結構式繪圖軟體

目錄

[摘要 1](#_Toc131273889)

[心得 2](#_Toc131273890)

[製作動機 3](#_Toc131273892)

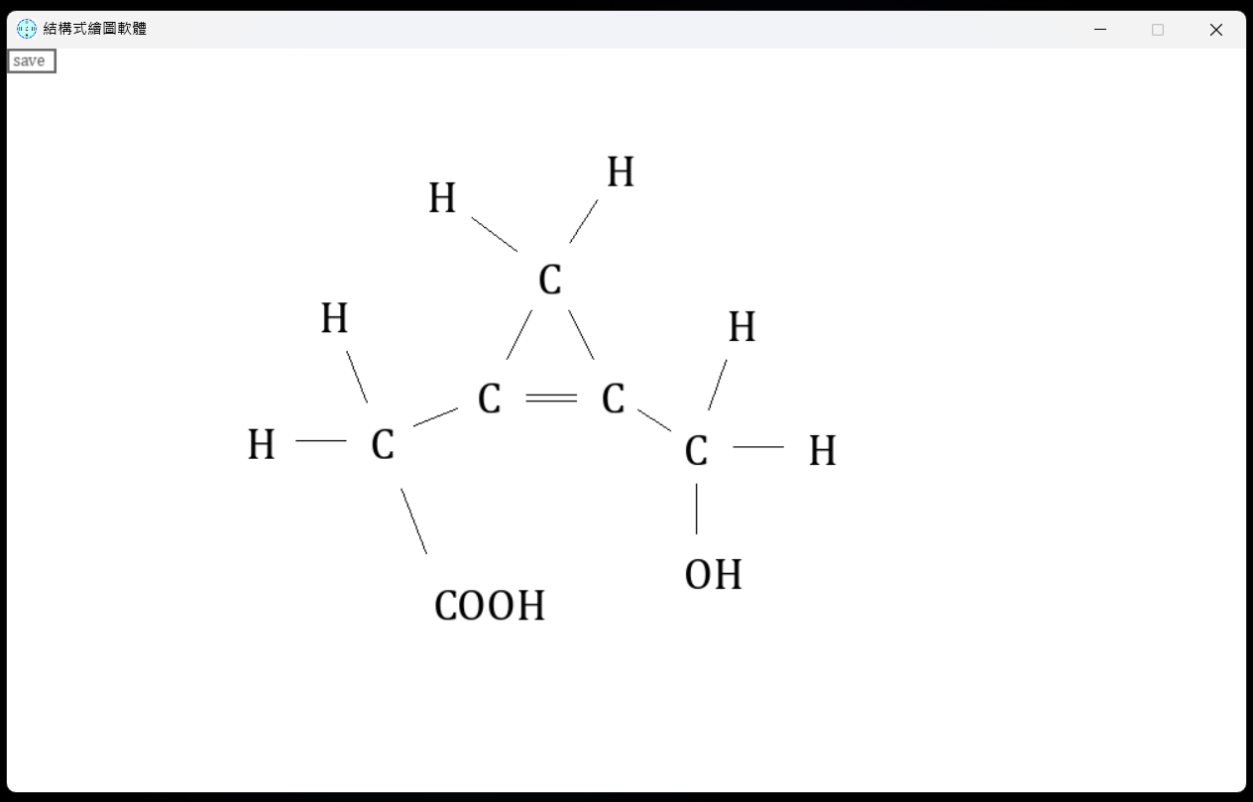
[製作過程 3](#_Toc131273893)

[實作成果 5](#_Toc131273894)

[未來展望 18](#_Toc131273895)

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](#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RBGA 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。

