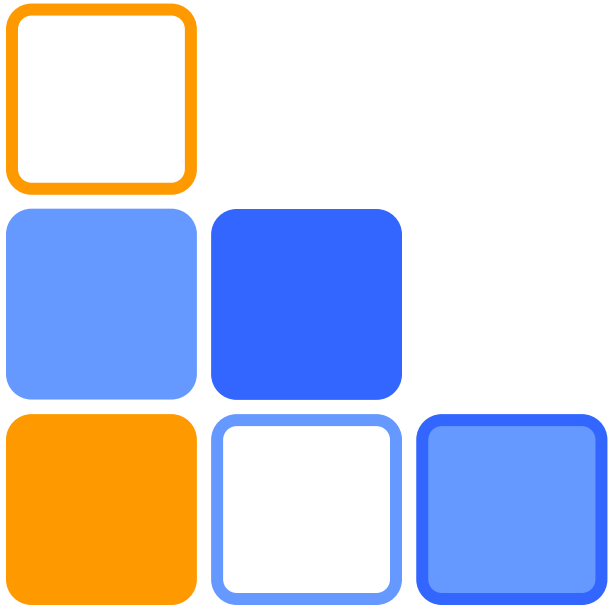


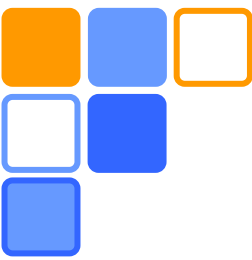
薬学情報処理演習 第1回

表計算ソフトの基本操作



奥菌 透

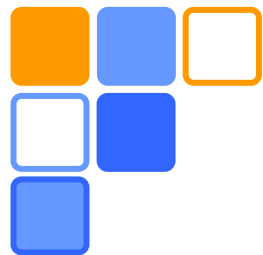
コロイド・高分子物性学



講義内容(予定)改

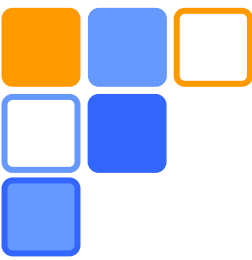
- 表計算ソフトの基本操作 (11/16)
- 常微分方程式の解き方(11/30)
 - 非線形化学振動反応のシミュレーション
- 偏微分方程式の解き方 (12/7)
- 休講 --- CBT本試 --- (12/14)
- 化学振動によって形成される時空間パターン (12/21)
- 表計算ソフトによる統計処理(12/21,4限)補
 - ブラウン運動のシミュレーション
- 機械学習1(1/11)
- 機械学習2(1/18)

毎回簡単なレポートを提出してもらう。



コンピュータの起動から終了まで

- コンピュータの電源を入れる。
- IDとパスワードを入力し、Windows にログインする。
- 目的の作業を行う。
 - アプリケーションの起動
 - アプリケーションの終了
- Windows のシャットダウンを行う。
 - 電源は自動的に切れる。



データの構成と入力

- 1つのエクセルファイルの中にはいくつかのシートがあり、シートの中には格子状に並んだセルがある。1つのセルに1個のデータ(数値や文字)が入る。
- 入力したい場所(セル)をクリックし、データを入力する。
 - 数値データは半角英数文字で入力する。

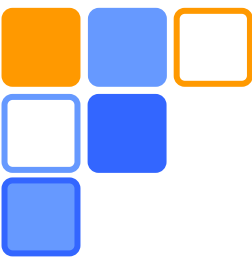
Sample	X	Y	$X+Y$	$X*Y$	X/Y	X^2	$(X*Y)^{(1/2)}$
A	1	23					
B	2	19					
C	3	17					
D	5	13					
E	7	11					
計							

表1

データの参照と演算

- データを用いて計算したいときには、先頭に「=」をつけて計算式を入力する。
- データはセルの番地（列番号と行番号からなる）によって参照できる。
 - 異なるシートのデータは（シート名）！（セル番地）の形で参照できる。

		A	B	C	D	← 列番号
行番号 →	1	Sample	X	Y	X+Y	
	2	A	1	23	=B2+C2	← B2の値と C2の値を 足した結果 をD2のセル に入れる。
	3	B	2	19		
	4	C	3	17		
	5	D	5	13		
	6	E	7	11		
	7	計				



