

孤立波在一维复合颗粒链中传播特性的模拟研究*

黄德财^{1)2)†} 陈伟中²⁾ 杨安娜¹⁾ 孙敏¹⁾ 胡凤兰¹⁾ 赵敏¹⁾³⁾

1) (南京理工大学应用物理系, 南京 210094)

2) (南京大学声学研究所, 近代声学教育部重点实验室, 南京 210093)

3) (合肥师范学院物理与电子工程系, 合肥 230601)

(2014年2月17日收到; 2014年3月4日收到修改稿)

采用分子动力学方法模拟研究了孤立波在重轻颗粒相间排列的一维复合颗粒链中的传播特性. 结果发现, 在轻重颗粒的质量比较大或较小时, 散射作用较弱, 颗粒的速度和孤立波的速度衰减较慢. 在轻重颗粒的质量比为中等时, 散射作用较强, 颗粒的速度和孤立波的速度衰减较快. 孤立波在通过重-轻颗粒界面时, 存在有增速效应, 可以提高孤立波的传播速度. 并且, 轻重颗粒的质量比越小增速效应越强. 在散射作用和增速效应的共同作用下, 改变轻重颗粒的质量比可以调控孤立波在重-轻颗粒链中的传播时间.

关键词: 颗粒链, 孤立波, 分子动力学方法

PACS: 45.70.-n, 46.40.Cd, 47.11.Mn

DOI: 10.7498/aps.63.154502

1 引言

当脉冲作用施加在颗粒链上时, 可以在颗粒链中形成脉冲波, 表现出如声真空^[1,2]、呼吸子^[3,4]、整流效应^[5,6]等独特的现象. 1984年, Nesterenko首次发现脉冲作用在一维单一颗粒链中可以形成一种特殊的孤立波, 其可以在较长距离内保持稳定的传播, 并且集中了脉冲作用的大部分能量, 孤立波的宽度约在5个颗粒直径范围, 还发现颗粒之间的非线性作用使得声波不可以在颗粒链中存在^[7,8]. 随后的研究表明通过改变脉冲作用的大小和预压缩程度等可以调控孤立波的传播速度、孤立波的宽度和体系内的能量分布等^[9-12]. 正是由于这些特殊的传播特性, 使得颗粒链成为一个很好的研究非线性动力学的系统.

为了进一步调控孤立波在颗粒链中的传播特性, 改变颗粒的粒度、质量或材质以形成复合颗粒链是常用的方法^[13-17]. 实验和模拟研究均发

现^[18-21], 将单一颗粒链一分为二形成轻-重二段式复合颗粒链, 当孤立波从轻颗粒端入射通过轻-重颗粒界面时, 大部分能量会在界面处被反射回来, 反射波在轻颗粒端形成一组振幅较小的子波, 而透射波在重颗粒端以较小振幅的孤立波的形式传播. 反之, 孤立波从重颗粒端入射至重-轻颗粒界面时, 大部分能量会在界面处被透射. Lindenberg等对孤立波在锥形颗粒链中的传播特性进行了研究^[22-25], 二体近似方法和数值计算结果显示, 孤立波在前行颗粒链(半径依次减小)中的传播速度快于其在后行颗粒链(半径依次增大)中的传播速度. 基于这些研究, 颗粒的质量在空间上的差异可以调控孤立波在颗粒链中的传播特性, 然而, 对于孤立波在由不同质量的颗粒相间排列的颗粒链中的传播一直未见更进一步的详细报道.

在本文中, 将质量不同的球形颗粒相间排列形成一维重-轻复合颗粒链, 采用分子动力学方法, 系统的模拟研究了孤立波在重-轻颗粒链中的传播过程. 模拟结果显示, 通过改变组成颗粒链的重-轻颗

* 国家自然科学基金(批准号: 10904070, 10847146, 11174145, 11334005)和南京理工大学青年学者基金(批准号: 200705)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hdc@njjust.edu.cn

粒的质量比, 不仅可以控制孤立波通过重-轻和轻-重颗粒界面时的颗粒的运动速度, 而且还可以控制孤立波在颗粒链中的传播速度.

2 计算模型

如图 1 所示, 模拟体系由两种粒度相同、密度不同的球形颗粒组成, 所有颗粒排成一列形成一维复合颗粒链. 在本文的模拟过程中, 颗粒仅受到颗粒之间相互接触而产生的作用力, 所有颗粒的运动被限制在一维空间内. 在模拟开始时刻, 颗粒之间恰好相互接触, 即颗粒之间既无空隙也无压缩. 颗粒链中处于偶数位置的颗粒与处于奇数位置的颗粒的质量比定义为 $\gamma = m_E/m_O$, 所以, 当 $\gamma = 1$ 时, 颗粒链为单一颗粒链, 当 $\gamma < 1$ 时, 质量较小的颗粒称为轻颗粒, 而质量较大的颗粒称为重颗粒, 颗粒链形成偶数颗粒为轻颗粒而奇数颗粒为重颗粒相间的排列方式, 因而被称为重-轻颗粒链.

