



Views & Comments

探索知识体系的逻辑与架构：多层次、多尺度及介尺度复杂性

李静海

Vice President of International Council for Science

State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

1. 突破惯性思维模式

为迎接新的科技革命，实现新的科研模式，应对全球挑战，我们迫切需要突破惯性思维。在新的科技时代，机遇多于挑战。然而，在这个新时代，政府和科技界需要意识到，最为重要的问题也许不是经常讨论的投资与回馈。

现代科学技术在20世纪取得了突飞猛进的进步。人类对自然界的认识和改造自然的能力不断提升，科学在向两个极端时空尺度扩展的同时，催生了许多新技术，特别是能源、材料、信息和生物技术的发展，从根本上改变了人类的生产和生活方式，推动了人类文明的进步。

然而，人们逐步认识到，在人类可持续发展面临的挑战、需要解决方案的同时，自然、工程、人类自身和社会科学中仍然存在很多用已有知识无法解决的问题，注重细节的还原论和关注整体行为的系统论仍然无法融合，不同层次之间和同一层次不同尺度之间的关联仍然难以实现。这严重制约了人类可持续发展的能力，对自然科学和社会科学提出了挑战。

与此同时，信息技术的进步和知识体系的爆炸性扩张，正在推动新的科研模式[1]的形成，学科交叉[2-5]、融合也越来越成为取得新突破的主要途径[3]，科学的开放性和全球性已成为当代科学的潮流。在这样一个机遇大于挑战的时代，世界各国都纷纷出台各种重大研究计划，重构国家创新体系，努力增加科技投入。大家普遍期盼着一场新的科技革命的发生。

为此，很自然地，各国科技界都呼吁政府增加科技投入，而各国政府也比以往任何时候都更期待科技界能

够对科技投入予以更多回馈。因此，相关政产学研的关系越来越引起社会各界的关注，其复杂性似乎甚至超过了科学本身。

增加科技投入、促进政产学研结合，当然十分重要，但是，在这些议题之外，还有什么问题更为重要而尚未引起重视呢？笔者认为，确实存在着忽视科学技术本身发展规律的问题，而这些问题或许更为关键，解决这些问题或许对应对全球挑战、加速科学技术进步和建立新的科研模式更为重要。比如：

(1) 知识体系及其缺失的环节：是否可在现有知识积累的基础上，理清科学知识之间的逻辑关系和结构体系，从而明确缺失的知识环节，优化和完善现代科学技术的布局？

(2) 推动科研新模式的行动：面对大数据、开放获取和科学全球化的发展趋势，如何理性地引导和推动新的科研范式的形成和发展，而不是被动地等待？

相应地，知识体系结构的认识和科研范式的变化也会对各国创新体系的结构和管理提出一系列新的要求，本文试图摆脱惯性思维，探索这些问题。

2. 理清知识体系的结构和逻辑

我们应当系统地理清现代知识体系的结构与逻辑，并使科学知识和应用技术的结构与逻辑及其相互之间的关系成为研发、教育布局的基础。通过理清知识体系的结构和逻辑，我们可以将所有学科和科研领域组织成一个逻辑架构，促进学科交叉融合，可极大地提升科研效

率，加快科学技术进步的进程。

自然科学与技术各学科和领域的研究对象包括自然界、物质加工科学、生命科学、社会科学，等等。这些对象之间存在严密的逻辑关系，所产生的知识和技术，理应存在严密的结构和逻辑，此结构和逻辑理所应当的是由所研究的对象之间的结构和逻辑决定的。

然而，现有学科和领域的布局并不是基于这一固有的结构和逻辑，而是在人们认识十分局限的情况下，受一些偶然或人为的因素影响，根据所研究的具体问题进行归类而逐步积累演化而来，客观上缺乏对整个知识体系的系统考虑。比如：基础学科包括数、理、化、天、地、生，并又进一步细化形成各种分支学科；应用领域包括能源、材料、环境、信息等，以及进一步专业化形成的分支领域；进而又有不同学科和领域形成的交叉学科等。据统计，可定义的学科领域就有8530个[2]。这些学科和领域之间缺少系统的逻辑，难以准确反映各门知识之间的内在关系。更应引起重视的是，学科、领域及其分支的形成，尽管当时有其积极意义，但逐步也会在无形中形成与其他学科领域的隔离，不利于学科无缝交叉和融合。

由此，我们有理由提出以下问题：各种各样的学科之间的逻辑关系是什么？已积累的各方面知识之间是否有一定的规律？打破原有学科和领域的分类，按现有知识之间的逻辑关系勾画科学技术的完整布局是否可能？现有知识体系中是否存在缺失的环节？如果缺失，可能在哪些方面？这些方面是否构成现代科学技术发展的瓶颈问题？这些是当前应当思考的十分重要的问题，可能

比争论投资与回馈更为重要。

根据已有科学技术的积累，明确各学科和领域之间的逻辑关系，不仅有利于科学研究机构的发展和组织，有利于教育体系的构建，也可促进学科交叉，实现相关学科的无缝融合，以最大限度地减少重复、促进合作，同时将极大地促进教育体系的重构和交叉学科人才的培养。从这个意义说，知识体系结构和逻辑应当满足的条件是：

(1) 相似性：科学知识体系的结构与逻辑要与研究对象的结构和逻辑一致，形成完整的体系结构；

(2) 普遍性：最大限度地归纳共性、减少重复，有利于交叉和融合；

(3) 适应性：将研究对象和知识体系的层次结构和社会经济重大需求有机统一，以便在知识体系的充分支持下更为科学地应对全球挑战。

3. 知识体系的多层次、多尺度属性和介尺度复杂性

我们需要重视知识体系的多层次、多尺度属性和介尺度复杂性。物质世界和人类自身的结构及其中的逻辑关系表现为多层次结构，每一层次又表现为多尺度的结构，建立每一层次多尺度之间的关系和不同层次之间的关联是现代科学的中心任务，其中每一层次的介尺度结构是实现这一中心任务的关键。因此，多层次、多尺度和介尺度将是一个完整合理的知识体系的显著特征。

