

科学计算可视化是 80 年代末提出并发展起来的一门新的技术,该技术正成为研究的热点。专家预测,可视化技术所具有的潜力有可能与计算机网络与通信技术相结合使人类通讯的方式发生革命性变革,并将产生巨大的经济效益和社会效益。为使大家更好地熟知可视化,学会可视化,使用可视化,我们约请了国内在科学计算可视化技术方面颇有研究的中国科学院计算技术研究所 CAD 开放研究实验室等单位共同组织了这期科学计算可视化专题。

本期专题共有 5 篇文章,这些文章都是结合这些单位的科研成果和开发实践,较全面地介绍了科学计算可视化技术的方方面面,具体包括可视化的研究和应用领域,可视化的研究和应用领域,可视化软件系统和软件开发平台等等。这 5 篇文章为:

- 1) 科学计算可视化;
- 2) 可视化软件系统介绍;
- 3) 可视化软件开发平台;
- 4) 一个实用的数据场可视化系统;
- 5) 并行程序行为及性能的可视化工具—ParaVision。

# 科学计算可视化

中科院计算所 CAD 开放实验室 唐卫清 刘慎权  
余盛明 李 华

## 一、可视化简史

对数据进行可视化可以追溯到远古时代,而计算机对数据的可视化则几乎与第一台数字式计算机的诞生同时起步。进入 80 年代以后,从超级计算机和传感器中产生的日益增长的庞大数据,使得数据可视化的要求和复杂性有了更深刻的变化。作为一门学科,科学计算可视化的诞生一般认为是在 1987 年,由美国国家科学基金会(NSF)的图形图像专题讨论组提交的一份报告中首次引入了“科学计算可视化(Visualization in Scientific Computing)”一词。它除了对科学计算可视化的范畴作了界定外,还就可视化的需求、近期目标、远景规划和应用前景方面均作了相应的阐述。科学计算可视化后来又被简称为“科学可视化”,甚至干脆称为“可视化(Visualization)”。

科学可视化的根本目标是把由实验或数值计算获得的大量数据转变成人的视觉可以感受到的计算机图像。由于图像可以将大量的抽象数据有机地组织到一起,并能形象生动地展示数据所表示的内容以及它们之间的相互关系,人们摆脱了直接面对由枯燥无味的数字组成的复杂形态而难以发现内在规律的局面,帮助人们直接把握复杂的全局,从而更好地认识规律。进入 90 年代后,科学计算可视化逐渐演变为一门新兴的学科,并且得到了空前的发展,研究成果不断涌现,应用领域不断扩大。与此同时,可视化

已经转化为一种产业,相应的可视化产品市场急剧膨胀。据统计,在 1990 年光可视化硬件费用全球估计在 10 亿美元,而到了 1995 年,可视化硬件费用至少在 50 亿美元。目前,科学计算可视化已广泛地应用于医学、生物、地质、地理、气象、环境、航天、教育、工业、军事等各个领域,对促进科学研究和工农业生产、提高人们的生活水平,起着越来越大的作用。

## 二、可视化过程介绍

科学计算可视化最早是用在科学实验的数字模拟过程中。在科学领域,研究的主要目的是理解自然的本性。科学家要达此目的,常常要经历从观测自然现象到模拟自然现象并分析模拟的结果。在观测自然、建立物理模型的基础上进行模拟实验,从实验数据中提取有关信息加以分析,从而找出各种因素间的基本关系。在分析实验结果的过程中,科学计算可视化是一个十分重要的辅助环节。特别是到了近年来,超级计算机数字模拟的实验结果,常常是极为庞大的数据集,单纯依靠纸和笔进行分析,无异于缘木求鱼,很难发现规律。而计算机自身的发展,也使得可视化技术有了它的用武之地。

我们所说的科学计算可视化,就是一个贯穿分析过程始终的过程,它一般分为以下几个步骤:

### 1. 过滤:抽取感兴趣的数据

这一步也就是从最原始的模拟实

验数据集中提取出研究人员感兴趣的数据,并经过粗略的数据加工(如滤去数据中的噪声等),然后将它转变成更浓缩、更相关的数据表示。

## 2. 映射:创建几何原语

将第一步得到的结果,即过滤出的抽象数据表示,映射成可以绘制成图的几何原语。常见的几何原语有零维的点原语(如粒子)、一维的线原语(如等值线)、二维的面原语(如等值面)、三维的体原语和更高维的基于特征的图标原语。

