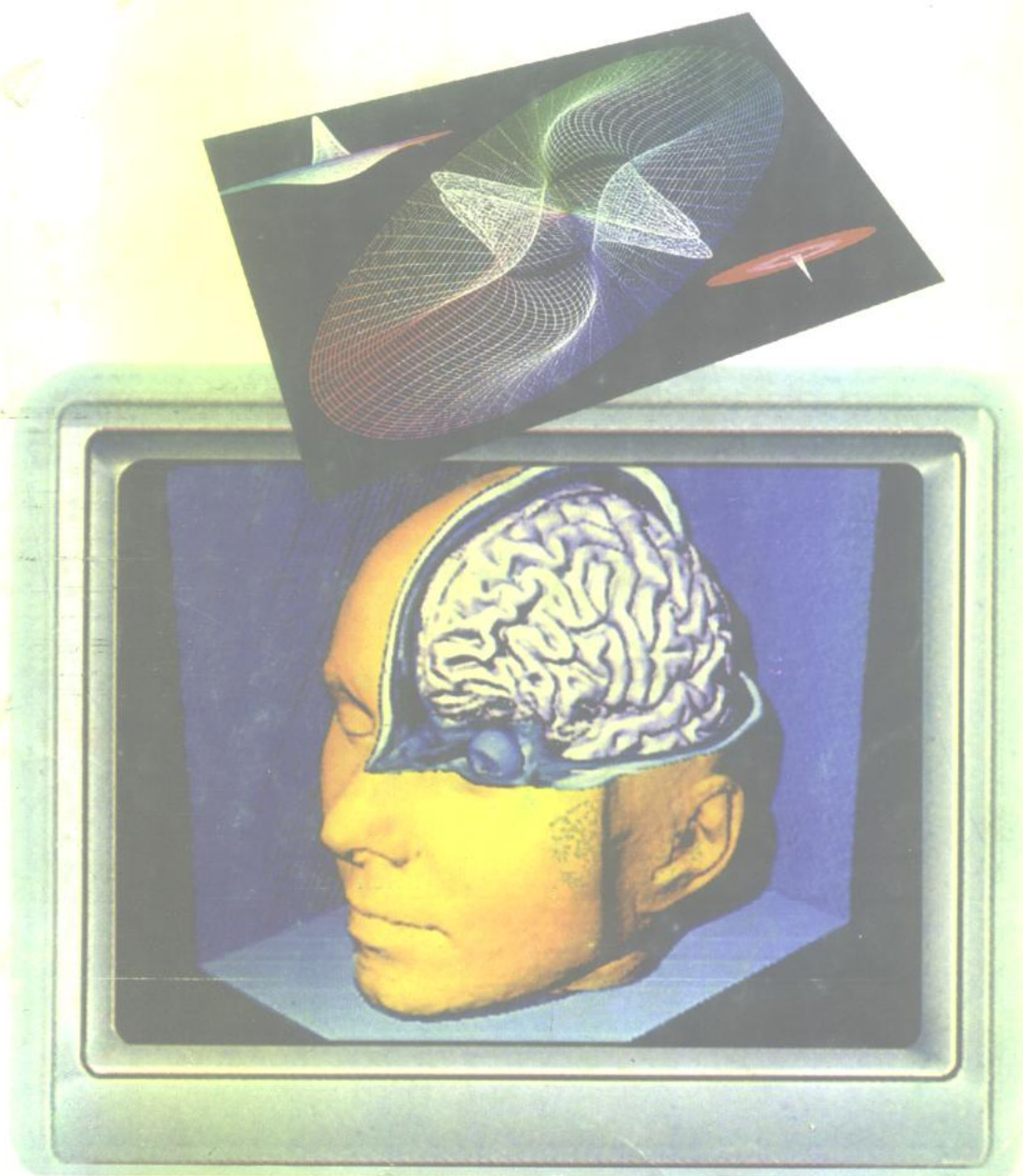


计算机新技术丛书○

科学计算 可视化导论

李晓梅 黄朝晖等 编著



计算机新技术丛书

科学计算可视化导论

李晓梅 黄朝晖等 编著

国防科技大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

科学计算可视化导论/李晓梅,黄朝晖等编著.长沙:国防科技大学出版社,1996.6
ISBN 7-81024-382-9

I 科学计算可视化导论

II 李晓梅,黄朝晖,蔡勋,钟志新,杨岳湘,廖海宁,汤红波

III ①科学计算 ②可视化 ③计算机

IV TP 301·4

责任编辑:胡见堂

责任校对:文 慧

封面设计:陆荣斌

国防科技大学出版社出版发行

电话:(0731)4555681 邮政编码:410073

新华书店总店北京发行所经销

国防科技大学印刷厂印装

*

开本:787×1092毫米 1/16 印张:11.75 字数:271千

1996年6月第1版第1次印刷 印数1-3000册

*

ISBN 7-81024-382-9

TP·80 定价:19.80元

内 容 简 介

本书系统地介绍科学计算可视化这一新兴学科的有关内容,包括可视化参考模型与系统框架、可视化技术组成与分类、体可视化技术、可视化中的数据管理与操纵、可视化中的人机界面问题、可视程序设计语言与环境、可视化软件分类与实例、科学计算可视化的应用、以及并行与分布式科学计算可视化。

本书可供从事科学计算研究与应用的人员阅读、也可供从事计算机应用的人员参考、还可作为高等院校有关专业的教材或教学参考书。

前言

自 80 年代以来,来自超级计算机、地球卫星、宇宙飞船、物理测量仪以及医学扫描仪等数据源的信息量及其数据密度都在成倍增长。比如,超级计算机的含义已从过去的 0.1~1.0 GFLOPS 变为 10~100 GFLOPS,地球资源卫星已比几年前提高了 10~100 倍的分辨率。科学家们需要对这些具有科学价值的数据进行分析、研究和运用。然而,他们面临的是“数据太多,无法处理”的困境。