如图1列出的科学技术的研究对象有：自然界、人

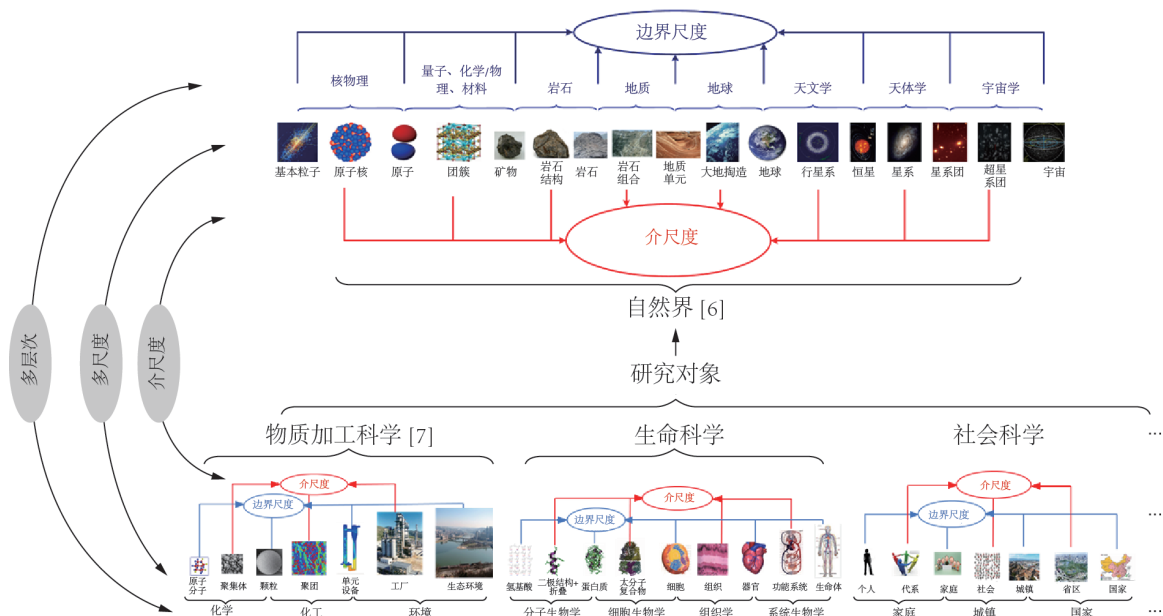


图1. 科学技术研究对象的多层次、多尺度特征及介尺度复杂性。

们在改造自然的过程中形成的**物质加工科学**、认识人类自身过程中形成的**生命科学**，以及认识人际行为的**社会科学**。

英文单词前缀“meso”源自古希腊的单词mésos，意思是“中间”或“之间”。研究问题或过程的时候，我们通常将大量“单元”的群体当作“系统”。系统还受到其与环境之间的边界的影响。这里的“介尺度”不是指绝对的物理尺寸，而是个相对的概念，指的是任何介于单元尺度与系统尺度之间的尺度范围。这种介尺度可以存在于不同的层次，因而具体尺寸可以十分多样[7]。物理学通常谈及的“介观”尺度仅仅是介尺度的一例，它是以原子、分子尺度为单元尺度，以块体材料尺度为系统尺度时的介尺度[8]。

传统的方法关注每一层次的单元尺度和系统尺度，而认识这种多尺度问题的关键在于介尺度结构，即介于单元和系统之间的尺度上表现出的动态非均匀结构，或来源于这类动态结构的静态结构，是各领域共同的挑战性问题。需要指出的是，介尺度过程不仅与所处的领域有关，还与同一领域所处的层次有关，如图1所示。这是介尺度问题固有复杂性的根源。

3.1. 自然界

自然界的最小单元是基本粒子。在此之上，依次有强子、原子核、原子，不同的原子又进一步构成分子及宏观材料或矿物，而不同矿物构成岩石，又由岩石形成地质单元结构，再进一步由地质单元构成地球和各种星体，以此类推，构成整个宇宙。因此，从基本粒子到宇宙之间存在多层次、多尺度的结构。由于知识的局限，不同层次就构成了不同的学科，而不同学科之间的融合和集成却十分困难。这一方面是知识体系本身属性的自然反映，而另一方面，这种多层次的属性又导致了层次之间的隔阂。在一个学科中作为“系统”来研究的对象，在其相邻学科中则是“单元”，反之亦然。因此，对同一研究对象，所用术语和方法不同，学科可能差别很大，造成了学科之间的隔阂。这是科技领域中长期存在的问题。虽然大家可能都意识到了，但关注不够。

3.2. 物质加工科学

同样，改造自然的物质加工科学也表现为多层次和多尺度的特征。对此，由于研究工作不断深入，对其多层次、多尺度特征的认识也更为明确。物质转化过程涉及三个层次：材料、反应器和生态环境，分别对应物质

加工研发的不同阶段，即工艺创新、过程设备研发和系统集成。具体到每个层次，其内部往往可分为单元尺度、介尺度和系统尺度。尽管三个层次研究的内容和对象截然不同，并形成不同的分支学科，但却具有以下共同的属性：①三个层次均具有多尺度特征；②对三个层次涉及的边界尺度(原子/分子、颗粒、单元设备和生态环境)，传统理论研究已较为深入，并逐步形成不同的学科：化学、化学工程和过程系统工程；③对于三个层次中介于各自的边界尺度之间的介尺度问题认识十分有限，而这分别对应于工艺创新、过程设备放大和系统集成阶段的瓶颈问题，成为现代物质科学和工程研发的焦点问题，也是取得进一步突破的关键。

3.3. 生命科学

生命体系也呈现典型的多层次、多尺度和介尺度结构。尽管不同层次研究的问题、内容与方法不同，但四个层次均具有多尺度特征：生物大分子层次包括氨基酸和核苷酸、二级结构和蛋白质、核酸等；细胞层次包括蛋白质等生物大分子、许多分子(包括生物大分子和其他分子)形成的超大分子机器或(亚)细胞器和细胞；器官层次则由细胞、组织和功能器官组成；生命体层次则由器官、功能系统(如消化系统、血液系统、神经系统)和完整生命体组成。对四个层次涉及的边界尺度，即基本单元分子、生物大分子、细胞、器官和生命体，传统理论研究已较为深入，并逐步形成不同的学科：分子生物学、细胞生物学、组织学和系统生物学。但对于四个层次中介于各自的边界尺度之间的介尺度问题，认识十分有限，分别对应非编码RNA、生物大分子动态结构、细胞器调控、组织和功能系统中的瓶颈问题，成为现代生物学和医学研发的焦点问题，久攻不破。

3.4. 社会科学

社会科学是学科的一大门类，涉及社会及其中的人际关系[9]，也表现出多层次属性，如家庭、城镇、国家等。每个层次上也包含多个尺度，并表现出介尺度复杂性。就是说，每个层次上的群体现象也是对应分支学科的最具挑战性的问题。在此不再详细评述。

