

进展评述

流变学范式的进化和当前的挑战*

许元泽

(厦门大学化学化工学院 厦门 361005)

摘要 流变学作为数理化大跨度交叉学科,其发展中理论范式的进化起着主导作用。从以简单流体为标志的宏观本构理论,到深入多尺度软物质物理本质的复杂流体范式,成功中面临非线性和非平衡带来复杂性的全面挑战,有待科学前沿的突破。

关键词 范式 简单流体 复杂流体 复杂性

Paradigm Evolution & Challenge in Rheology

Xu Yuanze

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract As a crossing discipline of science, the evolution of theoretical paradigm of rheology plays key role. In spite of the successes from constitutive theory of simple fluids to the complex fluid paradigm, considering the multiscale nature of soft matter, comprehensive challenges relating to complexity of non-linear and non-equilibrium nature exist as science frontier topics to overcome.

Keywords Paradigm, Simple fluid, Complex fluid, Complexity

在中国化学会八十周年庆的日子里,我们流变学科很荣幸作为分会参加年会。相对于其他学科,流变学是化学学科中的年轻成员,我国流变学学会从发起到现在只有近 30 年历史。不过流变学属于化学化工和数理力学交叉跨度最大之列。本文偏重从个人经历、学术思路的演化出发,以偏概全,探讨学科发展的宏观战略,温故知新,面对今后的挑战。

1 简单流体范式

1.1 学科与范式

流变学如何成为一门学科? 学科(discipline)是知识的分门别类,但学科不仅是对象,不能说只要有流变性物质就一定有流变学。学科同时又是指创造专门知识的方法(approach)。学科是活的东西,经历了萌生、形成、成长、成熟的过程,学科的发展和命运也取决于人们的主观努力。谈到一个学科发展思路的主线索,会提及“范式(paradigm)”的概念^[1],指的是科学概念假设、理论方法和应用的系统集合,形成一个特定的范式。库恩曾提出,学科发展不是单纯的知识的量的积累,科学发展是通过科学范式的转换实现的变革过程。也就是说,原有理论方法在事实面前遇到不可调和的矛盾,就会呼唤新的理论来扬弃旧的,科学也随之前进一大步。范式转变也可以通过学科之间的交叉,从邻近的学科得到启发,产生新的知识生长点或新学科来实现。

举一个大范畴的范式为例。在古代东西两大文明之中,西方采用的是希腊、犹太文明的范式,中国独立产生了一种道儒结合的范式,这两种范式是有差别的。西方受一神教神学影响,个人理性的外化为

许元泽 男 70 岁 厦门大学教授,复旦大学资深教授,前中国化学会流变学专业委员会主任委员。从事高分子和多相复杂流体研究。E-mail: yuanzexu@xmu.edu.cn

* 本文系作者应本刊编辑部之邀据他在 2012 年 4 月于成都举行的中国化学会第 28 届学术年会流变学分会上的报告整理
2012-08-20 收稿 2012-10-31 接受

上帝,追求一个一元的世界的统一性和简单性,与此相关,逻辑的、分析的、实证的思想方法在西方比较发达。在西方范式的传统中诞生了现代的精确科学。中国在战国、秦汉时期就发展了道儒结合的范式,天人合一的人文主义传统,直面自然的复杂性而混于一,也就是“道”,较重归纳、辨证和类比的方法。理论概括而空玄,技艺灵巧而实用。现在我们的自然科学教育基本是一种全盘西化的模式,东方智慧退隐,仅在例如医学养身方面偶有表现。可见大的范式也会影响具体的学科的发展,例如在我国流变学学科的发展过程中化学材料科学和数理科学交叉之中。