洪水般的数据流使科学家们能够做的只是收集与存储,而仅仅采用数值形式,人脑根本无法每天解释大批量(如十亿字节)的数据,大量的信息实际上都在浪费。另外,科学家们不仅需要分析超级计算机所产生的数据,而且要在进行超级计算期间解释数据、近实时地驾驭计算、修改计算参数并看到效果。但是,随着计算机性能的提高,求解问题的规模不断加大、复杂度不断提高,需要处理的和计算产生的数据量都在成倍增长,计算的过程越来越难以驾驭、计算结果的分析和解释越来越困难,严重影响了科学计算的效率和质量,阻碍了超级计算的进一步发展。

基于以上形势,1986 年 10 月,美国国家科学基金会(NSF)的高级科学计算部门召开了一个关于“图形、图像处理和工作站”的小型讨论会,目的是为其研究机构,特别是科学基金资助的超级计算中心,优先配备高性能的图形工作站和图形图像软硬件,从而以高性能的图形图像手段来为大型科学与工程计算和大规模数据处理服务。讨论会的成员一致认为:把图形图像技术应用于科学计算是一个需要作出努力的全新领域,并正式称之为“科学计算可视化”。1987 年 2 月,NSF 正式组织召开了“科学计算可视化”专题讨论会,与会人员包括学术界、企业界和联邦政府的代表,会议考察了科学家们对科学计算可视化的需求以及正在形成的技术。讨论会的报告在 1987 年年底发表,标志着科学计算可视化作为一门新兴学科和技术领域宣告诞生。

“科学计算的目的是洞察,而不仅是获得数值”。科学计算可视化(可简称为科学可视化或可视化)基于日趋成熟的图形学和图像处理技术,充分发挥人的视觉潜力,以图形、图像及动画等视觉表现形式展现计算与数据的本质,并允许与计算和数据进行交互,使科学家们能够观察到不可见的对象(see the unsee)、洞察到自然现象及其规律,促进科学发现与科学交流,是驾驭计算过程及理解大体积数据的唯一有效途径,它标志着计算工具的进一步现代化,甚至被誉为“第二次计算机革命”。

因此,科学计算可视化作为一门新兴学科,自正式确立以来已获得了飞速发展。欧美发达国家开展了广泛而深入的研究,推出了许多商品化的可视化软硬件产品,可视化应用市场逐年扩大。1990 年以来,与可视化相关的国际性及地区性学术会议十分频繁,最有影响的是一年一度的 IEEE 可视化会议及欧洲图形学学会组织的可视化专题讨论