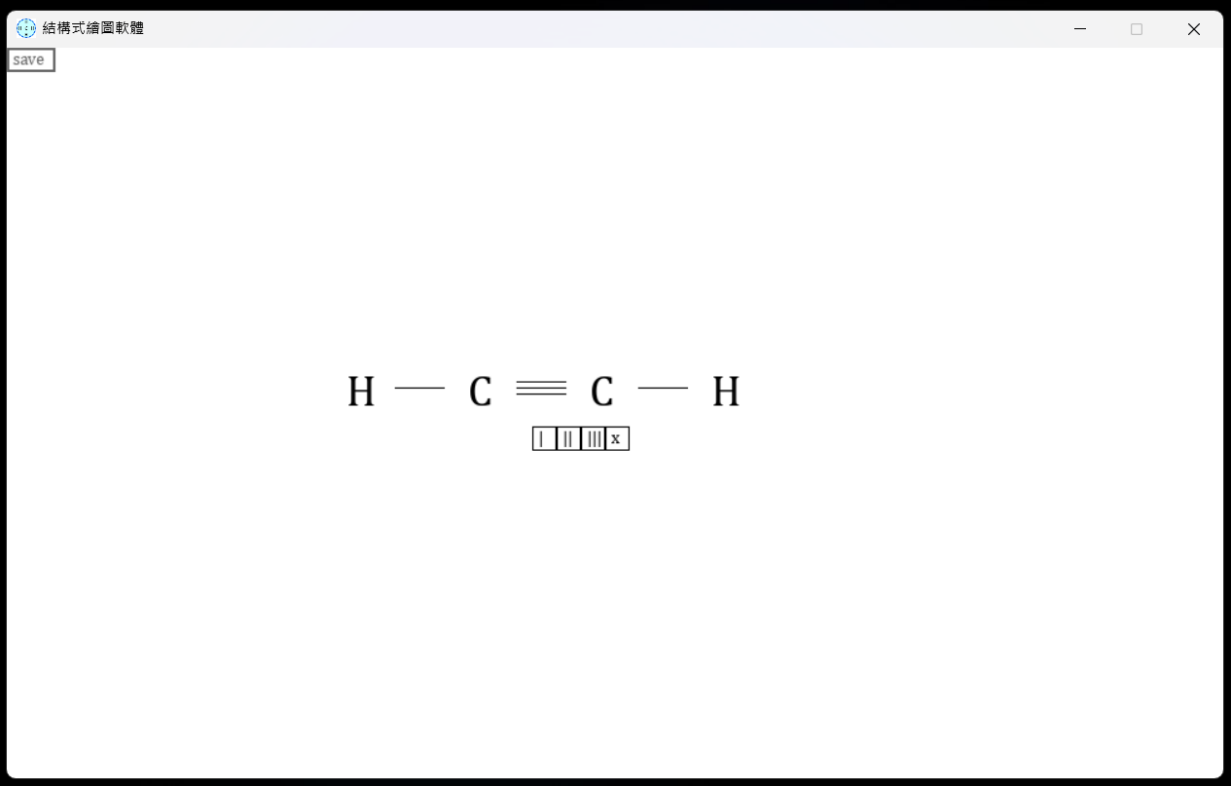
製作過程

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](#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(a1,a2)，B(b1,b2)。則可以構造一個AB的直線方程式：  
   設而若向量，則P點必定落在以AB中點為圓心，半徑為的圓。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(|, ||, |||, x)更改鍵結數目。如果按下x則刪除鍵結。
8. 移動元素：我在使用者點擊元素後，儲存玩家點擊的位置，若玩家沒有放開滑鼠，則將元素的座標向滑鼠移動。

實作成果

成果影片連結：<https://youtu.be/9MscGID9zAg>

使用過程中的截圖如下。



主程式程式碼如下。註解有部分是測試時留下的程式碼。若有需要，點此跳到[未來展望](#未來展望)。

import pygame

from tkinter import filedialog as fd

import Element

import os

import zlib

from PIL import Image

# pygame init

pygame.init()

screen=pygame.display.set\_mode((1000,600))

screen.fill((255,255,255))

pygame.display.set\_caption("結構式繪圖軟體")

font=pygame.font.SysFont('cambriamath',36)

clock=pygame.time.Clock()

programIcon=pygame.image.load('icon.jpg')

pygame.display.set\_icon(programIcon)

