

· 科学论坛 ·

科学基金申请中几个重要科学概念探析

王来贵¹ 朱旺喜^{2*}

(1 辽宁工程技术大学 力学与工程学院, 辽宁阜新 123000;

2 国家自然科学基金委员会 工程与材料科学部, 北京 100085)

[摘要] 国家自然科学基金申报过程中, 必须准确地把握申报项目所涉及的科学概念。但有一些常用科学概念的内涵不易把握, 或容易与相近的科学概念混淆, 造成误解。在总结申报与评审基金项目的基础上, 从系统科学角度就机理与演化机理、系统的结构响应与本构关系、稳定性、耦合、力学与数学模型等概念的基本内涵进行整理、分析、推广与深化, 为自然科学基金的申报、评审及完成提供借鉴。

[关键词] 科学概念; 机理; 本构关系; 稳定性; 耦合; 力学与数学模型

DOI: 10.16262/j.cnki.1000-8217.2015.01.010

国家自然科学基金注重基础理论或应用基础理论研究, 而科学理论是由概念、公式、模型、定理等知识单元组成, 并由逻辑链条有机联系起来的知识体系。基础理论可通过逻辑方法进行演绎、推理等思维方式来构建; 应用基础理论研究一般是在实验研究或者现场测试分析基础上归纳自然现象、通过科学抽象升华形成的知识体系。在基金申报、评审过程中, 有几个常用但又不容易理解的科学概念常常容易造成误解, 或者与相近的科学概念混淆, 或者没有深入理解这些科学概念的内涵, 使得基金申报、评审甚至完成过程中不能准确地把握这些概念的科学内涵, 造成不必要的损失。

根据申报与评审统计分析, 国家自然科学基金在选题、申报、评审和完成过程中, “机理”、“本构关系”、“稳定性”、“耦合”、“力学与数学模型”等科学概念的使用率排在前茅。有一些重要科学的概念如“机理”、“演化机理”、“稳定性”等一般是不应该回避的; 有一些重要科学的概念如“本构关系”、“耦合”、“力学与数学模型”等在自然基金特别是工程科学范畴内申报项目的使用率很高且不易完整掌握。很多申报者没有把握这些科学概念的实质内涵, 混淆了这些科学概念与相近科学概念的联系与区别而没有申报成功; 即使在申报成功的项目中, 掌握这些科学概念对于顺利完成科学基金项目也有重要意义。

本文在作者曾经探讨国家自然科学基金工程科学项目选题^[1]、以科学问题为主线申报自然科学基金项目^[2]、“机理”类项目研究内涵^[3]、“模型”类项目研究内涵^[4]、工程系统演化过程研究内涵^[5]、基金申请的科学假说^[6-8]等问题的基础上, 从系统科学^[5,9]的角度对国家自然科学基金项目申报中经常用到的如“机理”、“本构关系”、“稳定性”、“耦合”、“力学与数学模型”等重要科学概念进行归纳、分析、整理、推广与深化, 便于在国家自然科学基金选题、申报、评审及完成中掌握与运用。

1 机理与演化机理

在环境作用下物体就会发生演化, 而演化过程的发生原理即演化机理(或演化机制)的研究属于原始创新, 是国家自然科学基金资助特别重要的类型。2009—2014年的6年间, 主题词含有“机理”的资助项目分别为794、1062、1397、1533、1619、1538项, 总数为7943项; 主题词含有“机制”的资助项目分别为828、1009、1533、1866、1925、2175项, 总数为9336项。而以“机理”、“机制”为主要研究内容的项目就更多, 并且逐年增加。因此把握“机理”及“演化机理”的概念、内涵就显得至关重要。

科学研究过程中, 通常将所研究的对象视为一个系统。系统内部元素与结构在组分、浓度、强度、

收稿日期: 2014-05-07; 修回日期: 2014-11-24

* 通信作者, Email: zhuwx@mail.nsf.gov.cn

温度、顺序或速度等方面存在差异,这种差异就是系统的内部环境或内动力;系统之外如机械(力学)、物理、化学、生物甚至社会等各种因素独立或联合、耦合作用为系统的外部环境或外动力。系统结构与内、外动力的合作、竞争、矛盾相互作用中,在规模、组分、关联方式等方面的改变,进而引起系统功能或其他性质的改变。