会，许多学术刊物都开辟了科学可视化专题，可视化技术成为 90 年代的研究热点。最近几年，国内一些高校和研究所也相继开展了可视化的研究，但在研究规模与应用上与国外差距较大。鉴于国内的可视化研究刚刚起步，中文资料十分缺乏，我们组织编写了这本《科学计算可视化导论》，希望有助于国内计算领域的研究与应用人员系统地了解和掌握科学可视化技术，同时起到抛砖引玉的作用。

本书系统地介绍了科学计算可视化的主要内容。全书共分十章：第一章介绍科学计算可视化的历史背景与发展概况、科学可视化的概念与作用、实现科学可视化的软硬件要求以及科学可视化实现的基础。第二章介绍可视化的参考模型，引入一个模块化模型来描述可视化系统框架以及可视化系统的功能与性能。第三章介绍可视化技术的组成与分类，给出各种类型的可视化映射实例。第四章较详细地介绍了体可视化技术，它是科学可视化的核心技术之一。第五章介绍可视化中的数据管理与操纵，包括数据分类、数据管理、数据格式、数据变换以及数据压缩等内容。第六章从较高层次讨论了可视化人机界面设计与实现中存在的问题及解决途径。第七章较详细地介绍了可视程序设计语言及环境，它是当前可视化系统实现中的关键技术。第八章对国内外现有的可视化软件系统进行了分类，对各种类型的典型系统作了较详细的介绍。第九章介绍了科学可视化在计算流体力学、气象学、医学图像处理等典型科学与工程领域中的应用。最后，在第十章介绍了并行与分布式科学计算可视化。

本书的第一章由李晓梅教授编写，第二、三、五章由黄朝晖编写，第四章由汤红波和蔡勋编写，第六章由钟志新编写，第七章由蔡勋编写，第八章由廖海宁编写，第九章由杨岳湘编写，第十章由蔡勋和汤红波编写。全书由李晓梅教授统稿。

本书是在广泛研读国外可视化资料，特别是参考了英国 K. W. Brodlie 等人汇编的“Scientific Visualization: Techniques and Applications”一书的基础上，结合我们目前的工作综合写成的。我们已按本书思路，在 UNIX 工作站群机系统环境下开发了一个并行与分布式科学可视化应用框架，将科学可视化与基于 PVM 的并行与分布式计算相结合，建立了量子力学、医学图像处理、CFD 和气象等可视化模块库，取得了良好的效果。由于科学可视化仍是正在形成中的新兴学科，研究范围十分广泛，加上我们的水平和经验有限，书中难免会有不妥或错误之处，敬请广大读者批评指正。

目 录

1. 引 言

1.1 科学计算的目的、意义与应用领域	(1)
1.1.1 科学计算的目的、意义	(1)
1.1.2 科学计算的主要应用领域	(2)
1.1.3 科学计算可视化是科学计算中不可缺少的一个组成部分	(4)
1.2 科学计算可视化的概念与作用	(5)
1.2.1 科学计算可视化的概念	(5)
1.2.2 科学计算可视化的作用	(5)
1.3 科学计算可视化的历史背景与发展概况	(6)
1.3.1 历史背景	(6)
1.3.2 发展概况	(8)
1.4 实现科学计算可视化的软、硬件要求	(9)
1.4.1 硬件要求	(9)
1.4.2 软件要求	(11)
1.5 科学计算可视化实现的基础	(11)
1.5.1 硬件基础	(11)
1.5.2 图形软件	(14)
1.5.3 用户界面开发工具	(16)
1.5.4 数据库系统	(16)
1.5.5 科学数据格式	(18)

2. 可视化参考模型与系统框架

2.1 引 言	(20)
2.2 高级模型	(20)
2.2.1 创造性思维模型	(20)
2.2.2 科学研究模型	(21)
2.3 数值模拟与可视化过程模型	(21)
2.3.1 数值模拟模型	(21)