3.5. 四类科学的共同属性

以上四类(见图1)仅是具有代表性且易于理解的科学技术研究的内容。事实上，还有很多内容，虽然非实物存在，但也表现为多层次、多尺度的特征。比如神经

和认知系统,再比如语言逻辑和结构,等等。尽管这些具体对象存在差别,但其共性的特征是明显的,即都包含了多层次的系统,每一层次又都表现为多尺度,即单元尺度、系统尺度及介于单元和系统之间的介尺度,而介尺度问题也是认识多尺度特征的瓶颈。

近年来的研究表明,多个层次的介尺度问题已成为实现各层次量化和对各层次进行关联的挑战性问题[6-8,10,11]。所有的介尺度问题尽管呈现多样性和复杂性,但其共同特征是它们可能受共同的原理支配。这些共同的特征包括非均匀性、动态、分相等。现代科学分支一般是以一个层次为研究对象,不同层次之间的集成融合仍十分困难。在一个层次(或一个学科)上,现代科学对其单元和系统尺度关注较多,而对介于单元和系统的介尺度问题关注则很少。故而,人们往往被迫采用平均化方法来处理介尺度非均匀结构。因而也产生了试图关联单元尺度和系统尺度的复杂性科学。然而,复杂性科学对层次性和每一层次的介尺度问题关注不够,没有认识到介尺度上缺失的科学原理,这也就是提出介尺度科学的根本原因[6-8,10,11]。

4. 实现技术体系与知识体系的融合

知识体系与技术体系可以融为一体。广义讲,所有应用技术领域的结构和逻辑所涉及的科学知识范畴都是相同的,区别只是用这些知识解决问题的表现方式不同而已,因而也呈现多层次、多尺度和介尺度的特征,可

与知识体系融为一体。

具体技术和应用领域的形成无一不是建立在前述各层次知识的基础之上,并在发展中为知识体系的形成提供从具体问题中归纳出的共性规律。科学与技术的界限越来越模糊正是这一属性的结果。

依据研究内容,我们可以大致把与社会经济相关的科技领域,如能源、材料、信息、地球与气候、生命与健康、农业、空间等(当然,可以有不同的归纳,但并不影响我们分析知识与技术领域的关系),归于多层次的知识体系。每个领域,在发展过程中都涉及上述多层次、多尺度的知识,只不过应用知识的对象有所差异而已。

然而由于认识的局限,长期以来,这些共同的基本规律的研究称为基础研究,而应用知识解决具体问题的研究称为应用研究。现在看来,这样的区分不利于各领域的交叉,也不利于知识体系的融合。可以相信,随着知识体系完整性的提升,这一区别将逐步淡化。

结合上述两节讨论的内容,考虑现有知识和自然界的多层次、多尺度属性,就形成了知识体系和应用领域之间的关系,也就是科学技术的布局,如图2所示。其中,“纬”(同心圆)为知识,涉及基本粒子、分子原子、材料、工程、地学、空间、天文、宇宙等层次(这里的“工程”层次比其他层次更为广泛,涉及各个领域);“经”(放射线)为技术,各领域横贯各个层次的知识;中心区域是工具、理论、方法及通用知识(如数学、力学、系统科学等)。如此,按图2的结构和逻辑组织、部署科研,可望事半功倍。当然图2只是一个粗略的构架,还需进一

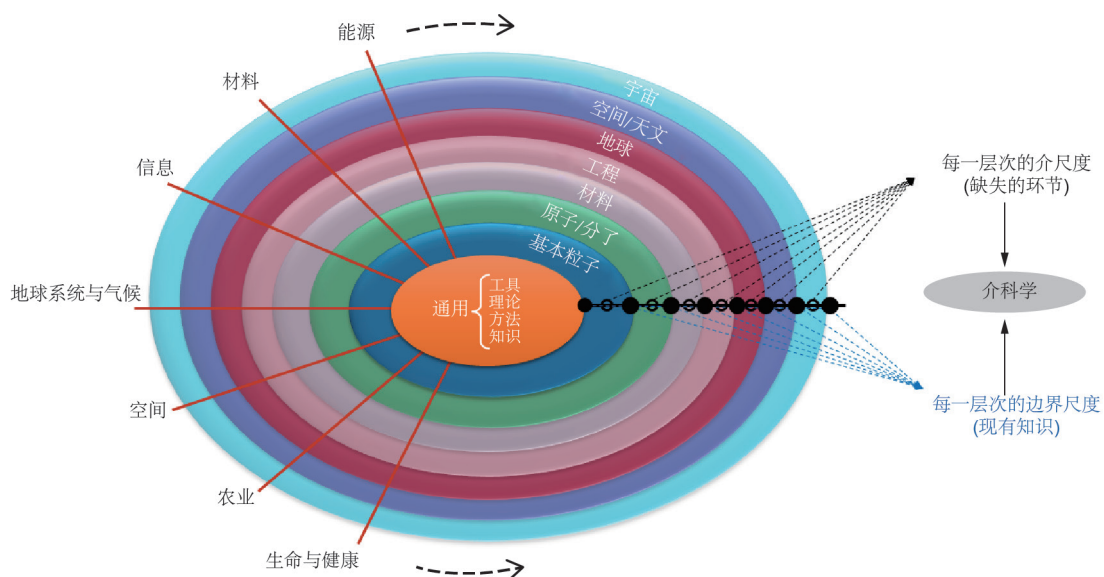


图2. 科学技术布局的概念模型。

步完善。事实上，不同人会有不同的组织方案，但图2的构架和逻辑不会有太大改变。

5. 填补现有知识体系缺少的环节

我们需要填补现有知识体系缺少的环节。各层次的介尺度问题是知识和技术体系共同缺失的环节，而不同层次的介尺度问题又可能具有共同的规律，受统一的原理支配，弥补这一原理将引发科学和技术整体的变革性进步。

在前面叙述的多层次知识和技术体系中，每个层次里，大家关注较多的是该层次的单元和系统(边界尺度)，研究众多单元如何构成系统并试图将单元行为与系统行为相关联。这种分层次的认识，就逐步导致各种分支学科的形成。然而人们逐步地认识到，各层次单元的行为相对较为简单，可运用已有知识进行描述；而多个单元之间相互作用，在很大程度上，决定了本层次系统(也是上一层次单元)的属性十分复杂，用传统的理论和方法无法解决。对介尺度问题的处理往往仅根据实验现象，或仅基于假设：统计力学假设分布函数，流体力学假设本构方程，天文学对无数星星、星系进行粗粒化处理等。对介尺度过程及其原理的忽视成为现代科学知识一个缺失的环节，也是科学技术进一步发展的严重障碍。比如，工程中的很多问题都还依赖于平均化处理，忽略介尺度结构；许多湍流计算、化工过程、气象、气候等工程应用软件采用的也是平均化经验参数处理。有的学科甚至虽然涉及的是介尺度，但还没有认识到介尺度的重要性。许多名义上的多尺度研究实际上主要关注的是单元尺度和系统尺度，对介尺度关注不够，忽略了介尺度上的重要支配原理。近年来，这种状况有所改观，但对介尺度的关注仍旧不足。至于不同层次的知识如何实现无缝融合，就更加困难。此外，更全面地看，处于两个相邻层次之间的边界尺度实际上受到这两个层次中的介尺度的影响，因而，只有充分认识了这两个介尺度，才能完全把握这个边界尺度。就是说，有关边界尺度的传统知识也需要在认识介尺度效应的基础上加以更新。

