

IFUSP/P 630
B.I.F. - USP

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

PUBLICAÇÕES

INSTITUTO DE FÍSICA
CAIXA POSTAL 20516
01498 - SÃO PAULO - SP
BRASIL

IFUSP/P-630

AJUSTE

MANUAL DO USUÁRIO

27 JUL 1987



Philippe Gouffon

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Março/1987

INDICE

| | |
|---|----|
| I - INTRODUÇÃO | 4 |
| II - COMANDOS BASICOS | |
| II.0 - Introdução | 6 |
| II.1 - Leitura de dados : comandos DA e LD | 7 |
| II.2 - Definição de funções : comandos FU e PA | 8 |
| II.3 - Preparo de ajuste : comandos PE e CO | 9 |
| II.4 - Obtenção de resultados : comandos RE e TA | 10 |
| II.5 - Gráficos : comandos VI e PL | 10 |
| II.6 - Diversos : comandos LI e LF | 11 |
| III - COMANDOS EM DETALHES | |
| III.0 - Introdução | 12 |
| III.1 - Entrada e saída de dados | 13 |
| III.2 - Alteração e correção de dados | 20 |
| III.3 - Transformação de dados | 25 |
| III.4 - Mudança de eixos | 27 |
| III.5 - Definição e controle dos parâmetros do programa | 30 |
| III.6 - Saída de resultados | 39 |
| III.7 - Gráficos | 44 |
| III.8 - Diversos | 49 |
| IV - EXEMPLOS DE USO | |
| IV.1 - Ajuste de uma função a dados | 54 |
| IV.2 - Cálculo de uma função e seu gráfico | 55 |
| IV.3 - Integração e derivação | 56 |
| IV.4 - Interpolação de dados, smoothing | 57 |
| IV.5 - Teste de hipóteses | 58 |
| V - FUNÇÃO DO USUARIO | |
| V.0 - Introdução | 59 |
| V.1 - A função externa FCTN | 59 |
| V.2 - A derivada da função externa FDERIV | 60 |
| V.3 - Montagem da função do usuário | 61 |
| V.4 - Informações adicionais | 62 |
| VI - USO COM COMANDO INDIRETO | |
| VI.0 - Uso do comando indireto | 65 |

APENDICES

| | |
|---|-----|
| A - Lista de comandos | 67 |
| B - Lista de funções internas | 77 |
| C - O Status | 82 |
| D - Os erros | 83 |
| E - Algoritmos usados | 93 |
| F - Capacidade e limites | 96 |
| G - Rotinas e overlay | 97 |
| H - Montagem | 106 |
| I - Adaptação a outros sistemas | 107 |

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO =====

O AJUSTE é um programa interativo que funciona na base de comandos dados pelo usuário no terminal. A finalidade básica de AJUSTE é ajustar curvas a dados por mínimos quadrados. Além deste objetivo, AJUSTE permite ao usuário alterar seus dados, efetuar uma série de transformações, calcular funções e fazer gráficos.

O presente manual descreve a implantação de AJUSTE num PDP11 rodando o sistema operacional RSX11M. Implantações em outros computadores podem ser mais restritas, principalmente no que toca à função do usuário, recurso que permite a AJUSTE trabalhar com qualquer função, sem ter que ser recompilado. Este manual descreve a versão 1.a, que tem como capacidade a análise de até 100 pontos experimentais, e funções com até 10 parâmetros. Estes limites são discutidos no apêndice F.

O manual apresenta AJUSTE em dois passos. Por ser um programa de muitos recursos, alguns mais complexos, AJUSTE poderia parecer difícil de ser operado. Por isto, os comandos básicos necessários para ajustar curvas a dados e visualizar curvas são dados inicialmente no capítulo II. Este capítulo descreve um conjunto de 12 comandos, na sua forma mais simples. Estes são suficientes para o dia a dia, e permitem efetuar o grosso das operações necessárias no tratamento de dados ao qual se destina AJUSTE.

O capítulo III descreve o conjunto completo de comandos incluindo os descritos no capítulo II, de forma completa e padronizada, com exemplos. Os comandos são divididos em 8 categorias de aplicação. A leitura deste capítulo não é

necessária para quem deseja um uso superficial e rápido de AJUSTE. Mas para se ter uma visão do que AJUSTE é capaz de fazer, esta leitura é fundamental. A lista atual dos comandos está no apêndice A, e é composta de 63 comandos, na maioria mnemônicos.

O capítulo IV descreve alguns exemplos de uso típico deste programa, que não se restringe a ajustar funções a dados. O capítulo V descreve a função do usuário, uma função externa a AJUSTE que estende sua capacidade a praticamente qualquer função. Uma breve descrição do mecanismo usado na comunicação entre AJUSTE e a função também é dada. Finalmente, o capítulo VI mostra como AJUSTE pode redirecionar a entrada de comandos para um arquivo, o que permite seu uso em batch, ou criar uma biblioteca de procedimentos a serem repetidos.

Os apêndices completam as informações dadas no texto, e são de dois tipos: os dirigidos ao usuário comum (A a D), cobrindo as listas de instruções, funções, status e erros, e os dirigidos a quem for implementar AJUSTE (E a I), que cobrem detalhe sobre algoritmos e procedimentos de instalação.

C A P I T U L O I I

COMANDOS BASICOS

II.0 - INTRODUÇÃO

Este capítulo descreve uma lista inicial de 12 comandos que formam o conjunto básico de operação de AJUSTE. Eles estão divididos em 5 classes de funções, que são formadas pelos comandos de :

- a - Leitura de dados
- b - Definição de funções
- c - Preparo de ajuste
- d - Obtenção de resultados
- e - Gráficos
- f - Diversos

Esta divisão está orientada para a finalidade básica de AJUSTE. Para ajustar uma função a dados experimentais, é necessário ler dados (classe a), definir a função a ser ajustada e seus parâmetros iniciais (classe b), definir o tipo de ajuste e efetuá-lo (classe c), obter resultados (classe d), e finalmente visualizá-los (classe e). Dois comandos de auxílio são dados na classe f.

Se o usuário quer apenas graficar dados ou uma função, esta divisão permite também descobrir os comandos necessários. Caso uma descrição mais detalhada seja necessária, basta consultar o capítulo III, já que a forma discutida aqui é resumida.

Todos os comandos são formados de duas letras. Alguns tem parâmetros, que devem ser dados após o comando seguido de um "=", separados por vírgulas. Por exemplo, o comando

VI=1,10,0.1 gera um gráfico para x variando de 1 a 10 em passo de 0.1

II.1 - LEITURA DE DADOS : comandos DA e LD

A leitura de dados pode ser feita tanto a partir do terminal como de um arquivo de dados em disco. O formato de entrada é de 3 campos de 14 caracteres (3G14.0), na ordem de (X,Y,SY), sendo SY o erro de Y, opcional. Os valores podem conter o expoente E, e podem ou não ter o ponto decimal. Na ausência deste, o ponto é posto após o último dígito. Os dados são entrados um ponto por linha, até um máximo de 100 pontos.

Comando DA : (mnemônico de DAdos)

Sintaxe : DA=arquivo

Parâmetro : arquivo - nome do arquivo a ser lido. Se a entrada for do terminal, use
arquivo = TI: (DA=TI:)

AJUSTE pede em seguida o número de pontos a serem lidos, e o número de pontos que devem ser pulados antes da leitura. Por exemplo, um arquivo de 80 pontos do qual se deseja ler os pontos 40 a 60 deve ser apresentado com tendo 21 pontos a ler, pulando 39 pontos.

Caso o arquivo de entrada seja o terminal (TI:), AJUSTE ignora o número de pontos a pular, e indica que está pronto a ler os dados com uma mensagem "AJU n)", onde n é o número do ponto a ser lido. O número de pontos a serem lidos é apenas indicativo. Caso haja um número menor de pontos, AJUSTE parará a leitura no último valor, sem erro de leitura. No caso inverso em que há mais pontos que o pedido, a leitura terminará como pedido. AJUSTE indica erros de leitura. Os valores errados aparecem na listagem como zeros. Os dados são ordenados por ordem crescente de X após a leitura.

Comando LD : (mnemônico de Lista Dados)

Sintaxe : LD

O comando LD lista na tela os dados lidos. A tabela é composta de 5 colunas, a primeira contendo o número do ponto, a segunda um carácter indicativo do status do ponto, e as três seguintes os valores propriamente ditos. O status do ponto está descrito no capítulo III.1.

II.2 - DEFINIÇÃO DE FUNÇÕES : comandos FU e PA

AJUSTE tem uma lista de 15 funções internas (listadas pelo comando LF descrito abaixo). Para fazer qualquer cálculo ou ajustar uma função, é preciso definir a função desejada, que é identificada por um número e definida pelo comando FU, e inicializar os valores dos parâmetros assim como indicar quantos parâmetros são utilizados. Isto é feito pelo comando PA.

Comando FU : (mnemônico de Função)

Sintaxe : FU=n

Parâmetros : n - número da função.

Caso n seja omitido, o comando FU indica a função em uso. Caso n seja nulo, a função é cancelada. n deve ser positivo e um número válido de função, de 1 a 15.

Comando PA : (mnemônico de PARâmetros)

Sintaxe : PA

AJUSTE pede o número de parâmetros a serem usados, e em seguida o valor destes. O capítulo III.5 mostra como alterar um parâmetro específico diretamente. O número de parâmetros é mandatorio. Os valores iniciais anteriores podem ser mantidos dando apenas um "return", isto é, linhas em branco indicam que o valor atual deve ser mantido. Portanto, para zerar um valor, um 0 deve ser dado explicitamente. O formato

dos valores é de até 14 dígitos (514.0), com ou sem expoente E, com ou sem ponto decimal.

II.3 - PREPARO DE AJUSTE : comandos PE e CO

Dois comandos ainda são necessários para efetuar o ajuste. Primeiramente, é preciso definir o tipo de ajuste a ser efetuado, ou seja, como os pontos serão ponderados, o que é feito pelo comando PE. Em seguida, o ajuste é iniciado com o comando CO.

Comando PE : (mnemônico de PEso)

Sintaxe : PE=tipo

Parâmetros : tipo - define o tipo de ajuste, que pode ser

S - sem peso

E - peso estatístico

I - peso instrumental

Caso o parâmetro seja omitido, AJUSTE indicará no terminal o tipo em uso. Sem peso corresponde a um ajuste em que todos os pontos tem peso 1 (erro=1). O valor do Chi quadrado pode não ter sentido. O peso estatístico usa como erro a raiz quadrada do valor da ordenada, e como peso o inverso da ordenada. O peso instrumental usa o erro dado nos pontos, sendo o peso definido como o inverso do quadrado do erro.

Comando CO : (mnemônico de COmece ou COntinue)

Sintaxe : CO

AJUSTE inicia o ajuste com até 30 iterações, terminando por convergência ou por esgotar o limite de iterações. CO só é executado se a função foi definida, existirem dados com um tipo de ponderação, e se valores iniciais foram dados.

II.4 - OBTENÇÃO DE RESULTADOS : comandos RE e TA

Uma vez terminado um ajuste, varias formas de se obter os resultados são disponíveis. Dois comandos, RE e TA, são apresentados aqui. Saídas gráficas são o assunto seguinte. Ao terminar um ajuste, AJUSTE indica o fato ao pedir um comando, identificando-se com um (AJU). Nesta hora, pode-se pedir os resultados pelo comando RE, ou uma tabela do ajuste com o comando TA.

Comando RE : (mnemônico de REsultado)

Sintaxe : RE

AJUSTE lista no terminal todas as informações relevantes ao ajuste : o tipo de função, que dados foram lidos, quais foram usados, o chi quadrado reduzido e a probabilidade de se obter um chi quadrado acima do obtido, e obviamente os parâmetros ajustados. Algumas mensagens podem aparecer no fim do ajuste, indicando qualquer anormalidade.

Comando TA : (mnemônico de TAbela)

Sintaxe : TA

AJUSTE lista no terminal uma tabela contendo os dados usados no ajuste, os valores ajustados e os resíduos quadráticos.

II.5 - GRAFICOS : comandos VI e PL

AJUSTE possui uma certa capacidade gráfica, detalhada em III.7. Neste capítulo básico, dois comandos são apresentados na sua forma mais simples, que permitem fazer gráficos no terminal (VI) ou no plotter (PL). A sintaxe é a mesma para ambos os comandos.

Comando VI : (mnemônico de VIdeo)

Sintaxe : VI ou $VI=X_0, X_n, dX$

Comando PL : (mnemônico de Plota)

Sintaxe : PL ou $PL=X_0, X_n, dX$

Parâmetros : X_0 - abscissa inferior a ser graficada
 X_n - Abscissa superior a ser graficada
 dX - Passo de abscissa para a função

Sem parâmetros, o gráfico usa os valores limites definidos pelos dados usados no mais recente ajuste, e com incremento, caso haja uma função, de um centésimo do intervalo de abscissa graficado. Caso não haja ponto e se deseja graficar apenas uma função, deve-se especificar pelo menos os limites inferiores e superiores de abscissa a graficar.

Quando o comando VI é dado num terminal não reconhecido como gráfico, o gráfico é feito com a escala rodada de 90 graus, a ordenada sendo horizontal. A resolução é a dos caracteres na tela.

Ao usar o comando PL, certifique-se de que o plotter está ligado, com papel e caneta, e com os limites setados.

II.6 - DIVERSOS : comandos LI e LF

Dois comandos são aqui apresentados nesta categoria : os comando de auxilio LI e LF.

Comando LI : (mnemônico de LIsta Instruções)

Sintaxe : LI

Uma tabela de todas as instruções é dada no terminal, com uma pequena explicação de cada comando.

Comando LF : (mnemônico de LIsta Funções)

Sintaxe : LF

Lista no terminal todas as funções definidas internamente a AJUSTE, assim como o número que deve ser usado no comando FU.

C A P Í T U L O I I I

COMANDOS EM DETALHES

=====

III.0 - INTRODUÇÃO

AJUSTE possui uma lista de 63 comandos. Este capítulo trata de descrever cada um dos comandos existentes, indicando sua sintaxe, seus parâmetros, e eventuais variantes e comandos relacionados. Para facilitar a apresentação, estes comandos foram divididos em 8 categorias de utilidade. O apêndice A lista estes comandos por ordem alfabética e por classe.

Todos os comandos de AJUSTE são formados por duas ou mais letras. Apenas os dois primeiros caracteres são usados na identificação do comando. Os comandos tentam ser mnemônicos. Caso o comando necessite de algum parâmetro, AJUSTE procura na linha a primeira ocorrência do caracter "=" para iniciar a decodificação. Os parâmetros devem ser separados por vírgulas. Alguns podem ser omitidos, outros são mandatórios. Esta situação consta dos comentários de cada comando. Algumas instruções são bi-direcionais, isto é, servem tanto para definir um valor como para listar este valor.

Os parâmetros podem ser números (inteiros ou reais), texto (nome de arquivo, legendas) ou um caracter. Os números tem formato livre, e podem ocupar um campo de até 14 casas, com ou sem expoente, e podem ser separados por vírgulas se ocuparem menos de 14 caracteres. Alguns comandos pedem número inteiros (tipo número do parâmetro), que devem ser dados como tais para evitar erro de conversão. Os textos podem ter algum limite. Para arquivos, este é normalmente

limitado pelo tamanho de uma linha de comando, que é de 80 caracteres. Quando o parâmetro do comando é uma letra, esta deve ser dada tal qual como indicada na sintaxe. AJUSTE não faz distinção entre maiúsculas e minúsculas.

AJUSTE possui uma série de parâmetros internos padrões que podem ser modificados por comandos, como a convergência no ajuste, por exemplo, e podem ser obtidos ou por comando ou pelo comando ST (status). Internamente a AJUSTE, existe uma variável que contém o status do programa, em que cada bit tem um significado, o que está detalhado no apêndice C. Este status aparece nas mensagens de erro, e pode ser usado para finalidade de localizar erros obscuros. A finalidade maior deste status é a de evitar que o usuário force a execução de comandos que não fazem sentido, tipo calcular uma função sem que ela tenha sido definida. Alguns comandos modificam este status. Isto é indicado quando é o caso.

Cada comando pode gerar alguma mensagem de erro. Estes erros são numerados, e o apêndice D contém uma lista destes erros.

No que segue, tudo que for impresso por AJUSTE ou pelo sistema aparece sublinhado, salvo os casos indicados especificamente. Por exemplo, em

AJUSTE

AJUSTE escreve AJU>, esperando um comando, e o usuário digita RE no teclado.

III.1 - ENTRADA E SAÍDA DE DADOS

AJUSTE é um programa interativo, isto é, interage através de comandos com o usuário. Postando, o teclado é o meio natural de entrada de dados. Mas em geral, o usuário deseja analisar dados que foram gerados por outros programas, ou por um editor. AJUSTE permite a leitura dos dados de arquivos em disco.

Da mesma forma, a saída é feita primordialmente para a tela, mas pode ser redirecionada para arquivos em disco e

para a impressora. A saída gráfica é objeto do capítulo III.7, a parte dos comandos tratados aqui. Existem comandos que tem saída normal para disco.

III.1.a - COMANDOS DE ENTRADA

Existem 4 comandos de leitura de dados. Três deles tratam da leitura de dados já prontos, e o quarto histograma números, gerando um histograma de até 100 canais, que é guardado pelo AJUSTE como "dados". Os comandos documentados aqui são :

DA - lê dados de um arquivo
DE - lê um espectro
DF - lê dados com formato do usuário
HI - histograma um arquivo

Comando DA

Mnemônico de : DAdos
Sintaxe : DA=arquivo
Parâmetro : arquivo - nome do arquivo a ler - Mandatório
Erros : 33,34,44
Status : Seta 16,256
Limpa 1,4,8,128,4096,8192

AJUSTE escreve no terminal a mensagem :

Numero de pontos, numero de pontos a pular :

ao que deve-se responder dando o número de pontos a serem lidos, e eventualmente, o número de pontos a pular antes de iniciar a leitura propriamente dita. No caso da leitura por terminal, este segundo número é ignorado. Caso o número de pontos seja desconhecido, basta dar zero pontos (RETURN), que o programa se encarregará de ler até 100 pontos. A leitura pára por esgotamento de dados ou n pontos lidos se n for dado.

O comando DA lê dados num formato padrão (3614.0), na ordem (X,Y,Sy), onde X é a abcissa, Y a ordenada e Sy seu erro (opcional), um ponto por linha. Os valores podem ocupar um campo de 14 caracteres cada, ou serem separados por vírgulas. Em caso de erro de leitura, um erro é impresso, e

o valor errado zerado. Para efeito de ajuste, não há dados lidos, isto é, a região parcial (ver comando RP) está indefinida. Quando os dados estão corretos, todos os valores lidos estão em uso, e os valores são ordenados em ordem crescente.

Por exemplo, se o arquivo EXEMPLD.DAT contém :

```
3,5,,1
5,7,0.2
7,12,.3
```

o comando DA=EXEMPLD.DAT lerá estes três pontos.

Caso a leitura deva ser feita a partir do terminal, o comando a ser dado é DA=TI: (o arquivo é o terminal, TI:). Nesta situação, AJUSTE pede os dados explicitamente, com uma mensagem :

AJU n)

onde n é o número do ponto. A leitura pára com um (RETURN) ou um (^Z).

Os dados podem ser entrados em qualquer ordem. Eles serão ordenados posteriormente.

Comando DE

Mnemônico de : Dados de Espectro
Sintaxe : DE=arquivo
Parâmetro : arquivo - nome do espectro a ler - Mandatório
Erros : 9,22,24,44
Status : Seta 16,64,128,256
Limpa 1,4,8,4096,8192
Observações : Define peso como estatístico

A finalidade de comando DE é a de ler espectros gravados em binário segundo o formato aceito pelos programas de aquisição de dados do Laboratório do Acelerador Linear. AJUSTE escreve a mensagem :

Primeiro canal a ser lido :

ao que deve-se dar o número desejado. Lembre-se que o primeiro canal de um espectro é o canal 0. Em seguida, AJUSTE pede :

Ultimo canal a ser lido :

ao que deve-se dar um valor que corresponda a um canal existente do espectro e tal que o número de canais lidos não ultrapasse 100.