2.3.2 可视化过程模型·····	(22)
2.4 框架模型与模块化模型·····	(23)
2.4.1 框架模型·····	(23)
2.4.2 模块化模型·····	(23)
2.5 可视化系统的功能·····	(27)
2.5.1 模块库·····	(27)
2.5.2 数据输入与输出·····	(27)
2.5.3 数据精度与误差·····	(27)
2.5.4 度量信息表示·····	(28)
2.5.5 分布式处理·····	(28)
2.5.6 后处理、跟踪与驾驭式可视化·····	(28)
2.6 可视化系统的性能·····	(29)
2.6.1 响应时间·····	(29)
2.6.2 人机界面·····	(29)
2.6.3 适用性·····	(30)
2.6.4 成本与效益比·····	(30)
2.7 可视化系统中的主要技术·····	(30)
2.7.1 可视化映射技术·····	(30)
2.7.2 数据管理与操纵技术·····	(30)
2.7.3 人机界面技术·····	(31)
2.7.4 系统实现技术·····	(31)

3. 可视化技术组成与分类

3.1 引言·····	(32)
3.2 可视化技术组成·····	(33)
3.2.1 建立一个经验模型·····	(33)
3.2.2 映射成抽象的可视化对象·····	(33)
3.2.3 可视化对象的实现·····	(33)
3.3 可视化技术分类·····	(34)
3.3.1 分类方法·····	(34)
3.3.2 实例说明·····	(35)
3.4 点数据场技术·····	(36)
3.4.1 一维散布点图·····	(36)
3.4.2 二维散布点图·····	(36)
3.4.3 三维散布点图·····	(37)
3.4.4 高维散布点图·····	(37)
3.5 标量场技术·····	(37)

3.5.1 一维域上的标量场	(37)
3.5.2 二维域上的标量场	(38)
3.5.3 三维域上的标量场	(41)
3.6 矢量场与张量场技术	(42)
3.6.1 二维矢量场	(43)
3.6.2 三维矢量场	(43)
3.6.3 张量场技术	(44)
3.7 图像处理技术	(44)
3.7.1 图像增强	(44)
3.7.2 特征提取与分割	(45)
3.7.3 图像变换	(45)
3.8 动画技术	(46)
3.8.1 动 画	(46)
3.8.2 视 频	(47)
3.9 人机交互技术	(47)
3.9.1 改变绘制方法	(48)
3.9.2 改变可视化技术	(48)
3.9.3 改变参数	(48)
3.9.4 改变相关数据	(48)
3.9.5 选择目标	(49)
3.9.6 标注图像	(49)
3.10 三维显示技术	(49)
3.10.1 前后关系	(49)
3.10.2 透视、光照与浓淡	(50)
3.10.3 立体视图	(50)
3.10.4 运 动	(50)

4. 体数据可视化技术

4.1 引 言	(52)
4.2 体数据介绍	(52)
4.2.1 体数据的来源	(52)
4.2.2 体数据场的类型	(53)
4.2.3 体数据的表达方式及数据结构	(53)
4.3 体数据可视化的方法	(55)
4.3.1 体可视化一般步骤	(55)
4.3.2 体可视化基本方法	(56)
4.4 体数据的分类	(58)

4.5	体数据的遍历	(60)
4.6	观察和浓淡处理	(61)
4.6.1	观察方式	(61)
4.6.2	浓淡处理	(61)
4.7	体可视化算法介绍	(63)
4.7.1	Contour Connecting 算法	(63)
4.7.2	Opaque Cube 算法	(64)
4.7.3	Marching Cubes 算法	(64)
4.7.4	图像空间序 Ray Casting 算法	(66)

5. 可视化中的数据管理与操纵

5.1	引言	(70)
5.2	数据源与数据分类	(70)
5.2.1	数据源	(70)
5.2.2	外部数据与内部数据	(71)
5.2.3	原始数据与导出数据	(71)
5.2.4	基本元素与逻辑集合	(71)
5.2.5	几何数据与属性数据	(72)
5.2.6	记录数据	(72)
5.2.7	关系数据	(73)
5.3	数据管理	(73)
5.3.1	数据描述与操纵语言	(74)
5.3.2	数据存档	(75)
5.4	数据格式	(75)
5.4.1	通用数据格式	(76)
5.4.2	专用数据格式	(77)
5.4.3	图形与图像数据格式	(78)
5.4.4	数据格式转换工具	(80)
5.4.5	标准化数据格式	(80)
5.5	数据变换	(81)
5.5.1	数据规范化	(81)
5.5.2	过滤	(81)
5.5.3	平滑	(81)
5.5.4	网格重新划分	(82)
5.5.5	坐标变换	(82)
5.5.6	线性变换	(82)
5.5.7	几何变换	(82)

