

УДК [532.5+539.3]:004.424(075.8)
ББК 22.251+22.253+32.973 я73
К27

*Печатается по решению кафедры теории упругости
Института математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича
Южного федерального университета (протокол № 9 от 26 апреля 2021 г.)*

Рецензенты:

заведующий кафедрой «Теоретическая и прикладная механика»
Донского государственного технического университета,
доктор физико-математических наук, профессор *А. Н. Соловьев*;
профессор теоретической и компьютерной гидроаэродинамики
Южного федерального университета,
доктор физико-математических наук, профессор *М. А. Сумбатян*

Карякин, М. И.

К27 Визуализация механических систем, процессов и явлений:
проектные задания с использованием Vpython : учебное пособие /
М. И. Карякин ; Южный федеральный университет. – Ростов-на-
Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального универси-
тета, 2021. – 244 с.
ISBN 978-5-9275-3827-0

Учебное пособие предназначено для студентов вузов, изучающих современ-
ные курсы или разделы курсов, связанные с моделированием явлений, происходя-
щих в деформируемых телах и средах, с использованием математических и компь-
ютерных методов, основанных на динамике частиц и ее приложениях. Оно может
также быть использовано в качестве дополнительной литературы при изучении ба-
калаврских и магистерских курсов по основам алгоритмизации, программированию,
теоретической механике, математическому моделированию, современным концеп-
циям естествознания и аналогичным дисциплинам.

УДК [532.5+539.3]:004.424(075.8)
ББК 22.251+22.253+32.973 я73

ISBN 978-5-9275-3827-0

© Южный федеральный университет, 2021
© Карякин М. И., 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ГЛАВА 1. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАКЕТА VPYTHON ДЛЯ СОЗДАНИЯ 3D-АНИМАЦИЙ.....	7
Введение.....	7
Первое знакомство	8
Установка.....	8
Холст.	9
Анимация.	12
Математический аппарат VPython	13
Математические функции.	13
Операции с векторами.....	15
Построение графиков.....	16
Базовые 3D-объекты.....	22
Цилиндр.	22
Сфера/Эллипсоид.....	25
«Простая» сфера.....	26
Параллелепипед.....	26
Стрелка.	28
Присоединение стрелки.	29
Спираль.	30
Пирамида и конус.	30
Кольцо.	31
Пространственная ломаная.....	32
Экструзия.....	34
Вывод текстовой информации.....	35
Общие характеристики объектов.....	38
Работа с цветом.	38
Прозрачность.	39
Текстуры.	40
Дополнительные атрибуты и методы.	42
Холст: свойства и события	45
Создание холста.	45
Основные характеристики холста.	46
Представление содержимого холста на экране.....	47
Освещение сцены.....	50
Интерактивные элементы.	50
Литература к главе 1.....	57

ГЛАВА 2. ПРОЕКТНОЕ ЗАДАНИЕ	
«ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛЫ»	58
Формулировка задания.....	58
Базовые сведения.....	61
Химическая информатика.	61
Хранение и визуализация структурных данных.	63
Формат XYZ.....	65
Формат MOL.....	65
Формат SDF.....	67
Формат PDB.....	69
Формат CML.....	73
Пример выполнения задания	75
Получение файла со структурой молекулы.	75
Обсуждение структуры программы.	78
Класс Atom.....	79
Класс Bond.....	82
Класс Molecule.....	86
Литература к главе 2	89
ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ	
МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ	91
Численные методы решения задачи Коши.....	91
Постановка задачи.	91
Метод Эйлера и его модификации.....	94
Методы второго порядка.	98
Решение задачи Коши с использованием библиотеки <code>scipy</code>	103
Примеры моделирования механических систем	109
Колесания тележки на нелинейно-упругой пружине.....	109
Полет снаряда.....	117
Литература к главе 3	128
ГЛАВА 4. ПРОЕКТНОЕ ЗАДАНИЕ	
«ПРУЖИННАЯ МОДЕЛЬ ТВЕРДОГО ТЕЛА»	130
Формулировка задания.....	130
Пример выполнения задания	143
Литература к главе 4.....	154
ГЛАВА 5. ПРОЕКТНОЕ ЗАДАНИЕ	
«НЕБЕСНАЯ МЕХАНИКА»	156
Формулировка задания.....	156
Базовые сведения.....	161
Примеры моделирования объектов солнечной системы.....	163
Задача трех тел.	182
Визуализация решения Эйлера задачи трех тел	187

Пример выполнения задания	195
Переборные задачи при моделировании астрономических систем.	195
Двумерная визуализация периодических траекторий.	198
Трёхмерная визуализация периодических траекторий.	204
Литература к главе 5	210
 ГЛАВА 6. ПРОЕКТНОЕ ЗАДАНИЕ	
«ЗНАКОМСТВО С МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКОЙ»	213
Формулировка задания.....	213
Базовые сведения.....	217
Молекулярная динамика.	217
Краткая историческая справка.	220
Потенциалы молекулярной динамики.	221
Пример выполнения задания	226
Литература к главе 6	238
 ОГЛАВЛЕНИЕ	241