Ao ser dado o comando DE, AJUSTE supõe que o tipo de ajuste a ser feito seja com ponderação estatística (veja comando PE), e já calcula os pesos. Um gráfico feito em seguida mostrará então barras de erro correspondentes à raiz quadrada da contagem.

Comando DF

Mnemônico de : Dados com Formato

Sintaxe : DF=arquivo

Parâmetro : arquivo - nome do arquivo a ler - Mandatório

Erros : 33,24,44

Status : Seta 16,256
Limpa 1,4,8,128,4096,8192

O comando DF é em tudo igual ao comando DA documentado acima, com uma pergunta adicional, feita imediatamente em seguida ao comando, antes, portanto, da pergunta do número de pontos :

Format (entre parenteses) :

Nesta hora, deve-se entrar com formato de entrada, com sintaxe FORTRAN. O formato deve ser dado correto sintaticamente, e portanto, deve estar entre parenteses, sob pena de AJUSTE abortar. A leitura é feita na ordem (X,Y,Sy). Caso se deseja ler dados numa outra ordem, a especificação de formato T pode ser usada para indicar as colunas onde estão a abcissa, a ordenada e o erro. Por exemplo, seja um arquivo FOF0.DAT contendo :

| | | |
|-----|----|-----|
| 10. | 1. | 1.0 |
| 15. | 2. | 1.0 |
| 20. | 3. | 1.2 |
| 30. | 4. | 1.5 |

em que a primeira coluna é a ordenada, a segunda a abcissa e a terceira o erro, gravados com formato (F5.0,F5.0,F5.1). Estes dados poderão ser lidos com o comando DF :

AJU>DF=FOF0.DAT

Format (entre parentese) : (T6,F5.0,T1,F5.0,T11,F5.1)

Numero de pontos,.....

Este formato manda ler X (a primeira leitura) a partir da coluna 6, com campo de 5 caracteres, em seguida Y a partir da coluna 1, e finalmente o erro Sy a partir da coluna 11, com formato F5.1. A leitura é sempre de um ponto por linha.

Toda as observações do comando DA são válidas. Internamente, o comando DA nada mais é que o comando DF com formato pre-definido (3G14.0) !

Comando HI

Mnemônico de : HIstograma

Sintaxe : HI=arquivo

Parâmetro : arquivo - arquivo a histogramar - Mandatório

Erros : 3,33,34,44

Status : Seta 16,256
Limpa 1,4,8,128,4096,8192

O comando HI histograma o arquivo dado, que deve conter uma série de valores, um por linha, gravados em campo de 14 caracteres. Em seguida ao comando, AJUSTE pede :

Número de pontos :

Caso a resposta seja nula, AJUSTE lê até 32767 pontos ou o fim do arquivo. Após esta resposta, AJUSTE pede :

Centro do primeiro intervalo, largura do intervalo :

Caso a largura do intervalo seja nula, AJUSTE lerá o arquivo e imprimirá a mensagem :

Lidos xxx pontos com media=yyy e desv. Pad.=yyy

após o que voltará a fazer a pergunta sobre os intervalos. Este recurso permite avaliar um valor razoável de intervalo de histogramação. A leitura é então repetida.

Quando a leitura é feita do terminal (arquivo = TI:), AJUSTE pede os valores colocando um nnn no início da linha, onde nnn é o número do valor a ser lido.

Se forem dados o centro do intervalo e a largura, AJUSTE lerá o arquivo, histogramando os valores. Ao final, um relatório é escrito sobre este histograma :

Lidos xxx pontos com media=yyy e desv. Pad.=yyy
Histograma de xxx a yyy com nnn pontos fora

indicando os limites efetivamente histogramados, e quantos valores caíram tanto à esquerda do valor inferior como à direita do valor superior, que é o primeiro intervalo + 99 vezes o intervalo.

III.1.b - COMANDOS DE SAIDA

Nesta categoria, existem 4 comandos que listam os valores lidos, ou dão alguma informação. São estes os comandos documentados aqui :

LD - lista dados no terminal
GR - grava os dados
GH - grava os dados sob forma de histograma
MD - fornece a média dos dados lidos.

Comando LD

Mnemônico de : Lista Dados
Sintaxe : LD ou LD=X₀,X_n
Parâmetros : X₀,X_n - faixa de abscissa a listar, opcional
Erros : 11
Status : inalterado

O comando LD lista no terminal os dados existentes. Esta tabela tem 5 colunas : a primeira indica o número do ponto, que pode ser usado para o comando AP (apagar o ponto). A segunda coluna contém um indicativo do status do ponto, segundo a tabela :

* - ponto selecionado para ajuste
branco - ponto fora da região de ajuste
E - ponto eliminado (pode ser restaurado)

Os pontos "eliminados" ficam no fim da lista. Os pontos selecionados serão usados em ajustes e gráficos. Veja no comando EL a descrição mais detalhada da disposição dos pontos internamente a AJUSTE

As três colunas seguintes listam as abscissas, ordenadas e os erros.

Se os parâmetros X₀ e X_n forem dados, apenas os dados cuja abscissa caia no intervalo definido serão listados.

Comando GR

Mnemônico de : GRave
Sintaxe : GR=arquivo
Parâmetro : arquivo - arquivo a gravar - Mandatório
Erros : 18,19,20
Status : inalterado

GR grava no arquivo (que pode ser o terminal) os dados que estão selecionados. Os dados eliminados ou que não pertencem à região ativa de dados não são gravados. O formato de gravação é (3G14.6), portanto propício a ser lido pelo comando DA. A ordem de gravação é (X,Y,Sy).

Comando GH

Mnemônico de : Grave em formato de Histograma
Sintaxe : GH=arquivo
Parâmetro : arquivo - arquivo a gravar - Mandatório
Erros : 18,19,20
Status : Inalterado

O comando GH age de forma semelhante a GR, mas no lugar de gravar os dados com os erros, gera uma curva de histograma, que pode ser graficada posteriormente. A abscissa de cada ponto é vista como centro do intervalo do histograma, cada intervalo tendo como largura a metade da separação do ponto para o anterior e para o posterior. O formato de gravação é (2G14.6), sendo que apenas pares (X,Y) são gravados.

Comando MD

Mnemônico de : MeDia
 Sintaxe : MD
 Erros : 26
 Status : Inalterado

MD calcula a média dos dados, considerando-os como formando um histograma, isto é, calcula a média da abscissa ponderada pela ordenada. O resultado é apresentado como :

Região total : X medio= xxxx desvio padrao= ssss

Caso a região dos dados selecionados (comando RP) não corresponda a todos os dados lidos, a média da região parcial também é calculada e dada :

Região parcial : X medio= xxxx desvio padrao= ssss

O desvio padrão corresponde à largura de um histograma, e não é o desvio padrão da média.

III.2 - ALTERAÇÃO DOS DADOS

Uma vez lidos os dados, algumas correções podem ser feitas, apagando ou adicionando pontos, corrigindo erros, ou eliminando provisoriamente alguns pontos para ver o que acontece com um ajuste. Nesta sessão, são apresentados os comandos :

ER - define o valor do erro dos pontos
 AD - adiciona um novo ponto aos dados existentes
 AP - apaga um ponto
 TD - troca um ponto
 MD - edita/modifica dados
 EL - elimina pontos
 RS - restaura pontos

Comando ER

Mnemônico de : ERro
 Sintaxe : ER=eee
 ER=%ppp
 Parâmetro : eee - erro comum a todos os pontos
 ppp - erro percentual
 Erros : 26,33,44

Status : Seta 16324
 Limpa 1,8,128

O comando ER permite alterar o erro dos pontos, de duas formas. Na primeira sintaxe listada, o comando ER=eeee força o valor eeee como erro para todos os pontos. Se durante a leitura os valores incluíam um erro, este será alterado para eeee. O tipo de ponderação não é alterado, de modo que se o peso não for instrumental, o comando ER parecerá não ter surtido efeito.

A segunda forma do comando ER, ou seja, ER=%pppp, define um erro percentual. O erro de cada ponto passará a ser pppp por cento do valor da ordenada. O caracter % é mandatório, pois é ele que permite a distinção das duas sintaxes. Convém lembrar que se um ponto tiver uma ordenada nula, o erro calculado será nulo também, e AJUSTE usará com o erro efetivo 1., que pode não ter nada a ver com o erro desejado.

Comando AD

Mnemônico de : Adiciona Dado à lista
 Sintaxe : AD=X,Y,Sy
 Parâmetros : X,Y,Sy - Ponto a ser inserido à lista
 Erros : 13,44
 Status : Seta 16
 Limpa 1,4,8,128,256,4096

AD insere o ponto (X,Y,Sy) após o último ponto da lista. Este comando só é executado se houver menos de 100 pontos. O ponto inserido estará fora de ordem, não selecionado. Mas ao tentar ajustar uma função, este ponto será inserido na ordem correta e a região parcial cancelada. Para evitar erros por causa deste fato, convém dar explicitamente o comando RP, para cancelar a região e inserir o ponto na ordem certa, e depois de novo redefinir a região desejada com outro RP.

Comando AP

Mnemônico de : Apague Ponto

Sintaxe : AP=X,Y,Sy
AP=X,Y
AP=#nParâmetros : X,Y,Sy - Ponto a ser apagado
n - Número do ponto a ser apagado

Erros : 15,26,33,44

Status : Limpa 1,4,8,128,256,4096
16 se não há mais dados

O comando AP apaga um dado da lista. Este apagamento é definitivo, no sentido que o dado terá que ser re-inserido pelo comando AD (ou DA) caso seja necessário. Apagamentos temporários podem ser feitos com o comando ELimine. O comando AP tem 3 sintaxes possíveis.

As duas primeiras sintaxes envolvem a especificação da abcissa e ordenada do ponto. A sintaxe completa pede o erro também. Neste caso, AJUSTE apaga o ponto apenas se houver um ponto absolutamente igual na lista. Cuidado com a precisão numérica. A forma sem erro, dando apenas X e Y, apaga o primeiro ponto que tiver abcissa igual a X e a ordenada num intervalo de 10^{-Y} em torno de Y.

A terceira sintaxe é mais rápida, apagando o ponto pelo número. O número pode ser obtido pelo comando LD. Por exemplo, o comando AP=#4 apagará o quarto ponto da lista.

Comando TD

Mnemônico de : Troca Dado

Sintaxe : TD=X₀,Y₀,X_n,Y_n,Sy_nParâmetros : X₀,Y₀ - Ponto a ser trocado
X_n,Y_n,Sy_n - Novo valor do ponto

Erros : 15,26,44

Status : Limpa 1,4,8,128,256,4096

O comando TD permite trocar um ponto por outro diretamente. A troca acontece para o primeiro ponto que tenha abcissa X₀ e ordenada num intervalo de 10^{-Y_0} em torno de Y₀. A abcissa, a ordenada e o erro tomam o valor dado no comando (X_n,Y_n,Sy_n).

Comando MO

Mnemônico de : Modifique dados

Sintaxe : MO
MO=X₀,X_FParâmetros : X₀,X_F - abcissas inferior e superior da região a ser modificada.

Erros : 1,26,33

Status : Limpa 1,4,8,128,256,4096
16 se não sobrar dado

O comando MO permite editar os dados. A forma sem parâmetros lista todos os pontos existentes. A forma com parâmetros lista apenas os pontos que caem na faixa X₀ a X_F. Cada ponto é mostrado, da seguinte forma :

(xxxx,yyyy,ssss,LL)[A,E,R,T,M,Q] :

onde xxxx é a abcissa, yyyy a ordenada, e ssss o erro. LL pode ser branco, o que indica um ponto normal, ou EL, que indica que o ponto foi eliminado (não apagado, no entanto). As letras que seguem são respostas aceitáveis, que indicam a ação desejada sobre o ponto. Elas querem dizer :

A - Apague o ponto
E - Elimine o ponto
R - Restaure o ponto
T - Troque o ponto (o novo valor segue T)
M - Mantém o ponto tal qual.
Equivale a "return" ou "enter"
Q - Saia do comando MO

Pode-se dar um "enter" ou "return" para manter o ponto. Ao Eliminar um ponto, este poderá re-aparecer adiante na lista dos eliminados, pois um ponto eliminado vai para o fim dos dados. Um ponto a ser trocado deve ser especificado como :

....[A,E,R,T,M,Q] : T,X_n,Y_n,Sy_n

onde X_n,Y_n,Sy_n correspondem ao novo valor do ponto.

Comando EL

Mnemônico de : Elimine Dado

Sintaxe : EL=X,Y,Sy
EL=X,Y
EL=#n

Parâmetros : X,Y,Sy - Ponto a ser eliminado
 n - Número do ponto a ser eliminado
 Erros : 15,26,33,44
 Status : Limpa 1,4,8,128,256,4096

O comando EL funciona como o comando APague, com a diferença que o ponto não é apagado fisicamente, mas apenas movido para o fim da lista de dados. Internamente, AJUSTE possui 4 ponteiros na lista de dados : um par que indica que pontos estão selecionados para ajuste (região parcial), quantos pontos tem no total (incluindo os pontos eliminados) e quantos pontos tem disponível (região parcial máxima). Os pontos eliminados são os pontos existentes fora desta região parcial máxima :

```
ppppppsssssssssssssssssssssspppppppeeeeeeee
      Início RP      Fim RP      RP max      Total
```

onde ssss são os pontos selecionados, pppp os pontos selecionáveis e eeee os eliminados.

Pontos eliminados aparecem no comando LD precedidos da letra E, e no comando MO seguidos de EL. Estes pontos podem a qualquer momento ser re-incluídos na lista dos pontos ativos. Isto é feito pelos comandos RS ou MO.

Comando RS

Mnemônico de : ReStaura dado
 Sintaxe : RS=X,Y,Sy ou RS
 Parâmetros : X,Y,Sy - Ponto a ser re-inserido na lista
 Erros : 26,33,44
 Status : Limpa 1,4,8,128,256,4096

O comando RS restaura o ponto (X,Y,Sy) que tinha sido ELiminado. O ponto pode ser omitido, caso em que todos os pontos eliminados serão restaurados. A região parcial será cancelada.

III.3 - Transformação de dados

A transformação de dados distingue-se da alteração no sentido que a transformação modifica todos os dados por meio de uma certa operação. Existe um outro tipo de modificação de dados que será apresentado a seguir em III.4 que trata de modificação de escala. Os algoritmos usados nestas transformações podem ser encontrados no apêndice E.

A transformação resume-se a 5 operações ou comandos :

SM - Smoothing
 IT - Interpolação
 FF - Transformada de Fourier
 DV - Derivação
 IN - Integração

Comando SM

Mnemônico de : SMoothing
 Sintaxe : SM
 Erros : 25,26,42
 Status : Seta 4096
 Limpa 1,4,8,128

O comando SM efetua um alisamento dos dados por três pontos, substituindo os pontos pelos valores alisados. O erro é recalculado por propagação, mas o smoothing cria uma correlação entre os pontos, e AJUSTE trabalha apenas com dados independentes. Qualquer resultado obtido terá um aviso que os dados sofreram smoothing. Os pontos devem ser igualmente espaçados.

Comando IT

Mnemônico de : InTerpole
 Sintaxe : IT=X_o,X_f,Dx
 Parâmetros : X_o - abcissa do início da interpolação
 X_f - abcissa do fim da interpolação
 Dx - passo de abcissa para interpolação
 Erros : 26,44,45, erros de diretivas de mapeamento
 Status : Limpa 1,4,8,128,256

O comando IT efetua uma interpolação usando como entrada os dados existentes. A interpolação é feita segundo o algoritmo de Lagrange para 5 pontos, e portanto, são

necessários pelo menos 5 pontos para o comando ser executado. Os erros são recalculados.

A interpolação substitui os dados existentes por um conjunto de pontos igualmente espaçados por um intervalo de Δx , começando em X_0 e acabando em X_F . O limite é de 100 pontos.

Comando FF

Mnemônico de : Fast Fourier transform

Sintaxe : FF ou FF=I

Parâmetros : I - guarde a parte imaginária da transformada

Erros : 26,42,45

Status : Limpa 4,8,64,128

Os dados são substituídos pela sua transformada de Fourier. Atualmente, o número de pontos deve ser uma potência de dois (2,4,16,32 ou 64). O comando FF (ou FF=R) devolve a parte real da transformada. O comando FF=I devolve a parte imaginária da transformada. Os pontos devem ser igualmente espaçados.

Uma série de alterações acontecem aos dados. Primeiramente, o número de pontos fica reduzido de um fator 2, já que a curva devolvida é simétrica em relação ao centro. AJUSTE mantém o número de pontos, mas redefine a região parcial como indo do primeiro ponto ao ponto do meio. Em segundo lugar, a escala de abcissa é alterada, passando de segundos para frequência, com a transformação:

$$X_n' = X_n * 6.28318 / (N * \Delta x * \Delta x)$$

onde X_n é o n-ésimo ponto, N o número de pontos, Δx o intervalo entre pontos. Nesta transformação, supõe-se que os dados entrem em segundos e saem em Hertz. Em terceiro lugar, o erro não é calculado. Como a amplitude da transformada nada tem a ver em valor absoluto com a entrada, o erro é zerado e o tipo de ponderação concluído.

Comando DV

Mnemônico de : Deriva

Sintaxe : DV

Erros : 26,42,45, erros de diretiva de mapeamento

Status : Limpa 4,8,128

Os dados são substituídos pelo valor da derivada no ponto. O cálculo é feito sobre 5 pontos, e portanto é necessário mais de 5 pontos para a execução do comando DV. Os pontos devem ser igualmente espaçados. Caso os pontos não o estejam, o comando IT poderá ser usado para gerar um conjunto de pontos igualmente espaçados. Os erros são recalculados por propagação.

Comando IN

Mnemônico de : INtegre

Sintaxe : IN

Erros : 26,42,45, erros de diretiva de mapeamento

Status : Limpa 4,8,64,128

O comando IN substitui os dados pela sua integral. A integração é feita sobre 3 pontos segundo a fórmula de Simpson, mas com somas separadas para os pontos ímpares e pares. Os erros são recalculados por propagação. Os pontos devem ser igualmente espaçados.

III.4 - MODIFICAÇÃO DE EIXOS

A necessidade de se multiplicar ou dividir um eixo por uma constante, ou de se relocar o sistema de referência é bastante frequente em análise de dados. Este capítulo apresenta comandos que permitem efetuar uma mudança de sistema, com as operações :

SX - soma constante ao eixo X
 SY - soma constante ao eixo Y
 MX - multiplica o eixo X por uma constante
 MY - multiplica o eixo Y por uma constante
 DX - divide o eixo X por uma constante
 DY - divide o eixo Y por uma constante
 EX - exponencia o eixo X
 EY - exponencia o eixo Y
 LX - logaritma o eixo X

LY - Logaritmo o eixo Y
 RD - roda o sistema de eixos

Como estes comandos existem para ambos os eixos, salvo o comando RD, eles serão apresentados em pares. Qualquer operação que afete o eixo Y leva AJUSTE a alterar os erros por propagação.

Comandos SX e SY

Mnemônico de : Soma a X e Soma a Y
 Sintaxe : SX=v e SY=v,s
 Parâmetros : v - valor a somar
 s - erro do valor, apenas para SY, opcional
 Erros : 26
 Status : Limpa 1,4,8,256,8192 e 128 (SY)

Os comandos SX e SY somam às abscissas e às ordenadas, respectivamente, o valor da constante v. O comando SY permite alterar o erro através do parâmetro s, que corresponde ao erro de v, por propagação. Esta é uma forma de incluir um erro sistemático na barra de erro, usando um comando tipo SY=0,erro. s é somado quadraticamente ao erro atual, e portanto não pode ser usado para diminuir o erro.

