

Programa SigmaPlot

Software de gráficos científicos

EURICO C. C. MELO *

Talvez porque sou do tempo em que os computadores serviam para fazer contas, e apenas eram usados em tarefas impensáveis de realizar à mão, continuo ainda avesso a utilizá-los em trabalhos em que se mostram incapazes de competir em velocidade e rigor com os métodos clássicos.

Nos últimos 2-3 anos a situação tem melhorado substancialmente no que respeita aos processadores de texto. O tremá voltou a ser banido das palavras portuguesas e a viscosidade voltou a poder representar-se por η . Mas no que respeita à apresentação gráfica de dados científicos as firmas produtoras de software têm-se mostrado maderistas. Quantas folhas de cálculo nem sequer dispõem da opção de gráficos XY no meio de uma orgia de camemberts e pizzas? Quantos programas gráficos lhe dão possibilidade de representar as datas em esquimó(?) mas nem um χ^2 zinho se deixam convencer a escrever?

O programa SigmaPlot na sua versão 4.1 contrasta com este software de costas viradas à ciência e produz gráficos científicos com verdadeira qualidade de publicação constituindo, se não o substituto do desenhador, pelo menos uma aproximação razoável. É

certamente complexo, e eu desaconselho vivamente o seu uso ocasional, mas para aquele que com frequência tem que fazer gráficos para publicar considero-o uma boa escolha. Veja o exemplo da Figura 1. Nela encontra muitos dos aspectos que tornam a realização de um gráfico científico em computador uma dor de cabeça.

A inclusão de letras gregas (todas) e expoentes nos títulos dos eixos, a definição independente da espessura de traço de títulos, eixos, numeração das escalas, marcas nos eixos, etc., as escalas controláveis manualmente com total liberdade e ainda a possibilidade de mudar de escala a meio de um eixo, são características difíceis de encontrar num só programa. Repare-se também que os eixos se cruzam antes da origem como é da norma quando existem pontos experimentais sobre os eixos. Todas estas "facilidades" não são fáceis de conseguir porque cada um destes pormenores é uma opção sua. Praticamente todos os "defaults" existentes no programa pode ser ultrapassados manualmente. Tomemos como exemplo a numeração dos eixos. Dados os valores máximo, mínimo e da divisão, a numeração é posta automaticamente em cada marca. Pode porém escolher de quantas em quantas marcas é colocado o número, qual a notação deste número, a sua precisão e

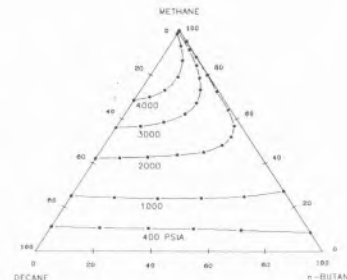


Fig. 3 – Diagrama ternário feito em SigmaPlot 4.1.

escala, um prefixo, ou sufixo, etc. Se, mesmo assim, não encontrar o formato que lhe convém pode simplesmente escrever uma lista dos valores, texto ou expressões e dizer ao programa para as usar no local adequado da escala dos eixos. Pode ainda, evidentemente, numerar a escala usando o modo texto colocando este adjacente à escala onde lhe aprouver.

Os pares XY, em número que pode ir até 65K pontos, provêm de uma espécie de folha de cálculo rudimentar, não porque com ela se não possam fazer cálculos complexos mas porque não tem a simplicidade de utilização de uma folha de cálculo comercial. Uma linguagem de programação própria e alguns programas de minimização de desvios a funções não lineares vêm incluídos no programa dando uma total flexibilidade de uso. Um exemplo de ajuste é apresentado na Fig. 2.

Os algoritmos disponíveis "de smoothing" como um spline ou polinômios de grau até 10 não se mostram suficientes para muitas tarefas. A inclusão de polinômios de Tchebichev poderia conduzir a melhores resultados em muitos casos. Devo confessar que pessoalmente, quando se trata de construir uma "linha para guiar a vista", prefiro a cobra de desenhador ou um bom conjunto de curvas francesas. Não só é mais rápido, como evita a ilusão de que se trata de uma análise de dados experimentais.

Outra limitação do SigmaPlot é a falta de regularidade no traçado de tracejados. Deve ser humilhante para um computador correr um programa

Fig. 1 – Gráfico exemplificativo das possibilidades básicas do SigmaPlot 4.1. Embora tendo excepcionais possibilidades sob o ponto de vista de representações, observe-se que o desenho das letras é de qualidade muito inferior àquela a que estamos habituados nos programas mais dirigidos a "encher o olho" do que a cabeça.

