

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 白石阳

(中科院计算数学所)

报告题目:

可视化软件 VCMM 介绍及使用
指导

邀请人: 卢本卓 研究员

报告时间: 2014 年 5 月 12 日 (周一)

下午 15:00-16:30

报告地点: 科技综合楼三层 311

计算数学所报告厅

简介：

VCMM 是一款由我所卢本卓研究员课题组开发的可视化软件，可用于分子连续性模拟，（随着进一步完善）也可用于计算化学、材料、流体、图像等其它广泛领域。VCMM 跨平台运行，提供了模型、网格、数据处理和求解器集成环境，满足了分子连续模拟过程各部分的可视化功能需求。VCMM 拥有简洁的界面和操作逻辑并拥有动态的交互操作功能，支持多种格式数据的可视化处理（包括 PHG 所产生的 VTK 格式数据），比同类可视化软件（如 VMD、Paraview 等）更易于上手使用。VCMM 提供了分子模拟需要的三大类模块和交互式脚本供用户调用实现包括分子建模、分子力场、网格标记、网格质量分析、数值结果插值、提取、绘制等功能。VCMM 底层包括了可视化工具包、网格生成工具包、数值求解器等内核并提供接口函数，可以适用于一般有限元前、后处理功能。VCMM 支持用户基于底层平台库做二次开发，实现用户自定义功能，因此用户可以处理分子模拟领域以外的功能，VCMM 欢迎和鼓励用户开发多种领域功能的插件。VCMM 内置 Python 编译器和科学计算库，可以作为 Python 科学计算初学者的学习工具。

这次培训主要内容为：

1. 简介、安装和调试。
2. 模块的介绍和演示。
3. 脚本和插件功能。
4. VCMM 库的介绍和合作意向。

感兴趣使用的可以自带笔记本电脑，先到我们的网站 www.continuummodel.org 下载 VCMM，本此报告的后半部分时间我们将做现场使用指导。

也欢迎参考刚发表的相关文章：
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1093326314000333>。

由于 VCMM 刚正式发布，现仍处于试用阶段，其中一定有很多问题和不足。

欢迎大家参加！