# ICON=os.path.join(os.getcwd(),"icon.jpg")

# variables

FPS=120

elements=[Element.Element()]

elements[0].isDefault=True

bonds=[Element.Bond()]

bonds[0].type=0

buttons=[Element.Button()]

buttons[0].type=0

relativePos=Element.vec2D(480,290)

selectedElement=elements[0]

selectedBond=bonds[0]

selectedPos=Element.vec2D(0,0)

bufferString=""

# def file\_path():

#     filename=

#     return filename

def show\_text(text='',x=0,y=0,color=(0,0,0)):

    text=font.render(text,True,color)

    textRect=text.get\_rect()

    textRect.topleft=(x+relativePos.x-10,y+relativePos.y-20)

    screen.blit(text,textRect)

def mouse\_click():

    global selectedElement,selectedPos,bufferString

    # add new bond

    operate=False

    t=pygame.mouse.get\_pos()

    for element in elements:

        op=element.detect\_mouse(Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y))

        if op==0:

            element.selected=0

            element.highlight=False

            continue

        elif op==1:

            if selectedElement.id==element.id and not element.left:

                newElement=Element.Element(Element.vec2D(element.pos.x-100,element.pos.y))

                newBond=Element.Bond(element,newElement)

                # element.left=newElement.right=True

                bonds.append(newBond)

                elements.append(newElement)

            else:

                selectedElement.selected=0

                newBond=Element.Bond(element,selectedElement)

                bonds.append(newBond)

        elif op==2:

            if selectedElement.id==element.id and not element.right:

                newElement=Element.Element(Element.vec2D(element.pos.x+100,element.pos.y))

                newBond=Element.Bond(element,newElement)

                # element.right=newElement.left=True

                bonds.append(newBond)

                elements.append(newElement)

            else:

                newBond=Element.Bond(element,selectedElement)

                bonds.append(newBond)

        elif op==3:

            if selectedElement.id==element.id and not element.up:

                newElement=Element.Element(Element.vec2D(element.pos.x,element.pos.y-100))

                newBond=Element.Bond(element,newElement)

                # element.up=newElement.down=True

                bonds.append(newBond)

                elements.append(newElement)

            else:

                selectedElement.selected=0

                newBond=Element.Bond(element,selectedElement)

                bonds.append(newBond)

        elif op==4:

            if selectedElement.id==element.id and not element.down:

                newElement=Element.Element(Element.vec2D(element.pos.x,element.pos.y+100))

                newBond=Element.Bond(element,newElement)

                # element.down=newElement.up=True

                bonds.append(newBond)

                elements.append(newElement)

            else:

                selectedElement.selected=0

                newBond=Element.Bond(element,selectedElement)

                bonds.append(newBond)

        elif op==5:

            # element is choosed

            if element.highlight:

                element.highlight=False

                selectedPos=Element.vec2D(0,0)

            else:

                element.highlight=True

                bufferString=""

                selectedPos=Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y)

        elif op==6 and element.highlight:

            if not element.isDefault:

                for bond in bonds:

                    if bond.ste.id==element.id or bond.ede.id==element.id:

                        bond.ste.left=bond.ste.right=bond.ste.up=bond.ste.down=False

                        bond.ede.left=bond.ede.right=bond.ede.up=bond.ede.down=False

                        bond.type=0

                    print(bond.ste.id,bond.ede.id,element.id)

                elements.remove(element)

        if op>=1 and op<=6:

            operate=True

        element.selected=0

    selectedElement=Element.Element()

    Element.id-=1

    selectedElement.isDefault=True

    for button in buttons:

        op=button.detect\_mouse(Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y))

        if op:

            if button.text=="|":

                button.bond.type=1

            elif button.text=="||":

                button.bond.type=2

            elif button.text=="|||":

                button.bond.type=3

            elif button.text=="x":

                button.bond.type=0

    if operate:

        return

    buttons.clear()

    for bond in bonds:

        op=bond.detect\_mouse(Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y))

        if op:

            newButton=Element.Button("|",Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y+20),[0,0,0],bond)

            buttons.append(newButton)

            newButton=Element.Button("||",Element.vec2D(t[0]-relativePos.x+20,t[1]-relativePos.y+20),[0,0,0],bond)