セルのコピーと参照方法

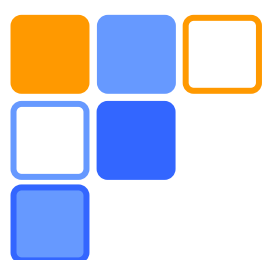
- 他のセルを参照しているセルを (Ctrl+c Ctrl+v やオートフィル機能によって) コピーすると、参照方法によって振る舞いが異なる。
 - － オートフィル機能: 選択領域を示す枠の右下にある小さな黒い四角をドラッグすると複数のセルのコピーができる。
- **相対参照**: 参照先のセルの番地は参照元との相対的な位置関係によって決まる。セルは列番号と行番号のみで参照する。
- **絶対参照**: 固定された位置のセルを参照するときに用いる。固定したい列・行番号の前に「\$」を付ける。

演算と関数の使用

- 様々な関数が用意されており、利用できる。
 - 数式/関数ライブラリで利用可能な関数がわかる。

		A	B	C	D	← 列番号
→ 行番号	1	Sample	X	Y	X+Y	
	2	A	1	23	=B2+C2	
	3	B	2	19		
	4	C	3	17		
	5	D	5	13		
	6	E	7	11		
	7	計	=SUM(B2:B6)			

↑ B2からB6の範囲のデータの総和を
B7に入れる。



演習課題(データの作成とグラフ表示)

□ van der Waals の状態方程式

$$p = \frac{nRT}{V - bn} - \frac{an^2}{V^2}$$

に基づいたPV曲線をいろいろな温度に対してプロットする。

□ 臨界点の圧力、体積、温度

$$p_c = \frac{a}{27b^2}, \quad V_c = 3nb, \quad T_c = \frac{8a}{27Rb}$$

でスケールした圧力 $\tilde{p} = p/p_c$ 体積 $\tilde{V} = V/V_c$ 温度 $\tilde{T} = T/T_c$ を用いると、状態方程式は

$$\tilde{p} = \frac{8\tilde{T}}{3\tilde{V} - 1} - \frac{3}{\tilde{V}^2}$$

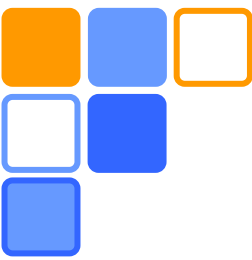
と書ける。

データの作成

- $\tilde{V}$ と $\tilde{T}$ のデータを等間隔で入力する。
 - ホーム/編集/フィル/連続データの作成 が便利
- $\tilde{V}$ と $\tilde{T}$ のデータから $\tilde{p}$ を計算する。
- オートフィル機能を利用する場合は参照方法に注意する。

	A	B	C	
1		0.8	0.85	← $\tilde{T}$
2	0.4	13.25	15.25	
3	0.45	3.470899	4.613757	
4	0.5	=8*B\$1/(3*\$A4-1)-3/\$A4^2		← $\tilde{p}(\tilde{T}, \tilde{V})$
5	0.55			