1.2 简单流体本构理论

流变学从经典流体与固体力学萌生可以回溯到 19 世纪 Maxwell(1868)粘弹性方程和 Boltzmann(1876)变形叠加原理的工作。20 世纪上叶,人们发现许多重要工程物质例如沥青、橡塑、胶体等既非虎克固体又非牛顿流体,即使同一物质在不同时间尺度内表现出从固体到液体的变化,于是掀起了研究复杂物质流变特性的热潮。面对看似无限的测量可能性和纷繁的结果,基于连续介质力学,将实际流动现象分为简单流动和复杂流动。简单流动指的是流动方向和梯度方向是明确不变的,如剪切和拉伸,这样就可以直接测量动力学和运动学分量的关系,即物料函数。简单流动按照形变方式和形变历史的组合共有 30 余种物料函数,例如,常见实验中的小振幅振动模量和稳态剪切粘度或拉伸粘度等。其测定原理与技术构成流变测量学^[2]。如果流动方向和梯度方向分不开就是复杂流动。例如,我们流变学会的会徽所采用的次级流动的旋球流,所有的牛顿流体都是沿赤道离心向外的漩涡,我们图案的向心漩涡只有靠粘弹流体复杂流动中的法向应力效应才能实现。当初设计这样的会徽就含有希望流变学会成员向心团结的初衷。一个基本问题是,物质的简单流动中不同物料函数之间是否关联,能否从简单流动的物料函数来预测复杂流动中的行为?若出自同一结构本体的不同流动没有关联,流变学将很令人失望。所以人们对于找到一个可以统一完整地描述物料流变性的“本构”方程有很高的期望。流变物理现象是三维本质,因此这样的方程应是三维张量形式的,物质的特性充分体现在方程参数之中。就像牛顿流体,各种化学物质的结构都体现在一个粘度量中。此方程结合宏观平衡方程,就可以完整求解宏观输运过程。



寻找众多复杂流变物质的普适流变学方程,是一个很长的推理与归纳的摸索过程。20 世纪 50 年代发展起来的连续介质力学方法起主导作用。人们抱着极大的热情创立一种如象几何学的公理演绎式结构,从几个公理式假设出发,构筑普适的本构方程。其创立的简单流体范式现已达到成熟的程度^[3]。简单流体是有确切定义的一大类流体的总称,可定义为符合连续性、决定性和客观性的物质^[4a]。这三点看似笼统,但都有其具体内容。正因为有连续性,所以不管是应力、应变、应变速率,都可以用三维空间的张量来描述,而且可以采用微积分的极限数学描述。决定性指的是空间某处现在发生的应力是由该处一系列的应变历史所决定的,因此可以用记忆泛函来描述,即时间依赖的应变函数的函数来描述,这是因果性的具体化。客观性指的是坐标变换的不变性,也就是说,物理现象不依赖于观察系是静止的还是运动的,结果应该是一样的。这就需要对形变张量提出一系列的限制要求,非客观的量将不能作为线性独立项。这样导出了三维的本构方程:

$$T = \int_{t'=-\infty}^t F[G(t-t_0)]$$

其中,应力 T 是应变历史张量 G 的泛函 F 。符合此规律的流体称为简单流体。这样的方程还有待具体化,常用积分与微分展开式。依据这种思维逻辑的最早做法就是从牛顿流体开始,将粘弹性或记忆特性作微扰展开,力学上称为摄动法。例如二阶流体的锥形复杂流动,即使在较快流速下,求解粘弹性和惯性同时存在的运动方程,可以预测较大速率范围锥形收敛流动的复杂流场^[4b]。这种求解复杂流动的方法,不适用于强粘弹性的场合。