            buttons.append(newButton)

            newButton=Element.Button("|||",Element.vec2D(t[0]-relativePos.x+40,t[1]-relativePos.y+20),[0,0,0],bond)

            buttons.append(newButton)

            newButton=Element.Button("x",Element.vec2D(t[0]-relativePos.x+60,t[1]-relativePos.y+20),[0,0,0],bond)

            buttons.append(newButton)

    if t[0]<40 and t[0]>0 and t[1]<20 and t[0]>0:

        file=fd.asksaveasfile(filetypes=(('png files', '\*.png'),('jpeg files', '\*.jpeg')))

        if file==None:

            file.close()

            return

        file\_path=fd.askopenfilename()

        # tp=io.BytesIO()

        f=pygame.image.tostring(screen,"RGBA")

        # tp=list(f)

        img=Image.frombytes("RGBA",(1000,600),f)

        img.save(file\_path)

        # image\_str = pygame.image.tostring(screen,"RGB")

        # compressed\_image\_str = zlib.compress(image\_str)

        # png.from\_array('L').save

        # print(tp)

        # file.write(tp)

def add\_bond\_only():

    global selectedElement,selectedPos

    if selectedElement.selected!=0:

        return

    for element in elements:

        t=pygame.mouse.get\_pos()

        op=element.detect\_mouse(Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y))

        if op==0:

            element.selected=0

            continue

        elif op==1 and not element.left:

            element.selected=1

            selectedElement=element

        elif op==2 and not element.right:

            element.selected=2

            selectedElement=element

        elif op==3 and not element.up:

            element.selected=3

            selectedElement=element

        elif op==4 and not element.down:

            element.selected=4

            selectedElement=element

# main loop

InGame=True

while InGame:

    screen.fill((255,255,255))

    # show elements

    for element in elements:

        show\_text(element.text,element.pos.x,element.pos.y)

        if element.highlight:

            pygame.draw.rect(screen,(0,0,0),[element.pos.x+relativePos.x-20,element.pos.y+relativePos.y-20,45,45],1)

        # print(element.id)

    # show button when mouse get close

    t=pygame.mouse.get\_pos()

    for element in elements:

        op=element.detect\_mouse(Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y))

        if op==0:

            continue

        elif op==1:

            # debug

            pygame.draw.rect(screen,(255,0,0),[element.pos.x+relativePos.x-40,element.pos.y+relativePos.y-20,20,45],1)

        elif op==2:

            # debug

            pygame.draw.rect(screen,(0,255,0),[element.pos.x+relativePos.x+25,element.pos.y+relativePos.y-20,20,45],1)

        elif op==3:

            # debug

            pygame.draw.rect(screen,(0,0,255),[element.pos.x+relativePos.x-20,element.pos.y+relativePos.y-40,45,20],1)

        elif op==4:

            # debug

            pygame.draw.rect(screen,(255,0,255),[element.pos.x+relativePos.x-20,element.pos.y+relativePos.y+25,45,20],1)

        elif op==5 and element.highlight and pygame.mouse.get\_pressed()[0]:

            # t=pygame.mouse.get\_pos()

            if selectedPos!=Element.vec2D(0,0):

                difference=Element.vec2D((t[0]-relativePos.x)-selectedPos.x,(t[1]-relativePos.y)-selectedPos.y)

                # print(difference.get\_tuple())

                element.pos+=difference

            selectedPos=Element.vec2D(t[0]-relativePos.x,t[1]-relativePos.y)

        elif op==6 and element.highlight:

            # debug

            pygame.draw.rect(screen,(0,255,255),[element.pos.x+relativePos.x+25,element.pos.y+relativePos.y-40,20,20],1)

        # print(op)

    # show button

    for button in buttons:

        if button.type==0:

            continue

        ft=pygame.font.SysFont('cambriamath',14)

        text=ft.render(button.text,True,button.color)

        textRect=text.get\_rect()

        textRect.topleft=(button.pos.x+relativePos.x,button.pos.y+relativePos.y)

        pygame.draw.rect(screen,(0,0,0),[button.pos.x+relativePos.x-5,button.pos.y+relativePos.y,20,20],1)

        screen.blit(text,textRect)

    for bond in bonds:

        if bond.type==0:

            bonds.remove(bond)