系统结构与系统内部环境相互作用的原理就为系统内部发生机理(或发生机制);系统结构与系统外部环境相互作用的原理就为系统外部发生机理(或发生机制)。考虑到系统的层次性,一个系统既是上一层次总系统的子系统,又是下一层次子系统的总系统。系统在结构形式、联接方式、参数分布及功能性质上的差异表现在该系统对上一层次总系统为内部功能和对下一层次子系统为外部功能特性。因此,一个影响因素可以从不同层次视角体现内、外环境的互相转换,可将内部环境、外部环境统称为环境。系统结构与系统环境相互作用具有普遍意义的基本规律,就为系统发生机理。

系统在环境作用下,系统的元素构成、结构形式、状态、特性、行为、功能等就会发生变化,这种变化统称为系统的演化。系统演化经历的时间序列包括孕育、潜伏、发生、爆发、持续、衰减、终止等过程。实质上,系统从孕育到潜伏、潜伏到发生、发生到爆发、爆发到持续、持续到衰减、衰减到终止等不同演化阶段中系统结构与环境相互作用的基本原理即演化机理是不同的。国家自然科学基金申报中,注意“机理”不是简单的系统结构分析、或环境分析、或实验测试单因素、有限样本的作用分析;而必须充分地了解系统演化过程的来龙去脉和前因后果,研究什么样的系统结构与什么样的系统环境、在哪一个阶段如何相互影响、相互作用,寻求具有普遍意义的演化过程及其规律,或系统结构与环境相互作用的普遍原理。

2 系统的结构响应与本构关系

国家自然科学基金申请书中,物体材料的本构关系多体现在力学类相关学科,体现物体材料激扰与相应之间的关系。但从更广义的角度分析,系统结构在组分、浓度、强度、温度、顺序或速度的差异等内部环境或机械(力学)、物理、化学、生物甚至社会等外部环境的激扰作用下,就会以相应的行为、形态、特性、功能等回应这种作用,即使系统结构产生响应。系统结构在内、外动力等单独、联合或耦合激

扰作用下,用数学表达式来描述系统结构的宏观响应性质,就可建立相应的本构关系或本构方程。常见的本构关系是建立在特征单元或系统特征子结构上的,如弹性力学的广义胡克定律,粘性流体力学的牛顿粘性定律,塑性力学的圣维南理想塑性定律,渗流力学的达西定律等;还有热力学中常用的克拉珀龙理想气体状态方程、傅里叶热传导方程等。

在建立物质系统的本构关系时,为了保证理论的正确性,必须遵循本构公理。本构理论的基本公理,包括因果性公理、决定性公理、等存在公理、客观性公理、物质不变性公理、邻域公理、记忆公理、相容性公理等。力学理论的本构公理有:(1) 确定性公理,即物体中的物质点在每一时刻的应力完全由组成物体的全部物质点运动的全部历史唯一地确定。(2) 局部作用公理,即假定离开某物质点有限距离的其他物质点的运动与该点上的应力无关。(3) 客观性公理,即物质的性质不随观察者的变化而变化,或者说,本构关系对于刚性运动的参考标架(或参考系)具有不变性。(4) 不变性公理,即本构关系应与坐标系无关。

实际研究过程中,可分以下4种情况:

(1) 通常都是建立特征单元或特征子结构的理想状态下的本构关系,对于多维、复杂系统结构,一般采用张量理论进行推广。如变形体力学中利用从特征单元建立的弹性本构关系广义胡克定律,在有限元分析中建立单元刚度矩阵,再推广组装成整体刚度矩阵。

(2) 依据简单结构的实验成果和理论分析结果,提出在多种复杂环境联合、耦合作用下的本构假说,并利用实验分析、逻辑关系推理以及得到验证的科学理论为基础进行检验。如力学中的材料破坏理论(强度理论),就是在大量单轴实验和少量的多轴实验基础上,结合应力状态分析,建立强度假说,再进行适量的二维、三维实验进行验证。

(3) 对于从孕育到潜伏、潜伏到发生、发生到爆发、爆发到持续、持续到衰减、衰减到终止等不同演化阶段的复杂演化过程,须分别建立不同演化阶段的本构方程,并同时建立不同演化阶段之间状态转换点、相变转换点的连续或间断性条件、转化判据及系统演化趋向判据。如流变力学中蠕变位移随时间经历了三个演化阶段,在建立不同蠕变阶段本构关系的同时,还需分别建立第一、第二和第三阶段蠕变位移连续条件和以蠕变加速度为判据的蠕变阶段转化判据。