Comandos MX e MY

Mnemônico de : Multiplique X e Multiplique Y
 Sintaxe : MX=v e MY=v,s
 Parâmetros : v - multiplicador
 s - erro do valor, apenas para MY, opcional
 Erros : 26
 Status : Limpa 1,4,8,256,8192 e 128 (MY)
 Observação : Se o multiplicador for nulo, uma confirmação é pedida no terminal para evitar perdas.

Os comandos MX e MY multiplicam respectivamente as abscissas e as ordenadas por uma constante v. Se por algum acaso v for nulo, AJUSTE pede confirmação, pois isto implicaria em ter todas as abscissas (MX) ou todas as ordenadas (MY) nulas. No caso do comando MY, é possível passar o erro desta constante. Neste caso, AJUSTE fará a propagação de erro nas ordenadas.

Comandos DX e DY

Mnemônico de : Divida X e Divida Y
 Sintaxe : DX=v e DY=v,s
 Parâmetros : v - divisor
 s - erro do valor, apenas para DY, opcional
 Erros : 26,40
 Status : Limpa 1,4,8,256,8192 e 128 (DY)
 Observação : Se o divisor for nulo, o comando é cancelado, para evitar perdas.

Os comandos DX e DY dividem respectivamente as abscissas e as ordenadas por uma constante v. Caso esta seja nula, um erro é impresso no terminal, cancelando o comando. No caso do comando DY, a constante v pode ter uma incerteza, que será usada na propagação de erro.

Comandos EX e EY

Mnemônico de : Exponencie X e Exponencie Y
 Sintaxe : EX e EY
 Erros : 26
 Status : Limpa 1,4,8,256,8192 e 128 (EY)
 Observação : se X ou Y for maior que 88, o valor 88 será usado para evitar estouro na exponenciação.

O comando EX troca as abscissas pela exponencial das mesmas. O comando EY faz o mesmo com as ordenadas, além de efetuar a propagação de erro.

Comandos LX e LY

Mnemônico de : Logaritme X e Logaritme Y
 Sintaxe : LX e LY
 Erros : 26
 Status : Limpa 1,4,8,256,8192 e 128 (LY)
 Observação : se X ou Y for nulo ou negativo, o valor 10⁻³² será usado para evitar logaritmos de números não positivos.

O comando LX troca as abscissas pela logaritmo natural das mesmas. O comando LY faz o mesmo com as ordenadas, além de efetuar a propagação de erro.

Comando RO

Mnemônico de : Rotação de eixos

Sintaxe : RO=t

Parâmetros : t - ângulo, em graus

Erros : 26

Status : Limpa 1,4,8,128,256,8192

O comando RO efetua uma rotação do sistema de eixos, de um ângulo t, dado em graus. Os erros das ordenadas não são alterados, e portanto perdem sentido.

III.5 - DEFINIÇÃO E CONTROLE DOS PARÂMETROS DO PROGRAMA

AJUSTE oferece uma série de comandos, descritos nesta seção, que permitem alterar ou definir alguns parâmetros do programa. Entre os parâmetros importantes, destacam-se :

- Número de função
- Número de parâmetros da função
- Tipo de ponderação no ajuste
- Convergência do ajuste
- Região de análise

Alguns dos comandos desta seção são bi-direcionais, isto é, devolvem o valor atual quando o parâmetro é omitido do comando. Os comandos apresentados aqui são os seguintes :

FU - define a função
 PA - define os coeficientes da função
 FX - fixa coeficiente
 LV - libera coeficiente
 NP - devolve número de coeficientes
 PE - define peso
 CV - define convergência
 RP - define região de ajuste
 ST - imprime status de AJUSTE
 CO - inicia o ajuste

Antes de iniciar a documentação destes comandos, é conveniente apresentar alguns conceitos ligados a estes comandos.

FUNÇÃO : A função no AJUSTE pode ser de 2 tipos : ou ela é interna, ou seja, pertence ao programa propriamente dito, ou ela é externa (chamada também de função do usuário). Este último tipo

está documentado adiante no capítulo V. A função é caracterizada por um número. Atualmente, as funções de 1 a 15 são internas, descritas no apêndice B, e podem ser listadas pelo comando LF. As funções com número superior ou igual a 30 são de usuário, com numeração de livre escolha. A função é definida com o comando FU.

PARÂMETROS ou COEFICIENTES : as funções são de um variável só, e podem ter até 10 parâmetros, que podem ser ajustados ou variados. Os parâmetros podem ser de dois tipos : livres ou fixos. Livres são aqueles coeficientes que serão variados durante o ajuste. O programa os inclui no algoritmo de minimização do chi-quadrado, e no fim, calcula os erros associados e as covariâncias. Os parâmetros fixos são os coeficientes da função que não podem ser alterados por AJUSTE, apenas pelo usuário, e permanecem constantes durante um ajuste. Não há cálculo de erro para estes, e a matriz de covariância será nula para eles. Os parâmetros são definidos pelo comando PA, fixados por FX e liberados por LV. Para haver algum ajuste, é necessário que haja pelo menos um parâmetro livre.

PESO : O ajuste de uma função a dados experimentais é feito aqui por mínimos quadrados. Este procedimento exige que os pontos tenham um erro associado real. Mas nem sempre este é o caso. Desta forma, AJUSTE precisa ser informado do tipo de ajuste a ser feito. Três tipos de ponderações podem ser definidas : tipo Instrumental, em que os pontos lidos possuem um erro na ordenada, tipo Estatístico, em que o erro é dado pela raiz quadrada da ordenada, o que é típico de ajustes sobre histogramas, e o tipo Sem peso, em que o erro é ignorado, e todos os pontos são igualmente pesados, o que corresponde internamente a supor um erro unitário. O comando PE define o peso.

REGIÃO PARCIAL DE AJUSTE: como já foi mencionado anteriormente, AJUSTE permite que apenas uma parte do dados seja usada no ajuste. Esta região de abscissas é definida como região parcial, e é setada pelo comando RP. Os dados desta região aparecem precedidos do caracter * no comando LD. Após a leitura de dados, a região parcial engloba todos os pontos lidos. Vários comandos podem afetar a região parcial.

CONVERGÊNCIA: O ajuste é feito iterativamente, ou seja, várias iterações são feitas até minimizar o chi-quadrado. O processo pára quando há convergência. Esta convergência é definida como a variação relativa do chi-quadrado da iteração anterior para a atual. Há convergência e o processo pára quando esta variação relativa, em módulo, é menor que o valor da convergência definida pelo comando CV, ou 10^{-5} se não foi definida explicitamente. O processo iterativo pode parar se não houver convergência antes de esgotado o número máximo de iterações especificado no comando CD ou 30, se foi omitido. Neste caso, uma mensagem de advertência aparece na listagem dos resultados.

Comando FU

Mnemônico de : FUnção
 Sintaxe : FU=n ou FU
 Parâmetros : n - número de função ou 0
 Erros : 8,43, erro de diretiva para função externa
 Status : Limpa 32 (FU=0), 4 (FU=n)
 Seta 32 (FU=n, n>0)

O comando FU é bi-direcional e tem vários efeitos possíveis e colaterais. Na sua forma sem parâmetros (FU), o número da função é listado no terminal, e nada é alterado. Esta é uma forma de verificar se a função selecionada é a desejada.

A forma completa, FU=n, pode ter dois efeitos opostos: se n=0, a função atual é cancelada, não existe mais função definida. Quando a função que era definida é externa, o task

responsável é terminado, e a ligação interrompida. A forma com n>0 define a função de número n. Se n for menor que 30, a função é interna. Na versão atual, as função de 16 a 29 são indefinidas, portanto rejeitadas.

Para n maior ou igual a 30, AJUSTE pede :

Nome do task da sua função :

ao que deve-se dar o nome pedido, na forma padrão do RSX11M: un:[uic]nome.ext;ver, sendo un: a unidade de disco, [uic] a sigla onde está o programa, nome o nome, ext a extensão e ver a versão. Normalmente, a função está na sigla do usuário, o disco é o padrão, a extensão é .TSK, e a versão a mais recente. Portanto, basta dar o nome do task. Por exemplo, se a função de número 31 tiver como task FUNC31.TSK;3, bastará bater FUNC31.

AJUSTE pede ao sistema para rodar este task com o nome pouco provável de ser duplicado de .Fnn., onde nn é o número do terminal: se rodado no TT3, a função será ativada como .F03.. A ligação entre AJUSTE e a função externa está descrita adiante. Caso AJUSTE ou a função venham a ser abortados ou terminados inesperadamente por erro, o sobrevivente ficará sabendo. Se foi o AJUSTE que abortou, a função terminará imediatamente com uma mensagem no terminal. Se foi a função a terminar, AJUSTE tomará conhecimento, resetando a função para 0 (não definida), e continuará como se o comando FU=0 tivesse sido dado, após escrever uma mensagem de aviso.

A troca de função cancela o número de parâmetros da anterior, mas não zera os valores, que podem ser recuperados com o comando PA, descrito a seguir.

Comando PA

Mnemônico de : PARâmetros
 Sintaxe : PA
 PA=n,v,l
 Parâmetros : n - número do parâmetro
 v - novo valor do parâmetro
 l - L se livre, F se fixo, opcional

```
Erros :      2,35,44
Status :      Limpa   1,8
              Seta    4
```

O comando PA define os parâmetros ou coeficientes da função. A forma simple, PA, é interativa. AJUSTE pede :

Numero de parâmetros :

ao que se deve responder com o valor apropriado. O número aceitável depende da função. Por exemplo, uma gaussiana deve ter um múltiplo de 3 parâmetros (posição, amplitude e largura), enquanto que um polinômio pode ter qualquer número. De acordo com a função definida, esta resposta é verificada. Se ela não for aceitável, um erro é impresso, e AJUSTE cancela o comando. O apêndice B toca neste assunto.

Quando o número foi aceito, AJUSTE passa a pedir os valores, parâmetro a parâmetro. Se a função é interna, AJUSTE pede pelo valor escrevendo explicitamente o coeficiente pedido (Amplitude, ou Grav 2, por exemplo). A função externa é tratada mais simplesmente como "Parâmetro n:" já que AJUSTE ignora o nome destes coeficientes.

O valor pode ser dado em qualquer formato, pois é lido em G14.0. Mas o valor atual pode ser mantido batendo-se apenas um "return". Neste caso, AJUSTE não altera o valor, isto é, não zera o coeficiente. Para zerar um parâmetro, deve-se bater um 0 explicitamente. AJUSTE não altera os coeficientes que estão além dos definidos. Por exemplo, se a função usa 3 parâmetros, os outros 7 não serão alterados. Isto pode ser usado para visualizar parte de uma função.

O valor entrado pode opcionalmente ser seguido de uma vírgula, esta seguida da letra L ou F, caso se queira Liberar ou Fixar o parâmetro, respectivamente. Assim,

Posicao 3 : 2567.7,F

define que o parâmetro correspondente à posição da terceira componente terá por valor 2567.7, e será mantido fixo durante o próximo ajuste. AJUSTE não altera a característica de ser livre ou fixo na troca de função.

A forma PA=n,v,l do comando permite alterar diretamente o parâmetro n, que passará a tomar o valor v. Para poder usar esta sintaxe, o número de coeficientes deve ter sido definido anteriormente com um comando PA simples. O parâmetro do comando l, opcional, pode fixar (F) ou liberar (L) o coeficiente redefinido. Quando esta letra for omitida, o status anterior é mantido, isto é, se era fixo, continuará fixo, e se era livre, assim o continuará.

Os valores iniciais podem ter um impacto importante na velocidade de convergência. Se a função é não linear nos coeficientes, ou de variação rápida, "chutes" ruins podem levar a divergências. Verifique os valores iniciais graficamente com um comando VI. Se os valores iniciais são razoavelmente bons, a convergência deve ser rápida. Mas o algoritmo (apêndice E) é tal que "chutes" um pouco longe podem levar a convergência mais rápida que chutes em cima (por exemplo, com o conhecimento prévio dos resultados). Alguns parâmetros convergem logo, e outros não. Seguir as iterações (comando IM) permite frequentemente descobrir problemas deste tipo.

Comando FX

```
Mnemônico de : FiXa parâmetro
Sintaxe :      FX=n
Parâmetros :   n - número do parâmetro
Erros :        2,35,44
Status :       Limpa   1,8
```

O comando FX fixa o parâmetro n, que não será mais alterado durante um ajuste, atuando como constante, com o valor atual. O parâmetro poderá ser liberado com o comando LV ou PA. Por exemplo, FX=3 fixará o parâmetro número 3.

Comando LV

```
Mnemônico de : LiVre parâmetro
Sintaxe :      LV=n
Parâmetros :   n - número do parâmetro
Erros :        2,35,44
Status :       Limpa   1,8
```

O comando LV libera o parâmetro n , que poderá ser variado durante o ajuste. O valor inicial é o atualmente definido. O coeficiente pode ser fixado com o comando FX ou PA. O comando LV=1 fará com que o primeiro parâmetro seja liberado, e variado durante ajuste.

Comando NP

Mnemônico de : Número de Parâmetros
 Sintaxe : NP
 Erros : não tem
 Status : Inalterado

O comando NP lista no terminal o número de parâmetros em uso pela função. A mensagem :

Numero atual de parâmetros = nn

é escrita no terminal.

Comando PE

Mnemônico de : PEso
 Sintaxe : PE=l ou PE
 Parâmetros : l - tipo de peso : I = Instrumental
 E = Estatístico
 S = Sem peso
 Erros : 31
 Status : Limpa 1,8,128
 Seta 64,16384

Como foi detalhado acima, o ajuste de curvas por mínimos quadrados necessita de um tipo de ponderação para os pontos. O comando PE define este peso, quando usado na forma completa PE=l. Sem parâmetros, o comando PE lista no terminal o tipo de peso em uso no momento.

Comando CV

Mnemônico de : ConVergência
 Sintaxe : CV=v ou CV
 Parâmetros : v - nova convergência
 Erros : 21
 Status : Inalterado

O comando CV é bidirecional. Sem parâmetro, CV lista no terminal qual é a convergência exigida para terminar um ajuste. Com parâmetro, este novo valor torna-se o critério de convergência. O teste é feito em simples precisão, de forma que não tem sentido um valor menor que 10^{-7} , que fica zero para todos os efeitos. O valor inicial da convergência é 10^{-5} .

Comando RP

Mnemônico de : Região Parcial
 Sintaxe : RP= X_a , X_F ou RP
 Parâmetros : X_a , X_F : região de abscissas
 Erros : não tem
 Status : Limpa 1,8

O conceito de região parcial foi definido no início desta seção e pode ser visualizado na documentação do comando EL. O comando RP define a região que será usada no ajuste. Sem parâmetros, RP reseta a região, que passa a englobar todos os pontos não eliminados.

Com parâmetros, a região passa a ser do ponto de abscissa imediatamente superior ou igual a X_a até o ponto de abscissa imediatamente inferior ou igual a X_F . A região parcial pode ser reseta internamente quando os dados são ordenados, por exemplo depois de um comando que multiplica o eixo X por uma constante negativa ou a adição de um ponto à lista. Pode acontecer também no início do ajuste, se o vetor dos pontos precisar ser ordenado. Para evitar este problema, convém dar um comando CO=0 para apenas iniciar o procedimento de ajuste, e dar em seguida o comando RP definindo a região parcial desejada.

Comando ST

Mnemônico de : SStatus
 Sintaxe : ST
 Erros : não tem
 Status : Inalterado

O comando ST lista no terminal o status de AJUSTE, descrevendo tudo o que foi definido, entre outros, a função, os parâmetros, a convergência, o tipo de gráfico e suas escalas, e o status propriamente dito, listado em binário.

Este comando é a única forma de se obter uma lista dos valores atuais dos parâmetros da função quando não há resultados disponíveis, isto é, quando não foi feito um ajuste.

Comando CO

Mnemônico de : COMECE ou CONTINUE
 Sintaxe : CO=n
 Parâmetros : n - número de iterações, opcional
 Erros : 2,3,4,5,26,28,30,36
 Status : Limpa 1,8192,16364
 Seta 1,4,8,128,256,8192

O comando CO é o que inicia ou continua o ajuste de uma função a dados. Várias formas são permitidas. Sem parâmetro, CO inicia ou retoma (não há distinção quanto a isto) o ajuste, e pára quando convergir ou quando o número de iterações ultrapassar 30, o que ocorrer primeiro.

Com o formato CO=n, AJUSTE inicia um ajuste que parará por convergência ou quando o número de iterações atingir n, o que acontecer em primeiro lugar. Ou seja, o comando CO corresponde a CO=30. n deve ser maior ou igual a 1.

O comando CO=0 efetua zero iterações, ou seja, prepara o ajuste, verificando tudo, e calcula o chi quadrado inicial para os parâmetros existentes, sem modificá-los. Esta forma é muito útil quando se quer ajustar uma função manualmente, modificando os seus coeficientes controladamente, um a um, ou quando a derivada da função não foi programada na função externa.

Quando o ajuste termina, AJUSTE escreve no terminal AJU), aguardando um comando. Isto não implica que houve convergência. Ao pedir resultados (comando RE), uma mensagem indicará se a convergência não foi alcançada.

III.6 - SAIDA DE RESULTADOS

AJUSTE oferece várias formas de se obter os resultados de uma análise. 3 comandos respondem pelos resultados básicos de um ajuste :

RE - imprime resultados
 TA - imprime uma tabela do ajuste
 MC - imprime a matriz de covariância

Além destes comandos, outros permitem a obtenção de resultados secundários, ou efetuar alguns cálculos ou testes estatísticos :

GF - grava os valores ajustados
 VA - calcula o valor da função
 VG - grava o valor da função
 AR - calcula a área debaixo da curva
 TT - faz um teste de hipóteses
 TI - calcula intervalo de confiança

Comando RE

Mnemônico de : RESULTADOS
 Sintaxe : RE
 Erros : 7
 Status : Inalterado

AJUSTE imprime no terminal as informações relevantes ao resultado do ajuste. Esta listagem tem o seguinte formato (não é sublinhado para não sobrecarregar o texto) :

RESULTADOS PARA A FUNCAO n : (descrição)

p parametros sendo f fixos durante o ajuste

Convergencia alcançada : aaaa Convergencia exigida : vvvv
 Numero de pontos lidos : np dos quais foram usados nu
 Limites da região usada : de xxx a yyy
 CHI-Quadrado reduzido : cc (pp%) com ll graus de liberdade
 Tipo de ponderação : ttt

Parametros : A1 = vvv +- vvv (descrição)
 A2 = vvv +- vvv (descrição)

Quando a função é interna, AJUSTE insere uma descrição sumária da função, além de dar seu número, e inclui o nome

dos parâmetros na parte final dos resultados. Se o parâmetro for fixo, uma mensagem FIXO aparecerá na linha do coeficiente em questão. Quando a função é de usuário, o número é impresso, seguido do nome do processador (task) da função, e o nome dos parâmetros é omitido.

Parâmetros fixos tem um erro nulo impresso. Os limites da região usada correspondem à região parcial em uso. O chi-quadrado reduzido é o chi-quadrado total dividido pelo número de graus de liberdade. O número de graus de liberdade é igual ao número de pontos menos o número de parâmetros ajustados (livres). A probabilidade indicada logo após o chi-quadrado, em porcentagem, é a probabilidade de se obter um chi-quadrado maior ou igual ao obtido e só tem sentido se os erros usados forem corretos.