    # show bond

    for bond in bonds:

        if bond.type==0:

            continue

        v=Element.vec2D(bond.ede.pos.x-bond.ste.pos.x,bond.ede.pos.y-bond.ste.pos.y)

        v\*=0.3

        if Element.dis(Element.vec2D(0,0),v)>50:

            v.set(v.x,v.y,50)

        n=Element.vec2D(v.y,-v.x)

        n.set(n.x,n.y,5)

        st=Element.vec2D(bond.ste.pos.x,bond.ste.pos.y)

        st+=relativePos

        st+=v

        ed=Element.vec2D(bond.ede.pos.x,bond.ede.pos.y)

        ed+=relativePos

        ed-=v

        if bond.type>=1:

            pygame.draw.line(screen,(0,0,0),st.get\_tuple(),ed.get\_tuple())

        if bond.type>=2:

            st-=n; ed-=n

            pygame.draw.line(screen,(0,0,0),st.get\_tuple(),ed.get\_tuple())

        if bond.type==3:

            st+=n\*2; ed+=n\*2

            pygame.draw.line(screen,(0,0,0),st.get\_tuple(),ed.get\_tuple())

    ft=pygame.font.SysFont('cambriamath',14)

    text=ft.render("save",True,(100,100,100))

    textRect=text.get\_rect()

    textRect.topleft=(5,0)

    screen.blit(text,textRect)

    pygame.draw.rect(screen,(100,100,100),[0,0,40,20],2)

    pygame.display.flip()

    # event in pygame

    for event in pygame.event.get():

        if event.type==pygame.QUIT:

            InGame=False

        if event.type==pygame.MOUSEBUTTONUP:

            mouse\_click()

        if event.type==pygame.MOUSEBUTTONDOWN:

            add\_bond\_only()

        if event.type==pygame.KEYDOWN:

            keys=pygame.key.get\_pressed()

            if keys[pygame.K\_BACKSPACE]:

                bufferString=bufferString[:-1]

            else:

                bufferString+=event.unicode

            for element in elements:

                if element.highlight:

                    element.text=bufferString

    clock.tick(FPS)

pygame.quit()

Element.py的程式碼如下。

import pygame

import math

import copy

PI=3.1415926535

EPS=0.00001

id=0

bid=0

class vec2D():

    def \_\_init\_\_(self,dx=0,dy=0):

        self.x = dx

        self.y = dy

    def \_\_deepcopy\_\_(self,memo):

        return vec2D(copy.deepcopy(self.\_x,memo), copy.deepcopy(self.\_y,memo))

    def set(self,dx,dy,length=0):

        l,r = 0.0,1e6

        for i in range(100):

            mid=(l+r)/2

            if (mid\*dx)\*\*2+(mid\*dy)\*\*2 < length\*\*2:

                l=mid

            else:

                r=mid

        self.x=l\*dx

        self.y=l\*dy

    def set\_angle(self,a,length=0):

        self.\_x = length\*math.cos(a/180\*PI)

        self.\_y = length\*math.sin(a/180\*PI)

    def \_\_iadd\_\_(self,other):

        self.x+=other.x

        self.y+=other.y

        return self

    def \_\_isub\_\_(self,other):

        self.x-=other.x

        self.y-=other.y

        return self

    def \_\_imul\_\_(self,other):

        self.x\*=other

        self.y\*=other

        return self

    def \_\_add\_\_(a,b):

        ret=vec2D(float(a.x),float(a.y))

        ret.x+=b.x

        ret.x+=b.y

        return ret

    def \_\_sub\_\_(a,b):

        ret=vec2D(float(a.x),float(a.y))

        ret.x-=b.x

        ret.x-=b.y

        return ret

    def \_\_mul\_\_(a,b):

        ret=vec2D(float(a.x),float(a.y))

        ret.x\*=b

        ret.y\*=b

        return ret

    def \_\_eq\_\_(self,other):