## 3. 绘制:几何原语转变为图像

一旦选定了数据的几何原语表示,研究人员可以对几何原语赋予视觉特性,即确定帧的合成、颜色、透明性、纹理、阴影等方面,并启动图像绘制过程。

## 4. 反馈:显示图像

可视化过程的最后一步是显示绘制出的图像,显示的方式可能因图形设备的功能不同而不同。对于因时而变的模拟现象(如时间序列),以动画方式播放帧的速率的不同,可以反映出不同的信息本质。

虽然可视化过程只有这四个步骤,但是分析过程并非到此就结束了,它是一个周而复始的循环迭代过程。由于研究人员事先并不知道原始数据集的哪些部分对分析最重要,而且他也不可能预定数据集到几何原语的最佳映射关系,甚至哪些光学属性绘制出的图像效果最佳都得靠经验的摸索,因而整个分析过程是反复精确的过程。由于应用领域的研究人员对可视化方面的专业知识知之甚少,而可视化的专家又很难理解具体应用领域的知识,只有二者很好地合作,可视化的作用才能真正发挥出来。

# 三、可视化技术的研究方向

在过去的8年中,可视化技术已取得了丰硕的成就。但随着可视化应用领域的不断扩大,人们对可视化的需求越来越复杂,可视化技术所暴露出的问题也越来越多。在目前,人们常常使用的技术多是某些特定问题的经验方法。然而,正是这些经验方法的探索,使可视化技术的发展前景生机勃勃。下面我们将从可视化研究的角度,就当前可视化技术研究前沿的几个问题作简单的介绍,希望这些介绍能起到抛砖引玉的作用。

## 1. 体可视化

体可视化是一种从体数据集中抽取内在的本质信息、并借助交互式图形图像技术来展现出来的技术。规则体数据集一般由三维笛卡尔网格体元构成,网格体元(网格点上的数据值)存储在三维数组(即体缓冲区)中。体可视化技术研究的是如何表示、维护和绘制体数

据集,从而提供洞察数据内部结构和理解物质复杂特性的机制。体数据集可能来自许多领域,如在医学上由核磁共振、CT扫描等设备产生的人体器官密度场,在工业无损探伤中用超声波探测到的零部件密度场,在模拟人工地震、航空航天实验、核爆炸模拟等产生的速度场、温度场、力场等等,都可以表示成体数据集。

在过去的几年中,体可视化技术是可视化研究最为活跃、应用领域最广的技术之一。随着计算机硬件的飞速发展和图形功能的不断完善,体绘制技术也在快速的发展之中。体可视化的一个缺点是,即使是处理相对较小的数据集,所花费的时间也很长,正是这个缺点,使得人们所追求的实时可视化还是一个理想。利用现有的计算资源,对中等大小的数据集,实现交互式的体绘制,是目前体可视化技术可以达到的目标。Lacroute 报告说对大小为  $256 \times 256 \times 256$  的体数据,在普通的工作站上绘制  $512 \times 512$  的精确图像,几乎可以限制在几秒之内。但是,由于数据量的增大速度和人们对图像细节精确度的要求总是超过计算机硬件的发展,因此,要真正实现实时可视化的要求,人们在探索新型算法的同时,更倾向于求助并行计算技术。

当前典型的 MIMD 并行计算机集成了成百上千的微处理器,通过消息传递或共享存储方式协同工作。由于并行计算的威力日益壮大,科学计算可视化也必将从中获益。就可视化的应用需要来看,为了达到实用的目的,一个体可视化系统应该具备以下功能:

- 有高质量的数据表示方法
- 能够处理巨大的数据集(分辨率高)
- 具备快速的绘制方法
- 可以交互式地空间操作
- 参数的表示和修改更加人性化

显然,并行体可视化既可以提供快速绘制方法,又能够处理大的数据集(如分布式存储),因而是可视化走向实用的一个重要技术。

## 2. 流场可视化

长期以来,流场可视化一直是流体力学的重要部分。到了今天,若没有计算机对数据模拟结果的可视化,计算流体力学(CFD)几乎无法开展研究工作。计算流体力学中的主要数据类型(包括向量场和张量场)的可视化研究正方兴未艾。流场可视化中常用箭头、流线和粒子跟踪技术来研究二维流场。对三维流场,还没一个普遍为人们接受的、直观的、符合人类心理的方法进行可视化。目前人们正在探索中的方法不外乎以下几种:

- 对现有体可视化技术加以拓展,应用到流场(尤其是三维向量场)中
- 流面技术(常用流面加上梯度线索来表示)

- 图标技术
- 基于特征的可视化(从较高层次来把握全局性)