线性粘弹性的理论^[5]是一个十分成功的例子。在小剪切的线性范围,简单流体方程简化为 Boltzmann 叠加原理,

$$\tau = \int_{-\infty}^t G(t-t') \dot{\gamma}(t') dt'$$

其中, τ 为切应力, $G(t-t')$ 是松弛模量函数, $\dot{\gamma}(t')$ 为剪切速率。由此出发, 可以导出所有应变历史的物料函数, 不管是动态振动, 还是瞬态应力松弛或蠕变, 都是相通的, 原则上, 可以从反映物质本质的松弛时间谱导出所有的物料函数。这给人们极大鼓舞, 也就是说, 可以找到联系各种流变性质的方程, 其中松弛时间谱包含了所有物料结构信息。但是在在大形变中这一切都成问题了。于是大家寻找原因, 一个可能原因是在大形变的描述。大家知道胡克定律不适用于橡胶弹性这类的大形变, 橡胶弹性的应力是与 Finger 张量成正比的。所以这种橡胶弹性的非线性是源于应变量的不恰当选择, 而非什么神秘的结构变化。在分子稀溶液的 Rouse-Zimm 珠簧模型和高分子熔体瞬态网络模型中, 也得到了 Finger 张量描述的方程^[4]。上述这些都是仿射模型, 也就是微观和宏观形变几何相似。可是我们知道, 流体在大流动的时候, 里面所有的物质元都发生位移和一定程度的形变, 所以物质坐标和观察坐标系之间可能存在一种复杂的关系。形象地说, 在静止观察者坐标系中, 看转盘上两个人拉一个弹簧粘壶组合 (Maxwell 模型) 好像很复杂, 因为有拽有转。但在随流转盘坐标中来看却很简单, 应该符合 Maxwell 方程。Oldroyd 等发展了随流坐标方法, 确定了坐标之间的变换关系, 这是简单流体客观性原理的发展。不过一个宏观介质的物理观测坐标系和一个微观的运动并发生形变的物体坐标之间的转换并非一种很单一的关系, 取决于随流的程度不同, 坐标转换具有各种可能性。于是 Maxwell 定律中的微分项可以用各种各样的导数, 包括物质导数、共转导数、共形变导数, 或者更为普遍的非仿射导数来代替。可以用这样一种 Maxwell 方程来概括,

$$T + \tau \overset{\square}{J} = 2\eta D$$

其中, τ 为松弛时间,

$$\overset{\square}{J} = \overset{\nabla}{J} + \lambda(f_c(J, D) + f_d(J))$$

$$\overset{\nabla}{J} = \overset{\square}{J} - L \cdot J - J \cdot L^T$$

方程中有 f_c, f_d 这样的参数, 当参数选用不同的值的时候, 得到不同的方程, 这些方程都冠以人名: Johnson and Segalman, White and Metzner, Larson, Giesekus, Leonov 以及 PTT 模型等等^[6a]。这些模型的设计各有一定根据, 有的认为坐标的滑移应该和应力有关, 有的说该和应变或和应变速率有关, 或再加上修正等, 其合理性有待于同实验的比较。随动坐标系中的方程也可以从 Jeffery 模型出发, 例如得到 Oldroyd 8 参数模型。一个比较成功的积分形式模型是 K-BKZ 模型, 其应变描述是仿射 (Finger) 和反仿射 (Cauchy-Green) 形变张量的组合。

非线性本构方程应用于实际物质大形变流动问题在联系各种物料函数和描述加工复杂流动方面取得大量成果, 但也遇见一系列困难, 方程的预测符合某种流动的物料函数, 却不能适合另一些流变结果, 尤其在剪切和拉伸形变之间, 在参数选择中顾此失彼; 参数和物质结构之间缺乏联系。有些困难可能反映方法中的本质困难, 即应力随流时间导数和空间坐标的相关性缺乏选择的依据。到底是应力依赖、应变依赖还是应变速率依赖、拉伸还是剪切应变方式依赖? 这就发展出以不同类型的方程适合不同对象和流动类型的经验判断方法。应变速率依赖的, 即非牛顿性为主的方程, 也包括广义牛顿流体, 主要用于以稳态剪切流动为主的问题。应变依赖的方程用于粘弹性显著的近固态、非稳态场合。这些模型在实际应用中往往难以做到定量符合实验, 往往还与对松弛过程的谱特性缺乏考虑有关。松弛谱要从线性粘弹性得到, 该谱能否适用于强流动非线性场合还不肯定, 例如 Wagner 模型, 要乘一个经验的应变阻尼函数。总之, 简单流体的宏观范式发展出了一系列本构方程, 在实际应用中再考虑针对性和简单性的折衷, 就可以用于大量复杂流体实际体系^[6b]。计算机技术和数值模拟方法的飞跃发展使得解决工程问题的效率大为提高, 流变模型被软件化用于各种流动。例如许多流变测量仪公司配备实验数据与本构方程拟合的软件, 大大方便了不具备计算能力的用户。在加工流动方面, Fluent 公司的 Polyflow 和 Winter 教授的更多用于材料表征的 Rheology Platform 可以联系各种理论和实验, 进行预测^[7]。这使流变方程在分子加工和材料表征方面得到了广泛应用。