最近几年，逐步从化学工程研究发展产生的介尺度科学概念，触动并引起了大家对这一问题的重视，更为重要的是，认识到不同层次介尺度问题可能满足共同的物理原理(控制机制在竞争中的协调)和数学构架(多目标变分)[6,8]。一旦这一概念得以确认并发展成为一个跨学科的科学，现有知识缺失的环节将得以填补。这将

有力地推动各学科的进步和不同层次学科之间的融合。因此，介尺度科学是一个十分值得各学科领域共同关注的前沿方向，应当属于图2的中心区域。

在化工领域，我们已取得了一定的进展[6,7,10-12]：从早期对气-固流态化系统进行具体的介尺度建模[所谓能量最小多尺度(EMMS)模型]，逐步发展到提出主导机制在竞争中协调这一可能的普遍原理(EMMS原理)。我们认为，所有的介尺度问题或过程都主要受到至少两个机制的主导。为方便讨论，我们以两机制主导为例，即假定“机制A = 极值1”和“机制B = 极值2”共同控制着系统的行为。此时，A机制主导和B机制主导的状态以时空交替的方式并存[6]。因此，系统的变分判据在物理上可以表达为主导机制在竞争中的协调，在数学上表达为多目标变分问题[6-8]：

$$\text{Extremalizing} \begin{pmatrix} A(\mathbf{X}) \\ B(\mathbf{X}) \end{pmatrix}$$

服从守恒定律： $F_i(\mathbf{X}) = 0, i = 1, 2, \dots, m (m < n)$

其中，结构参量 $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 。

随着B的主导作用的相对增强(相对于A)，依次历经三个区域，如图3所示(示例了气-固流态化结果)，呈现出明显不同的结构。

(1) A机制主导：当“A = 极值1”起主导作用，而“B = 极值2”受到抑制，系统的稳态几乎完全由A控制，而机制B对系统的结构几乎没有作用。

(2) A-B竞争中协调：随着“机制B = 极值2”相对于“机制A = 极值1”主导作用的增强，往往存在一个临界点，此时A失去相对于B的绝对主导优势，必须与B协调。这导致A机制主导状态与B机制主导状态(此时的主导状态未必是完全主导状态，往往与两个机制的相对主导性有关[13]，如图3中部的三个结果所示)在时空上交替出现，造成了系统在介尺度上动态变化的复杂性。

(3) B机制主导：当B的主导作用达到另一个临界值时，A完全受到抑制，而B得以充分实现，系统完全由机制B控制。

虽然随研究领域和具体系统的不同，由机制相对主导性的改变所导致控制区域过渡的形式可能十分复杂、多样，但上述“三区域”特征可能是普遍存在的。正是由于介尺度现象不仅与操作区域有关，还与研究领域、层次有关，所以探索其共性原理十分困难[13]。

为验证EMMS原理的普遍性，拓展其适用范围，我们需要不同学科之间的交叉、融合，以寻找“竞争中协

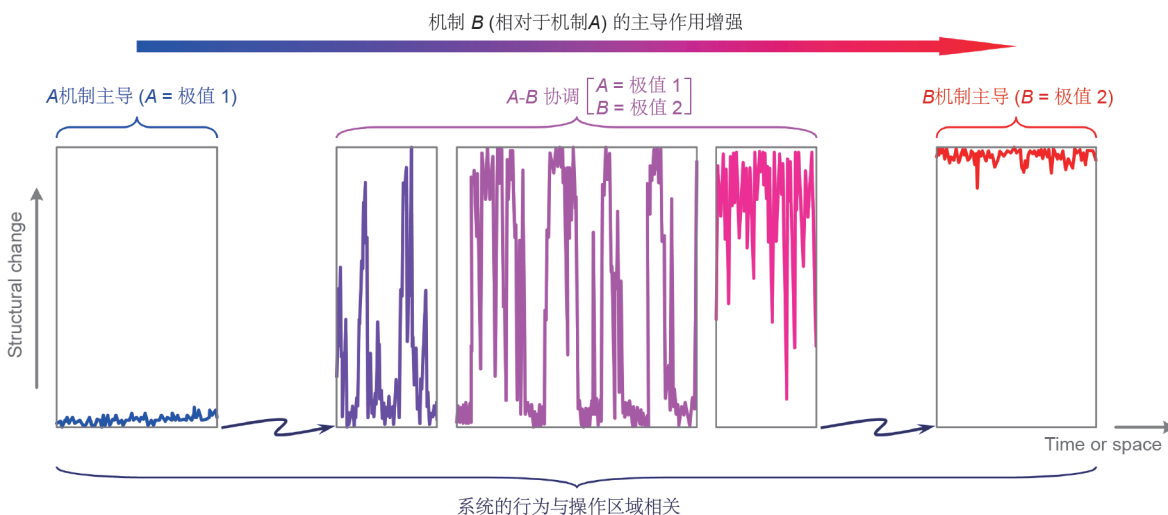


图3. 随机制B的主导作用增强(相对于机制A), 依次出现三个区域。

调”原理的更多证据。通过考察不同层次的系统，可以阐明层次的影响；通过改变操作条件，可以验证操作区域的影响。一旦取得进展，建立起介科学，我们有望解决不同领域的介尺度问题，推动不同领域在理论、计算、实验方面的革命性进步，如图4所示。

由于现实世界的复杂性和多样性总是出现在介尺度上，理论、实验、计算应当都聚焦于介尺度现象，如图4所示。首先，需要建立相关理论以表达介尺度上竞争中的协调原理，并通过多目标变分方法求解多尺度动态结构。随着来自具体问题的证据积累，介科学可能发展为一门交叉科学。其次，实验可以产生多尺度数据，利用介科学方法可以识别这些数据背后的主导机制，对这些数据进行介尺度建模，这也有望为介科学的普遍性提供依据。第三，计算也可以依据介科学来进行多尺度建模，通过实现逻辑、结构的相似性来开发软件和硬件[11]，实现所谓“虚拟现实”。如果介科学建立起来，它不仅可以为揭示现象背后的机制发挥重要作用，而且可以提升模型的预测能力、计算速度，促进虚拟现实的实现和新的科研模式的形成[14]。