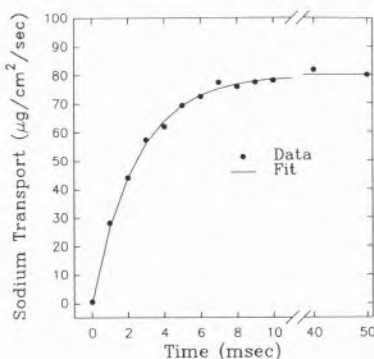
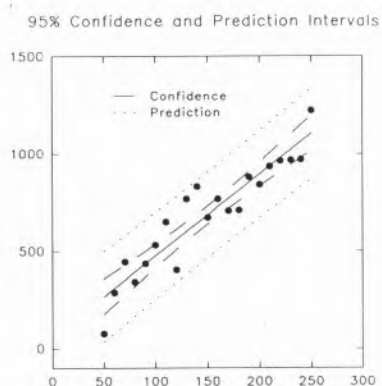


Fig. 2 – Exemplo de regressão linear indicando os intervalos de confiança.



que se atrapalha mais do que eu a espaçar um traço-ponto. Se no caso de "smoothing" temos a possibilidade de escrever uma rotina que substitua a existente incluída no programa, o que acontece com os tracejados não é ultrapassável. Trata-se portanto de um importante defeito que se espera ver corrigido na novas versões.

Para melhor ajuizar das potencialidades deste software adicionamos a Fig. 3. Diagramas ternários são o dia-a-dia de alguns químicos e o SigmaPlot 4.1 pensou neles.

De facto, este programa é produzido por uma companhia que se dedica exclusivamente a soft e hardware científicos, Jandel Scientific, e a sua produção reflecte o conhecimento das necessidades do mercado. A nova versão, que ainda não possuo, já faz gráficos 3D o que também é, sem dúvida, importante.

A composição de múltiplos grá-

ficos numa só página é um dos pratos fortes deste programa. Eixos comuns, "inserts" ou eixos múltiplos num só gráfico são fáceis de manusear desde que se entendam os conceitos com que foi constituído o programa. Para o SigmaPlot, GRAPH é o grande objecto (página) que contém TEXT e PLOTS. Estes últimos são entidades autónomas resultantes da justaposição de AXIS, LINES, POINTS e TEXT. A interacção entre estes diferentes elementos é muito flexível, o que constitui o segredo das potencialidades deste utilitário.

O SigmaPlot constitui para mim a fracção gráfica de um dos meus sonhos. Qual é ele? Pois ter uma **Folha de Cálculo Científica**. Isto é, um programa cuja interface com o utilizador tivesse a mesma simplicidade de uma folha de cálculo comercial mas que, para além de dispor de funções intrínsecas poderosas como ter um Matlab™ ou Mathematica™, pudesse também

usar funções definíveis pelo utilizador em C e/ou FORTRAN. A secção gráfica de tal programa seria então muito bem confiada ao SigmaPlot.

Em conclusão, o SigmaPlot 4.1 não substitui o desenhador nem em qualidade do produto final, nem em versatilidade, nem em tempo gasto por si. Porém, se a química o aborrece, se gosta de brincar com computadores ou se tem um daqueles gráficos que provocam no seu desenhador um olhar que lhe dá vontade de desistir da inclusão do gráfico no artigo, é a vítima ideal para o SigmaPlot. Vai ver que não fica desiludido e dará o devido valor à sabedoria popular que, mesmo antes de haver computadores pessoais, dizia: "Depressa e bem não faz ninguém".

* Instituto Superior Técnico e Centro de Tecnologia Química e Biológica



Espectrofotómetro

UV-VIS CADAS 100.

ENGENHOSAMENTE SIMPLES
EM ANÁLISE DE ÁGUAS

SIMPLESMENTE ENGENHOSO
NA RESPOSTA AOS MAIS COMPLEXOS
PROBLEMAS ANALÍTICOS



DR LANGE



labNORMA

Equipamento de controlo de qualidade e investigação, lda.

RUA INFANTARIA, 16, 41 - 2.º 1200 LISBOA
TELEFONES 69 24 14 - 69 24 31 FAX 65 62 62