客观评价方法论的演变, 从公理式的假设演绎下来的统一的理论结构, 变成主要靠各种实验物料函

数来归纳的经验方法,而且至今本构方程对实际体系的应用不尽人意,对于实际材料非线性流变函数的相互关系和复杂流动的整体预测能力较差以及模型参数与物料参数的关系不清的缺点,应该发人深省。那么问题在什么地方呢?是不是因为我们偏唯象的宏观方法还需要找到更好的数学形式?这方面的努力已十分深入,但效果不尽如人意^[6c, 6d]。是否应从根本上挑战简单流体范式的基石,即宏观决定论?如果宏观因果关系是缺失的,也就是说规律不能在宏观尺度内完满,在时空当中必须与更微观尺度行为耦合?这些问题难以在宏观层面解决,必须深入微观物理机制的研究。实际应用也要求深入物料结构本质,联系流变量和微观结构参数,而且物质科学和材料工艺技术向微观发展,微流变行为的研究本身也有直接技术意义,日益受到重视。因此深入流体内在物理本质的复杂性,从各方面来看都成为流变学进一步发展的新阶段。

2 复杂流体范式

结构流变学方法是认识从现象的描述向物理本质发展的必需。其发展几乎与连续力学同步。柔性长链高分子平衡统计物理学启发了 20 世纪 50 年代动力学模型的发展。Rouse-Zimm 将高分子链模型为“珠簧链”,高分子链段就是高斯弹簧,承受近邻弹簧作用、介质粘滞阻力和布朗运动,以及非相邻链段通过介质的扰动-流体力学相互作用来模拟溶液中的远程相互作用。该模型导出了本构方程,在近线性范围取得全面定量预测高分子稀溶液流变性质的巨大成功^[4]。对高分子浓体系,关键概念是“缠结”。若把缠结简化为瞬时交联网,得到网络模型,其本构方程竟然与稀溶液形式一致,所差仅在松弛时间谱。高分子微结构动力学模型最后得到的结论和宏观的流变方程一致,这是一个了不起的结果。支持了宏观本构方程的方法和宏观决定论的思想。也就是说,宏观的流变现象可在宏观范围内决定,其余的都应存在于宏观的模型参数或者微观诠释中,不过在结构模型中,参数不再盲目,有了坚实的物理基础。

20 世纪 80 年代以来,借助凝聚态物理的兴起,研究广泛复杂流体出现了从唯象方法转向多尺度物理本质的探究方法的热潮。凝聚态物理的突破在于使各种复杂流体从宏观到微观的物质层次纷繁现象有了普适规律,其中软物质物理进展尤其是无序态的规律最为引人注目^[8, 9]。在无序态中结构形态的自相似、空间上的分形几何特征、数学上的普适标度律、转变上的逾渗规律等,都是内在统一的,具有普适性。de Gennes 说,软物质和复杂流体是同样的对象,不同的称呼。软物质物理规律是研究复杂流体重要的物理基础,尤其是其动力学部分,不过复杂流体流变学还要进一步得到流变力学量,它是当代流变学主要研究的对象,其研究方法可概称为复杂流体范式。其特点是以多尺度的软物质物理的视野和方法来研究复杂物质的流变现象。