6. 提炼介科学共性原理

只有通过研究具体介尺度问题，并注意其规律的普适性，才能获得介科学的共性原理。也就是，从特殊到一般的归纳法。当今我们所面临的多数挑战的实质源于介尺度复杂性。由于这种复杂性的多样性，直接推导出介尺度普遍理论可能不太现实。相反，我们可以通过研究具体问题，为揭示介科学共性原理积累充分的依据。

根据以上分析，结合当前各领域的前沿和难点，以下几个问题是典型的介尺度问题。应用介科学的概念(见图4)将加速解决这些问题，他们的突破也将带动相应学科和领域的重大进展，并反过来为介科学提供具体的范例，有力地促进介尺度科学的形成和发展。

(1) 光伏、光合、催化机理的突破：将推动可持续能源和材料技术的革命，为应对气候变化，实现可持续发展提供解决方案；

(2) 蛋白质三维动态结构和细胞内动态过程这两个层次的介尺度问题的认识：将推动生命和健康科学革命的发生；

(3) 湍流、气象、气候、工程、天文、宇宙复杂系统的认识：将极大地提升可持续发展的能力，增加人类认识自然、改造自然和防灾减灾的能力；

(4) 神经系统与智能科学：通过对神经系统多层次、多尺度信息传递和处理机理的认识，推动认知、脑、计算、智能科学的进步；

(5) 超导、储能(热、电)、量子材料、功能材料设计：将带来能源、信息、材料领域的重大突破；

(6) 材料设计、合成和规模制备：推动工业现代化，特别是制造业的发展；

(7) 超级计算、智能、大数据、虚拟现实：将极大地提升人类认识和改造自然的能力，开创科研模式的重大变革和生活生产方式的革命。

此外，在图2中更小和更大两个极端层次上的介尺度问题的突破，比如，量子力学的进一步深化，星系和超星系结构及其演化规律的进一步认识等，也将从根本上推动人们对物质世界认识的深入。

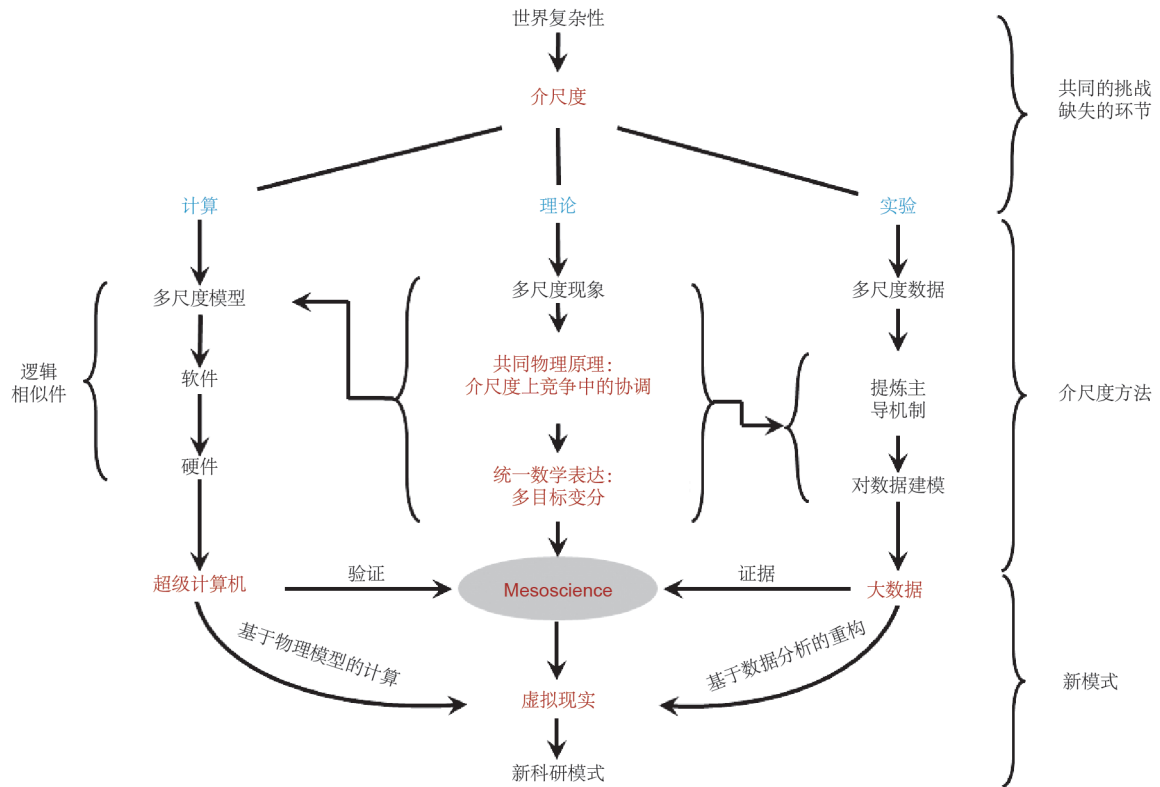


图4. 大数据、超级计算、介科学、虚拟现实与新科技模式的实现途径之间的关联。

基于介科学的概念解决这些不同领域的问题，可以自觉地推动学科交叉以三种方式(图5)发展。

(1) 跨学科方式1：跨越同一学科内处于不同层次的子学科。本文探讨的介科学概念已用于研究物质加工科学中不同层次(子学科)的介尺度问题，比如材料层次的界面与材料结构；反应器层次的气-固流态化系统的动态非均匀结构，气-液系统，湍流；生态环境层次的过程集成超结构[15]。

(2) 跨学科方式2：跨越不同学科。研究前面列出的挑战性问题的不同领域。比如，对于神经系统，不同层次介尺度上的动态变化可能遵循与复杂流动、关联电子系统、蛋白质结构等问题相同的规律，也就是，这些问题可能都与不同主导机制竞争中的协调原理相关。

(3) 跨学科方式3：跨越所有学科普遍存在的共同问题。可以进一步将学科交叉拓展到研究所有领域的共同问题，比如大数据、超级计算、虚拟现实，如图4所示。

如果不同学科和领域能够联合探讨上述三种学科交叉方式，我们将会看到截然不同的科学技术态势，即基于分享介尺度共性原理。该论断可能有些唐突，但至少值得重视和尝试。

以发展介科学为目标的竞争中的协调原理(EMMS, 见第5节)采用的是不同于热力学的思路。热力学期望采用单一的变分判据来确定系统的稳态。

事实上，只要涉及两个及以上的主导机制(第5节讨论的图3中的 $A-B$ 协调区域)，要直接推导出单一的变分判据就十分困难，因为不同的主导机制目标相左。这时需要考虑反映不同机制(可能对应于不同耗散过程)的不同变分判据在竞争中的协调。这也可能是非线性非平衡热力学中，对于耗散结构[16]选取统一的单一变分判据如此困难[17]、争议重重[18]的原因所在。

