

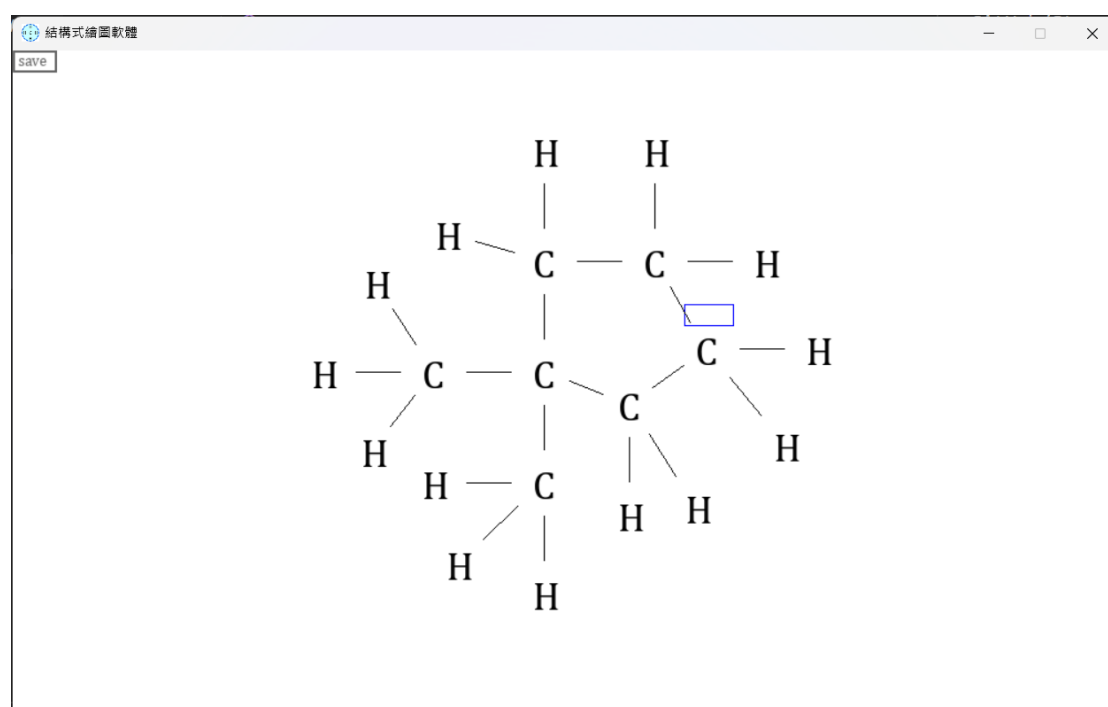
結構式繪圖軟體

目錄

摘要.....	1
心得.....	2
困難	2
製作動機	3
製作過程	3
實作成果	5
未來展望	5

摘要

此次專案同樣使用 **Pygame** 套件製作。因為第五冊選修化學中的主要內容是有機化學，我發現我們老師製作的講義中，圖片的解析度不佳，經過詢問得知老師是從有機課本中尋找圖片，而許多免費的繪圖軟體不符合老師的需求。於是我決定自行製作此軟體。過程中使用許多平面向量的觀念，從元素開始，再到鍵結，克服許多困難。最終成品截圖如下，在[實作成果](#)中將有近一步的說明。



我很享受這解決問題的過程，經由這個專案我又更加熟悉 **Python** 這個程式語言以及 **Pygame** 套件，同時也接觸到更多與圖像處理有關的套件，例如 **PIL** 使我可以將 **Pygame** 輸出的 **RGBA Bytes** 變數，用 **PNG** 的形式存到使用者的設備中。

心得

此專案耗費我 12 小時整的心力(不包含撰寫此報告的時間)，我再次應用我高中所學的數學與程式設計能力。我在高中參加過北一區資訊學科能力競賽，即使此專案沒有應用到所有我學過的演算法與資料結構，但經過 C++ 與思考訓練，我變得可以在短時間內學習一種新的程式語言或該語言中的衍生套件。