Comando TA

Mnemônico de : TAbela

Sintaxe : TA

Erros : 11

Status : Inalterado

O comando TA lista no terminal uma tabela do ajuste, contendo os pontos experimentais (abscissa, ordenada e erro), o valor da ordenada ajustada, e os resíduos quadráticos. O resíduo quadrático é o quadrado da razão da diferença entre o valor experimental e o ajustado para o erro do ponto. Esta coluna permite identificar os pontos muito fora da curva, quer seja por estar de fato longe, como por ter um erro pequeno demais. O chi-quadrado nada mais é que a soma destes resíduos.

Apenas os pontos que participaram do ajuste (região parcial) aparecem nesta tabela.

Comando MC

Mnemônico de : Matriz de Covariância

Sintaxe : MC=i,j
MC

Parâmetros : i,j - índice da matriz de covariância
(número dos parâmetros)

Erros : 7,44

Status : Inalterado

Este comando lista no terminal (ou no arquivo de listagem auxiliar) a matriz de covariância (forma MC), ou o elemento desta matriz ($MC=i,j$). O elemento (i,j) desta matriz é a covariância entre os parâmetros i e j . O comando $MC=i,i$ devolve portanto a variância do parâmetro i . Como a matriz de covariância é simétrica, somente metade dela é impressa.

Comando GF

Mnemônico de : Grave Função

Sintaxe : GF=arquivo

Parâmetros : arquivo - arquivo onde será gravada a função

Erros : 29

Status : Inalterado

O comando GF atua como o comando GR, mas grava o valor da função ajustada no lugar da ordenada experimental. Um erro nulo é gravado também. O formato de gravação é (3G14.6), como nos outros comandos de gravação.

Comando VA

Mnemônico de : VAlor

Sintaxe : VA= X_0, X_F, Dx ou VA=X

Parâmetros : X_0, X_F : abscissa inicial e final do intervalo
Dx : passo de abscissa para cálculo (opc.)
X : abscissa onde será calculado o valor

Erros : 2,35

Status : Inalterado

O comando VA calcula o valor da função definida com os parâmetros atuais (ajustados ou não). Com apenas um parâmetro no comando (VA=X), a função é calculada apenas neste ponto.

Na forma completa (VA= X_0, X_F, Dx), o valor da função é calculado para todos os valores de X_0 a X_F , em passo Dx. Caso Dx seja omitido, o passo será $Dx=(X_F - X_0)/10$. E no caso de função externa, se o número de pontos a calcular for

superior a 1000, AJUSTE recalculará o passo para obter 1000 pontos.

O comando VA permite usar AJUSTE como calculadora programável de funções. Este comando pode ser usado para localizar zeros de funções.

Se a função foi ajustada, isto é, se houver uma matriz de covariância disponível, o valor calculado será seguido do erro calculado por propagação.

Comando VG

Mnemônico de : Valor Gravado

Sintaxe : VG=X_o,X_F,Dx

Parâmetros : X_o,X_F : Abcissas inicial e final do intervalo
Dx : passo (opcional)

Erros : 2,35,44

Status : Inalterado

O comando VG é igual ao VA, com a saída redirecionada para um arquivo, que o comando pede em seguida :

Arquivo de gravação :

Ambos os parâmetros X_o e X_F são mandatórios. Se Dx não for dado, o passo será de um décimo do intervalo pedido. E no caso de função de usuário, o limite é de 1000 pontos.

O comando VG permite gravar uma tabela de função para ser graficada posteriormente. O erro da função é calculado se ela foi ajustada. Para eliminar o erro (ou seja, zerá-lo), basta redefinir os parâmetros, dando "return" para manter o valor. Isto cancelará a matriz de covariância, e o erro não será calculado.

Comando AR

Mnemônico de : ARea

Sintaxe : AR=X_o,X_F,Dx

Parâmetros : X_o,X_F : região de abcissas

Erros : 2,35,44

Status : Inalterado

O comando AR calcula a área debaixo da curva definida pela função (ajustada ou apenas inicializada) pela regra de Simpson de 5 pontos. A área é calculada entre X_o e X_F, que são mandatórios. O passo Dx é opcional, e é definido como um décimo do intervalo de integração caso omitido. De início, AJUSTE divide Dx por 4, para ter uma integral por passo Dx. O resultado da integração é impresso como :

Area= aaaaa Erro inerente= eeee *derivada quarta

O "erro inerente" é o erro devido ao método de integração, e é proporcional à sétima potência do intervalo usado (Dx/4). Este erro nada tem a ver com a incerteza da função, quando esta foi ajustada (ver comandos VA e VG). O erro devido à incerteza na função não é computado.

Comando TT

Mnemônico de : Teste T de Student

Sintaxe : TT
TT=n,v

Parâmetros : n - número do parâmetro a testar
v - valor a testar (opcional)

Erros : 11,44

Status : Inalterado

O comando TT efetua um teste t de Student sobre o valor do parâmetro, comparando o valor obtido no ajuste com um valor qualquer v. Em geral, deseja-se verificar se um parâmetro é nulo. Neste caso, v pode ser omitido. Se o comando TT for dado sem parâmetros, todos os coeficientes livres do ajuste são comparados com zero, isto é, um teste de hipótese nula é feito.

Os resultados do teste são apresentados como :

Parametro n - Teste de hipótese aaaa = vvvv
T= tttt Probabilidade = pppp% mmmm a 5%

aaaa é o valor do parâmetro n, vvvv o valor do teste (v do comando ou 0), tttt o valor do t de Student, pppp a probabilidade percentual de (aaaa - vvvv) ser nulo, e mmmm uma mensagem (ACEITA ou REJEITA), indicando se a hipótese é aceita ou rejeitada a 5%, isto é, se pppp>5%.

Comando TI

Mnemônico de : Teste de Intervalo
 Sintaxe : TI=n,p
 TI
 Parâmetros : n - número do parâmetro a testar
 p - percentual do intervalo de confiança
 Erros : 11,44
 Status : Inalterado

O comando TI determina um intervalo de confiança para o parâmetro n, com conteúdo de probabilidade de p%, isto é, determina em que faixa deve-se encontrar o valor do parâmetro n em p% das vezes. O resultado é impresso como :

Um intervalo de confiança de ppp,pp% para o parâmetro n
de xxxxx a yyyvy

Este comando pode ser dado sem o parâmetro p, caso em que um intervalo de 95% será determinado. Caso ambos os parâmetros sejam omitidos, um intervalo de 95% será listado para todos os coeficientes da função que estejam livres.

III.7 - GRAFICOS

AJUSTE dispõe de recursos gráficos limitados, controlados por 3 comandos :

VI - faz gráfico no terminal
 PL - faz gráfico no plotter
 ES - define a escala

Os gráficos gerados sem ter sido dado o comando ES para escolher escalas mais estéticas são simples e pouco apropriados para publicação, sendo orientados para gráfico de trabalho. O comando ES permite um acabamento melhor. Os gráficos mostram os dados quando estes existem, e a função quando esta existir, ou ambos se for o caso. Os pontos experimentais são mostrados com barra de erro. A barra mostrada pode ter duas origens : se não há resultados de ajuste, o erro mostrado é o dos dados, independentemente do peso escolhido, ou seja, se não há erro, a barra será nula. E se houver resultados de ajuste, o erro graficado será o

usado durante o ajuste : no caso acima citado, sem peso será graficado com barras unitárias.

Se não houver resultados de ajuste, mas a função foi definida, assim como seus parâmetros, a função será graficada também. Assim, AJUSTE pode ser usado como ferramenta para gerar gráficos de funções de uma variável de forma muito simples.

Comando VI

Mnemônico de : VIdéo
 Sintaxe : VI=X_o,X_F,Dx
 VI
 Parâmetros : X_o,X_F : região de abscissas a graficar
 Dx : passo para cálculo da função (opc.)
 Erros : 17,26,44
 Status : Inalterado

O comando VI gera um gráfico no terminal onde foi dado, ou na impressora, se VI foi dado com registro de resultados em disco. O formato do gráfico depende do tipo de terminal. Dois tipos são diferenciados : o terminal tipo Tektronix 4010, gráfico, e o terminal que não é gráfico, tipo console.

O gráfico em terminal gráfico é feito com resolução de 1024 por 768 pontos. O gráfico em terminal tipo console é feito com a escala das ordenadas na largura do papel e a escala das abscissas no comprimento, ou seja, o gráfico é rodado de 90 graus. Este tipo de gráfico tem a resolução de um caracter de impressora. A escala das ordenadas tem 80 caracteres no terminal e 132 na impressora.

O comando VI dado sem parâmetros gera um gráfico numa faixa de abscissas que é definida pela região parcial em uso no momento. Portanto, é necessário ter dados para poder usar VI sem mais. Caso uma função tenha sido definida, ela será graficada, com 50 valores calculados no intervalo.

O comando VI dado com os limites gera um gráfico dos dados que estão nesta faixa e pertencentes à região parcial. A função, se ela for definida, será graficada no intervalo dado, com passo Dx ou 50 pontos se este não for dado. Cada

ponto de função calculado representa uma linha num terminal não gráfico, e na impressora. Portanto muito cuidado com o Dx se os comandos estão sendo redirecionados para o disco.

A escala do gráfico dependerá da existência de especificações do comando ES. Sem estas, AJUSTE escolhe escalas que sejam bem divididas e arredondadas, e formatos adequados a um gráfico de trabalho. Isto para um gráfico num terminal de vídeo. Na impressora, somente a escala das ordenadas é escolhida esteticamente. A das abcissas é escrita passo a passo (linha a linha). A legenda da escala Y não é escrita em ambos os casos.

Comando PL

Mnemônico de : PLOTar

Sintaxe : PL=X_o,X_F,Dx
PL

Parâmetros : X_o,X_F : região de abcissas a graficar
Dx : passo para o cálculo da função

Erros : 17,26,44

Status : Inalterado

O comando PL gera um gráfico no plotter exatamente como o do comando VI num terminal de vídeo, com a diferença que a legenda do eixo Y será também escrita. Veja portanto os comentários do comando VI acima descrito.

Certifique-se de que o plotter está ligado, com papel, caneta, e com limites setados, antes de dar o comando PL. Senão, AJUSTE ficará esperando pelo plotter para sempre, tendo que ser abortado, com as perdas dos resultados.

Comando ES

Mnemônico de : ESCalas

Sintaxe : ES=E,z,Z_o,Z_F,Dz define Escala
ES=T,z,t define Tipo de eixo
ES=F,z,f define Formato
ES=L,z,l define Legenda

Parâmetros : Z_o,Z_F : Limites inferiores e superiores do eixo
Dz : Passo da escala
z : escala a ser alterada : X ou Y
t : tipo de escala : 1=linear, 2=Log
f : formato a ser usado na escala

l : texto da legenda

Erros : 44

Status : Inalterado

O comando ES determina algumas opções sobre as escalas e eixos, permitindo a obtenção de gráficos mais adequados, ou para forçar uma escala única a vários gráficos. As opções do comando ES são válidas apenas para os gráficos gerados pelo comando PL e pelo VI em terminal de vídeo, não se aplicando aos gráficos de terminal console ou impressora. A sintaxe do comando ES tem 2 parâmetros comuns a todas as formas : o primeiro é uma letra (E,T,F,L), que indica a opção desejada do comando, e o segundo, também uma letra, X ou Y, indicando a que eixo se refere este comando. E dependendo da opção, os outros parâmetros variam. Vejamos as várias opções :

Sem Opção : as escalas, formatos e legendas são canceladas para ambos os eixos.

Opção E : Define a escala propriamente dita. Os limites inferiores e superiores indicados serão absolutamente respeitados por AJUSTE. Apenas os pontos da região parcial que caíem neste intervalo serão graficados. E caso o comando VI ou PL seja dado com parâmetros, somente o que cair na faixa do comando ES será graficado. O passo especificado determina em que intervalo a escala será impressa. Se a opção E foi dada sem especificar o eixo, as escalas definidas serão canceladas. E se o eixo for dado, mas não os limites, as escalas deste eixo serão canceladas. Se o passo foi omitido, AJUSTE escolherá o intervalo, podendo alterar estes limites para efeitos estéticos. Cuidado com os limites se o eixo for logaritmico. Neste caso, todos os valores das escalas devem ser estritamente positivos, ou seja, uma escala logaritmica começa acima de 0. No caso de eixo logaritmico, o passo é ignorado.

Exemplo : ES=E,X,0,1000,200

Eixo X irá de 0 a 1000, com graduação a cada 200 (0-200-400-600-800-1000).

Opção T : esta opção define o tipo de eixo a ser usado. Se o tipo for 2, o eixo será logaritmico, qualquer outro valor, ou omissão do tipo, leva a um eixo linear. No caso de eixo logaritmico, o passo é ignorado se dado no comando ES=E... Antes de pedir gráfico em escala log, certifique-se que os pontos que serão logaritmados não são nulos ou negativos. Gráficos ou escalas podem causar erros obscuros caso ocorram valores negativos ou nulos.

Exemplo : ES=T,Y,2

Escala Y será logaritmica

Opção F : esta opção permite a escolha do formato com o qual a escala será escrita. O campo é de 9 caracteres. O formato DEVE ESTAR ENTRE PARENTESES, sem o que AJUSTE será terminado por erro. Verifique a sintaxe do formato, que deve ser Fortran, antes de mandar graficar. O comando ST permite verificar se não houve erro na leitura, pois a sintaxe não é verificada na leitura, mas na execução, dando um erro fatal. Formatos aceitáveis são (F9.0) ou (F6.1 MeV), por exemplo. O campo não deve ultrapassar 9 caracteres, e o formato 20 caracteres. Um formato aconselhado para escala logaritmica é (1PE9.0).

Exemplo : ES=F,X,(F9.2)

O formato da graduação da escala X será em F9.2 (campo de 9 caracteres, com 2 dígitos após a vírgula)

Opção L : esta opção permite a especificação de uma legenda de até 40 caracteres para qualquer um dos eixos. A legenda Y será impressa apenas no comando PL. Na ausência de legenda, a letra X é usada no eixo das abscissas, e um Y na escala das ordenadas (PL). O

legenda é sempre escrita em maiúsculas, independentemente do formato usado na entrada.

Exemplo : ES=L,X,Tempo em segundos
A legenda do eixo X será :
TEMPO EM SEGUNDOS

III.8 - Diversos

Documentamos aqui 11 comandos aceitos que não se enquadram nas categorias anteriores, efetuando tarefas diversas de controle ou informação. São estes, em ordem alfabética :

AS - Abre saída para arquivo de em disco
BL - Suspende AJUSTE temporariamente
DI - Desliga impressão das iterações
FI - termina AJUSTE
IM - Imprime as iterações
LF - Lista funções
LI - Lista instruções
NO - Anota comentário na listagem
SP - Imprime arquivo de listagem
ZE - inicializa o programa
^Z - termina AJUSTE

Comando AS

Mnemônico de : Associe Saída

Sintaxe : AS=arquivo ou AS

Parâmetros : arquivo : arquivo de listagem auxiliar

Erros : Não tem

Status : Limpa 1024
Seta 1024

O comando AS permite a AJUSTE a possibilidade de copiar as saídas impressas para um arquivo em disco, para posterior impressão. Nem todos os comandos geram saídas para este arquivo, principalmente os de informação (ST,LI,LF). Um certo cuidado deve ser tomado, pois cada comando dado no terminal é copiado para o arquivo, assim como sua eventual saída. Um gráfico feito com detalhes de 1000 pontos vai gerar 1000 linhas de impressora ! A sintaxe exige a passagem do nome de um arquivo, para o qual será direcionada a saída, sem afetar a do terminal. Os comandos são executados duas vezes, uma com saída para o terminal e uma para o arquivo.

Se o comando for dado sem parâmetro, AJUSTE listará no terminal o local onde se encontra a saída.

Para terminar com esta saída auxiliar, basta redirecioná-la para o terminal com outro comando AS :

AS=TI:

Este comando fecha o arquivo e o manda para a impressora. Um comando AS com arquivo, dado com arquivo já aberto fecha este, manda-o para a impressora, e abre o novo.

Para um bom uso deste comando, recomenda-se a rotina :

- efetuar o ajuste, olhar o resultado e o gráfico
- abrir o arquivo auxiliar : AS=LP.LST
- inserir um eventual comentário : NO=comentário
- pedir de novo os resultados: RE, TA, VI...
- fechar o arquivo : AS=TI:
- prosseguir, recolher a listagem, ...

O arquivo sugerido aqui como LP.LST tem a vantagem de ser apagado automaticamente após a impressão.

Comando BL

Mnemônico de : BLoquear
 Sintaxe : BL
 Erros : não tem
 Status : Inalterado

O comando BL suspende AJUSTE até que este seja reativado por um comando UNS do RSX11M. A finalidade de BL é permitir ao usuário efetuar uma série de comandos ou tarefas sob o sistema operacional, como se AJUSTE não estivesse ativado, retornando posteriormente no ponto onde tinha parado. Por exemplo, se o nome de um arquivo de dados foi esquecido, dá-se o comando BL, e pede-se um diretório ao sistema. Depois, o comando UNS restaura AJUSTE como se nada tivesse acontecido. O comando UNS exige o nome com o qual AJUSTE está rodando, que pode ser ...AJU, AJUIn (n=número do terminal), ou TTn. O comando ACT lista os nomes dos tasks ativos no terminal, com o que fica fácil identificar AJUSTE.

Comando DI

Mnemônico de : Desligue Impressão
 Sintaxe : DI
 Erros : não tem
 Status : Limpa 2

O comando DI cancela o comando IM, descrito adiante. As iterações deixarão de ser impressas durante o ajuste.

Comando FI

Mnemônico de : FIm
 Sintaxe : FI
 Erros : não tem
 Status : Inalterado

O comando FI termina AJUSTE, voltando ao sistema operacional. Um eventual arquivo de saída auxiliar aberto (comando AS) será fechado e impresso.

Comando IM

Mnemônico de : IMprima as iterações
 Sintaxe : IM
 Erros : não tem
 Status : Setá 2

O comando IM habilita a impressão das iterações durante o processo de ajuste. AJUSTE imprimirá uma tabelinha contendo o número da iteração, o chi quadrado inicial e o final, e os parâmetros. Com este comando, torna-se possível acompanhar o ajuste, e descobrir causas de divergências. Uma convergência lenta em geral indica uma função com derivada calculada erroneamente, numa função de usuário, ou então uma função com parâmetros muito parecidos, em que dois parâmetros ficam trocando de valor entre si, oscilando. A impressão, inicialmente desabilitada, pode ser cancelada com o comando DI acima descrito.

Comando LF

Mnemônico de : Lista Funções
 Sintaxe : LF

Erros : não tem
Status : Inalterado

Uma lista de funções é impressa no terminal, indicando a função e seu número. A fórmula, em alguns casos, fica escrita também. O apêndice B lista estas funções e faz alguns comentários a respeito.

Comando LI

Mnemônico de : Lista Instruções
Sintaxe : LI
Erros : não tem
Status : Inalterado

Uma lista das instruções de AJUSTE é impressa no terminal, indicando resumidamente a sintaxe e a finalidade. Os comandos estão divididos em assuntos.

Comando ND

Mnemônico de : NDtas
Sintaxe : ND=texto
Parâmetros : texto - texto a ser inserido na listagem
Erros : não tem
Status : Inalterado

O comando ND permite inserir comentários na listagem auxiliar aberta pelo comando AS. Na realidade, ND é considerado como um comando não executado, mas que é copiado naquele arquivo. Como AJUSTE usa apenas as duas primeiras letras para identificar um comando, e inicia a decodificação após o primeiro =, qualquer carácter entre os dois primeiros e o = são copiados e ignorados, o que permite passar comentários diretamente. Por exemplo, o comando RE, que não tem parâmetros, pode ser seguido de um comentário, tornando o ND superfluo neste caso:

RESULTADOS COM DADOS DO JOAO ou

RECUSO-ME A ACREDITAR NESTES RESULTADOS

são interpretados ambos apenas como RE, mas serão copiados por extenso.