依据EMMS原理(其适应性已在许多系统中得到验证[6,8,11])，我们进一步推断，上面提到的这些争议是由于忽视了竞争中的协调原理，以及变分判据与操作区域有关这一规律(见第5节及图3)，当然这还需要更多的证据来核实。换句话说，最小耗散[19]与最大耗散[20]分别对应于不同的主导机制，二者共同控制着复杂系统的结构，这已在湍流[21,22]、气-固流态化[12,13]、反应-扩散系统[23]中得到了初步验证[13]。二者可以在同一个系统中起作用，但只限于 $A-B$ 协调区域(参见图3)，且以交替实现的方式，即在同一时刻、不同位置，或同一位置不同时刻分别呈现各自的极值趋势。而对于 A 机

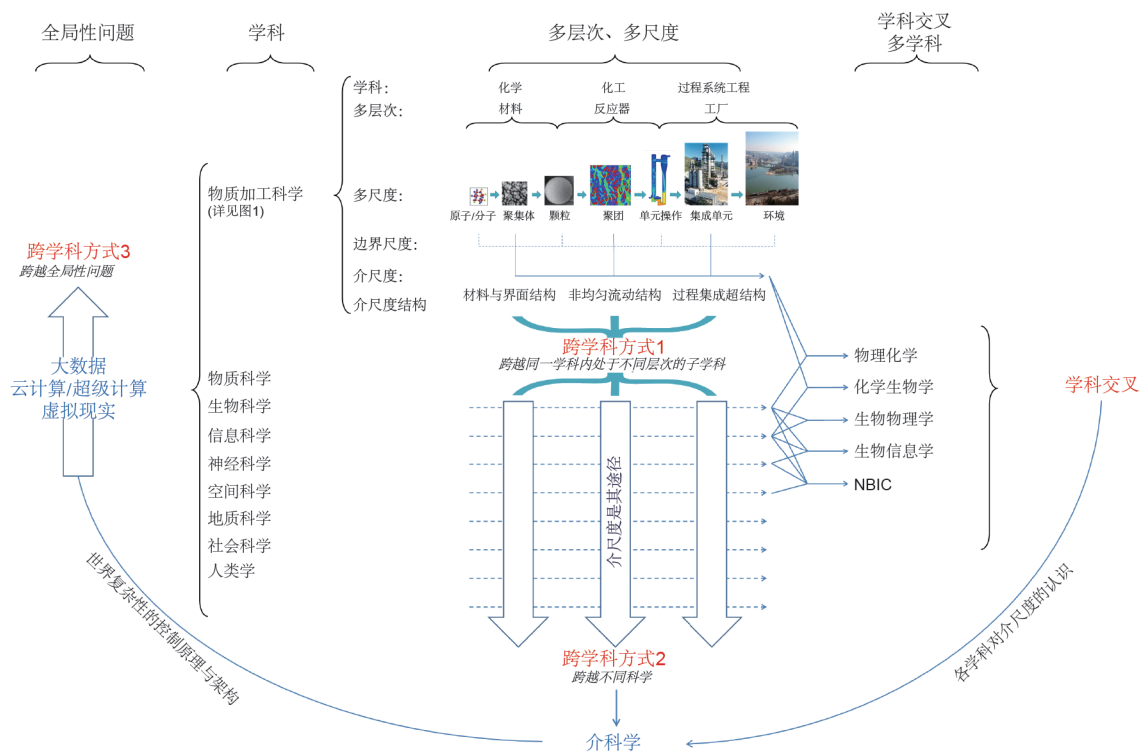


图5. 三种跨学科方式：跨越同一学科内处于不同层次的子学科，跨越不同学科，跨越所有学科普遍存在的共同问题[3](NBIC表示纳米技术、生物技术、信息技术和认知科学)。

制主导区域、 B 机制主导区域，单一的极值判据(最小耗散或最大耗散)可能适用，因为此时的耗散过程是由单极值主导的。

以目前掌握的证据，我们初步推断，考虑不同主导机制(对应于不同的变分判据)之间竞争中的协调，重视变分判据对操作区域的依赖性，可以平息上述争议。就是说，单一的总耗散(熵产生)变分判据可能不足以描述 A - B 协调区域。这一关键问题一直未受关注。介科学的任务之一就是解决这个问题[13]。另一个需要阐明的问题：EMMS原理的适用范围有多大？国家自然科学基金委员会已经启动了介科学研究计划[24,25]，资助不同领域的研究。该计划的宗旨是搜集更多的证据，从不同方面探讨竞争中协调的EMMS原理的普适性，比如原理涉及的基本问题，以及变分判据等。

7. 能源技术研究规划实例

目前，能源研究主要按能源的类型来组织，比如，核能、可再生能源、化石能源。将来，可以依据知识体系的逻辑，在全面考虑和学科交叉的基础上，设计一个能源研究综合体，以便揭示整个领域的关键技术和共性科学问题，用以组建团队、建设机构、构建平台。

能源是社会经济可持续发展的关键要素之一，但能源的使用又导致了气候变化这一全球性的挑战。当然，多数政府和工业研发部门都将能源研究作为主要任务。能源研究的效率与人类可持续发展的能力密切相关。合理地规划、组织研发活动对于提高研究效率、催生能源革命至关重要。然而，现有能源研究基本上没有考虑知识体系的逻辑、结构，因而，学科交叉难以实现。这是组织管理方面的局限。例如，通常不同的实验室分别研究核能、可再生能源、化石能源，以几乎相互隔绝的方式各自发展。更甚的是，往往基于完全不同的学科，忽略了其知识上的共性和互补性。随着我们对新科技革命、新科研模式、应对全球挑战的探讨，将来我们应当改变这种状况。

