

## Program pro tvorbu grafů - Grace

1. Web programu Grace: <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>
2. **Spuštění programu**

Spouštíme z terminálu příkazem *xmgrace &*. Program se také nachází v modulech, takže ho můžeme též spustit tak, že nahrajeme příslušný modul: *module add grace* a pak spustíme: *xmgrace &*.
3. **Načtení souboru s daty:**

Zvolíme *Menu: Data / Import / ASCII*. Vybereme soubor *example1.dat* (v */home/martinp/C2150/grace/*) vybereme v *Load as* volbu *NXY*. Zobrazí se graf se 4 křivkami (v pořadí černá, červená, zelená, modrá). Soubor si prohlédněte v textovém editoru: první sloupec obsahuje hodnoty na ose *x* a dle 4 sloupců jsou 4 série s hodnotami *y*.
4. **Práce se sériemi, odstranění série**

Budeme chtít odstranit poslední sérii (modrá čára). Vyberte *Menu: Edit / Data sets*. Označení série vždy znamená číslo grafu a číslo série, např. *G0.S1* je graf 0, série 1. Při kliknutí na sérii se zobrazí příslušná statistika (min a max na *X* a *Y* a pořadí bodu, která dané hodnoty dosahuje). Vybereme poslední sérii *S3* a pravým tlačítkem myši otevřeme kontextové menu a vybereme *Kill*. Dojde k odstranění série z grafu.
5. **Nastavení vzhledu sérií**

Vyberte *Menu: Plot / Set appearance*. Též můžeme dosáhnout dvojkliknutím na křivce v grafu.

  - Můžeme nastavit vlastnosti čáry křivky na záložce *Main* v sekci *Line properties*, např. změnu barvy v položce *Color*, změny musíme vždy potvrdit tlačítkem *Apply* (případně *Accept*, které však zavře okno). Dále můžeme nastavit různé typy symbolů zobrazených v jednotlivých bodech křivky.
  - Chceme-li provést změnu na více sériích, označíme více sérií s použitím *<Ctrl>* nebo *<Shift>*. Např. nastavte stejnou barvu pro všechny 3 série. Pokud nyní naopak chceme nastavit pro každou sérii odlišnou barvu, označíme tyto série a v menu okna *Set Appearance* vybereme: *Edit / Set different colors*. Pro nastavení odlišného typu čar obdobně použijeme *Edit / Set different line styles* a pro nastavení různých symbolů v bodech křivky *Edit / Set different symbols*. Pro černobílé zobrazení použijeme *Edit / Set black & white*.
  - Pokročilejší nastavení čar je na jednotlivých záložkách. Propojení mezi body lze např. odstranit v záložce *Main* v *Line properties* nastavením *Style* na *None*. Prostor pod čarou lze vyplnit na záložce *Line* nastavením v sekci *Fill properties* položky *Type* na *To baseline* případně nastavením barvy (*Color*) nebo vzoru (*Pattern*). Nastavte pro každou křivku jinou barvu vyplnění prostoru od křivkou.
  - Chceme-li změnit pořadí v jakém se křivky překrývají, klikneme na příslušnou sérii v seznamu pravým tlačítkem myši a v kontextovém menu vybereme *Bring to front* nebo *Send to Back*. Pořadí sérií v seznamu se změní tak aby byly vždy vykreslovány v pořadí jak jsou uvedeny v seznamu. V kontextovém menu lze také skrýt/zobrazit jednotlivé série.
6. **Vlastnosti os**

Vyberte *Menu: Plot / Axis Properties* nebo dvojklikněte na rámeček grafu. V okně je možné změnit parametry osy. Nahoře v poličku *Edit* vybíráme osu na kterou se budou změny aplikovat.

  - **Rozsah os.** V poličku *Start* a *Stop* lze vyplnit hodnoty počátku a konce osy a typ stupnice (lineární, logaritmická ...).
  - **Popisky os x a y.** Popisek uvedeme na záložce *Main*, sekce *Axis label*, poličko *Label string*. Chceme-li vložit do popisku speciální znak, stiskneme *<Ctrl><E>*. (V poličku se někdy nezobrazují ty znaky, které jsme vybrali, ale v grafu by to

mělo být vpořádku). Vytvořte vhodný popisek osy  $x$ . Na záložce *Axis label & bar* je možné nastavit další parametry popisku. Změňte font popisku na *Helvetica* a jeho barvu na modrou a velikost písma přibližně na 150. Vyzkoušejte další možnosti nastavení.