起初我是為了開發遊戲以外的應用程式，以探索新的應用領域。我發現不同類型的應用程式有不同的困難點，此外，程式語言的特性也會影響開發難度。

困難

1. Python 的物件在複製時會被當作參考(Reference in Cpp)，雖然有時候這樣對我來說很方便，但是大多數情況下我希望他是被 Deep Copy，也就是在修改時不會影響原來的變數值。
2. 在處理存檔問題時，我始終沒有找到讓使用者選擇檔案路徑的完美方法。我使用 tkinter 中的 filedialog，然而這樣使用者必須點擊兩次。第一次選擇檔案建立的位置，第二次再次選擇該檔案使檔案確實寫入資料夾。
3. 同樣是在存檔時，我總是存到空白的圖片。隨後發現是因為我在每個畫面渲染之前存檔所致。

製作動機

我希望能用我程式設計的能力幫助我的教師，那些曾經幫助過我的人。這個軟體幫助的是化學老師。因為發現到他對畫出結構式的需求，而決定製作此軟體。

製作過程

1. 物件 Vec2D 是從我的 Pygame Diep 專案複製過來的。裡面包含許多二維向量的運算，以及轉換成 Python 裡面的 tuple 的方法(method)或稱為成員函式(member function)。
2. 我首先製作有機化學分子式的核心：元素(Element)。元素物件所需要的變數如下。
 - (1) 元素符號(字串)
 - (2) 所在位置(Vec2D)
 - (3) 是否被選擇(bool)
 - (4) 唯一代碼(int)，詳見[未來展望](#)
3. 而元素需要能夠被點擊。因此需要一個函式偵測滑鼠的位置是否再元素的可點擊區域中。而主程式中就需要對每一個元素呼叫這個函式，並接受回傳值。回傳值表示滑鼠點擊符合的判定種類，以此決定接下來的操作，包含新增元素在上下左右，移動/刪除元素，以及選取元素。(此函式為 detect_mouse)

4. 再來是同樣重要的鍵結，鍵結需要的變數如下。

(1) 起始元素(Element)

(2) 結束元素(Element)

(3) 單/雙/三鍵(int)

(4) 唯一代碼(int)

5. 顯示元素與鍵結，我使用 `pygame.font` 的函式 `font.render` 顯示元素，用 `pygame.draw.line` 繪製鍵結。而雙/三鍵的位置用到法向量調整位置。

6. 鍵結需要能夠被選取，然而鍵結是一條線，因此我決定使用直線距離與向量內積作為鍵結的偵測標準。

說明：假設元素 AB 之間有一個鍵結，設 $A(a_1, a_2)$ ， $B(b_1, b_2)$ 。

則可以構造一個 AB 的直線方程式：

$$(a_2 - b_2)x - (a_1 - b_1)y - (a_1(a_2 - b_2) - a_2(a_1 - b_1)) = 0$$

設 $f_1 = (a_2 - b_2)$, $f_2 = -(a_1 - b_1)$,

$f_3 = (a_1(a_2 - b_2) - a_2(a_1 - b_1))$ ，點擊的位置為 $P(p_1, p_2)$

則 P 到 AB 的距離為 $\frac{|p_1 f_1 + p_2 f_2 + f_3|}{\sqrt{f_1^2 + f_2^2}}$

而若向量 $PA \cdot PB \leq 0$ ，則 P 點必定落在以 AB 中點為圓心，半徑為 $\frac{1}{2}AB$ 的圓。如此可以確保滑鼠點擊的位置在這兩個區域的交集上。

7. 點擊鍵結時，在下方顯示出四個按鈕，分別表示要將它更改為單雙三鍵，此時會用到鍵結的唯一代碼，表示這四個按鈕屬於哪一個鍵結。按下按鍵後，依據按鍵的文字(I, II, III, x)更改鍵結數目。如果按下 x 則刪除鍵結。

實作成果

未來展望