基于知识体系的结构和逻辑，图6为针对核能、可再生能源和化石能源的能源研究综合体提出的一个初步框架。换句话说，组织能源领域的研究需要遵循以下步骤：

(1) 组建专业团队：确定不同层次上各类能源(如核能、可再生能源、化石能源)最具挑战性的科学问题，以便组织专业的研究团队攻关这些与能源类型相关的问题。

(2) 创建学科交叉部门：分析同一层次上不同类型能源具体问题的相互关联，以确定共性科学问题，即组

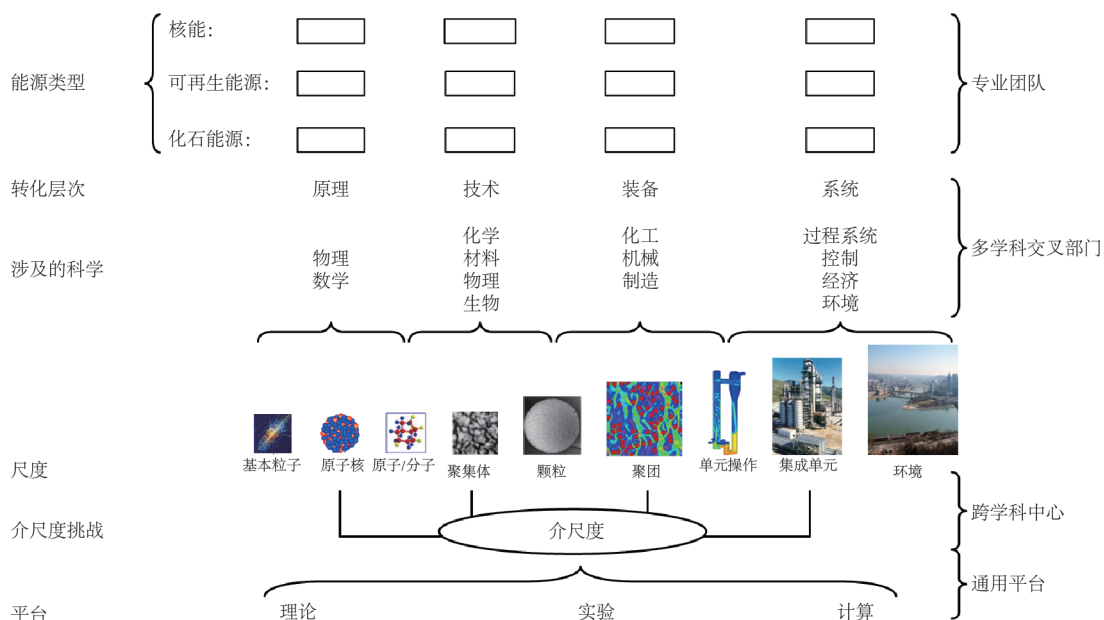


图6. 依据知识体系的结构与逻辑来规划能源研究综合体。

织同一层次不同能源的统一研究部门，也就是学科交叉部门。

(3) 创建跨学科中心：探索不同层次上的共同挑战，比如介尺度问题，需要创建一个研究能源领域共性问题的部门，即跨学科中心。

(4) 建立通用平台：为不同的团队和部门建立通用平台，注重其在理论、实验、计算方面的能力和水平。

对能源研究综合体的这种多级规划可望将重复研究降到最低，最大限度地加强不同团队、部门之间的互动，形成研发实力。当然，与此匹配的管理机制也是达到预期目标的关键。

8. 形成新的科研模式

我们需要引导新科研模式的形成。理清知识体系的结构与逻辑，将导致理论、方法、工具和思维方式的变革，再加上信息技术和数据科学的推动，未来的科研模式将发生根本性的变化。如何应对这一变化，也是实现科技跨越式发展的另一关键问题，需要科技界、政府、相关部门给予关注。

GH信息技术引发的变革：由于信息技术的发展和大数据的兴起，新的科研模式也正在孕育之中[1]。这一过程又伴随着科学的开放性和全球性的快速发展，比如开放获取(Open Access, OA)和各式各样的新的科研、出版、交流、共享模式，这些都将带来科研环境的革命性变革。然而，如何理性地引导这一变革，却是当前科

研管理方面面临的重大挑战。比如，OA当然有利于人类对新知识的共享，但是OA应当如何健康发展，而不至于知识过度“商品化”而影响知识的健康传播？究竟应当建立哪些制度来确保OA能够造福人类？又比如，信息技术当然对知识传播方式的变革十分重要，但如何保证知识的质量和有序？如何保证从海量数据中及时获取可靠的知识？再比如，大数据被认为可能导致科研模式的变革[1]，但大数据背后隐藏的科学原理是什么？这需要引起科技界的充分重视。诸如此类的问题很多，需要建立全球制度予以规范。就像技术发展过程中逐步建立起专利制度一样，当前，在新的科研范式形成过程中，需要哪些新的全球性制度值得我们深思，也需要全球共同行动。

(2) 研究方法、理论、技术的突破引发的变革：根据前述知识体系的结构和逻辑，以及所讨论的在介尺度上的缺失环节，研究方法、理论、工具也应有相应的变革，而这些变革也会是新的科研模式的重要特征，同样需要进行一些学科方面的重组。比如，介尺度结构往往呈现时空动态和高度非均匀的属性，并以有序和无序混合的形式为特征，这就对测量和实验技术提出了重大挑战，因为要求更高的时空分辨率。又比如蛋白质三维动态结构的测量、材料中电子的群体运动、神经系统中每一层次介尺度上的信号传导规律等，都将是未来科学研究的重要内容。与之相适应，研究方法也会发生根本性的变革，以解析、推导和决定论为主导的研究方法，正在并将继续逐步让出一部分空间给数值和图形模拟及不

确定性的科学方法，甚至虚拟现实将成为重要的研究手段和工具。一些传统的基于静态、线性、平衡的理论将会被动态、非线性、非平衡和以介尺度结构为核心的理论所替代；各层次上介尺度问题的突破将使得不同层次知识集成和融合成为可能，导致不同学科的贯通，研究机构、组织部门则应全面重组以适应知识体系的逻辑。这些将可能成为未来发展的趋势。

我们应当对这两方面的变革所引发的科研和思维模式的相应变化做好充分的准备，以理性地防止因思维惯性而带来的变革阻力，引导科学技术的健康快速发展。

9. 结语

推动时代必需的变革需要各方的共同努力。对知识体系的结构与逻辑的完整认识，以及科研环境的变化将导致新的科技布局和新的科研模式的逐步形成，这将是21世纪科学技术的特征之一。对这一进程的推动，需要各界的共同努力，否则由于我们的思维惯性，可能导致这一过程相当漫长。本文的目的就在于提醒全球各界，推动这一进程需要各学科的共同努力，更需要政府坚定的支持。学科界限的打破并逐步融合，新思想的出现并得到及时支持，都需要学术界采取一种开放的心态，也需要科技界、政府、所有国际科学组织的积极推动。各方对这些变革的态度将决定一场新的科技革命能否到来、新的科研模式能否形成，而这些对于开放的全球性科学至关重要。这里的“开放”不仅指对知识的获取，也指思维方式；“全球性”不仅指空间上，也指不同学科的交叉，作为一个整体！随着我们对可能的共性原理认识的增进，自然科学、工程科学、人文科学、社会科学将会沿着介尺度这一共同道路，在一定程度上达到统一。各方面应对此有充分的认识。只有这样，人类才能更有效地应对全球性的挑战。