5.5.8 数据分割·····	(82)
5.5.9 特征检测、增强和提取·····	(82)
5.5.10 颜色表操纵与特征映射·····	(83)
5.6 数据压缩·····	(83)
5.6.1 数据完整性·····	(83)
5.6.2 压缩技术·····	(83)
5.6.3 数据压缩标准·····	(84)

6. 可视化中的人机界面问题

6.1 引言·····	(86)
6.2 可视化人机界面中涉及人的问题·····	(87)
6.2.1 关于认知·····	(87)
6.2.2 关于感知·····	(87)
6.2.3 人文因素·····	(89)
6.2.4 关于组织·····	(89)
6.3 可视化人机界面中涉及系统的问题·····	(90)
6.3.1 关于适应性·····	(90)
6.3.2 关于模型·····	(90)
6.3.3 关于设备·····	(90)
6.3.4 关于对话管理·····	(91)
6.4 可视化人机界面设计中的困难·····	(91)
6.4.1 要求符合预期用户的行为习惯和应用需要·····	(92)
6.4.2 要求易学易用·····	(92)
6.4.3 涉及多种学科·····	(92)
6.4.4 界面设计有章难循·····	(93)
6.4.5 要求迭代式设计·····	(94)
6.5 可视化人机界面实现中的困难·····	(94)
6.5.1 迭代式设计难·····	(94)
6.5.2 程序结构复杂·····	(94)
6.5.3 实现多处理环境难·····	(95)
6.5.4 强健性要求高·····	(95)
6.5.5 测试难·····	(95)
6.5.6 现有语言支持不力·····	(95)
6.5.7 现有工具使用难·····	(96)
6.5.8 软件模块化困难·····	(96)

7. 可视程序设计语言与环境

7.1 引 言	(98)
7.2 可视语言原理	(99)
7.2.1 归约图符	(99)
7.2.2 图符系统的形式说明	(100)
7.2.3 图符操纵者	(101)
7.2.4 作为图符系统的用户界面说明	(103)
7.2.5 可视语言编译器	(104)
7.3 可视界面设计原理	(106)
7.3.1 可视交互式范例	(106)
7.3.2 可视界面设计过程	(110)
7.4 可视程序设计环境原理	(111)
7.4.1 可视程序设计环境的定义	(111)
7.4.2 可视程序设计环境中的有关问题	(112)
7.5 数据流与可视程序设计原理	(113)
7.5.1 数据流程序设计语言	(113)
7.5.2 可视程序设计环境中的数据流机制	(114)
7.5.3 可视程序设计语言	(115)
7.5.4 可视程序设计语言的优势	(116)
7.6 可视程序设计系统实例分析	(117)

8. 可视化软件系统分类与实例

8.1 引 言	(121)
8.2 可视化软件分类	(121)
8.2.1 图形库和图形包	(121)
8.2.2 Turnkey 可视化系统	(122)
8.2.3 可视化应用建造器	(123)
8.3 可视化软件描述方法	(123)
8.4 Turnkey 系统实例	(124)
8.4.1 几何观察器	(124)
8.4.2 专用科学数据可视化系统	(125)
8.5 可视化应用建造器实例	(129)
8.5.1 apE2.0	(129)
8.5.2 AVS	(132)
8.5.3 Khoros	(133)

8.5.4 Explorer	(136)
8.6 评价与展望	(138)

9. 科学计算可视化的应用

9.1 引言	(140)
9.2 计算流体力学可视化	(140)
9.2.1 CFD的一般过程及可视化技术	(141)
9.2.2 CFD中的网格划分	(141)
9.2.3 CFD场景建立技术	(141)
9.2.4 CFD可视化中的交互	(143)
9.3 气象学可视化	(143)
9.3.1 气象数据的可视化	(144)
9.3.2 当前气象可视化软件产品	(144)
9.4 医学可视化	(146)
9.4.1 医学图像模式	(146)
9.4.2 医学图像处理技术	(146)
9.5 分子图形学可视化	(151)
9.5.1 分子图形学可视化的概念、表示方法及应用	(151)
9.5.2 分子图形学可视化的主要技术	(152)
9.6 石油地震可视化	(153)