Comando SP

Mnemônico de : mande para o Spooler
Sintaxe : SP
Erros : não tem
Status : Inalterado

O comando SP fecha o arquivo atual de listagem auxiliar e o manda para a impressora pelo Spooler. Um arquivo LP.LST é aberto para continuar a receber os comandos.

Comando ZE

Mnemônico de : ZERe
Sintaxe : ZE
Erros : não tem
Status : Limpa 1,2,4,8,16,32,64,128,256,4096

O comando ZE inicializa o programa, deixando-o como estava no início. Ao ser ativado, AJUSTE efetua um comando ZE automaticamente.

Comando ^Z

Sintaxe : ^Z
Erros : não tem
Status : Inalterado

O ^Z (Ctrl-Z) equivale ao comando FI, e termina AJUSTE.

CAPÍTULO IV

EXEMPLOS DE USO

O conjunto de comandos de AJUSTE permite a execução de muitas tarefas, com um pouco de imaginação. Neste capítulo, serão apresentadas algumas sequências de comandos típicas para o dia a dia. Esta lista não pretende portanto esgotar as possibilidades oferecidas pelo programa.

Como antes, o que for sublinhado é escrito pelo sistema operacional ou por AJUSTE. A resposta do usuário é dada em maiúsculas, e os comentários pertinentes em minúsculas, à direita.

IV.1 - AJUSTE DE UMA FUNÇÃO A DADOS

Vamos ver aqui uma série típica de comandos necessários para permitir ajustar uma função a dados.

>AJU

Ajuste versao 1a - RSX11M - 09:52:43 20-JAN-87

AJU>

Nesta altura, AJUSTE foi ativado, e está atento a comandos.

AJU>DA=EXEPLD.DAT

vai ler dados de EXEPLD.DAT

Numero de pontos, numero de pontos a pular : 38,150

primeiro, pula 150 pontos, e lê os próximos 38.

AJU>PE=IN

Dados lidos, o tipo de peso é dado. Aqui, instrumental. Bastaria a letra I.

AJU>FU=7

Define função 7 : polinômio

AJU>PA

Numero de parametros : 4

Grau 0 : 0

Grau 1 : 1.5

Grau 2 : 0.5

Grau 3 : 0.2

Inicializa parâmetros polinômio de terceiro grau
coeficiente de grau 0 nulo
coeficiente de grau 1 = 1,5
coeficiente de grau 2 = 0,5
coeficiente de grau 3 = 0,2

AJU>CO

Inicia o ajuste. Este é rápido

AJU>RE

Vamos ver os resultados: aqui, o que segue é impresso por AJUSTE, mas não é sublinhado para não ficar pesado

RESULTADO PARA A FUNCAO 7 : polinomio

4 parametros sendo 0 fixos durante o ajuste

Convergencia alcuncada: 0.12E-6 Convergencia exigida 0.10E-4
Numero de pontos lidos: 38 dos quais forma usados 38
Limites da regioa ajustada : de 8.01300 a 30.2581
CHI-quadrado reduzido: 1.8 (0.00%) com 34 graus de liberdade
Tipo de ponderacao : instrumental

| | | |
|-------------|-----------------------------|--------|
| Parametros: | A1 = 12.3445 +- .588123 | Grau 0 |
| | A2 = 1.37652 +- 0.21834E-01 | Grau 1 |
| | A3 = 0.34561 +- 0.34512E-02 | Grau 2 |
| | A4 = 0.12221 +- 0.23412 | Grau 3 |

AJU>

Nesta altura, uma tabela do ajuste pode ser pedida com um comando TA, que não será dado aqui para não estender demais este exemplo. Um VI é recomendado para descobrir a causa do chi-quadrado tão alto.

AJU>AS=LP.LST

AJU>RESULTADOS RUINS

Vamos registrar os resultados Comandos RE disfarçado

AJU>AS=TI:

volta ao terminal, resultado sai na impressora

AJU>FI

Sai de AJUSTE

IV.2 - CALCULO DE UMA FUNÇÃO E SEU GRAFICO

AJUSTE permite a visualização de uma função sem ter dados aos quais ela tenha sido ajustada. Vamos ver um exemplo com polinômios de Legendre :

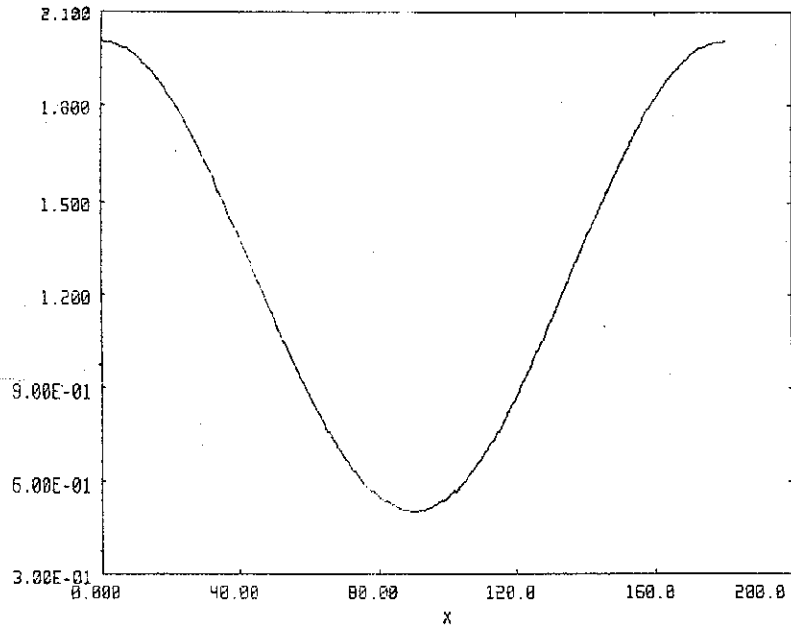
>AJU

Chama AJUSTE. Este se identifica e pede comando.

AJU>FU=6

Função 6 : Pol. de Legendre

```
AJU>PA                               Define parâmetros e L
Numero de parametros : 2              2 parâmetros, e L's
L = 0
Amplitude para L = 0. = 1.           A0 = 1
L = 2
Amplitude para L = 2. = 1.           A2 = 1
AJU>VI=0,180,1                       Gráfico de 0 a 180 graus, de
                                       grau em grau
```



```
AJU>^Z                               Sai de AJUSTE
```

IV.3 - INTEGRAÇÃO E DIFERENCIAÇÃO

Este exemplo simples mostra a capacidade de AJUSTE em integrar e diferenciar dados e funções. No caso de função, AJUSTE não efetua diretamente a transformação. É preciso ter os valores da função como se fossem dados. Isto é feito gerando uma tabela de valores com o comando VG, que é gravada no disco e lida em seguida.

```
>AJU                                   Ativa AJUSTE, ...
.....
AJU>FU=9                               Gaussiana + pol. grau 2
AJU>PA                                 define parâmetros
Numero de parametros : 6              coeficiente do grau 0 = 10
Grau 0 : 10                          coeficiente do grau 1 = 1
Grau 1 : 1                            coeficiente do grau 2 = 0
Grau 2 : 0                            Desvio padrão da gaussiana = 3
Sigma 1 : 3                           Amplitude da gaussiana #1 = 100
Amplitude 1 : 100                     Posição da gaussiana #1 = 20
Posição 1: 20
AJU>VG=0,40,.5                         Grava função de 0 a 40, Dx=0.5
Arquivo de gravação : X.TMP           no arquivo X.TMP (provisório)
AJU>DA=X.TMP                           Agora lê este arquivo
Numero de pontos..... <enter>       todos serão lidos.
AJU>DV                                 Cálculo da derivada
AJU>GR=DERIV.DAT                       Grava a derivada
AJU>IN                                 Agora integra. A constante
                                       deve ter sido alterada.
AJU>GR=INTEG.DAT                       Grava a integral da derivada.
AJU>^Z                                 Sai de AJUSTE
>PIP X.TMP;0/DE                        Apaga X.TMP
```

IV.4 - INTERPOLAÇÃO DE DADOS E SMOOTHING

Neste exemplo, dados serão lidos de um arquivo, alisados por smoothing, e depois interpolados.

```
>AJU                                   Ativa AJUSTE
.....
AJU>DA=GXM.DAT                         Lê dados de GXM.DAT
Numero de pontos,... 30                Lê 30 pontos
AJU>SM                                  Alisa os dados
AJU>IT=8,27.8,.2                       Interpola de 8 a 27.8 com
                                       passo 0.2 (100 pontos)
AJU>GR=GXM.INT                         E grava em GXM.INT os valores
                                       interpolados.
```

IV.5 - TESTE DE HIPOTHESES

AJUSTE permite testar se um parâmetro ajustado tem um dado valor, conhecido sem erro. O teste é feito usando o teste t de Student. Duas possibilidades existem : testar diretamente o valor, ou obter um intervalo de confiança. Os valores aqui mostrados foram retirados de um ajuste de duas Breit-Wigner mais uma constante sôbre uma simulação que gerou dois picos simétricos largos, em principio sem fundo. O resultados para a constante, objeto do teste, é:

$$A_0 = -111.744 \pm 39.5554$$

AJU>TT=1,0 testa se $A_0=0$

Parametro 1 - teste de hipotese -111.744 = 0.000000
t= 2.825 probabilidade = 0.58%: REJEITA a 5%

AJU>TI=1,99.6 Intervalo de 99.6%

Um intervalo de confiança de 99.6% para o parametro 1
de -228.513 a 5.02605

Existe 99.6% do valor de A_0
 estar entre -228.513 e 5.02605

AJU>TT=1,-100 Testando se $A_0=-100$

Parametro 1 - teste de hipotese -111.744 = -100.000
t= 0.297 probabilidade = 76.72%: ACEITA a 5%

Passou no teste, neste caso.

C A P I T U L O V

FUNÇÃO DE USUARIO

=====

V.0 - INTRODUÇÃO

A função de usuário ou função externa amplia a capacidade de AJUSTE em ajustar funções a dados ou efetuar cálculos. Existe apenas um limite a esta expansão: a função externa está limitada a ser uma função de uma variável, com no máximo 10 parâmetros.

Este capítulo descreve como a função deve ser definida e montada, para que AJUSTE possa usá-la. No fim, uma descrição de como é feita a conexão entre a função e AJUSTE é dada de forma simplificada.

Para poder usar a função externa, o usuário precisa definir dois módulos Fortran : a função FCTN e a derivada FDERIV desta função num arquivo só.

V.1 - A FUNÇÃO FCTN

FCTN é a função que calcula o valor desejado num dado ponto. Ela deve ser definida como :

```
FUNCTION FCTN (A,X,IFUN,NTERMS)
DIMENSION A(1)
```

```

:
:
:
FCTN=.....
RETURN
END
```

onde A - vetor dos parâmetros da função (entrada)
 X - abcissa onde deve ser calculada a função
 IFUN - Número da função (definida pelo usuário com o comando FU no AJUSTE)
 NTERMS - Número de parâmetros em uso

Esta FUNCTION deve calcular o valor da função no ponto X, com NTERMS parâmetros, passados em A(i). Uma mesma rotina FCTN pode atender a várias funções, através do parâmetro IFUN, que especifica que função deve ser calculada.

Por exemplo, para um polinômio de grau $n=NTERMS-1$, temos:

```
FUNCTION FCTN(A,X,IFUN,NTERMS)
DIMENSION A(1)
IF(IFUN.NE.32)RETURN      ! So aceita função 32
FCTN = 0.
XI=1.
DO 100 I=1,NTERMS
FCTN = FCTN + A(I)*XI
XI = XI * X
100 CONTINUE
RETURN
END
```

V.2 - A DERIVADA DA FUNÇÃO EXTERNA FDERIV

Para poder ajustar a função a dados, AJUSTE necessita da derivada da função em relação aos parâmetros (mas não em relação a variável X). Para cada X, devem ser calculadas NTERMS derivadas, portanto. Isto é feito pela rotina FDERIV, descrita logo abaixo.

Uma observação muito importante : caso se deseja usar AJUSTE apenas como uma calculadora de funções, FDERIV não precisa ser programada, bastando para isto que ela seja definida (SUBROUTINE FDERIV seguido de RETURN e END)

Um erro de programação na derivada leva AJUSTE a convergir muito lentamente, ou até a divergir.

O formato da rotina FDERIV é :

```
SUBROUTINE FDERIV(X,A,D,IFUN,NTERMS,FIXD)
DIMENSION A(1),D(1)
LOGICAL FIXD(1)
.
.
RETURN
END
```

onde : X - abscissa do ponto onde a derivada deve ser calculada
A - vetor dos parâmetros da função
D - vetor contendo as derivadas calculadas
IFUN - número de função
NTERMS - número de parâmetros da função
FIXD - FIXD(i) é .TRUE. se A(i) for fixo, .FALSE. se se A(i) for livre.

Por exemplo, seguindo o caso do polinômio apresentado em FCTN, teríamos para a derivada :

```
SUBROUTINE FDERIV(X,A,D,IFUN,NTERMS,FIXD)
DIMENSION A(1),D(1)
LOGICAL FIXD(1)
XI=1.
DO 100 I=1,NTERMS
D(I)=0.          ! Supõe A(i) fixo, D(i)=0.
IF(.NOT.FIXD(I))D(I)=XI ! A(i) está livre. Calcula
XI=XI*X          ! derivada = Xi-1
100 CONTINUE
RETURN
END
```

V.3 - MONTAGEM DA FUNÇÃO DO USUARIO

Os módulos FCTN e FDERIV devem ficar juntos num arquivo, aqui no exemplo chamado de FUNPOL.FTN. Este arquivo de rotinas fontes deve ser compilado :

```
>FOR FUNPOL=FUNPOL
FCTN
FDERIV
>
```

Um arquivo FUNPOL.OBJ foi criado, e será a entrada para a montagem. Esta é feita por um arquivo de comando indireto que junta estas rotinas ao programa principal que serve de interface com AJUSTE. A montagem é feita com:

```
>@1,2)USUARF
* NOME DO PROGRAMA (FUNCAO DO USUARIO) [S] :FUNPOL
```

Após algum tempo, um aviso é impresso indicando que a função está pronta a ser usada. Para usá-la, a seguinte sequência de comando do AJUSTE pode ser dada:

```
AJU>FU=32
Nome do task da sua função : FUNPOL
AJU>
```


V.4 - INFORMAÇÕES ADICIONAIS

A função externa de AJUSTE usa alguns recursos do sistema operacional RSX11M para a sua implementação. Uma breve descrição de como é efetuada a comunicação é dada a seguir.

A função externa é um task separado, autônomo, que é montado como "SLAVE", isto é, só pode ser ativado por outro task, aqui o AJUSTE. Um mecanismo de sincronismo é definido entre estes tasks, em que o AJUSTE pede à função algum cálculo, espera pelo resultado, e segue, enquanto que a função fica esperando alguma ordem de AJUSTE. A comunicação é feita em três níveis :

- os dados e valores são passados por um COMMON de 4 kBytes situado numa região dinâmica de memória, que AJUSTE pede ao sistema logo antes de estabelecer a ligação. (Esta região também é usada em alguns comandos que necessitam de mais memória para trabalhar, como a interpolação, a derivação e a integração. Neste caso, a região é criada, o comando efetuado, e a região liberada em seguida). Esta região aparece no mapa de memória do sistema (comando PAR) como DYNAMIC. Ela existe durante todo o tempo em que a ligação AJUSTE-função estiver ativa. A região é criada por AJUSTE, e sua referência mandada para a função pela diretiva SREF. Ao recebê-la, a função se mapeia e espera comandos.

- O sincronismo é feito pelas diretivas SEND e RECEIVE, que mandam informações, juntamente com as diretivas USTP e STLDR, que controlam a execução de tasks. No pacote mandado por AJUSTE está especificada que tarefa deverá ser executada pela função, e os parâmetros associados a esta tarefa. Os parâmetros da função propriamente dita, e as abcissas, são passados pelo COMMON. Há quatro tipos de tarefas :

- 1- Cálculo da função nos pontos a ajustar
- 2- Cálculo da função para efeitos de gráfico e integração. Os valores iniciais e finais das

abcissas, assim como o passo, são passados pelo COMMON

3- Cálculo das derivadas. As NTERMS derivadas são calculadas para todos os pontos de uma vez, para diminuir o overhead de comunicação.

4- Término da função : a conexão é terminada, a função sai, a memória liberada, e AJUSTE segue.

- Ao chamar a função, AJUSTE pede ao sistema para estar ligado via ligação "parent-offspring". Ao ser ativada, a função também requer este status em relação a AJUSTE. Esta ligação dupla faz com que se um dos dois programas vier a ser abortado, ou terminar por erro, o outro ficará sabendo imediatamente, e tomará providências. No caso da função terminar, AJUSTE avisa o usuário e volta a esperar um comando, após cancelar a definição da função. No caso oposto, a função emite uma mensagem e termina.

O processo de comunicação no tempo é descrito a seguir

| <u>AJUSTE</u> | <u>FUNÇÃO</u> |
|---|---|
| Pede a região ao sistema | Ainda não existe |
| Pede ao sistema para rodar a função com nome .Fnn.. | Função é ativada. Entra e pára. Fica esperando região. |
| Manda a referência da região à função e pára | Função recebe região, avisa AJUSTE que recebeu, e pára. |

A comunicação está estabelecida

| | |
|--|---|
| AJUSTE pede cálculo de função: manda pacote com SEND, reativa função e pára. | Função recebe pacote após ser reativada. Calcula, acorda AJUSTE e pára. |
|--|---|

AJUSTE retoma controle e segue em frente

| | |
|--|---|
| AJUSTE pede cálculo da derivada da função. Manda pacote, ativa função e pára | Função recebe pacote após ser reativada. Calcula a derivada, acorda AJUSTE e pára |
|--|---|

AJUSTE é acordado, retoma controle e segue.

AJUSTE quer acabar a função.
Manda um pacote, acorda a
função, libera a memória e
segue

Função recebe pacote e termina

CAPITULO VI

USO COM COMANDO INDIRETO

=====

AJUSTE pode ser usado com comandos vindos de um arquivo em vez do terminal. Duas formas de uso desta característica existem : ou AJUSTE é chamado como :

`>AJU @arquivo`

caso em que o arquivo (com .CMD de extensão se esta não foi mencionada) é lido e executado, todos os resultados indo para a impressora, ou então, quando AJUSTE está ativo no terminal:

`AJU>@arquivo`

caso em que os comandos contidos em arquivo serão executados, copiados no terminal com saída no terminal.

No primeiro caso, alguns comandos não serão executados, como ST, LI, LF, MO, que são de natureza essencialmente interativa. No segundo, apenas a entrada é feita do arquivo, a saída é o terminal.

Para poder usar esta capacidade de AJUSTE, é preciso criar um arquivo com o editor de texto. Este arquivo deverá conter comandos executáveis de AJUSTE, e eventuais respostas às perguntas. Por exemplo, para uma leitura de dados, definição de função, valores iniciais e efetuar um ajuste, o arquivo de comandos seria :

| <u>Conteúdo do arquivo</u> | <u>Comentário</u> |
|----------------------------|----------------------|
| DA=EXEMPLO.DAT | Le dados |
| 35 | 35 pontos |
| FU=7 | Função 7 - polinômio |
| PA | define parâmetros |
| 3 | 3 parâmetros |
| 0 | Grau 0 |
| 0 | Grau 1 |
| 0 | Grau 2 |
| PE=I | Peso Instrumental |
| CO | Faz o ajuste |
| RE | Pede resultados |
| TA | Pede tabela |
| FI | Termina |

Em qualquer momento, uma linha iniciada com ponto-virgula (;) é considerada comentário. Ela não será aparecerá na listagem nem no terminal, no entanto, servindo apenas de informação sobre o que fazem certos comandos no arquivo.