(4) 对于复杂条件下如高速冲击、爆炸、周期运动、随机作用等特殊环境作用,或在机械(力学)、物理、化学、生物甚至社会等单独或联合、耦合扰动作用,须根据具体情况进行具体分析,建立相应的本构关系。

以建立本构关系为主要研究内容的国家自然科学基金申请书中,主要存在以下几个问题。一是将本构关系的概念狭义化,仅仅把本构关系理解为固体力学中的应力—应变之间的关系,特别是面对多种、多相、多过程等复杂演化问题;二是没有遵循本构公理,建立的模型不是真正意义上的本构关系,不能进行广泛意义上的推广;三是不能结合演化过程来进行响应分析,忽视了不同演化阶段及对应不同的响应特性和本构关系。

3 稳定性

稳定性研究是国家自然科学基金申报的热点之一,2009年—2014年的6年间,主题词含有“稳定性”的资助项目分别为248、306、405、452、450、401项,总数为2312项。稳定性理论涉及到各个不同学科领域和研究方向,常在物理学、力学、控制科学、管理科学等学科中广泛应用。

稳定性是指系统在外界扰动作用下,能否保持原来的平衡状态或运动状态的能力;系统在环境的扰动作用下失去原来平衡状态或运动状态的过程,叫失稳;在扰动作用下,系统在平衡点附件发生振荡,出现不稳定现象,系统的不稳定振荡不一定绝对导致失稳。工程中,常见的如突发事件、量变引起质变、相变、蝶变等突变均是常见失稳现象。

系统在去掉作用于系统上的扰动之后,能够以足够的精度恢复到初始平衡状态,系统的这种特性称为稳定的系统。系统的稳定性可以分成在大范围内稳定和小范围内稳定两种。如果系统受到扰动后,不论它的初始偏差多大,都能以足够的精度恢复到初始平衡状态,这种系统就叫大范围内渐近稳定的系统。如果系统受到扰动后,只有当它的初始偏差小于某一定值才能在取消扰动后恢复初始平衡状态,而当它的初始偏差大于限定值时,就不能恢复到初始平衡状态,这种系统就叫做在小范围内稳定的系统。在一定范围内处于稳定状态的系统,系统结构的势能最小,此时系统具有一定的抵抗外界干扰能力和自我恢复能力;反之系统可能局部势能最大,在环境干扰下发生局部失稳。

系统的演化进程常用微分方程描述,因此系统

稳定性的问题就转化为研究微分方程解的稳定性问题,即研究当初始条件甚至微分方程右端函数发生变化时,解随时间增长的变化情况。判定系统稳定性主要有两种方法:一是李雅普诺夫方法,它同时适用于线性系统和非线性系统、定常系统和时变系统。二是基于对系统传递函数的极点分布的判别方法,该方法只适用于线性定常系统。系统稳定性也可用稳定性定义或与微分方程等效的能量泛函分析方法来判别。

以“稳定性”为研究内容的基金申请书中,主要存在以下几个问题。一是没有抓住稳定性问题的实质,混淆了强度与稳定性的概念。在工程力学中,强度是指材料抵抗破坏能力,特别在岩土、采矿、水利、隧道等工程中,岩土体抵抗破坏能力的强度问题与保持平衡状态能力的稳定性问题是有实质的区别。二是可以采用微分方程(组)或能量方程来描述稳定性问题,并建立相应的稳定性问题判据。

4 耦合

在物理学、力学、控制科学、管理科学等学科中,耦合问题的研究是国家自然科学基金申报的热点之一。2009年—2014年的6年间,主题词含有“耦合”的资助项目分别为333、483、701、816、782、727项,总数为3842项。把握“耦合”概念的内涵,是申报、评审、完成该类项目的重要工作。

耦合通常是指系统内部各元素之间、系统之间以及系统与环境之间的相互关系,通常是以交互、互动等方式存在并相互依赖、互联作用;系统内各元素之间的互联作用为内耦合,系统与系统之间、系统与环境之间的相互影响为外耦合。耦合作用方式表现在系统内元素、系统之间以及系统与环境之间的相互影响过程可以是单向的、双向的或随机的。耦合在控制工程、通信工程、软件工程、机械工程等学科中有广泛应用。最常见的耦合例子是火借风势,风助火威现象,火与风两个系统彼此互动,相辅相成,产生互馈作用。因此,系统之间的耦合,一般也可通过反馈作用完成,这种联系系统间信息的参量就是耦合变量。