10. 并行与分布式科学可视化

10.1 引言	(155)
10.2 并行与分布式科学可视化技术	(156)
10.2.1 支持并行与分布式计算的科学可视化软硬件环境	(156)
10.2.2 支持并行与分布式计算的科学可视化软件结构	(160)
10.2.3 网络环境中的科学可视化任务分配和负载平衡	(162)
10.2.4 网络环境中数据的有效管理和访问	(165)
10.3 并行体绘制技术	(166)
10.3.1 多处理机环境下的体数据可视化并行处理	(166)
10.3.2 体数据可视化的专用体系结构及环境	(169)
10.4 并行与分布式科学可视化发展概况	(170)
10.5 并行与分布式科学可视化的未来发展趋势	(172)

1 引言

1.1 科学计算的目的、意义与应用领域

1.1.1 科学计算的目的、意义

计算机的诞生与迅速发展推动了科学技术的迅速发展,从而也促进了科学与工程计算的诞生与迅速发展。科学计算的目的是洞察,而不仅是获得数据。通过科学计算来启发和促进人们对自然规律的更深层次认识,从而发现新规律、建立新学科,并应用于生产实践中。1984年初,诺贝尔奖金获得者,著名的美国物理学家 Wilson 撰文指出:科学的计算机化就是要从牛顿以来的 400 多年间人类在科学技术研究中获得和正在获得的知识转化为计算机程序,应用于科研和生产实际,促进各个学科的科学家的广泛合作。

由计算机带来的当代技术革命的巨大意义,在于它继实验方法、理论方法之后,引进了第三种科学手段——计算。而科学计算的意义则在于:

- 可以模拟客观物理世界的过程,部分取代实验或作为实验的补充,检验理论的模型,进行预测、模拟在实际中无法重复或进行实验的自然现象或社会现象;
- 利用“数值实验”发现新的规律,并对工业生产进行产品分析与设计;
- 对那些精确性尚不够,数学模型尚未定型的问题,利用数值模拟可以进行多个方案的模拟计算和对比筛选。从而对科学定量化起到了重要作用。

事实表明,实验、理论与计算已成为科学研究方法上相辅相成而又互相独立、互相补充替代,彼此不可缺少的三个主要手段。计算的兴起,形成了与实验、理论鼎足而立之势,这是继伽利略、牛顿以来在科学方法论方面取得的最大进展。

科学计算作为一门工具性、方法性、边缘性的新学科,已经确立和得到发展,并已在各种科学与工程领域中逐步形成了计算性学科分支,如计算流体力学、计算物理、计算化学、计算力学、计算地震学等等;在生物科学、医学、系统科学、经济科学和社会科学中也发展起计算理论;在核技术、气象、石油勘探、航空航天、密码破译等领域中,计算已成为不可缺少的重要工具。这些计算性的科学和工程领域,是以计算数学作为其基础和联系纽带的。计算机方法对提高计算能力,对基础理论、应用技术及工程设计诸方面发挥了重要作用。

1.1.2 科学计算的主要应用领域

科学计算,首先开始于核武器的研制与设计,它是把科学计算作为第三种科学手段的极好例子。由于造成核爆炸条件的过程和核反应过程都是在高温高压下进行的,压力高达几百万大气压,温度高达几千万摄氏度,而且核爆炸的巨大能量是在微秒量级的时间内释放出来。因此,在一次核试验中要求测量出核武器内部的细微反应过程是十分困难的,而描述核反应这样复杂的物理过程的数学模型是一组非定常的非线性偏微分方程,它的解给出了核爆炸全过程各细节的图像、定量的数据和运动全过程。但是,这样的方程没法求出解析解,只有借助于数值方法——大规模科学计算来求解。核武器的测试结果,只能提供一些综合效应的数据,而从计算机计算的结果却能看出各种因素和机制的相互作用,从而能深入了解核反应的运动规律,这对产品的设计是至关重要的。因为设计一个核武器型号,从摸清规律、调整各种参数直到优选等等,需要计算成百上千个模型,由于进行核试验耗资大,周期长,所以不能只通过核试验来设计和改进核武器。在计算机上选择一套参数,计算一个模型,在一定意义上相当于进行一次核试验。因此,在计算机上花上几百万元进行科学计算可以换回以亿元计的试验经费,计算可以减少核武器试验次数,节省投资,缩短研究周期。所以各国在核武器研制设计中都大量采用科学计算方法。在现代核武器的研究中,探索新一代战略武器需要比现代超级计算机还要高出2~3个数量级的新机型,同时也特别需要高效率的计算方法,以提高计算能力和精度。