此外，这些变化必然引发各个国家创新体系、教育体系和科研管理模式的变化，各国政府均应主动地去适应这些变化，对国家创新体系做出必要的调整，对科技队伍的规模和结构进行优化。在全球层面，国际科学组织应当考虑各国创新体系之间的关系，甚至考虑如何在“开放和全球性科学”的背景下促进全球创新体系的建立，至少是各国之间的合作，这样才能有效提升创新体系的效率和能力，并在科研投入增加有限的背景下，确保科学技术仍能高速发展。这可能比要求投入和追求回报更为重要。

最后，笔者想强调的是，我们正处于快速变革的时代，适应这些变革的能力和灵活性对于加速科技进步、应对全球挑战至关重要。有能力、有责任发出“全球声音”的科技界、工业界、政府部门，尤其是国际组织，应当首先推动这种模式变革。本文观点仅为以一孔之见，只希望能引起讨论。

致谢

笔者感谢EMMS团队中各位同事的长期合作，尤其是早期对EMMS模型的贡献及如今在介科学方面的努力。对Ying Hu教授、Xiaoye Cao教授、Jiaofeng Pan教授能够阅读文章的初稿并提出宝贵建议表示诚挚谢意。也诚挚感谢Zhongxian Zhao教授、Zhizhen Wang教授、Jianzhong Xu教授、Yuntai Chen教授、Wei Li教授对文稿的有益交流和讨论。还要特别感谢Zhenyu Wang、Yan Zhuang、Kai Feng、Wenlai Huang、Xiaowei Wang、Jian Wang等同事在英文、插图和文字加工方面的帮助。感谢Angela Welch女士对英文原稿的润色。此外，感谢国家自然科学基金委员会对介科学项目“多相反应系统中的介尺度机制及调控”(91334000)的资助。

(翻译：黄文来)

References

- [1] Hey T, Tansley S, Tolle K, editors. *The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery*. Redmond: Microsoft Research; 2009.
- [2] United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization, Division of Philosophy and Ethics. *Transdisciplinarity: stimulating synergies, integrating knowledge*. Paris: United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization; 1998.
- [3] Li J. Mesoscales: the path to transdisciplinarity. *Chem Eng J* 2015;277:112–5.
- [4] Nicolescu B, editor. *Transdisciplinarity: theory and practice*. New York: Hampton Press; 2008.
- [5] Liu Z. *Modern disciplinary sciences*. Hangzhou: Zhejiang Education Press; 1998. Chinese.
- [6] Li J, Ge W, Wang W, Yang N, Liu X, Wang L, et al. *From multiscale modeling to meso-science: a chemical engineering perspective*. Berlin: Springer; 2013.
- [7] Li J, Ge W, Kwauk M. Meso-scale phenomena from compromise—a common challenge, not only for chemical engineering. 2009. arXiv:0912.5407.
- [8] Li J. Approaching virtual process engineering with exploring mesoscience. *Chem Eng J* 2015;278:541–55.
- [9] Social science [Internet]. San Francisco: Wikimedia Foundation, Inc. [cited 2016 Jun 21]. Available from: https://en.wikipedia.org/wiki/social_science.
- [10] Li J, Huang W. Towards mesoscience: the principle of compromise in competition. Berlin: Springer; 2014.
- [11] Ge W, Wang W, Yang N, Li J, Kwauk M, Chen F, et al. Meso-scale oriented simulation towards virtual process engineering (VPE)—The EMMS Paradigm. *Chem Eng Sci* 2011;66(19):4426–58.
- [12] Li J, Zhang J, Ge W, Liu X. Multi-scale methodology for complex systems. *Chem Eng Sci* 2004;59(8–9):1687–700.
- [13] Li J, Ge W, Wang W, Yang N, Wang J, Huang W. Focusing on mesoscales: from the energy-minimization multiscale model to mesoscience. *Curr Opin Chem Eng* 2016;13:10–23.
- [14] Guo L, Li Z, Li J, Liu X, Lu B, Meng F, et al. Harnessing the power of virtual reality. *Chem Eng Prog* 2012;108(7):28–33.
- [15] Floudas CA, Niziolek AM, Onel O, Matthews LR. Multi-scale systems engineer-

- ing for energy and the environment: challenges and opportunities. *AIChE J* 2016;62(3):602–23.
- [16] Gage DH, Schiffer M, Kline SJ, Reynolds WC. The non-existence of a general thermokinetic variational principle. In: Donnelly RJ, Herman R, Prigogine I, editors *Non-equilibrium thermodynamics variational techniques and stability*. Chicago: University of Chicago press; 1966. p. 283–6.
- [17] Nicolis G, Prigogine I. *Self-organization in nonequilibrium systems: from dissipative structures to order through fluctuations*. New York: Wiley; 1977.
- [18] Martyushev LM. Entropy and entropy production: old misconceptions and new breakthroughs. *Entropy (Basel)* 2013;15(4):1152–70.
- [19] Prigogine I. *Introduction to thermodynamics of irreversible processes*. 3rd ed. New York: John Wiley & Sons Ltd.; 1968.
- [20] Ziegler H. *An introduction to thermomechanics*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company; 1983.
- [21] Li J, Zhang Z, Ge W, Sun Q, Yuan J. A simple variational criterion for turbulent flow in pipe. *Chem Eng Sci* 1999;54(8):1151–54.
- [22] Wang L, Qiu X, Zhang L, Li J. Turbulence originating from the compromise-in-competition between viscosity and inertia. *Chem Eng J* 2016;300:83–97.
- [23] Huang W, Li J. Compromise between minimization and maximization of entropy production in reversible Gray-Scott model. *Chem Eng Sci* 2016. In press. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2016.08.022>.
- [24] NSFC initiates the major research plan on meso-science [Internet]. Beijing: Bureau of International Cooperation, NSFC; c2007 [updated 2012 Sep 13; cited 2016 Jun 21]. Available from: <http://www.nsf.gov.cn/publish/porta1/tab158/info39251.htm>.
- [25] Li J, Hu Y, Yuan Q. Mesoscience: exploring old problems from a new angle. *Scientia Sinica (Chimica)* 2014;44(3):277–81. Chinese.