工程力学中常见的固体中流体流动问题,即流体与固体相互作用组成流固耦合系统。描述流体与固体之间的交互作用,须建立分别建立固体变形、流体流动两个系统的微分方程组。但是,在描述固体平衡状态的平衡(微分)方程组中,须包含流体流动压力变量;同时在描述与固体相互作用流体流动的

微分方程组中,须包含固体应力状态的变量。为了分析方便,流固耦合问题在求解过程中通常采用单向耦合方法,即将系统结构体视为定常变形场,忽略结构变形对流场空间的改变,使得求解计算简化。流固耦合双向耦合通常包括两种求解方法,即对弱耦合场的迭代解耦和对强耦合场直接解耦两种计算方法。

申报耦合问题的国家自然科学基金项目,往往存在以下主要问题。一是没有搞清楚场与场之间是如何耦合的,耦合变量是什么,如何描述耦合过程;二是如何测定耦合变量变化规律及其耦合控制作用;三是如何利用解析方法和数值方法求解耦合方程(组)。

5 力学模型与数学模型

国家自然科学基金项目中的模型,是指为了科学目的对复杂实体进行简化或抽象,是经验、现象或实际过程逻辑化的表述。建立力学模型、或选择力学模型是力学类或与力学相关的国家自然科学基金项目申报的基础性工作;而从更加广义的角度深入理解建立力学、数学模型的思路、方法有助于申请者申报和完成国家自然科学基金项目。

系统结构在受到系统内部动力、外部动力的单独、联合或耦合激励作用下,就会以相应的响应回应这种作用,使系统结构遵循事物发展的基本规律产生机械运动,用数学表达式描述这种机械运动基本规律的过程就叫建立力学模型。一般来说不同力学模型对应不同的本构关系,相应建立的力学理论体系而形成不同的力学学科,如描述刚体机械运动基本规律的科学就采用刚体力学模型,形成理论力学;描述弹性变形体运动、变形基本规律的科学就采用广义胡克定律模型,形成弹性力学,等等。实际中的力学问题往往非常复杂,通常对研究的工程对象(或系统),依据不同的研究目的,通过实验、观察、分析,抓住问题的本质,提出假设,使问题理想化或简化,从而达到在满足一定精确度的要求下用简单的力学模型来解决实际问题。

对于具体的工程问题,要进行凝练、抽象、简化成科学问题。如果本质科学问题是力学问题的话,就需要确定力学模型,进而建立相应的描述力学模型的数学模型。数学模型指反映特定问题或特定的具体事物系统的数学关系结构,是联系一个系统中各变量间内在关系的数学表达。数学模型包含的主要内容如下:

(1) 实际问题的凝练,即将工程问题凝练成科学问题或具体的力学问题;

(2) 基本假设,将凝练的科学问题或力学问题简化,提出相应的假设条件;

(3) 建立本构关系及其状态变量的拐点、极值点、转化或转换点(处)判据;

(4) 状态(控制)方程描述,一般包含质量守恒、动量守恒、动量矩守恒、能量守恒等自然界普遍规律的基本方程,可采用微分方程(组)、积分方程(组)或等效的能量泛函来描述;

(5) 确定定解条件,一般包含演化历程起点的初始条件及环境对结构体作用的边界条件;

(6) 对模型进行求解,通常对简单模型采用解析方法,对复杂模型采用数值方法等;

(7) 采用实验对比分析、现场测试等方法对模型进行检验与评价、修正与优化;

(8) 现场应用。

国家自然科学基金项目申报中,建立力学模型并用数学模型进行描述,是科研过程中的重要环节。因此需要对系统的结构特性、环境特性及演化过程及其特性进行深入分析。通常是建立与系统演化过程相匹配的非线性、随机、动态等复杂过程的力学、数学模型,以便从更深的层次揭示事物发展的基本规律。同时要区分力学模型与数学模型的概念差别和联系,并且在数学模型描述中,不能缺失系统演化阶段转化或转换点(处)或系统状态变化的拐点、极值点的判据。