科学计算在航空航天工业中具有十分重要的应用。在当代飞行器的设计中,气动力学、风洞实验和自由飞行一起构成了获得飞行器气动力数据的三种手段。风洞实验是飞行器设计中的一个重要手段,但建设风洞的费用很高,实验费十分昂贵,而且有局限性。相反采用计算流体力学和计算气动力学方法,不仅周期短,费用降低,还可以改变参数重复计算。这就是通常人们把这种数值模拟方法称之为“数值风洞实验”的原因。“数值风洞实验”在减少实验次数、降低成本和缩短型号研制周期方面已取得了十分明显效果。在国外,计算已使飞机型号设计的风洞实验量减少了三分之一以上。由于计算能力增强,现在人们不仅可以计算战略导弹、局部机翼,而且开始了整架飞机、航天飞行器的三维计算;“数值风洞实验”对那些目前不能在特定的飞行状态下进行实验的未来所有飞行器而言,可以减少其设计风险、降低成本,在风洞实验前能迅速确定出有希望的设计方案,“数值风洞实验”可用于解决目前和未来飞机、直升机的各种问题,如机体/发动机一体化,机体/武器一体化,分离、气动力/气动弹性结构相互影响,航空声学/结构的相互影响以及目标特征等;“数值风洞实验”可以更好地对旋翼飞行器的空气动力学特性作出预测,这可以设计出具有低振动能级的、体积更小的、噪音更低、生存力更强的方案,从而减轻空勤人员的疲劳,提高武器精度和零部件寿命。在气动力学发展的20多年中,计算机的成本大约下降了1000倍,与之同时,计算方法的效率也大约提高了1000多倍。尽管如此,但要对完整的复杂形状的飞行器进行更为精细的计算,要使完整的粘性流和湍流的计算实现工程化,估计计算机的运算速度还需提高几个数量

级。

科学计算在大气科学研究中起着重要作用。随着人类活动的发展,天气预报只用简略的定性描述和相应的理论解释已远远不够了,人们需要精确的气象预报和气候预报。因此,必须建立能提供计算的理论数学模型和方法,算出规定地区和规定时间内的天气变化,然而在没有强大的计算能力时代,这是不可想象的。本世纪 20 年代初,天气预报方程已基本建立起来,但只有在电子计算机出现以后,数值天气预报才成为可能。现在美国和欧洲联合预报中心已建立了 5~10 天的逐天天气形势的中期数值预报业务。我国使用 YH-2 并行巨型机也建立了中期数值天气预报系统。大气科学由于有了科学计算这一有力工具,因而完成了从定性描述到定量计算,从经验性的学科进入“实验”学科的突破。在这一过程中,数值模拟沟通了理论与应用两个方面,对大气科学的发展产生了极为重大的影响。人们现在可以用计算机来做实验,模拟大气的变化过程,这一进步从根本上改变了大气科学研究方法。由于描述大气运动方程是一组复杂的非线性方程,涉及到力学、化学、生物学、地貌学的各种因素的影响,又在天空、海洋等广大尺度上进行求解,因此其数值模拟的方法是非常复杂的。越要精确地模拟大气现象,就越要进行规模极大的科学计算,因此,气象部门也成为最大计算机用户之一。

科学计算在国民经济发展中产生直接效益的最明显例子是在石油资源勘探中的应用。现代进行油气资源勘探的主要方法是人工地震法。这种方法是用人工地震造成的地震波在地下半空间的传播,然后在地面不同点上测量其反射信号,经过计算分析反推出地下的岩层构造。勘探数据处理的精确化对探明地层构造,从而对探清石油储量,提高打井的准确率和布局的合理性有重要的指导意义。在石油开发中,特别是 2 次或 3 次回收的开采中,计算机应用也越来越重要,油田开采的实地试验的代价是计算模拟的千百倍,而且耗时长、结果不精确。现在,油藏模拟的计算正由简单的二维模型过渡到复杂的三维模型,从单一的“黑油模型”过渡到更完整的多相组合模型。在地震资料勘探处理中已由二维偏移过渡到三维偏移,后者正由三维迭后偏移计算过渡到三维迭前偏移计算以至三维迭前深度偏移计算,要使得三维迭前深度偏移计算实现工程化,估计计算机的性能要比当前最快计算机性能高出几个数量级。