### 3. 可视化的人机交互研究

在目前的市场上,有着各式各样的可视化工具或系统。这些工具和系统虽然是面向普通用户的,但是它们所要求的可视化专业知识还是太多,因而限制了可视化技术的推广使用。可视化的人机交互主要解决三个问题:

- 信息采用的表示方法,应最好地与人的认知与感觉能力相匹配。也就是将认知理论和可视化技术相结合,使所表达的信息量既直观、又丰富。
- 能提供交互式的工具,加快可视化的进程。这就是指提高绘制的速度,使用户能够及时跟踪图形结果,调整可视化参数,驾驭可视化进程。
- 能提供辅助用户的软件环境,帮助用户自动地进行可视化设计和探索。

### 4. 科学计算可视化的数据建模

数据分析与可视化的主要目的是获取知识。知识需要语言来表达,对科学而言这个语言就是数学。建模就是用数学语言来描述、表示和条理化我们的科学思想。例如,在体可视化的应用领域之一——医学上,在对人体病变的组织绘制肿瘤体之前,我们必须导出肿瘤体的数学模型。在可视化的研究中,数据建模主要有以下的工作:

- **体建模:**是指如何表示三维对象及其内部结构性质的方法,在体可视化乃至体图形学中,最后绘制的都是体模型。
- **多分辨率建模:**对数据集所建立的模型,能对应于不同精确度要求,具有相应层次的抽象描述。也就是在同一个模型中能表示出数据对象的不同程度的细节特性。
- **散乱数据建模:**所谓散乱数据是指数据在空间中的分布没有特定规则的构型,它是相对于规则地分布在笛卡尔网格上的数据集而言的。目前对散乱数据建模试用的方法有距离加权法和细胞分解法等。

在数据建模之后,还要对模型进行合理性检查,然后再设计相应的绘制算法。

### 5. 可视化基本原理的研究

可视化系统集成常用的可视化工具和技术,虽然已被众多的科研人员使用,但它还有许多不尽人意的地方:功能的局限性、信息量的有限性,甚至不同技术在集成时造成的不完备性等冲突。这些缺陷固然和可视化是面向特定应用的传统有关,但对于可视化基本原理的不够重视也是一个重要原因。可视化基本原理的研究需要解决的主要问题有:

• **可视化模型:**对可视化过程的核心成分及相互接口(包括用户行为)应有一个抽象的描述。这个模型可分为多个子模型,如数据模型、用户模型、时间模型、设备模型等。

• **合理化:**研究可视化结果与被测试数据集的内涵在一致性和有效性上是否相符。

• **系统化:**设计并实现的集成系统应确实向人们提供了一个可视化工作环境。

### 6. 复杂对象形状的建模

可视化的主要目标是帮助人们理解对象的构造和形状。为了在计算机中表示三维对象的结构,需要有一种抽象描述对象形状的方法,尤其对那些十分复杂的自然物体。如果用传统的一组自由形状的面片来描述。则对整体结构完整性的验证将是极其困难的事。目前正在被研究的是采用奇异点方法。

### 7. 复杂数据集基于模型的可视化

从最抽象的意义上讲,数据可视化就是将在 $N$ 维域上计算出的离散值映射到像素颜色上,这是一个维数规约过程。传统的数据可视化方法对采样点上的数据进行局部分析,然后生成并显示图形效果。由于计算的复杂性,在普通的工作站上进行交互式的数据探索几乎不可能。目前,人们正在研究一个智能型的、基于模型的方法,来提取数据的本质特性并构造多分辨率图形模型,以满足交互式的需要。这种方法主要有以下步骤:

- **分段:**通过局部的几何或微分性质,对数据集定义若干个“特征”。
- **拓扑:**将每个特征分解为有一定拓扑关系的“细胞”群构成。
- **过滤:**即构造多分辨率图形模型,按不同程度的细节精确度来描述特征的形状与性质。
- **绘制:**确定应该显示的特征以及采用的显示方法。

## 四、可视化应用领域

尽管可视化技术相对来讲还是一个新生事物,而从它的诞生之日起,便受到了各行各业的普遍欢迎。在过去的短短几年里,可视化的应用应用范围已从最初的科研领域走到了生产领域,到今天它几乎涉及到了所有能应用计算机的部门。在这里,我们将简要地列举一些应用可视化技术的例子。

### 1. 医学

在医学上由核磁共振、CT扫描等设备产生的人体器官密度场,对于不同的组织,表现出不同的密度值。通过在多个方向多个剖面来表现病变区域,呈着重建

为具有不同细节程度的三维真实图像,使医生对病灶部位的大小、位置,不仅有定性的认识,而且有定量的认识,尤其是对大脑等复杂区域,数据场可视化所带来的效果尤其明显。借助虚拟现实的手段,医生可以对病变的部位进行确诊,制定出有效的手术方案,并在手术之前模拟手术。在临床上也可应用在放射诊断、制定放射治疗计划等。例如有人借助可视化技术,对孕妇体内胎儿的成长过程,进行三维实时的观测。