A P E N D I C E A

LISTA DE COMANDOS

=====

Este apêndice apresenta a lista de comandos de AJUSTE de três formas: na primeira tabela, os comandos estão listados em ordem alfabética pela suas primeiras duas letras, e ao lado o comando que representam mnemônicamente. A coluna seguinte indica a classificação do comando e a página em que se encontra, para facilitar a procura na documentação. Na segunda tabela, a lista está organizada também em ordem alfabética, mas contém as várias formas e sintaxes dos comandos e uma descrição sumária. A terceira forma lista os comandos por classificação.

A.1 - LISTA ALFABETICA

| Comando | Mnemônico | Classificação | P. |
|---------|--------------------|-----------------|------------|
| AD | Adicione Dado | Alteração | III.2 21 |
| AP | APague dado | Alteração | III.2 21 |
| AR | ARea | Resultados | III.6 42 |
| AS | Associe Saída | Diversos | III.8 49 |
| BL | BLoquear | Diversos | III.8 50 |
| CO | COntinue | Def. e Controle | III.5 38 |
| CV | ConVergência | Def. e Controle | III.5 38 |
| DA | DAdos | Entrada | III.1.a 14 |
| DE | Dados de Espectro | Entrada | III.1.a 15 |
| DF | Dados com Formato | Entrada | III.1.a 16 |
| DI | Deslique Impressão | Diversos | III.8 51 |
| DV | DeriVe | Transformação | III.3 27 |
| DX | Divide X | Modificação | III.4 29 |
| DY | Divide Y | Modificação | III.4 29 |
| EL | ELimine dado | Alteração | III.2 23 |
| ER | ERro | Alteração | III.2 20 |
| ES | EScala | Gráficos | III.7 46 |
| EX | Exponencie X | Modificação | III.4 29 |
| EY | Exponencie Y | Modificação | III.4 29 |
| FF | Fast Fourier Trn. | Transformação | III.3 26 |
| FI | FIm | Diversos | III.8 51 |
| FX | FiXe parâmetro | Def. e Controle | III.5 35 |
| FU | FUnção | Def. e Controle | III.5 32 |

| | | | | |
|----|-----------------------|-----------------|---------|----|
| GF | Grave Função | Resultados | III.6 | 41 |
| GH | Grave Histograma | Saída | III.1.b | 19 |
| GR | GRave | Saída | III.1.b | 19 |
| HI | Histograma | Entrada | III.1.a | 17 |
| IM | IMprima as iterações | Diversos | III.8 | 51 |
| IN | INtegre | Transformação | III.3 | 27 |
| IT | INterpole | Transformação | III.3 | 25 |
| LB | Lista Dados | Saída | III.1.b | 18 |
| LF | Liste Funções | Diversos | III.8 | 51 |
| LI | Liste Instruções | Diversos | III.8 | 52 |
| LV | LiVre parâmetro | Def. e Controle | III.5 | 35 |
| LX | Logaritme X | Modificação | III.4 | 29 |
| LY | Logaritme Y | Modificação | III.4 | 29 |
| MC | Matriz de Covariância | Resultados | III.6 | 40 |
| MD | Media | Saída | III.1.b | 20 |
| MO | MODifique dados | Alteração | III.2 | 23 |
| MX | Multiplique X | Modificação | III.4 | 28 |
| MY | Multiplique Y | Modificação | III.4 | 28 |
| NO | NOTas | Diversos | III.8 | 52 |
| NP | Número de Parâmetros | Def. e Controle | III.5 | 36 |
| PA | Parametros | Def. e Controle | III.5 | 33 |
| PE | Peso | Def. e Controle | III.5 | 36 |
| PL | PLote | Gráficos | III.7 | 46 |
| RE | REsultados | Resultados | III.6 | 39 |
| RO | ROtação | Modificação | III.4 | 30 |
| RP | Região Parcial | Def. e Controle | III.5 | 37 |
| RS | ReStaurado | Alteração | III.2 | 24 |
| SM | SMoothing | Transformação | III.3 | 25 |
| SP | SPooler | Diversos | III.8 | 53 |
| ST | STatus | Def. e Controle | III.5 | 37 |
| SX | Some a X | Modificação | III.4 | 28 |
| SY | Some a Y | Modificação | III.4 | 28 |
| TA | TAbela | Resultados | III.6 | 40 |
| TD | Troca Dado | Alteração | III.2 | 22 |
| TI | Teste de Intervalo | Resultados | III.6 | 44 |
| TT | Teste t de Student | Resultados | III.6 | 43 |
| VA | VALor | Resultados | III.6 | 41 |
| VG | Valor Gravado | Resultados | III.6 | 41 |
| VI | VIdeo | Gráficos | III.7 | 45 |
| ZE | ZERe | Diversos | III.8 | 53 |
| ^Z | termina AJUSTE | Diversos | III.8 | 53 |

A.2 - LISTA COM SINTAXE

| | | |
|----|-----------|---|
| AD | AD=X,Y,Sy | Adiciona o ponto (X,Y,Sy) à lista de dados. Cancela região parcial. |
| AP | Ap=X,Y,Sy | Apaga o ponto especificado. |
| | AP=X,Y | Apaga o ponto mais próximo de (X,Y). |
| | AP=#n | Apaga o n-ésimo ponto da lista. |

| | | |
|----|---------------------------------------|---|
| AR | AR=X _o ,X _F ,Dx | Calcula a área debaixo da função, entre as abscissas dadas, com passo Dx. |
| | AR=X _o ,X _F | Calcula a área debaixo da função, entre as abscissas dadas, com 10 intervalos. |
| AS | AS | Indica no terminal para onde está sendo direcionada a impressão dos resultados. |
| | AS=arquivo | Redireciona saída de resultados para arquivo. |
| | AS=TI: | Volta saída para o terminal apenas. |
| BL | BL | Suspende AJUSTE até ser dado um comando UNS AJU no terminal. |
| CO | CO | Inicia o ajuste, com um máximo de 30 iterações. |
| | CO=n | Inicia o ajuste, com um máximo de n iterações. |
| | CO=0 | Prepara o ajuste, calcula o chi-quadrado, mas não altera os parâmetros. |
| CV | CV | Devolve no terminal o valor da convergência definida no momento. |
| | CV=e | Define a convergência como sendo e. |
| DA | DA=arquivo | Lê dados formatados do arquivo especificado. |
| DE | DE=arquivo | Lê dados não formatados de um espectro. |
| DF | DF=arquivo | Lê dados do arquivo especificado com formato a ser dado em seguida. |
| DI | DI | Inibe a impressão das iterações durante o ajuste. |
| DV | DV | Troca os dados pela sua derivada. |
| DX | DX=v | Divide as abscissas de todos os pontos pelo valor da constante v. |
| DY | DY=v | Divide as ordenadas de todos os pontos pelo valor da constante v. |
| | DY=v,s | Divide as ordenadas de todos os pontos pelo valor da constante v, propagando o erro s desta constante nos erros dos pontos. |

| | | |
|----|---|---|
| EL | EL=X,Y,Sy | Elimina o ponto especificado. Este poderá ser restaurado. |
| | EL=X,Y | Elimina o ponto mais próximo a (X,Y) |
| | EL=#n | Elimina o n-ésimo ponto |
| ER | ER=s | Troca todos os erros pelo valor s |
| | ER=%pp | Troca os erros pelo valor de pp por cento da ordenada dos pontos (erro relativo). |
| ES | ES | Cancela as definições de escala |
| | ES=E,X,x _o ,X _F ,dx | Define escala X : de x _o a x _F com intervalo de graduação dx. |
| | ES=E,X | Cancela escala do eixo X |
| | ES=E,Y,y _o ,y _F ,dy | Define escala Y : de y _o a y _F com intervalo de graduação dy. |
| | ES=E,Y | Cancela escala do eixo Y |
| | ES=F,X,f | Define o formato (f) a ser usado na escala X. |
| | ES=F,X | Cancela formato do eixo X |
| | ES=F,Y,f | Define o formato (f) a ser usado na escala Y. |
| | ES=F,Y | Cancela formato do eixo Y |
| | ES=L,X,texto | Define a legenda do eixo X |
| | ES=L,X | Cancela a legenda do eixo X |
| | ES=L,Y,texto | Define a legenda do eixo Y |
| | ES=L,Y | Cancela a legenda do eixo Y |
| | ES=T,X,n | Define tipo de eixo para as abcissas: n=1 - linear n=2 - logarítmico |
| | ES=T,X | Define eixo X como linear |
| | ES=T,Y,n | Define tipo de eixo para as ordenadas: n=1 - linear n=2 - logarítmico |
| | ES=T,Y | Define eixo Y como linear |
| EX | EX | Exponencia as abcissas de todos os pontos. |
| EY | EY | Exponencia as ordenadas de todos os pontos. |

| | | |
|----|---------------------------------------|--|
| FF | FF | Troca os dados pela parte real da transformada de Fourier dos dados. |
| | FF=I | Troca os dados pela parte imaginária da transformada de Fourier dos dados. |
| FI | FI | Termina AJUSTE. |
| FU | FU | Devolve no terminal o número da função atualmente em uso |
| | FU=0 | Cancela a função em uso |
| | FU=n | Define a função como sendo a de número n (o comando LF lista a tabela de funções) |
| FX | FX=n | Fixa o parâmetro n. |
| GF | GF=arquivo | Grava os valores da função ajustada no arquivo especificado. |
| GH | GH=arquivo | Grava os dados em forma de histograma no arquivo dado. |
| GR | GR=arquivo | Grava os dados da região parcial atual no arquivo. |
| HI | HI=arquivo | Histograma os dados contidos no arquivo, segundo especificação pedidas em seguida ao comando. |
| IM | IM | Habilita impressão das iterações durante o ajuste |
| IN | IN | Troca os dados pela sua integral. |
| IT | IT=X _o ,X _F ,Dx | Troca os dados por valores interpolados entre X _o e X _F , com espaçamento Dx |
| LD | LD | Lista todos os dados existentes. |
| | LD=X _o ,X _F | Lista dos dados entre as abcissas especificadas no comando. |
| LF | LF | Lista no terminal as funções existentes. |
| LI | LI | Lista no terminal os comandos de AJUSTE. |
| LV | LV=n | Libera o parâmetro n para ajuste. |
| LX | LX | Logaritma as abcissas de todos os pontos. (logaritmo natural) |
| LY | LY | Logaritma as ordenadas de todos os pontos. (logaritmo natural) |
| MC | MC | Imprime a matriz de covariância. |
| | MC=i,j | Imprime o valor da covariância entre os parâmetros i e j. |

| | | |
|----|-----------------------------------|--|
| MD | MD | Calcula a média e o desvio padrão dos dados, ponderados pela ordenada, para todos os valores, e para a região parcial em uso. |
| MO | MO | Lista no terminal todos os pontos, um a um, pedindo que modificação fazer : A - Apaga o ponto E - Elimina o ponto R - Restaura o ponto T - Troca o ponto (valor deve seguir: T,X,Y,Sy M - Mantém o ponto Q - Sai do comando MO Return - o mesmo que M |
| | MO=X _o ,X _F | Lista no terminal os pontos dentro da região de abcissas dado, pedindo que modificação deve ser feita, um a um. |
| MX | MX=v | Multiplifica as abcissas de todos os pontos pelo valor da constante v. |
| MY | MY=v | Multiplifica as ordenadas de todos os pontos pelo valor da constante v. |
| | MY=v,s | Multiplifica as ordenadas de todos os pontos pelo valor da constante v, propagando o erro s desta constante nos erros dos pontos. |
| ND | ND=observação | Registra no arquivo de listagem a observação. |
| NP | NP | Devolve no terminal o número de parâmetros atualmente em uso. |
| PA | PA | Define o número de parâmetros, assim como seus valores iniciais. |
| | PA=n,v | Define o valor do parâmetro n como sendo v, mantendo seu status (fixo ou livre) |
| | PA=n,v,F | Define o valor do parâmetro n como sendo v, fixando-o neste valor. |
| | PA=n,v,L | Define o valor do parâmetro n como sendo v, liberando-o para ajuste. |
| PE | PE | Devolve no terminal o tipo de ponderação em uso no momento. |
| | PE=I | Define o peso como sendo "Instrumental" |
| | PE=E | Define o peso como sendo "Estatístico" |
| | PE=S | Define o peso como sendo "Sem peso" |

| | | |
|----|---|--|
| PL | PL | Gráfica no plotter os pontos da região parcial e a função nesta região se esta for definida. |
| | PL=X _o ,X _F | Gráfica os dados que caem na faixa dada, assim como a função. |
| | PL=X _o ,X _F ,Dx | Gráfica os dados que caem na faixa dada, e a função, com passo Dx. |
| RE | RE | Devolve os resultados do ajuste. |
| RD | RD=t | Roda o sistema de eixos de um ângulo t, dado em graus. |
| RP | RP | Define região parcial de ajuste como abrangendo todos os dados. |
| | RP=X _o ,X _F | Define a região parcial como abrangendo os dados cuja abcissa pertence ao intervalo dado. |
| RS | RS | Restaura todos os pontos eliminados |
| | RS=X,Y,Sy | Restaura o ponto especificado. |
| SM | SM | Alisa os dados (smoothing). |
| SP | SP | Manda para a impressora o arquivo de listagem aberto por AS. |
| ST | ST | Lista o terminal o status de AJUSTE. |
| SX | SX=v | Soma às abcissas de todos os pontos o valor da constante v. |
| SY | SY=v | Soma às ordenadas de todos os pontos o valor da constante v. |
| | SY=v,s | Soma às ordenadas de todos os pontos o valor da constante v, propagando o erro s desta constante nos erros dos pontos. |
| TA | TA | Imprime uma tabela do ajuste. |
| TD | TD=X _o ,Y _o ,X,Y,Sy | Troca o ponto de coordenadas (X _o ,Y _o) pelo ponto (X,Y,Sy). |
| TI | TI | Determina um intervalo de confiança de 95% para todos os parâmetros. |
| | TI=n | Determina um intervalo de confiança de 95% para o parâmetro n. |
| | TI=n,p | Determina um intervalo de confiança de p porcentos para o parâmetro n. |

| | | |
|----|---------------------------------------|---|
| TT | TT | Testa a hipótese de que todos os parâmetros sejam nulos (teste t de Student) |
| | TT=n | Testa se o parâmetro n é nulo. |
| | TT=n,v | Testa se o parâmetro n vale v. |
| VA | VA=X | Devolve o valor da função no ponto X |
| | VA=X ₀ ,X _F | Devolve o valor da função em 10 pontos entre os limites dados. |
| | VA=X ₀ ,X _F ,Dx | Devolve o valor da função para as abcissas entre os limites dados, com passo Dx. |
| VG | VG=X ₀ ,X _F | Grava o valor da função em 10 pontos entre os limites dados. O arquivo é pedido em seguida. |
| | VG=X ₀ ,X _F ,Dx | Grava o valor da função para as abcissas entre os limites dados, com passo Dx. |
| VI | VI | Grafica no terminal os pontos da região parcial e a função nesta região se esta for definida. |
| | VI=X ₀ ,X _F | Grafica os dados que caem na faixa dada, assim como a função. |
| | VI=X ₀ ,X _F ,Dx | Grafica os dados que caem na faixa dada, e a função, com passo Dx. |
| ZE | ZE | Inicializa AJUSTE. |
| ^Z | ^Z | Termina AJUSTE, como o comando FI. |

A.3 - LISTA POR CATEGORIA

COMANDOS DE ENTRADA DE DADOS - III.1.a

DA - Lê dados
 DE - Lê espectro
 DF - Lê dados com formato
 HI - Histograma arquivo

COMANDOS DE SAIDA DE DADOS - III.1.b

LD - Lista dados no terminal
 GH - Grava dados em formato de histograma
 GR - Grava os dados
 MD - Calcula a média dos dados

ALTERAÇÃO DOS DADOS - III.2

AD - Adiciona um ponto à lista de dados
 AP - Apaga dado da lista
 EL - Elimina dado da lista (não é apagado)
 ER - Fixa o erro dos pontos
 MD - Modifica seletivamente os dados
 RS - Restaura ponto eliminado
 TD - Troca dado por outro

TRANSFORMAÇÃO DE DADOS - III.3

DV - Troca os dados pela sua derivada
 FF - Troca os dados pela sua transformada de Fourier
 IN - Troca os dados pela sua integral
 IT - Troca os dados por valores interpolados
 SM - Suaviza os dados (smoothing)

MODIFICAÇÃO DE EIXOS - III.4

DX - Divide abcissas por uma constante
 DY - Divide ordenadas por uma constante
 EX - Exponencia as abcissas
 EY - Exponencia as ordenadas
 LX - Logaritma as abcissas
 LY - Logaritma as ordenadas
 MX - Multiplica as abcissas por constante
 MY - Multiplica as ordenadas por constante
 RO - Roda sistema de eixos
 SX - Soma constante às abcissas
 SY - Soma constante às ordenadas

DEFINIÇÃO E CONTROLE DOS PARÂMETROS DO PROGRAMA - III.5

CO - Inicia o ajuste da função aos dados
 CV - Fixa a convergência
 FU - Define função a ser usada
 FX - Fixa parâmetro
 LV - Libera parâmetro
 NP - Devolve número de parâmetros
 PA - Define os parâmetros da função
 PE - Define tipo de ponderação a usar no ajuste
 RP - Define região parcial de dados a usar
 ST - Devolve status do programa

SAIDA DE RESULTADOS - III.6

AR - Calcula a área abaixo da curva
 GF - Grava os valores da função ajustada
 MC - Imprime matriz de covariância
 RE - Devolve resultados do ajuste
 TA - Imprime tabela do ajuste
 TI - Determina um intervalo de confiança
 TT - Testa hipótese sobre valor do parâmetro

VA - Calcula valor da função em pontos selecionados
 VG - Grava o valor da função em pontos selecionados

GRAFICOS - III.7

ES - Define escalas
 PL - Grafica dados e função no plotter
 VI - Grafica dados e função no terminal

DIVERSOS - III.8

AS - Define arquivo de saída auxiliar
 BL - Suspende AJUSTE temporariamente
 DI - Desliga a impressão das iterações durante o ajuste
 FI - Termina AJUSTE
 IM - Habilita a impressão das iterações no ajuste
 LF - Imprime a lista das funções existentes
 LI - Imprime uma lista das instruções de AJUSTE
 NO - Registra comentário na listagem auxiliar
 SP - Imprime listagem auxiliar na impressora
 ZE - Inicializa AJUSTE
 ^Z - Termina AJUSTE

A P E N D I C E B

LISTA DE FUNÇÕES INTERNAS

=====

Este apêndice descreve as 15 funções que AJUSTE possui internamente e está dividido em duas partes. A primeira lista as funções propriamente ditas, numa lista de consulta rápida, parecida com a do comando LF. A segunda parte descreve as funções em mais detalhe, dando as fórmulas e a ordem dos parâmetros, informação importante para seguir as iterações e interpretar a matriz de covariância. O número permitido de parâmetros também é indicado.

B.1 - LISTA DAS FUNÇÕES

AJUSTE dispõe internamente de 15 funções, acessadas por um número.

| Número | Função |
|--------|---|
| 1 | Reta + soma de até 4 exponenciais |
| 2 | Função tipo carga de capacitor $A(1 - e^{-ax}) + C$ |
| 3 | Exponencial de um polinômio (grau até 9) |
| 4 | Logaritmo de um polinômio (grau até 8) |
| 5 | Soma de até 5 termos $A.X^n$ |
| 6 | Soma de polinômios de Legendre |
| 7 | Polinômio de grau menor ou igual a 9 |
| 8 | Polinômio de terceiro grau + soma de até duas gaussianas de larguras diferentes. |
| 9 | Polinômio de segundo grau + soma de até três gaussianas de mesma largura |
| 10 | Soma de até três gaussianas de largura diferentes |
| 11 | Soma de até três cosenos $(A \cos(Bx + C))$ |
| 12 | Polinômio de segundo grau + soma de até 2 Lorentzianas $[A/((X^2 - B)^2/(CX)^2 + 1)]$ |
| 13 | Soma de até três Lorentzianas |
| 14 | Polinômio de segundo grau + soma de até três Breit-Wigner $[A/((X - B)/C)^2 + 1]$ |
| 15 | Soma de até três Breit-Wigner |
| 30 | Função do usuário. Ver capítulo V. |

B.2 - DETALHES DAS FUNÇÕES

Cada função será aqui detalhada, com expressões analíticas e parâmetros.