这里有必要强调多尺度的时空观。可以说,正是多层次的松弛运动造就丰富的流变现象。

表 1 复杂流体多尺度时空中的主要相互作用和理论方法

Tab. 1 Multi-scale interactions and theoretical approaches for complex fluids

空间尺度	时间尺度	对象举例	相互作用	研究方法举例
宏观 > mm	min, s	两相流	重力	流体力学
细观 0.1 mm	ms	悬浮体	表面张力, 粘弹性	界面动力学
微观 μm	μs	胶体, 高分子	布朗运动, 热涨落	微观动力学
纳米 nm	ns	大分子链段		分子动力学
原子 0.1 nm	ns ~ ps	原子分子	电子云与核	量子力学

这里特别强调纳米尺度,它是流变学的下限,这一至今充满未知的尺度是一个承上启下的关键尺度。纳米以下是原子电子量子力学的可逆世界,其上则是大量粒子包含耗散的随机过程,充满涨落熵变相变的世界,有丰富的凝聚态物理现象,产生了无序态的分形、逾渗、相变、标度等规律。这些性质不能简单还原为原子分子的性质。这种尺度分界有一个深刻的本质。物质世界的这种层次性被称作层展性(emergence)。层展性一定程度上是一个哲学概念,世界的统一性和层展性是互补的。层展的思想认为:在宽时空中的物质世界分化为一系列的层次,源于下层更“基本”粒子的复杂聚集体的行为并不能还原为粒子的性质,而展现了全新的性质。在纳米尺度出现层展性的判据,就看新相互作用规律的突现

及其不可还原性。在此尺度上的一个典型例子是高分子的链段。在分子物理学中,不管是热力学、动力学,还是相态转变,链段尺度都是关键。链段既是一种理论处理的共同方法,它也有其物理的实在性的基础。链段的具体尺度,按不同热力学动力学表现,要与实验对照而推算,都在几纳米左右。反映在高频热运动中接近最可几态而存在的相较更大尺度松弛运动的某种共同的相对稳定结构。不管是柔性高分子链的库恩长度和最小高斯链段,还是稀溶液中的珠簧或高分子浓溶液模型的蠕动管概念,都在纳米尺度。可以说,在链段尺度以下我们只有五光十色的链状分子,在链段以上才有统一的高分子的物理学规律,不受具体化学结构左右。

多尺度软物质物理的观念可以使很多复杂流体的物理图像变得简单,许多科学和技术问题迎刃而解。在研究高分子缠结、支化、凝胶化、共混与分相、相转变、微流、扩散等复杂流体现象等方面都取得了长足的进展^[6,8,10,11]。以下举几个例子来解释其方法和面临的挑战。

由于 de Gennes^[8a]和 Edwards 等^[8b]等引入软物质物理,缠结网动力学有了革命性的进展,原来网络模型中致命的弱点(网点的寿命和仿射性)为管式蠕动牵制网所代替,得到了 K-BKZ 形式的本构方程,并与高分子结构相联系。这一微观-宏观的统一,表明在蠕动模型范围内简单流体的本构框架依然有效。原先在唯象本构方程中拉伸流和剪切流缺乏相关性一直是一个很大难题,各种高分子体系的数据十分分散,一直解决不了。现在通过支化大分子的分子蠕动模型知道其蠕动管与线型链有本质不同,使问题得到了一定程度的解释^[12]。但剪切类弱运动和拉伸类强流动的物料函数的普遍相关性规律还是不清,似乎它们处于不同的结构状态。