参 考 文 献

- [1] 王来贵,朱旺喜. 探讨国家自然科学基金工程科学项目的选题. 中国科学基金, 2011, 4: 244—246.
- [2] 王来贵,朱旺喜. 以科学问题为主线申报国家自然科学基金项目. 中国科学基金, 2007, 1: 39—42.
- [3] 王来贵,朱旺喜. 浅析国家自然科学基金“机理”类项目的研究内涵. 中国科学基金, 2009, 1: 47—49.
- [4] 王来贵,朱旺喜. 探析国家自然科学基金“模型”类项目的研究内涵. 中国科学基金, 2010, 3: 175—178.
- [5] 王来贵,朱旺喜. 试论工程系统演化过程研究内涵. 中国基础科学, 2013, 2: 3—6.
- [6] 朱旺喜,王来贵. 基于假说的自然科学基金申请. 科技导报, 2014, 32(12): 89.
- [7] 朱旺喜,王来贵. 科学基金申请中科学假说的研究内涵. 科技导报, 2014, 32(13): 89.
- [8] 朱旺喜,王来贵. 科学基金申请中科学假说的论证和检验. 科技导报, 2014, 32(14): 88.
- [9] 陈忠,盛毅华. 现代系统科学学. 上海: 上海科学技术文献出版社. 2005.

Analysis of the several important scientific concepts in applying for science foundation

Wang Laigui¹ Zhu Wangxi²

(1 Institute of mechanics and engineering, Liaoning Technical University, Fuxin 123000;

2 Department of Engineering and Materials Science, NSFC, Beijing 100085)

Abstract During the process of national natural science foundation of application, some commonly used scientific concepts are not easy to grasp, or easily confused with similar scientific concepts. On the basis of summarizing applications and funded projects from the view of system science, we select some concepts such as the mechanism and evolution mechanism, the structure of the system response and constitutive relation, stability, coupling, mechanical and mathematical model, etc., and provide suggestions for correct uses of these concepts.

Key words scientific concept; mechanism; constitutive relations; stability; coupling; mechanics and mathematical model

· 资料信息 ·

我国学者在活细胞内的生物正交反应研究领域取得重要进展

DOI:10.16262/j.cnki.1000-8217.2015.01.011

生物正交反应是指在活体细胞或组织中,能够在不干扰生物自身生化反应条件下可以进行的化学反应。化学生物学家为满足生物正交的要求设计了各种化学策略。狄尔斯-阿尔德反应(Diels-Alder reaction)是经典的双烯加成反应,“逆电子需求的狄尔斯-阿尔德反应”(“逆)狄-阿”反应)同样有着重要的理论和应用价值,近年来被应用于抗体修饰、材料合成和活体标记等多个领域。

北京大学化学与分子工程学院陈鹏课题组长期致力于发展活细胞内的外源化学反应,特别是生物正交消除反应的提出,丰富了生物正交反应的内容(*Nat. Chem.* 2014, 6, 352-361; *Nat. Commun.* 2014, 5, 4981; *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 7330-8; *Chem. Soc. Rev.* 2014, 43, 6511-6526)。最近,他们首次在活细胞的蛋白质上实现了“(逆)狄-阿”反应,并将其应用于蛋白质酶的激活(*Nat. Chem. Biol.* 2014, 10, 1003-1005)。基于对“(逆)狄-阿”反应的解析,他们发现,对于烯丙位被氧原子取代的反式环辛烯,在与3,6-二甲基-1,2,4,5-四嗪发生反应后会进一步发生重排,诱导环辛烯骨架与氧原子之间C—O键的断裂,从而发生脱除反应。这种特殊的“(逆)狄-阿”反应类型首先在有机小分子上和模型蛋白质上得到了很好的验证。实验表

明,该反应能够很好地与生物体系兼容,对于插入活细胞内蛋白质上的反式环辛烯保护的赖氨酸,能在十分钟内将其高效转化为天然赖氨酸。在以上结果的基础上,他们将“(逆)狄-阿”反应应用于小分子介导的蛋白质激活。首先,他们在萤火虫荧光素酶的活性位点引入环辛烯保护的赖氨酸,抑制其催化活性。通过四嗪介导的“(逆)狄-阿”反应,释放出被保护的催化赖氨酸残基,实现荧光素酶的特异激活。与此同时,利用该酶活性定量可测的特点,他们将反应产率与生物发光的信号强度关联起来,高效定量地监测了这一活体内的蛋白质脱保护反应。数据表明,该反应能够在15分钟内激活90%以上处于抑制状态的蛋白质酶。这一研究突破将针对“蛋白质激活的理性设计”从概念验证提升到了拓展应用阶段,具有重要的意义。

该项工作得到了杰出青年科学基金(21225206)和“基于小分子探针的信号转导过程研究”国家自然科学基金重大研究计划集成项目(91313301)的资助。

(化学科学部 张艳 郑企雨
陈拥军 梁文平 供稿)