FUNÇÃO 1

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2X + A_3 \exp(A_4X) + A_5 \exp(A_6X) + A_7 \exp(A_8X) + A_9 \exp(A_{10}X)$$

Parâmetros: A_1 - Constante (grau 0) do polinômio
 A_2 - Termo linear (grau 1) do polinômio
 A_3, A_5, A_7, A_9 - Amplitudes das exponenciais
 A_4, A_6, A_8, A_{10} - Expoentes das exponenciais

Número de parâmetros permitido : 2-4-6-8-10

FUNÇÃO 2

$$\text{Fórmula : } Y = A_1(1 - \exp(-A_2X)) + A_3$$

Parâmetros: A_1 - Amplitude
 A_2 - Expoente da exponencial
 A_3 - Constante

Número de parâmetros permitido : 2-3

FUNÇÃO 3

$$\text{Fórmula : } Y = \exp(A_1 + A_2X + A_3X^2 + \dots + A_kX^{k-1})$$

Parâmetros: A_i - Coeficiente do grau (i-1)

Número de parâmetros permitido : 1-2-3-4-5-6-7-8-9-10

FUNÇÃO 4

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 \log(A_2 + A_3X + \dots + A_kX^{k-2})$$

Parâmetros: A_1 - Constante multiplicativa do log
 A_k - Coeficiente do grau (k-2)

Número de parâmetros permitido : 2-3-4-5-6-7-8-9-10

Observação : o logaritmo é natural.

FUNÇÃO 5

$$\text{Fórmula : } Y = A_1X^{A_2} + A_3X^{A_4} + A_5X^{A_6} + A_7X^{A_8} + A_9X^{A_{10}}$$

Parâmetros: A_1, A_3, A_5, A_7, A_9 - Amplitudes
 $A_2, A_4, A_6, A_8, A_{10}$ - Expoentes

Número de parâmetros permitido : 2-4-6-8-10

FUNÇÃO 6

$$\text{Fórmula : } Y = A_1P_{A_2}(\cos X) + A_3P_{A_4}(\cos X) + A_5P_{A_6}(\cos X) + A_7P_{A_8}(\cos X) + A_9P_{A_{10}}(\cos X)$$

Parâmetros: A_1, A_3, A_5, A_7, A_9 - Amplitudes
 $A_2, A_4, A_6, A_8, A_{10}$ - "l" dos polinômios de Legendre: $P_l(\cos x)$

Número de parâmetros permitido : 1,2,3,4,5

Observação : O ângulo X deve ser dado em graus.

FUNÇÃO 7

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2X + A_3X^2 + A_4X^3 + A_5X^4 + A_6X^5 + A_7X^6 + A_8X^7 + A_9X^8 + A_{10}X^9$$

Parâmetros: A_k - Coeficiente do termo de grau (k-1)

Número de parâmetros permitido : 1-2-3-4-5-6-7-8-9-10

FUNÇÃO 8

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2(X-A_3) + A_3(X-A_3)^2 + A_4(X-A_3)^3 + A_5 \exp(-0.5((X-A_3)/A_7)^2) + A_6 \exp(-0.5((X-A_3)/A_{10})^2)$$

Parâmetros: A_1, A_2, A_3, A_4 - Coeficiente do termo de grau (k-1), com k=1,2,3 ou 4
 A_5, A_6 - Amplitude das gaussianas
 A_7, A_{10} - Posição das gaussianas
 A_7, A_{10} - Largura das gaussianas (sigma)

Número de parâmetros permitido : 7-10

Observação : O polinômio de grau 3 é definido na variável $(X-A_3)$, ou seja, num referencial centrado no primeiro pico. Isto tem por objetivo acelerar a convergência, diminuir os erros de cálculo. Recomenda-se definir como primeiro pico o pico maior.

FUNÇÃO 9

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2(X-A_4) + A_3(X-A_6)^2 + \\ A_5 \exp(-0.5((X-A_4)/A_4)^2) + \\ A_7 \exp(-0.5((X-A_6)/A_4)^2) + \\ A_9 \exp(-0.5((X-A_{10})/A_4)^2)$$

Parâmetros: A_1, A_2, A_3 - Coeficiente do termo de grau (k-1), com k=1,2 ou 3
 A_4 - Largura das gaussianas (sigma)
 A_5, A_7, A_9 - Amplitude das gaussianas
 A_6, A_8, A_{10} - Posição das gaussianas

Número de parâmetros permitido : 6-8-10

Observação : O polinômio de grau 2 é definido na variável (X-A₆), ou seja, num referencial centrado no primeiro pico. Isto tem por objetivo acelerar a convergência, diminuir os erros de cálculo. Recomenda-se definir como primeiro pico o pico maior.

FUNÇÃO 10

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 \exp(-0.5((X-A_2)/A_3)^2) + \\ A_4 \exp(-0.5((X-A_5)/A_6)^2) + \\ A_7 \exp(-0.5((X-A_8)/A_9)^2)$$

Parâmetros: A_1, A_4, A_7 - Amplitude das gaussianas
 A_2, A_5, A_8 - Posição das gaussianas
 A_3, A_6, A_9 - Largura das gaussianas (sigma)

Número de parâmetros permitido : 3-6-9

FUNÇÃO 11

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 \cos(A_2 X + A_3) + A_4 \cos(A_5 X + A_6) + \\ A_7 \cos(A_8 X + A_9)$$

Parâmetros: A_1, A_4, A_7 - Amplitude do coseno
 A_2, A_5, A_8 - Frequencia polinômio
 A_3, A_6, A_9 - Fase

Número de parâmetros permitido : 3-6-9

Observações: - A frequencia deve ser tal que o produto frequencia x X seja em radianos.
 - A fase deve ser em radianos.

FUNÇÃO 12

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2 X + A_3 X^2 + \\ A_4 (A_4 X)^2 / ((X^2 - A_5)^2 + (A_6 X)^2) + \\ A_7 (A_7 X)^2 / ((X^2 - A_8)^2 + (A_9 X)^2)$$

Parâmetros: A_1, A_2, A_3 - Coeficiente do termo de grau (k-1)
 A_4, A_7 - Amplitudes
 A_5, A_8 - Posições
 A_6, A_9 - Larguras (gamma)

Número de parâmetros permitido : 6-9

FUNÇÃO 13

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 (A_3 X)^2 / ((X^2 - A_2)^2 + (A_3 X)^2) + \\ A_4 (A_4 X)^2 / ((X^2 - A_5)^2 + (A_6 X)^2) + \\ A_7 (A_7 X)^2 / ((X^2 - A_8)^2 + (A_9 X)^2)$$

Parâmetros: A_1, A_4, A_7 - Amplitudes
 A_2, A_5, A_8 - Posições
 A_3, A_6, A_9 - Larguras (gamma)

Número de parâmetros permitido : 3-6-9

FUNÇÃO 14

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 + A_2 X + A_3 X^2 + A_4 A_6^2 / ((X-A_5)^2 + A_6^2) + \\ A_7 A_9^2 / ((X-A_8)^2 + A_9^2)$$

Parâmetros: A_1, A_2, A_3 - Coeficiente do termo de grau (k-1)
 A_4, A_7 - Amplitudes
 A_5, A_8 - Posições
 A_6, A_9 - Larguras (meia largura a meia altura)

Número de parâmetros permitido : 6-9

FUNÇÃO 15

$$\text{Fórmula : } Y = A_1 A_3^2 / ((X-A_2)^2 + A_3^2) + A_4 A_6^2 / ((X-A_5)^2 + A_6^2) + \\ A_7 A_9^2 / ((X-A_8)^2 + A_9^2)$$

Parâmetros: A_1, A_4, A_7 - Amplitudes
 A_2, A_5, A_8 - Posições
 A_3, A_6, A_9 - Larguras (meia largura a meia altura)

Número de parâmetros permitido : 3-6-9

A P E N D I C E C

O STATUS

=====

O "status" de AJUSTE é uma palavra de 16 bits que contém informações sobre o estado atual do programa. Esta palavra é escrita quando um erro ocorre, e pode ser também obtida pelo comando ST. Em ambos os casos, o status vem escrito em octal, e no caso do comando ST, decodificado em binário. A tabela abaixo lista o significado de cada bit, quando setado.

| bit | octal | decimal | significado |
|-----|--------|---------|--|
| 0 | 1 | 1 | Houve convergência. |
| 1 | 2 | 2 | Imprimir as iterações. |
| 2 | 4 | 4 | Valores iniciais dos parâmetros foram definidos. |
| 3 | 10 | 8 | Há resultados calculados (houve um ajuste, com ou sem convergência). |
| 4 | 20 | 16 | Há dados (foram lidos dados). |
| 5 | 40 | 32 | Existe uma função definida. |
| 6 | 100 | 64 | O peso foi definido. |
| 7 | 200 | 128 | O peso foi calculado. |
| 8 | 400 | 256 | O vetor de dados foi ordenado em ordem crescente de abscissas. |
| 9 | 1000 | 512 | O arquivo de entrada de comandos não é um terminal (não é TI:). |
| 10 | 2000 | 1024 | O arquivo de saída auxiliar foi aberto e deverá ser mandado para a impressora. |
| 11 | 4000 | 2048 | AJUSTE foi chamado como "AJU comando". |
| 12 | 10000 | 4096 | Houve smoothing dos dados. |
| 13 | 20000 | 8192 | O ajuste está autorizado (interno). |
| 14 | 40000 | 16384 | O peso deve ser calculado. |
| 15 | 100000 | 32768 | Livre para expansão |

A P E N D I C E D

OS ERROS

=====

Quando ocorre uma situação anormal, AJUSTE imprime uma mensagem de erro, que tem como formato:

*ERRO nnn * ssssss * texto do erro

onde nnn é o número do erro, e ssssss o status de AJUSTE (ver apêndice C). Estas mensagens são na maioria suficientemente explícitas e auto-explicativas. Neste apêndice, os erros serão listados segundo sua numeração, com comentários a respeito quando for o caso. Os comandos que podem gerar estes erros são também listados.

Erro 1 - COMANDO INEXISTENTE

Este erro aparece cada vez que AJUSTE não consegue identificar os dois primeiros caracteres da linha como comando, ou então quando o comando MO é dado a partir de um arquivo de comando (este comando é exclusivamente interativo). Verifique sua linha.

Erro 2 - FUNÇÃO NÃO DEFINIDA

Comandos : AR,CO,FX,LV,PA,VA,VG

Um cálculo foi pedido, mas a função a ser usada não foi definida. Defina-a com um comando FU.

Erro 3 - PESO NÃO DEFINIDO

Comandos : CO

Ao mandar ajustar uma curva, o tipo de ponderação deve ser definido. Use o comando PE.

Erro 4 - HOUVE DIVISAO POR ZERO OU OVERFLOW (ERRO CLASSE 3)

Comandos : CO

Durante o ajuste, houve uma divisão por zero, ou um estouro (overflow). Verifique os valores dos parâmetros, retificando-os. Este erro pode acontecer por divergencia do ajuste, provocado por uma escolha inadequada da função ou dos valores iniciais.

Erro 5 - HOUVE ERRO NO CALCULO DA FUNÇÃO (ERRO CLASSE 4)

Comandos : CO

Um erro tipo raiz quadrada de número negativo ou logaritmo de zero aconteceu. Verifique os parâmetros.

Erro 6 - PARAMETRO ERRADO. DEVE SER UM INTEIRO

Comandos : ?

Erro 7 - NAO HA RESULTADOS A LISTAR

Comandos : MC,RE,TI,IT

Os comandos RE e MC só tem sentido quando houve um ajuste, o que define "resultados". Do mesmo modo, só é possível efetuar um teste em cima de resultados. Use o comando CO. Lembre-se que comandos tipo PA cancelam a indicação de resultados definidos (bit número 3 (A₁₀) do status).

Erro 8 - FUNCAO INEXISTENTE

Comandos : FU

O argumento do comando FU esta errado. Ele deve ser um inteiro entre 1 e 15 para funções internas, e maior ou igual a 30 para as externas. O valor 0 é aceito para cancelar a função.

Erro 9 - ARQUIVO INEXISTENTE OU ILEGIVEL

Comandos : DA,DE,DF,HI

O arquivo que foi passado para o comando de leitura de dados não existe ou está em estado tal que não pode ser lido (aberto ou acessado por outro comando). Use o comando BL para suspender AJUSTE, e use o PIP para localizar o erro e saná-lo. Talvez o arquivo esteja protegido ou pertença a outro usuário.

Erro 10 - não usadoErro 11 - NAO HA DADOS A LISTAR

Comandos : LD,TA

Não foram lidos pontos experimentais, e portanto não pode haver listagem (LD). Este erro no comando TA significa que não tem resultados (como o erro 7).

Erro 12 - não usadoErro 13 - NAO HA MAIS ESPACO PARA DADOS (MAIS DE 100 PONTOS)

Comandos : AD

Tentou-se inserir um ponto quando já havia 100 pontos na lista (máximo de pontos=100).

Erro 14 - não usado

Erro 15 - DADO NAO ENCONTRADO

Comandos : AP,EL,TD

O ponto especificado no comando não foi encontrado na lista de dados. Provavelmente trata-se de um erro de digitação. Este erro ocorre também devido à precisão numérica. Assim, pontos que foram transformados (com um LX, por exemplo) e re-transformados de volta podem aparecer na listagem (LD) como tendo o valor original, mas serem internamente distintos. Use a forma com #n neste caso, ou o comando MO.

Erro 16 - não usadoErro 17 - NAO HA DADOS NEM FUNCAO A GRAFICAR

Comandos : PL,VI

O comando foi dado sem que tivesse dados ou função para graficar. Seria um gráfico sem nada!

Erro 18 - NAO HA DADOS A GRAVAR

Comandos : GH,GR

A lista de dados está vazia. Não há o que gravar.

Erro 19 - ARQUIVO A SER GRAVADO FALTANDO

Comandos : GH,GR

O comando foi dado sem seu parâmetro obrigatório, o nome do arquivo. Use a sintaxe correta.

Erro 20 - ARQUIVO NAO PODE SER GRAVADO (ERRO CLASSE 1)

Comandos : GH,GR

Algo aconteceu com a gravação. O nome do arquivo pode estar errado, ou o disco cheio, ou a unidade especificada

inexistente ou não montada. Verifique, após usar o comando BL para suspender AJUSTE.

Erro 21 - CONVERGENCIA O REJEITADA

Comandos : CV

O comando CV foi dado com parâmetro decodificado como nulo (poder ter sido erro de conversão). Isto não é permitido.

Erro 22 - SO PODEM SER LIDOS ATE 100 CANAIS

Comandos : DA,DE,DF

Ao ler um espectro, o número de canais ultrapassou 100 (número de canais = canal final - canal inicial + 1). Ou nos comando DA e DF, o número de pontos foi dado acima de 100. Embora a leitura termine no último ponto do arquivo se tiver menos pontos que o pedido, não se pode pedir mais que 100.

Erro 23 - não usadoErro 24 - CANAL FORA DOS LIMITES DO ESPECTRO

Comandos : DE

Foi pedida a leitura de um ou mais canais além do fim do espectro, pelo menos de acordo com o conteúdo do bloco descritor. Verifique o espectro, ou seu pedido de leitura.

Erro 25 - NUMERO DE PONTOS INSUFICIENTE PARA SMOOTHING

Comandos : SM

São necessários pelo menos 3 pontos para efetuar a operação de smoothing.

Erro 26 - DADOS NAO DEFINIDOS

Comandos : AP, CD, DV, DX, DY, EL, ER, EX, EY, FF, IN, IT, LX, LY, MD, MD,
MX, MY, PL, RO, RS, SM, SX, SY, TD, VI

Todos estes comandos atuam sobre dados, que devem ter sido lidos. A lista de dados está vazia.

Erro 27 - NAO HOUVE CONVERGENCIA REQUERIDA

Comandos : CD

Este erro não aparece na execução, mas como aviso no pedido de resultados (comando RE), embora tenha sido gerado durante um comando CD. Trata-se apenas de uma informação. Continue com as iterações até convergir, ou verifique a causa da demora em convergir.

Erro 28 - GRAUS DE LIBERDADE NEGATIVO

Comandos : CD

Não há pontos suficientes para o ajuste, isto é, tenta-se extrair mais parâmetros do que há pontos para isto. Reduza o número de parâmetros ou aumente o número de dados da região parcial.

Erro 29 - NAO HA PONTOS CALCULADOS PARA GRAVAR

Comandos : GF

Só é possível gravar os valores da função ajustada se ela foi de fato ajustada. Use o comando CD para efetuar o ajuste.

Erro 30 - VALDRES INICIAIS NAO DEFINIDOS

Comandos : CD

Para poder efetuar um ajuste, valores iniciais dos parâmetros devem ser dados. Este erro vem seguida da pergunta :

CONTINUA ?

ao que deve-se respondem S (sim) se o ajuste deve prosseguir com os valores atualmente existentes. Qualquer outra resposta é interpretada como um "não prossiga".

Erro 31 - PONDERACAO NAO DEFINIDA OU INVALIDA

Comandos : PE

Os tipos permitidos são Instrumental, Estatístico e Sem peso (I, E e S respectivamente). Uma outra alternativa foi dada. Corrija.

Erro 32 - não usadoErro 33 - ERRO DE CONVERSÃO. VERIFIQUE OS DADOS

Comandos : AP, DA, DF, EL, ER, HI, MD, RS

Houve erro de conversão durante a execução de um destes comandos. Verifique os valores. Um erro de conversão gera um valor nulo.

Erro 34 - ERRO DE FORMATO

Comandos : DA, DF, HI

Este erro só deve acontecer no comando DF, já que neste o formato foi dado pelo usuário. Caso aconteça com DA ou HI, comunique-se com o responsável da sua instalação.

Erro 35 - NUMERO DE COEFICIENTES NAO DEFINIDO

Comandos : AR, FX, LV, PA, VA, VG

A função foi definida, mas não os coeficientes, num comando que exige valores para eles, ou pelo menos saber quantos parâmetros são usados (PA, FX, LV). Use o comando PA para definir quantos parâmetros serão usados.

Erro 36 - NUMERO DE PARAMETROS LIVRES NULO

Comandos : CD

Todos os parâmetros estão fixos. Libere pelo menos um deles para que possa haver alguma possibilidade de ajustar a curva. Se apenas o chi-quadrado interessar, e não se quer modificação dos parâmetros, libere um deles, e use CD=0.

Erro 37 - não usadoErro 38 - não usadoErro 39 - não usadoErro 40 - DIVISOR NULO (DX OU DY)

Comandos : DX,DY

O parâmetro do comando foi decodificado como nulo. Para evitar divisão por zero, este erro é impresso e o comando cancelado.

Erro 41 - ARQUIVO DE ENTRADA NAO EXISTE

Comandos : ?

Erro 42 - ESPACAMENTO DE DADOS NAO E' CONSTANTE

Comandos : DV,FF,IN,SM

Estes comandos exigem um espaçamento constante entre as abscissas dos pontos pelo tipo de algoritmo usado. Se não houver outro jeito de se obter pontos espaçados igualmente, use o comando IT para interpolar os pontos na região desejada.