- **Značky na osách.** Na záložce *Main* v sekci *Display options* můžeme měnit zobrazení značek na osách a jejich popisků. V sekci *Tick properties* lze nastavit rozestupy mezi hlavními značkami (*Major spacing*) a počet menších značek mezi dvěma hlavními (*Minor ticks*), dále lze nastavit formát čísla popisku značek a počet desetinných míst (zkuste nastavit na *decimal* a 1 desetinné místo). V sekci *Tick label properties* lze změnit font a barvu popisků značek. V sekci *Axis placement* lze nastavit posun osy v kolmém směru (zkuste změnit hodnotu *Offset-Normal* na 0.03). Podrobnější nastavení lze provést na záložkách *Tick labels* (zkuste nastavit u popisků úhel na přibližně 45°, vyzkoušejte nastavení hodnot *Stagger*) a *Tick marks* (nechte vykreslit pomocné čáry *grid lines*). Nastavení čáry osy (*bar*) lze provést na záložce *Axis label & bar* v sekci *Bar properties* (barvu, tloušťku a styl čáry). V záložce *Special* lze přidávat uživatelské popisky na specifikované pozice.

## 7. Titulek grafu a další vlastnosti grafu

Vyberte *Menu: Plot / Graph Appearance* nebo dvojklikněte v oblasti nad grafem.

- **Titulek grafu.** Na záložce *Main* v sekci *Titles* vyplňte vhodný text nadpisu a podnadpisu grafu. Na záložce *Titles* můžeme měnit font, velikost písma a barvu.
- **Okraje grafu.** Šířku ohraničení grafu lze nastavit na záložce *Main* v sekci *Viewport*. Téhož lze dosáhnout dvojkliknutím na rohy grafu a posunutím.
- **Orámování grafu.** Na záložce *Frame* lze měnit typ ohraničení, barvu, tloušťku a styl čáry. Také lze nastavit vlastnosti výplně grafu.

## 8. Legenda grafu

V okně *Set Appearance* (*Menu: Menu: Plot / Set appearance*) přidejte pro každou sérii popisek legendy (záložka *Main*, sekce *Legend*). Dále v okně *Graph Appearance* (*Menu: Plot / Graph Appearance*) označíme *Display legend* (záložka *Main*, sekce *Display options*) a tak dojde k zobrazení legendy. Vlastnosti legendy nastavujeme na záložkách *Leg. box* a *Legends*. Polohu rámečku s legendou lze změnit pomocí myši když v okně s grafem stiskneme <Ctrl><L>, kurzor myši se změní na ruku a umožní posunout rámeček do jiné polohy, tento režim pak ukončíme pravým tlačítkem myši.

## 9. Kreslení grafických objektů

Vyberte *Window: Drawing objects*. Klikněte na tlačítko *Line* a nakreslete čáru. Pak klikněte na tlačítko *Edit object* a klikněte na vytvořenou čáru. Editujte ji tak abyste z ní vytvořili červenou šipku s tloušťkou čáry 3 a délkou šipky 2. Dále vytvořte elipsu a vyzkoušejte ansatvení jejich vlastností. Do oblasti grafu dále umístěte text. Vyzkoušejte přesouvání, kopírování a mazání objektů pomocí tlačítek *Move object*, *Copy object* a *Delete object*.

## 10. Vytvoření grafického výstupu

Vyberte *Menu: File / Print setup*. V položce *Device* specifikujte výstupní formát, nejčastěji *PostScript* (pro tisk), *EPS* (pro vkládání do dokumentů) nebo *PNG* (rastrový obrázek). Ve *File name* specifikujte jméno výstupního souboru (pokud nspecifikujete cestu, ukládá se do složky ze které byl program spuštěn) a potvrďte *Accept*. Soubor se vygeneruje vybráním *Menu: Print*.