又如,把凝胶化看作逾渗临界过程,在凝胶化临界附近动态模量遵守标度律,其幂指数与交联网分形指数相关。这一规律用于广泛交联体系的流变表征。再如,多组分共混物在温度或聚合反应的影响下发生相分离,是一个二级相变过程,其分相形态结构自组装成多种斑图(pattern),斑图动力学可以由近平衡态相变热力学控制。对于热固树脂单体与热塑高分子的共混物的反应分相动力学的研究,可进行斑图控制以得到优化增韧结构^[13,14]。这样的例子不胜枚举。现在流变学的新的热潮是在微观流变学和软物质力学方面^[11,12]。一方面是与微结构可控高性能材料、生物技术、纳米技术有关对象的重大或潜在的技术意义,另一方面,实验技术例如微成像技术、微区激光技术、核磁成像等的发展和各种尺度下的微结构数学模拟,大大方便了直接研究微流变学,而不一定借助宏观流变方程。所谓“软物质力学”,目前多是以力学的精确性研究软物质的各尺度结构的动力学行为^[11]。

3 非线性、非平衡和非均匀的挑战

应当指出,复杂流体理论取得巨大成功的这些例子都是在近线性的范围内。不管是高分子稀溶液或浓溶液以至熔体的结构模型,所遇到的共同的困难是在大形变和高应变速率范围,即使是一个剪切变稀的粘度也难以预测。例如在稀溶液珠簧链模型中考虑非仿射形变,但增加了唯象参数^[4]。其实非线性行为也是有规律的。例如 50 多年前就知道的 Cox-Merz 经验法则,即稳切粘度等于同速率(圆频率)下的动态复数粘度值,对高分子溶液熔体及许多多相体系都适用,但分子理论中导不出来。这时就要从根本上找原因。现有的结构流变学理论往往基于平衡态统计力学和热力学。这是否决定了其动力学局限于近线性、近平衡态以及扩散控制的范围?分析这一问题要有多尺度物理的视野。由于松弛就是从非平衡态到平衡态。线性行为就是从近平衡态到平衡态。大形变和高应变速率使体系远离平衡态。但是,因为小尺寸平衡快,例如,高分子链段的松弛时间比整个分子小几个数量级,可以期待整体不平衡时链段或蠕动管还是接近统计平衡状态。因此在现有模型基础上改进还有一定余地。在管式模型中考虑流动带来蠕动管的取向和解束缚(CCR)以解释剪切变稀是比较成功的例子^[12]。还有其他改进管式模型的努力,但往往物理基础不强,理论与实验的符合改进了,公式越来越繁,加入参数越来越多,类似唯象理论当年的情况。看来,需要更深入非平衡的问题。

既然流变的过程是一个包含能量耗散的过程,必须与热力学相容,按照熵增加原理,是不可逆的。小形变,过程一般用平衡可逆热力学和统计力学处理,是权宜之计。例如 Rouse-Zimm 模型中用平衡统计,耗散用粘度,不可逆表现在时间中。

不可逆热力学假定线性热力学(热流与热力成线性)、局域平衡假设(Onsager 倒易关系)、Prigogine 最小熵产生原理,对描述近平衡态是更适宜的,流变学本构方程应该经得起不可逆热力学的检验。利用不可逆热力学方法,结合 Hamilton 力学在能量层面的可加性,对复杂流体本构方程的构筑另辟蹊径^[15]。例如对于高分子共混物熔体,模型化为粘弹性乳液,通过分别求得各相和界面及液滴动力学对内能和耗散能的贡献,进行加和,得到本构方程。与介观液滴拉伸实验^[16]直接对照的结果发现,在弱粘弹性范围理论和实验符合甚佳,但在高粘弹性的情况下偏差甚大。可能原因是对粘弹性的非线性考虑不足,此外,近平衡态的不可逆热力学采用一阶偏微分的摄动形式,可能不足以用来描述远离平衡态的粘弹性。

针对更大大形变和非平衡态目前正在发展的是非线性非平衡热力学,其中尚受限于局域平衡假设以定义热力学函数,时间与涨落成为基本不可逆性自然推论。远离平衡态的热力学显然尚在艰难起步,如前面所提,利用多尺度中允许的平衡近似,还是一个捷径^[17]。

