel でブックを保存するのと同様で、ファイル名とファイル形式、 保存場所を指定する.

### 2.3 fitting の方法 ① (線形の場合)

2.3.0 fittingとは

得られたデータに"最もよく合う = fit する"ような直線または曲線(しばしば関数のパラ メータ)を求めること。得られた直線や曲線は、それぞれ近似直線や近似曲線とよばれる。近 似直線や近似曲線を表す関数は、最小二乗法や最尤法によって求められる。

#### 2.3.1 fitting の方法

Mathematica で線形 fitting を行う際には、次のコマンドを用いる:

```
In[10]:= fit = LinearModelFit[data, {t}, t];
```

これは、データ「data」に対して、fit するtの1次関数を求め、その結果を「fit」と名付ける、という意味である。ほかにも、fit するtの2次関数を求めたければ、{t}の部分を{t,t^2} に変えればよい。

これを実行すれば計算が始まり, 更に,

```
In[i1]:= fit[{"BestFit", "ParameterTable"}]
```

と入力すれば,

6		Estimate	Standard Error	t-Statistic	P-Value
$\text{Out[11]} = \{1.00002 + 0.0000174571t,$	1	1.00002	0.0000163532	61151.4	$4.29067 \times 10^{-19}$
ι,	t	0.0000174571	$4.19913  imes 10^{-7}$	41.5733	$2.00088 \times 10^{-6}$

という結果を得る.従って、求める近似直線の式は、

 $l/m = (1.75 \pm 0.04) \times 10^{-5} t/^{\circ}C + 1.00002 \pm 0.00002$ 

である.

近似直線をデータ点と共にプロットしたグラフをかくには、

In[12]:= Show[ListPlot[data, PlotRange -> {{0,65}, {1.0000,1.0012}}, Frame -> True, FrameLabel -> {"Temperature [°C]", "Length [m]"}, PlotStyle -> Black], Plot[fit["BestFit"], {t,0,65}, PlotStyle -> Black]]

のように、「Show」というコマンドを用いて、「ListPlot[]」と「Plot[]」とを繋げばよい. 尚, Plot[fit["BestFit"], {t, 0, 65}, PlotStyle -> Black]の意味は、近似直線「fit["Best Fit"]」を $0 \le t \le 65$ の範囲で、黒色でプロットする、ということである.

#### 2.4 完成形

前節までに説明した方法でかいて完成したグラフを,図1に示す.



図 1: 金属試料の長さと温度の関係

## 3 Mathematica を用いた fitting の方法 ②

"複雑な"関数にfit させたいとき,前章の方法では,(拡張された最小二乗法の)計算が収束 しなくなってしまう.本章では,この場合の対処法を,以下に示す過制動の測定結果を例に説 明する.

## 3.1 fitting の方法②(非線形 fitting)

#### 3.1.1 使用するデータ

本章で使用するデータは、「減衰振動の測定」におけるグリセリン水溶液中で円筒の運動が過 制動となるときの測定結果である。Excelファイル「data.xlsx」に、「gly」というシートを作 成し、以下のようにデータを並べる(A列が時刻t/s、B列が回転角 $\theta/rad$ のデータである)。

	A	В	С	D	E	F
1	0	0.15053				
2	5	0.07141				
3	10	0.02316				
4	15	0.00772				
5	20	0.00154				
6	25	0.00077				
7	30	0.00000				
8						
9						
10						

#### 3.1.2 非線形 fitting の方法

"複雑な"関数にfit させるときには, fitting する前に「初期値」を設定する必要がある.パ ラメータのおおよその値の見当を付け,その値を「初期値」として与える.この「初期値」の 与え方が悪いと,これもまた計算が収束しなくなってしまうため,値の見当の付ける際には注 意が必要だ.データと関数形とから,適当な初期値を見出す必要がある.

今回の例では,

$$\theta_2 = A \mathrm{e}^{\frac{-k + \sqrt{k^2 - 4Ic}}{2I}t} + B \mathrm{e}^{\frac{-k - \sqrt{k^2 - 4Ic}}{2I}t}$$

という形の関数に、前小節に示したデータを ftt させる.ただし、

I = 0.000664, c = 0.0000696

は定数とし、fittingのパラメータは、A,B,kの3つである. これらのパラメータの初期値は、

$$A = 0.3$$
,  $B = -0.2$ ,  $k = 0.00045$ 

とする.

```
In[13]:= datag = Import["data.xlsx", {"Data", "gly", All, 1;;2}]
```

としてデータを Mathmatica 上に読み込んだ上で,以上のことを,Mathematica 上のコマンド では,

と入力すればよい. ただし, Mathematica では,「I」は虚数単位を表す記号なので, 円筒の中 心軸まわりの慣性モーメント *I* を「II」としていることに注意せよ. これを実行すれば計算が 始まり, 更に,

```
In[18]:= fitg[{"BestFit", "ParameterTable"}]
```

と入力すれば,



という結果を得る.従って、この系の抵抗係数は、

 $k = (4.41 \pm 0.04) \times 10^{-4} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 

と求まる(無論, この数値が妥当かどうかの議論は必要である→どのように議論すればよいか 考えてみてください).

また、この運動を表すグラフは、図2である.



図 2: グリセリン水溶液中での円筒の運動(過制動).

## 4 おわりに

ここまでで、Mathematicaを用いた基本的なグラフのかき方の説明は、おしまいである.「基本的な」と書いたのは、この説明が全てではないし、最善なものでもない.後は各自で、より見やす

く、より分かりやすいグラフを描画するために、様々な工夫をしてほしい. 最後に、Mathematica の操作等で困ったときに、筆者がしばしば参考にするサイトを紹介する(以下の URL から適 当なページを探すよりも、単に検索エンジンで「Mathematica 軸ラベル」「Mathematica 方程 式」などと検索した方がラク).

 Wolfram 言語&システム ドキュメントセンター (https://reference.wolfram.com/language/index.html.ja)

また,Mathematica以外にもグラフを描画したり,解析をしたりすることのできるソフトウェ アは存在する.例えば,gnuplotやMATLABである.なんでもいいから,何か新しい(特に, コマンドで操作するタイプの)ソフトウェアの操作を身に付ける,ということは,大学生の間 にやっておくべきことじゃないかなぁ.時間もかかるので,なるべく早いうちから.