Erro 43 - PROCESSADOR DA FUNCAO NAO EXISTE OU JA ATIVO

Comandos : FU

Uma função externa foi definida e não pode ser ativada pois por alguma razão já existe um task rodando com o nome .Fnn. (nn=número do terminal onde roda AJUSTE), ou, o que é bem mais provável, o arquivo do task não existe (nome errado, ou não foi montado, isto é, não existe o arquivo.TSK). Use o comando BL para suspender AJUSTE, e localize a causa do erro.

Erro 44 - PARAMETROS DO COMANDO ERRADOS

Comandos : AD,AP,AR,DA,DE,DF,EL,ER,ES,FX,HI,IT,LV,MC,PA,PL,RS,TD,TI,TT,VG,VI

O comando foi dado com algum parâmetro ilegal. Verifique a sintaxe. Por exemplo, o número do parâmetro a ser alterado nos comandos PA,FX,LV é maior que o número de parâmetros definidos.

Erro 45 - NAO HA DADOS SUFICIENTES PARA A TRANSFORMACAO PEDIDA

Comandos : DV,FF,IN,IT

Um número mínimo de pontos é necessário para poder efetuar a operação pedida. São necessários pelo menos 5 pontos para o comando DV e IT, 7 pontos para IN, e para o comando FF, uma potência de dois (2,4,8,16,32 ou 64 pontos exatamente).

Erro 46 - LINHA DE MAIS DE 80 CARACTERES. COMANDO IGNORADO

Este erro aparece se a linha de comando tem mais de 80 caracteres, que é um limite de AJUSTE.

Além dos erros citados acima, dois erros ou mensagens podem aparecer, com ou sem número:

Erro -nnn - ERRO DE DIRETIVA OU OUTROS NAO IDENTIFICADOS

Este erro ocorre apenas nos comandos que usam a função externa (FU, quando chama a função), ou que usam o COMMON de comunicação com área de trabalho (IN,IT,DV). O código -nnn é indicativo do erro da diretiva que falhou, e pode ser procurado no "Executive Reference Manual". A causa mais frequente é sobrecarga de sistema. Não há memória disponível naquele instante. O jeito é tentar de novo ou aguardar um instante mais propício. Falta de Pool também pode ocorrer, com a mesma causa e recuperação.

O PROCESSADOR DE FUNÇÃO TERMINOU INESPERADAMENTE

Por alguma razão, a função externa terminou. Em geral, a causa foi um erro de programação do usuário, que provocou um erro fatal (violação de memória, por exemplo). Ou a função foi abortada explicitamente.

A P E N D I C E E

ALGORITMOS USADOS

Este apêndice apresenta os algoritmos e fórmulas usados pelo programa AJUSTE. Quando for o caso, as referências bibliográficas são dadas.

E.1 - MININOS QUADRADOS

O ajuste de curvas a dados é feito por minimização do chi-quadrado. Em geral, as curvas ajustadas não são lineares nos parâmetros, e portanto, um algoritmo iterativo se faz necessário. AJUSTE usa uma versão modificada da rotina CURFIT descrita em:

DATA REDUCTION AND ERROR ANALYSIS FOR THE PHYSICAL SCIENCES

P.Bevington, Mc Graw Hill.

O procedimento segue o algoritmo de Marquard, que usa um passo variável na minimização. Quando o conjunto de parâmetros corresponde a um chi-quadrado longe do mínimo, a procura tende a ser do tipo gradiente, enquanto que nas proximidades do mínimo, tende a ser de expansão parabólica.

A modificação introduzida refere-se a aumentar a velocidade de cálculo, armazenando resultados parciais que são usados várias vezes numa iteração.

E.2 - SMOOTHING

O smoothing de dados é feito usando uma fórmula de 3 pontos igualmente espaçados:

$$Y_n' = (Y_{n-1} + 2Y_n + Y_{n+1})/4.$$

e para as pontas,

$$Y_n' = (Y_{n-1} + 3Y_n)/4.$$

onde Y_n' é o novo valor.

E.3 - DERIVAÇÃO

A derivação usa uma fórmula de 5 pontos igualmente espaçados, segundo fórmula 25.3.6 dada em Handbook of Mathematical Functions, M. Abramowitz, Dover. :

$$Y_n' = (Y_{n-2} - 8Y_{n-1} + 8Y_{n+1} - Y_{n+2})/12h$$

onde Y_n' é a derivada no ponto n , e h o espaçamento entre pontos.

E.4 - INTEGRAÇÃO

A integração é feita por Simpson, segundo a regra tradicional de 3 pontos com peso (1,4,1). Para evitar o problema de se ter obrigatoriamente um número ímpar de pontos, e só ter a integral para os pontos ímpares, duas somas são armazenadas : uma para os pontos pares e uma para os ímpares.

E.5 - INTERPOLAÇÃO

A interpolação segue a fórmula de Lagrange para 5 pontos, descrita na 25.2.1 da obra citada em derivação (E.3). Os pontos escolhidos para efetuar a interpolação numa dada abcissa são escolhidos de forma que circundam a abcissa, para minimizar erros. Nas extremidades, os primeiros ou últimos 5 pontos são usados.

E.6 - POLINÔMIOS DE LEGENDRE

Os polinômios de Legendre são calculados por recursão, a partir de P_0 . A cada l obtido, AJUSTE procura se um

parâmetro da função usa este P_l , e vai até o maior l definido.

E.7 - TRANSFORMADA DE FOURIER

A transformada de Fourier usa o algoritmo conhecido como Fast Fourier Transform. A rotina usada é a listada em:

THE FAST FOURIER TRANSFORM
E.O.Brigham
Prentice-Hall, 1974

Esta rotina foi escolhida por ser pequena, e rápida para o número de pontos que AJUSTE aceita no máximo. A restrição maior é que aceita apenas um número de pontos que é uma potência de 2, o que limita sua aplicação. Rotinas que usam qualquer número de pontos são muito grandes, e poderiam não caber na estrutura do programa.

A P E N D I C E F

CAPACIDADE E LIMITES

=====

A versão implantada no computador PDP11/45 na época da redação deste manual, em janeiro 1987, era a 1.a, com capacidade de analisar 100 ponto com função de até 10 parâmetros. Estes limites tem por origem a capacidade de endereçamento do PDP, de 16 bits. AJUSTE já está em overlay, e para poder usar a função externa, precisa de uma janela de 8 kBytes (1 APR) para se mapear, embora a região use apenas 2 kBytes de memória física. Isto limita o tamanho de AJUSTE a 56 kBytes, limite praticamente atingido na versão 1.a.

Para aumentar o número de pontos, deve-se portanto abrir mão da função externa e dos comandos que usam memória extra (DV,IN,IT). Consideramos mais importante o recurso da função de usuário que aumentar o número de pontos.

Para aumentar o número de parâmetros, a restrição é a mesma, embora 1 ou 2 parâmetros a mais talvez caibam. O problema surge com a função externa. No cálculo da derivada da função de usuário, toda a região dinâmica é usada, pois trata-se de calcular até 10 derivadas (10 parâmetros) em até 100 pontos, num total de 1000 valores. Cada parâmetro a mais representa 100 valores a mais, e a região de comunicação deverá ser ampliada.

Qualquer alteração deverá ser feita também no programa principal da função externa.

A P E N D I C E G

ROTINAS E OVERLAY

=====

Este apêndice descreve sucintamente cada rotina que compõe AJUSTE. Em seguida, a estrutura de overlay usada é apresentada. Esta estrutura visa minimizar a carga de ramos de overlay. AJUSTE foi escrito tendo em mente que somente com overlay seria possível um programa deste tamanho. A estrutura é portanto virada para este fim, o programa principal sendo pequeno, e despachando tarefas para as rotinas adequadas. A interpretação dos comandos fica a cargo da rotina que executa o comando, o programa principal apenas identificado o comando.

G.1 - ROTINAS DE AJUSTEPrograma PRINCIPAL :

Sua função é determinar com AJUSTE foi chamado, ou seja, se a entrada será feita por terminal. Em seguida, e até terminar, o programa principal lê uma linha de entrada, copia-a para o arquivo de saída auxiliar se for o caso, descobre que comando foi (identifica as duas primeiras letras), e chama a rotina que executará este comando. No retorno do comando, verifica a existência de erros, e em caso positivo, imprime-os.

Rotina AJUSTA :

A rotina AJUSTA controla o ajuste, que é feito por CURFIT. A cada iteração, verifica se houve convergência, ou algum erro.

Rotina ARITH :

Esta rotina trata dos comandos de modificação de eixo: DX,DX,EX,EY,LX,LY,MX,MY,RO,SX e SY. Decodifica os parâmetros e executa o comando.

Rotina BREITW :

Calcula o valor de uma Breit Wigner.

Rotina CALC :

Trata dos comandos AR,VA e VG.

Rotina CARAC :

Atende aos comandos AS,CV,ES,FU,NP,PE,RP e ZE.

Rotina CDERIV :

Manda o task da função externa calcular as derivadas desta função.

Rotina COMPAC :

Compacta a matriz de erros usada no ajuste, removendo as linhas e colunas correspondentes aos parâmetros fixos.

Rotina CONTIN :

Responde pelo comando CD. Verifica se tudo está OK, manda ordenar vetor de pontos se for necessário, prepara o ajuste para a rotina AJUSTA, que é chamada em seguida quando não há erro.

Rotina CRIVIR :

Esta rotina cria a região dinâmica de memória. Pede ao sistema um bloco de 2kBytes, no qual se mapeia após criar

uma janela. Esta rotina deve ser alterada quando se muda o APR usado.

Rotina CURFIT :

A CURFIT é a rotina responsável pelo ajuste propriamente dito. AJUSTE foi construído em torno dela. CURFIT efetua uma iteração, isto é, altera os parâmetros de forma a que o chi-quadrado final seja menor que o inicial. Esta iteração pode ser composta de muitas sub-iterações.

Rotina EIXO :

Traça eixos no plotter.

Rotina EIXDV :

Traça eixos no video.

Rotina ENTRA :

Executa os comandos de entrada de dados : DA,DE,DF e HI.

Rotina ERRO :

Imprime os erros que aconteceram na execução de qualquer comando.

Rotina EXPAND :

Rotina complementar de COMPAC, esta rotina expande a matriz de covariância, inserindo linhas e colunas nas posições correspondentes a parâmetros fixos.

Rotina FCHISQ :

Calcula o chi-quadrado do ajuste.

Rotina FCTN :

Rotina intermediária no cálculo das funções. De acordo com a função em uso, chama a função interna (FCTN1 e FCTN2), ou devolve o valor da função externa que deve estar no COMMON.

Rotina FCTN1 :

Calcula o valor das funções número 1 a 7.

Rotina FCTN2 :

Calcula o valor das funções número 8 a 15.

Rotina FD1 :

Calcula as derivadas das funções 1 a 7

Rotina FD2 :

Calcula as derivadas das funções 8 a 15.

Rotina FDERIV :

Controla o cálculo da derivada, chamando FD1 ou FD2 se a função é interna, ou devolvendo valores da função externa que estão no COMMON.

Rotina FFT :

Calcula a transformada de Fourier.

Rotina FUNCTN :

Pede ao task da função externa o cálculo desta função.

Rotina GAUSS :

Calcula o valor de uma gaussiana.

Rotina GRAFIC :

Faz gráfico no papel, impressora ou terminal não gráfico.

Rotina GRAPH :

Prepara o gráfico, achando mínimos e máximos, verificando se há dados, função, e se o terminal é gráfico.

Rotina IESCX :

Converte a abcissa para coordenada de plotter.

Rotina IESCXV :

Converte a abcissa para coordenada de video.

Rotina IESYX :

Converte a ordenada para coordenada de plotter.

Rotina IESYV :

Converte a ordenada para coordenada de video.

Rotina LABELV :

Coloca texto na tela de video.

Rotina LEP :

Lê do terminal o valor do parâmetro para o comando PA, imprimindo o nome do parâmetro, e mantendo o valor se um "return" foi dado.

Rotina LISFUN :

Executa o comando LF.

Rotina LISINS :

Executa o comando LI.

Rotina MODIF :

Executa os comandos de modificação de dados : AD,AP,TU, ER,MO,EL e RS.

Rotina MZIVSJ :

Inverte matriz.

Rotina ORDEM :

Ordena o vetor de dados em ordem crescente de abcissas.

Rotina PAR :

Imprime o nome e valor do parâmetro.

Rotina PARAMI :

Responde pelos comandos PA,FX e LV.

Rotina PCHI :

Calcula a probabilidade de se obter um chi-quadrado acima de um certo valor, dado o número de graus de liberdade.

Rotina PLOTA :

Efetua o comando PL, inicializando o plotter, e fazendo o gráfico.

Rotina PONDER :

Calcula o peso de cada ponto.

Rotina PRIT :

Efetua o teste t de Student.

Rotina RESULT :

Imprime os resultados para o comando RE.

Rotina SAIDAS :

Executa os comandos TA,LD,GR,GF,GH,MC,ST e MD.

Rotina TESTES :

Executa os comandos TI e TT.

Rotina TPCTPI :

Calcula intervalo de confiança.

Rotina TRNSFO :

Executa os comandos de transformação de dados : SM,DV, II,IN e FF.

Rotina ISV :

Traça um vetor na tela de video.

Rotina VIDED :

Executa o comando VI, quando o terminal é de video.

Rotina ZPRB :

Calcula a probabilidade de se obter um valor normalmente distribuido acima de um dado valor.

G.2 - ROTINAS DE BIBLIOTECAS

Uma série de rotinas são usadas que provêm de bibliotecas diversas, principalmente as gráficas. Algumas rotinas de sistema também são chamadas. Descrevemos a seguir de forma resumida o que fazem estas rotinas.

Rotinas de SISTEMA:

| | |
|--------|--|
| ASSIGN | Associa arquivo a unidade lógica |
| CLOSE | Fecha arquivo |
| DATE | Devolve a data |
| ERRSET | Define tolerância a erros |
| ERRSNS | Testa tipo de erro |
| GETLIN | Lê uma linha da unidade de entrada |
| IRAD50 | Converte ASCII para RAD50 |
| R50ASC | Converte RAD50 para ASCII |
| RAD50 | Converte ASCII para RAD50 |
| RECAST | Permite receber AST da diretiva RECEIV |
| RECDST | Inibe AST de RECEIV |
| TIME | Devolve hora |

Rotinas de DIRETIVAS DE SISTEMA

| | |
|--------|--|
| ALTPRI | Altera prioridade |
| CLREF | Limpa Event Flag |
| CRAW | Cria janela de endereçamento |
| CRRG | Cria região dinâmica |
| DTRG | Desliga-se da região dinâmica |
| EXST | Termina com status |
| GETLUN | Devolve informações sobre a unidade em uso |
| MAP | Mapeia-se na região dinâmica |
| READEP | Lê Event Flags |
| RECEIV | Recebe mensagem |
| SEND | Manda mensagem |
| SPAWN | Passa comando para o sistema |
| SREF | Manda referência da região dinâmica |
| STLOR | Para num "OU" de Event Flags |
| USTP | Unstop programa (reativa task) |
| WAITFR | Espera por um Event Flag |
| WFSNE | Espera por um evento significativo |
| WTFLOP | Espera por um OU de Event Flags |

Rotinas gráficas do PLOTTER

| | |
|--------|---------------------------------------|
| CHRSZ2 | (DISPLO) - define caracteres grandes |
| CHRSZ3 | (DISPLO) - define caracteres médios |
| CHRSZ4 | (DISPLO) - define caracteres pequenos |
| ERRBAR | (DISPLO) - traça barra de erro |

| | |
|--------|--|
| LABL | (DISPLO) - Coloca texto no gráfico |
| PLFINI | (HPLIB) - termina ligação com plotter |
| PLINIT | (HPLIB) - inicia ligação com plotter |
| PSGRIS | (HPLIB) - define tamanho da grade |
| PSVEL | (HPLIB) - define velocidade da pena |
| ROTLAB | (DISPLO) - coloca texto rodado de 90 graus |
| TS | (DISPLO) - traça curva |

Rotinas gráficas para VIDEO: biblioteca ICS

| | |
|--------|-----------------------------------|
| ANMODE | Entra em modo alfanumérico |
| DRWABS | Traça segmento absoluto |
| DRWREL | Traça segmento relativo |
| FINITT | Termina ligação gráfica |
| INITT | Inicia ligação gráfica |
| MOVABS | Move cursor gráfico absolutamente |
| MOVREL | Move cursor gráfico relativamente |

G.3 - OVERLAY

```

.ROOT PRIN,AUX
0V0: .FCTR AJUSTE/LB: .MAIN.-[1,1]SYSLIB/LB:RECAST:$SHORT
01: .FCTR AJUSTE/LB:LISINS:LISFUN:ERRO
02: .FCTR AJUSTE/LB:CARAC
03: .FCTR AJUSTE/LB:GRAFIC:SAIDAS
031: .FCTR AJUSTE/LB:TESTES:TPCTPT:PRTT:ZPRB
032: .FCTR AJUSTE/LB:RESULT:PAR:PCHI
04: .FCTR AJUSTE/LB:AJUSTA:CURFIT:COMPAC:EXPAND:MZIVSJ:FCHISO
05: .FCTR AJUSTE/LB:ARITH:GRAPH
052: .FCTR AJUSTE/LB:VIDEO:CONVRT:EIXOV:IESCXV:IESCYV:TSV:LABLV-[1,1]TCS/LB
053: .FCTR AJUSTE/LB:PLOTA:CONVRT:EIXO:IESCX:IESCY-[1,1]DISPLO/LB-[1,1]HPLIB/LB
06: .FCTR AJUSTE/LB:TRNSFO:FFT:IBITR:CALC
08: .FCTR AJUSTE/LB:ENTRA:PONDER:CONTIN
07: .FCTR AJUSTE/LB:PARAMT:LEP:MODIF
PRIN: .FCTR 0V0-*(01,02,03,031,032,04,05,052,053,06,07,08)
;
AV1: .FCTR AJUSTE/LB:FCTN1:FD1
AV2: .FCTR AJUSTE/LB:FCTN2:FD2:GAUSS:BREITW:LORENT
AV3: .FCTR AJUSTE/LB:ORDEN:CDERIV:CRIVIR
AUX: .FCTR *AJUSTE/LB:FCTN:FDERIV:FUNCTN-*(AV1,AV2,AV3)
.END

```

A P E N D I C E H

MONTAGEM:

=====

A montagem de AJUSTE é feita pelo arquivo indireto AJUSTE.CMD. A operação se divide em 3 fases. Na primeira, AJUSTE é compilado pelo compilador Fortran FOR. Em seguida, o LBR (Librarian) gera uma biblioteca AJUSTE.DLB a partir do arquivo AJUSTE.OBJ criado na fase anterior. Finalmente, AJUSTE.TSK é montado pelo TKB (Task Builder), que usa o arquivo AJUSTE.BLD, que contém as indicações dos arquivos necessários à operação, assim como as janelas necessárias para a função externa. O mapa de overlay está em AJUSTE.OBL. Montar AJUSTE num PDP11/45 com RK07 leva cerca de meia hora incluído a compilação

A P E N D I C E I

ADAPTAÇÃO A OUTROS SISTEMAS

=====

AJUSTE não foi escrito com a preocupação de portabilidade. Assim sendo, AJUSTE foi feito essencialmente pensando em usar da melhor forma possível, tanto em espaço quanto em velocidade, os recursos disponíveis na época no PDP11/45, sem processador de ponto flutuante, e usando recursos do sistema operacional RSX11M para atingir este objetivo.

O programa torna-se assim pouco portátil. Mesmo compilado no PDP com o F4P, algumas dificuldades aparecem (em LISFUN e LISINS, por exemplo, por um formato longo demais). Todo o sistema de arquivo é dependente do RSX11M. O tipo BYTE não é padrão FORTRAN. O manuseio de caracteres também não é bem aceito por outros compiladores. A adaptação pode ser uma tarefa muito complicada.