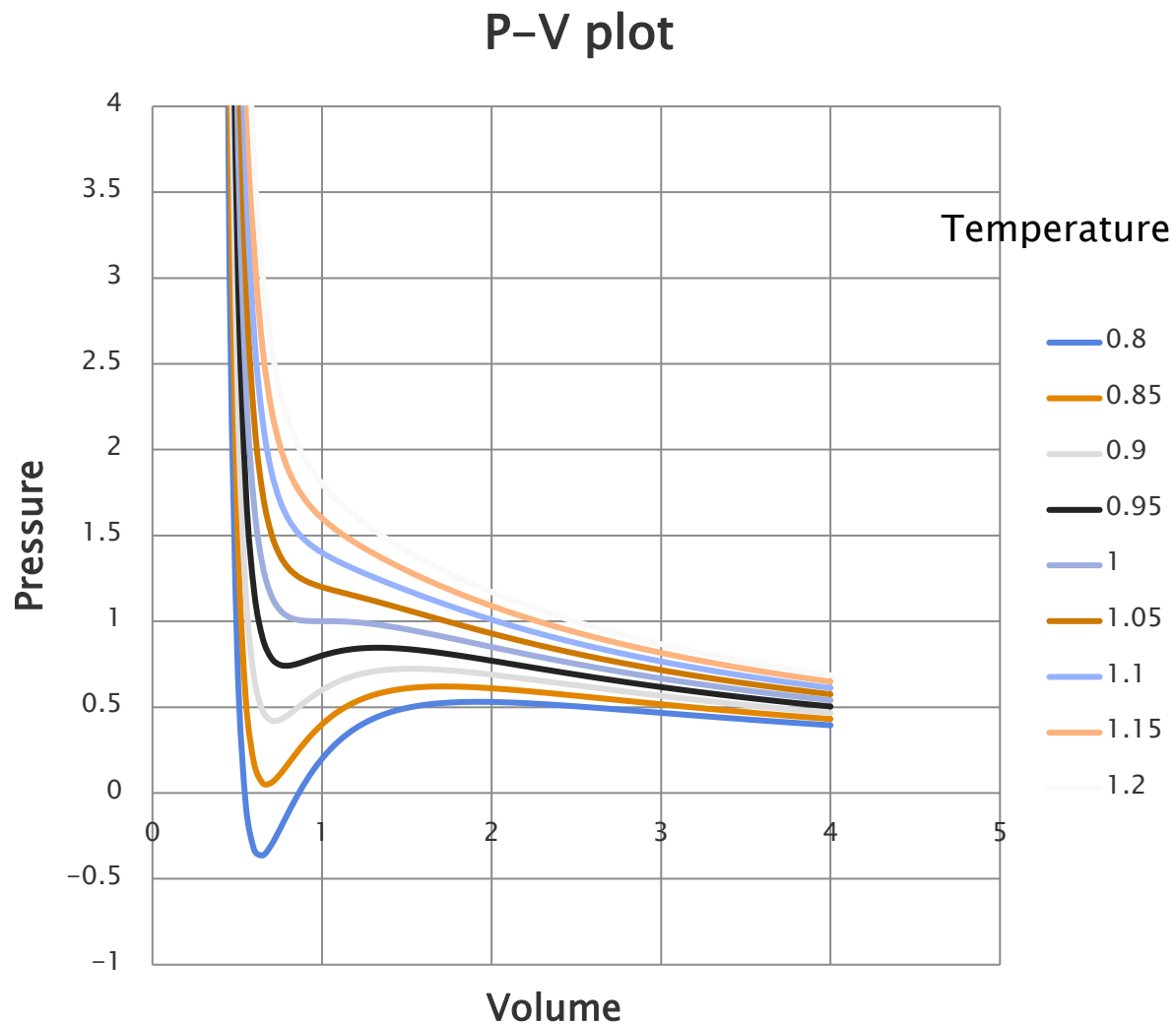
↑ $\tilde{V}$

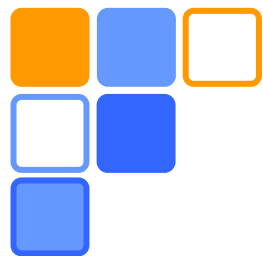


グラフ表示方法

- 表示したいデータ範囲を選択し、**挿入/グラフ/散布図**でグラフの描かれたオブジェクトができる。
- 望みのグラフが得られない場合には、
 - (データ領域から離れたセルを選んで)
 - **[挿入/グラフ/デザイン]データの選択**で
 - **追加** をクリック
 - **系列名** に適当な名前を記入
 - **系列Xの値** X座標データが入っているセルの範囲を指定
 - **系列Yの値** Y座標データが入っているセルの範囲を指定
 - 同じ面に複数のグラフを表示したい場合には、**追加** をクリックし、上記の操作を繰り返す。
- **グラフツール** を用いて、軸の調整やタイトルの編集などを行う。

グラフの表示例





レポート

- 演習課題をレポートとしてA4用紙1枚にまとめ、学籍番号、氏名（自筆）、提出日を明記して、できるだけこの時間内に提出。
- 作成したデータを全て記載する必要はない。
- グラフのスタイルは自由。複数のグラフを作成してもよい。
- レポートは MS WORD などを用いて作成してもよい。
- 印刷範囲に注意すること！