科学计算在资源调度、交通管理、厂矿布局及社会经济系统和生态环境系统中也起着重大作用。由于这些都可通过建立数学模型,进行数值模拟计算,实行动态的分析、预测统筹和规划,它们在经济管理系统工程中的每一个方案的实施与改进,均可收到千万元甚至是亿元的经济效益。

同样,科学计算在基础理论研究上已成为重要的研究手段。如前所述,计算引入大气科学产生了革命性变化;计算将研究微观物理过程推上新层次,使用统计物理的理论与现代计算技术相结合,对生物大分子动力学进行模拟,从而使人们有可能对大分子的结构与功能的关系有更本质、更精确的解释。

1.1.3 科学计算可视化是科学计算中不可缺少的一个组成部分

科学与工程计算的主要特点：一是具有很高的数值计算要求，可称之为数值计算密集的计算机应用领域，二是在计算过程中产生巨大数量的数字信息。研究人员为了获得数值模拟的研究结果，必须对计算输出的数据进行仔细的分析理解，以便洞察计算中发生的情况和问题，从而获得对被研究现象的认识与理解。然而这是一个十分费时而又繁琐的过程，这对科研人员来说是一种不堪承受的重负。为使研究人员摆脱或减轻分析和理解计算过程中所产生的巨大数据，出路只有借助科学计算可视化，即用直观的图形输出代替数字输出。

科学计算可视化可在三个层次上实现，对应于三种处理方式，即**事后处理 (Post-processing)**、**跟踪处理 (Tracking)**和**驾驭处理 (Steering)**。**事后处理**是把计算与计算结果的可视化分成二个阶段进行，二者之间不能发生交互作用。目前事后处理比较普遍的做法是采用分布处理方案，即在超级计算机上进行计算，产生的计算结果经网络传至工作站，可视化任务则由工作站承担。**跟踪处理**要求实时地显示计算中产生的结果，以便使研究人员能了解当前的计算情况，在发现错误或认为已无必要继续往下计算时，可停止当前的计算并开始下一个新的计算。**驾驭处理**则不仅能使研究人员实时地观察到当前计算的状态，而且要能对计算进行实时干预，如增加或减少网络点，修改某些网格中的参数等，并使计算继续下去。

例如，当计算复杂飞行器的绕流时，被计算的几何外形，一般总是由离散的数据来表示。人们希望在计算开始之前，将这些离散的数据所确定的几何外形显示出来，看看是否与真实的几何外形一致。对于不完全一致的地方，要求显示软件具有人机对话的能力，并及时修改和处理。在进行具体计算时，希望能将网格的生成情况显示出来，看看网格正交性和粗密分布情况，并及时调整和伸缩网格线使之形成理想的网格空间分布。特别当使用自适应网格技术时，显示技术可以帮助了解网格的自适应情况，以便及时修改和调整。在计算执行过程中，人们常希望能将任意的中间结果显示出来，以决定计算是否继续下去，以及计算方法和程序是否需要修改。当计算结果完成后，可视化技术作用更大，利用计算机图形学可提供各种方法描绘流场的各种物理量分布，提供便于利用和分析的各种流动画面。如果能进一步做到智能显示，研制出自动识别与抽取关键特征数据和关键现象的可视化专家系统，其作用就更大了。又比如，我们可以采用三维图形来表示飞行器高速穿过大气层时，其周围气流的运动情况以及对飞行器表面的压力、温度的影响等。再如，以三维图形显示核爆炸数值模拟中高温高压下物质状态的动态变化规律等。这样做必将大大加快加深研究人员对被模拟对象物理变化过程的认识，发现通过数值信息发现不了的现象，并获得意外的启发与灵感，从而可缩短研究周期，提高研究效率，取得更丰硕的研究成果。

总之，作为第三种科学研究方法的科学计算要获得发展，必须实现科学计算可视化，也只有具有可视化能力的科学计算才能真正成为科学发现与理解的强有力手段。