        return self.x==other.x and self.y==other.y

    def \_\_ne\_\_(self,other):

        return ~(self==other)

    def get\_tuple(self):

        return (self.x,self.y)

def dis(a,b):

    return math.sqrt((a.x-b.x)\*\*2+(a.y-b.y)\*\*2)

def dot(a,b):

    return a.x\*b.x+a.y\*b.y

class Element:

    def \_\_init\_\_(self,pos=vec2D(0,0)):

        global id

        self.text="C"

        self.pos=pos

        self.left=False

        self.right=False

        self.up=False

        self.down=False

        self.selected=0

        self.highlight=False

        self.isDefault=False

        self.id=id

        id+=1

    def detect\_mouse(self,pos=vec2D(0,0)):

        #

        # 0 2 1

        # left -20,-40,+25,-20

        if pos.x<self.pos.x-20 and pos.x>self.pos.x-40 and pos.y<self.pos.y+25 and pos.y>self.pos.y-20:

            # left

            return 1

        elif pos.x<self.pos.x+45 and pos.x>self.pos.x+25 and pos.y<self.pos.y+25 and pos.y>self.pos.y-20:

            # right

            return 2

        elif pos.x<self.pos.x+25 and pos.x>self.pos.x-20 and pos.y<self.pos.y-20 and pos.y>self.pos.y-40:

            # up

            return 3

        elif pos.x<self.pos.x+25 and pos.x>self.pos.x-20 and pos.y<self.pos.y+45 and pos.y>self.pos.y+25:

            # down

            return 4

        elif pos.x<self.pos.x+25 and pos.x>self.pos.x-20 and pos.y<self.pos.y+25 and pos.y>self.pos.y-20:

            # middle

            return 5

        elif pos.x<self.pos.x+45 and pos.x>self.pos.x+25 and pos.y<self.pos.y-20 and pos.y>self.pos.y-40:

            # right up

            return 6

        return 0

class Bond:

    def \_\_init\_\_(self,ste=Element(vec2D(0,0)),ede=Element(vec2D(0,0))):

        global bid

        self.ste=ste

        self.ede=ede

        self.type=1

        self.id=bid

        bid+=1

    def detect\_mouse(self,pos=vec2D(0,0)):

        # return True or False

        f1=self.ste.pos.y-self.ede.pos.y

        f2=-(self.ste.pos.x-self.ede.pos.x)

        f3=-(self.ste.pos.x\*f1+self.ste.pos.y\*f2)

        if (pos.x\*f1+pos.y\*f2+f3)\*\*2<(20\*\*2)\*(f1\*\*2+f2\*\*2):

            pb=vec2D(self.ede.pos.x-pos.x,self.ede.pos.y-pos.y)

            pa=vec2D(self.ste.pos.x-pos.x,self.ste.pos.y-pos.y)

            if dot(pa,pb)<=0:

                return True

        return False

class Button:

    def \_\_init\_\_(self,text="click me",pos=vec2D(0,0),color=[0,0,0],bd=Bond()):

        self.text=text

        self.pos=pos

        self.color=color

        self.type=1

        self.bond=bd

    def detect\_mouse(self,pos=vec2D(0,0)):

        if pos.x<self.pos.x+20 and pos.x>self.pos.x and pos.y<self.pos.y+20 and pos.y>self.pos.y:

            return True

        return False

未來展望

1. 使用二元搜尋樹的資料結構，以唯一代碼作為鍵值。如此可以將搜尋元素時的時間複雜度從O(n)降至O(log2(n))。
2. 新增繪製芳香烴的功能，芳香烴在有機化合物中具有重要的地位，有許多的有機化合物有苯環在內。我認為可以建立一個新的物件：苯。裡面有六個Element物件，分別有與本體的相對位置座標。苯可以支援旋轉功能，這部分藉由旋轉矩陣實現。而按鍵偵測範圍可以用圓形以節省運算資源。
3. 移動畫布：實現方式與移動元素相似。都是藉由追蹤滑鼠位置與位移來實現。
4. 分子式分析，這部分可會需要用到圖論演算法或是堆疊。