与非平衡态孪生的是非均匀性(inhomogeneity)。由于过程来得快,来不及松弛均匀化,所以体系内应力、应变在时空区域内会发生非均匀状态,静下来以后往往又恢复。在非线性范围非均匀性的实验观察在悬浮体系和高分子溶液及熔体中多有发现^[18],例如剪切带和拥堵(jamming)区等。尺寸越大的体系越易发生,也就是越远离平衡态,越不稳定。这样,非均匀性也可作为非平衡态的标志。它对宏观连续介质的连续性和因果性,以至于简单流体的假定构成挑战,某点的应力不是由该处的应变历史决定,而是包括周围区域影响,而且不一定具备一一对应的必然的因果性。这就超越了简单流体,面临真正复杂性的挑战。连续介质微元加大,定义改变,也不一定能够维持传统的微积分本构方程,还会发生多尺度间发生强耦合等复杂性问题^[19]。

我们现在能感觉到,非线性流变学要继续前进遇到的挑战带有全面的本质的特点。需要发展出一种新的范式,新范式将联系到大形变、非平衡、非均匀、非微元决定性和多尺度耦合等困难的非线性和复杂性,这种新的范式在流变学领域尚未形成,因为非线性和复杂性科学是个全面的本质的挑战,也就是说,并不仅仅在某一具体对象或某一学科分支中遇见,而是在各个学科所有的物理学中都将遇见的问题。也不是某种学科方法能解决的,是基础学科共同的任务。

试看我国 2011~2012 年学科的规划中,化学、材料科学、物理、数学力学等领域都提出了与流变学进一步发展有关的重点。其中包括:

在化学领域,探索和认识大分子、超分子、分子聚集体及分子聚集体的高级结构的形成、构筑、性能以及分子间相互作用的本质;注重对复杂化学体系的研究,关注化学中的尺度效应和多尺度化学过程;优先发展包括复杂体系的理论、模拟与计算;发展原位、实时、动态、快速、简便的科学装置。

在材料科学领域,多层次多尺度复合;纳米尺度的新的物理本质及规律;由纳米结构单元组成的宏观材料或系统中的多尺度、复合化、智能化,多种性质协同效应。

在物理学领域,揭示各种尺度下的时空本质和物质能量存在形式与运动规律;研究由大量组元构成的复杂体系;复杂系统中的相互作用、凝聚现象;随机非均匀介质中的力学表征。

在力学领域,宏观与微观相结合,与物质科学相结合的物理力学将有重要发展。集理论建模、数据测量、智能控制和力学计算为一体的力学研究手段正在形成。关键科学问题:跨物质层次、多尺度的力学理论与方法;非线性并远离热力学平衡态的力学行为;高维非线性系统、随机和多体系统动力学与控制;多场耦合理论与智能材料及结构力学;多尺度力学及跨尺度关联;复杂相间作用的多相流。

在数学领域,高性能科学与工程计算,加强相关的建模、算法和模拟软件的研究。发展海量数据处理的新方法和新手段,从数据出发寻找和发现规律,促进“数据驱动”。

在信息科学领域,复杂系统与复杂网络。

在空间科学领域,地外复杂流体行为及其本质规律。

总之,流变学学科战略要重视范式的进化,有一个大的视野,集中东西方文明智慧,紧密结合实验和理论。在解决多尺度、非线性和复杂性等科学的前沿方面,与邻学科互相借鉴竞赛合作,再造流变学学科的辉煌。前面提到,基础探索之路在技术应用上也是富有回报的,正确的概念和方法将成为更多创新技术的基础。