## 11. Uložení projektu s grafem

Graf lze uložit do souboru pomocí *Menu: File / Save as*. Souborům dáváme koncovku *.agr*. Soubor lze znovu načíst pomocí *Menu: File / Open*.

## 12. Lineární regrese, prokládání křivek

- **Lineární regrese.** Z grafu vymažte série *S1* a *S2*. Vyberte *Menu: Data / Transformations / Regressions*, ponechte výchozí hodnoty a potvrďte *Accept*. Zobrazí se výsledky lineární regrese a vytvoří se nová série, která odpovídá regresní přímce.

- **Složitéjší regrese.** Vyberte *Menu: Data / Transformations / Regressions*, v seznamu vyberte první sadu, *Type of fit* vyberet *Cubic*, v *Load* vyberte *Function*, počátek a konec (*Start load at*, *Stop load at*) zvolte 0 a 10 a počet bodů 50 a potvrďte *Accept*.

### 13. Vytváření sérií dat

Kromě načtení dat ze souboru můžeme data pro série vytvořit i přímo v programu.

- **Zadání dat do tabulky.** Zvolíme nový graf (*Menu: File / New*). Vybereme *Menu: Edit / Data sets* a v otevřeném dialogovém okně vybereme *Edit / Create new / In spreadsheet*. Data zadáme ručně do tabulky a potvrdíme tlačítkem *Accept*. Pro nastavení vhodného rozsahu souřadnic vybereme *Menu: Edit / Autoscale graphs*.
- **Vytvoření série pomocí rovnice.** Zvolíme nový graf (*Menu: File / New*). Vybereme *Menu: Edit / Data sets* a v otevřeném dialogovém okně vybereme *Edit / Create new / By formula*. Zde specifikuje počáteční a koncovou hodnotu na ose x (např. 0 a 10) a počet bodů v políčku *Length* (např. 50). Hodnoty  $X$  = obvykle specifikujeme jako  $\$t$  (proměnná t, která se bude měnit) a v políčku  $Y$  = uvedeme matematický vzorec pro výpočet (např.  $\$t*\$t$ ). Potvrdíme tlačítkem *Accept* a nastavíme vhodný rozsah souřadnic *Menu: Edit / Autoscale graphs*. Vyzkoušejte též pro jiné funkce, např.  $1/\$t$ ,  $\sin(\$t)$ ,  $\exp(\$t)$ .

### 14. Práce s více grafy

Vyberte *Menu: Edit / Arrange graphs*. Vymažte existující graf – v seznamu klikněte na jméno grafu a v kontextovém menu vyberte *kill*. Počet sloupců nastavte na 1 a počet řádků na 2, potvrďte tlačítkem *Apply*. Okno zavřete.

- Načtení dat. Vyberte *Menu: Data / Import / ASCII*. Vyberte soubor *example1.dat*. V sekci *Read to graph* vyberte graf G0 a v *Load as* vyberet *NXY* a soubor načtete (tlačítko *OK*). Stejný soubor načtete též do grafu G1.
- Odstarnění sérií. Vyberte horní graf tím, že na něj kliknete – v rozích grafu se objeví černé čtverečky. Vyberte *Menu: Plot / Set Appearance* (též lze dosáhnout rychleji dvojkliknutím na graf). U grafu G0 vymažte sérii S1, S2 a S3 (v kontextovém menu vyberte *Kill*). U grafu G1 vymažte série S0, S1 a S3.
- Odstraňte mezeru mezi grafy. Vyberte *Menu: Edit / Arrange graphs*, v seznamu vyberte oba grafy (<Ctrl>+<levé tlačítko myši>), nastavte *Vgap/height* na 0 a potvrďte *Apply*. U grafu G0 odstraňte popisky na ose X (označte graf, *Menu: Plot / Axis properties* a zrušte volbu *Display tick labels*).

### Úloha 1:

Vytvořte graf nárůstu počtu struktur v PDB databázi. Použijte data ze souboru *PDB\_growth.dat* (ve složce */home/martinp/C2150/grace/*). Graf by měl vypadat jak je uvedeno na obrázku vpravo.

Do odevzdávací složky vložte soubor *\*.agr* a také obrázky grafu ve formátu *PostScript* a *PNG*.