在心电图学研究中,可以将人体器官复杂的三维几何构造与电压电流场的关系可视化。如从健康人胸部的核磁共振图像构造出人体胸部的多面模型,作为研究从心脏到贯穿胸部的电压电流分布的基础。利用构造出的三维模型对胸部活动的模拟结果进行可视化,等等。

## 2. 天文物理学

对整个宇宙可视化——绘制宇宙的三维地图,可以更好地理解星系的起源、演变和内部结构,帮助人们设计更先进的天方观测工具(如更高倍的天文望远镜),了解宇宙更深层的奥秘。

## 3. 材料科学

最近,国外有人利用 AVS 系统对原子散乱数据进行可视化,来研究凝固态物质的微观结构和力学特性。在计算机中模拟改变分子模型的拓扑结构,新型物质的化学和物理性质都有较直观的反映。在开发新型材料时,可视化技术是一个不可缺少的辅助工具。

## 4. 人类学和考古学

在考古过程中找到古人类化石的若干碎片,由此重构出古人类的骨架结构。传统的方法是按照物理模型,用粘土来拼凑而成。现在,利用基于几何建模的可视化系统,人们可以从化石碎片的数字化数据完整地恢复三维人体结构,因而向研究人员提供了既可以作基于计算机几何模型的定量研究,又可以实施物理上可塑的化石重现过程。

## 5. 海洋学

利用卫星重力测结果来重构出海底结构,通过将海洋平面的重力与海底深度建立关系,海洋学家对海底延展的物理学和动力学机制有了深刻了解,对海底的形成和变迁有了进一步的认识。考虑到海洋占地球表面的三分之二,而且它仍是一个巨大的未知世界,可视化技术提供了一种自然方法所不能比拟的探索未知世界的手段。

## 6. 环境与生态科学

利用可视化技术对污染的传播和积累、全球臭氧的分布、建筑物与周围气流、大面积水域污染等许多问

题进行模拟、实验,分析产生的后果,设计可行的预防措施。例如,目前正有人用可视化系统研究大气对地球系统的其它成分(如海洋、植被、土壤等)的交互作用。

## 7. 建筑设计

在建筑设计时,利用可视化技术,可以将客户的各种要求和想法转化为计算机图形和图像。在送交客户们审查意见时,设计者提交的不是厚厚的一迭图纸,而是按设计图纸建成后的建筑物外貌,甚至于内部结构。客户的反馈信息能及时地反映到设计当中,使设计的效率大大提高。除用在设计新的建筑外,可视化技术还可以从部分或全部被破坏的古代建筑构造出原有的模型,并使人们获得身临其境的视觉感受。例如,中科院 CAD 开放实验室开发的古建园林系统成功地恢复了圆明园部分遗址的原貌。

## 8. 地质勘探

利用模拟人工地震的方法,可以获得地质岩层信息。通过数据特征的抽取和匹配,可以确定地下的矿藏资源。用可视化方法对模拟地震数据的解释,可以大大地提高地质勘探的效率和安全性。

## 9. 航天工业

飞行器高速穿过大气层时周围气流的运动情况和飞行器表面的物理特性的变化,在现有的流场可视化技术下,可以非常直观的展现出来。尤其是对飞行器的不稳定现象、超音速流的研究,这是计算流体力学里的新课题,借助可视化技术,许多意想不到的困难都可以迎刃而解了。中科院 CAD 开放实验室开发的数据可视化系统(DVS),已经应用于飞行器流场模拟显示。

## 10. 气候模型与预测

用全球气候模型模拟、由超级计算机生成的多变量数据,可通过可视化技术中的等高线、等值面、向量和流线生成等方法,甚至于借助动画,预测天气形式的变化。这种办法已经被日常的天气预报采用。

## 11. 工业无损探伤

在工业无损探伤中,可以用超声波探测,在不破坏部件的情况下,不仅可以清楚地认识其内部结构,而且对发生变异的区域也可以准确地探出。显然,能够及时检查出有可能发生断裂等具有较大破坏性怀的隐患是有极大现实意义的。

## 12. 生物学

在对体积较小的对象进行研究时,例如对一生物组织,可以利用电镜、光镜等辅助设备对其剖片进行分析、采样等获得剖片信息,利用这些剖片构成的体数据可以对其原形态进行定性和定量分析。