参 考 文 献

- [1] 库恩. 科学革命的结构. 李宝恒, 纪树立译. 上海: 上海科学技术出版社, 1980.
- [2] (a) K Walters. Rheometry. Chapman and Hall, London, 1975; (b) C W Macosko. Rheology: Principles, Measurements, and Applications. VCH Publishers, New York, 1994.
- [3] (a) G Astarita, G Marucci. Principles of Non-Newtonian Fluid Mechanics, McGraw-Hill Book Company (UK) Ltd., Maidenhead, 1974; (b) 陈文芳. 非牛顿流体力学. 北京: 科学出版社, 1984.
- [4] (a) 许元泽. 高分子结构流变学. 成都: 四川教育出版社, 1988; (b) P Schuemmer, Y Z Xu. Rheol. Acta, 1986, (25): 23 ~ 27.
- [5] B Gross. Mathematical Structure of the Theory of Viscoelasticity. Hermann et Cie., Paris, 1953.
- [6] (a) R G Larson. The structure and rheology of complex fluids. Oxford Univ. Press, 1998; (b) R G Larson. Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions, Butterworths, Boston, 1988; (c) R B Bird, R C Armstrong, O Hassager. Dynamics of Polymeric Liquids, Vol. 1: Fluid mechanics, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987; (d) R B Bird, C F Curtis, R C Armstrong et al. Dynamics of Polymeric Liquids, Vol. 2: Kinetic Theory. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987.
- [7] H H Winter, M Mours. J. Cent. South Univ. Technol., 2007, 14 (S1): 138 ~ 141.
- [8] (a) P G 德热纳, J 巴杜. 软物质与硬科学. 卢定伟, 唐玉立, 孙大坤译. 湖南出版社, 2000; (b) M Doi, S F Edwards. The Theory of Polymer Dynamics, Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1986.
- [9] (a) R 泽仑. 非晶态固体物理学. 黄昀译. 北京: 北京大学出版社, 1983; (b) 陆坤权, 刘寄星. 软物质导论. 北京大学出版社, 2006; (c) 吴其晔. 高分子凝聚态物理及其进展. 上海: 华东理工大学出版社, 2006.
- [10] 许元泽. 高分子通报, 2010 (9): 29 ~ 33.
- [11] 李少凡, 孙博华. 软物质力学进展(英文版). 高等教育出版社, 2011.
- [12] T C B McLeish. Rheology Rev., 2003: 197 ~ 233; H D Rowland, W P King, J B Pethica et al. Science, 2008, 322: 720 ~ 724.
- [13] X J Zhang, X Yi, Y Z Xu. Front. Chem. Eng. China, 2008, 2: 276 ~ 285.
- [14] Y Z Xu, X J Zhang. High Performance Thermoplastic/Thermosetting Composites Microstructure and Processing Design Based on Phase Separation// A Z El-Sonbati. Thermoplastic -Composite Materials, Chapter 4, InTech Pub, 2012.
- [15] (a) A N Beris, B J Edwards. Thermodynamics of Flowing Systems, Oxford University Press, 1994; (b) 艾树涛. 非平衡态热力学概论. 武汉: 华中科技大学出版社, 2009.
- [16] J Yang, Y Xu. Phys. Fluids, 2008, 20(4), 043101 - 1 - 9.
- [17] M Grmela. Multiscale Equilibrium and Nonequilibrium Thermodynamics in Chemical Engineering//D H West editor, Advances in Chemical Engineering (Volume 39). Academic Press, 2010, p. 75.
- [18] (a) Y Guo, W Yu, Y Z Xu et al. Phys. Rev. E, 2009, 80(6): 061404; (b) Y Guo, W Yu, Y Z Xu et al. Soft Matter, 2011, 7(6): 2433 ~ 2443; (c) P Tapadia, S Q Wang. Phys. Rev. Lett., 2006, 96(1): 016001. (d) S Ravindranath, S Q Wang, M Olechnowicz et al. Macromolecules, 2008, 41(7): 2663 ~ 2670.
- [19] 李静海, 欧阳洁, 高士秋等. 颗粒流体复杂系统的多尺度模拟. 北京: 科学出版社, 2005.