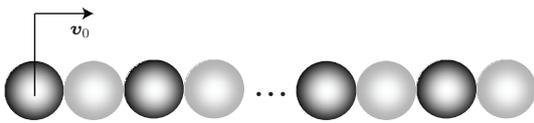


图 1 模拟体系示意图

本文采用的模拟方法为分子动力学方法, 对于颗粒的运动采用牛顿方程来描述, 球形颗粒之间的相互作用采用的是软球模型 [26-30], 相邻颗粒作用的形式如下:

$$F_{i,i+1} = k_n(u_i - u_{i+1})^{3/2}H(u_i - u_{i+1}), \quad (1)$$

其中, $H(u_i - u_{i+1})$ 为 Heaviside 函数, 该函数保证了颗粒之间只有在接触时才有相互作用, u_i 为第 i 个颗粒偏离平衡位置的位移, k_n 为颗粒的法向弹性系数,

$$k_n = \frac{4}{3} \frac{Y_i Y_{i+1}}{Y_i + Y_{i+1}} \sqrt{\frac{R_i R_{i+1}}{R_i + R_{i+1}}}, \quad Y = \frac{E}{1 - \nu^2},$$

R 为颗粒的半径, E 为颗粒的杨氏模量, ν 为颗粒球的泊松比.

在本文的模拟中, 采用速度-Verlet 算法来更新每个颗粒的位置和速度, 颗粒的具体参数为: 杨氏模量 $E = 193 \text{ GPa}$, 泊松比 $\nu = 0.3$, 半径 $R = 2.5 \text{ cm}$, 重颗粒的密度固定为 $\rho = 7.9 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$. 模拟的时间步长为 $dt = 1.0 \times 10^{-8} \text{ s}$. 为了在颗粒链中产生一个向右的脉冲作用, 在模拟开始时刻

$t = 0$, 第 1 个颗粒即最左边的颗粒设定一定的向右的初速度 $v_1 = 1.0 \text{ m/s}$, 而颗粒链中其他颗粒的速度 $v_i = 0, i = 2, 3, \dots, N$, N 为颗粒总数. 通常, 脉冲作用形成一个完整的孤立波需要一定的时间和距离, 在本文的模拟中, 脉冲作用在传播至第 30 个颗粒时均可见到一个完整的孤立波.

3 模拟结果与讨论

首先, 我们对脉冲作用在不同质量比的重-轻颗粒链中的传播过程进行了模拟, 如图 2 所示为孤立波传播至颗粒 31, 40, 51, 60 时, 颗粒链中颗粒的速度的分布关系. 由图 2 可以看出, 当 $\gamma = 1$ 时, 脉冲作用在质量单一的颗粒链中传播时, 形成了一个独立的孤立波, 孤立波的宽度约在 5 个颗粒的范围 [1,2,7,8]. 在孤立波的传播过程中, 孤立波的波幅 (即颗粒的速度峰值) 保持恒定, 孤立波的形状也保持稳定, 没有散射现象发生. 当 $\gamma = 0.5$ 时, 即颗粒链为重-轻颗粒链, 脉冲作用形成的脉冲作用不再是一个独立的孤立波, 在传播过程中发生了明显的散射现象. 在脉冲波经过后, 颗粒的速度不再为零, 脉冲作用由一个领先的孤立波和多个波幅较小的二次波组成. 另外, 对比颗粒 31 和 51、颗粒 40 和 60 处的波幅, 重、轻颗粒处孤立波的波幅不同且波幅随着传播距离的增加而减小. 当 $\gamma = 0.1$ 时, 组成重-轻颗粒链的两类颗粒的质量比较小时, 散射现象仍然存在, 脉冲波仍然由一个领先的较大波幅的孤立波和多个较小波幅的二次波组成. 但孤立波的波幅和形状更接近于在单一颗粒链中传播的情形, 衰减较慢且孤立波的宽度明显增加.

为了更详细的观察脉冲作用在传播过程中颗粒的运动规律, 图 3 分别给出了颗粒 31, 40, 51, 60 的速度随时间的变化关系. 由图 2 可以看出, 当 $\gamma = 1$ 时, 孤立波在经过每个颗粒时颗粒的速度峰值相同, 且孤立波通过每个颗粒的形状保持稳定. 当 $\gamma = 0.5$ 时, 一方面, 颗粒在通过同类颗粒 (如重颗粒 31 和 51 或轻颗粒 40 和 60) 时, 孤立波的波幅减小. 另一方面, 颗粒的速度出现明显的振荡现象, 但不同质量的颗粒的运动情形不同, 重颗粒的速度的衰减速度明显快于轻颗粒. 当 $\gamma = 0.1$ 时, 当孤立波通过重颗粒时, 重颗粒的速度随时间的变化关系接近孤立波在单一颗粒链时的情形, 重颗粒的速度无明显的振荡出现, 而轻颗粒则出现明显的振幅较小的振荡现象.

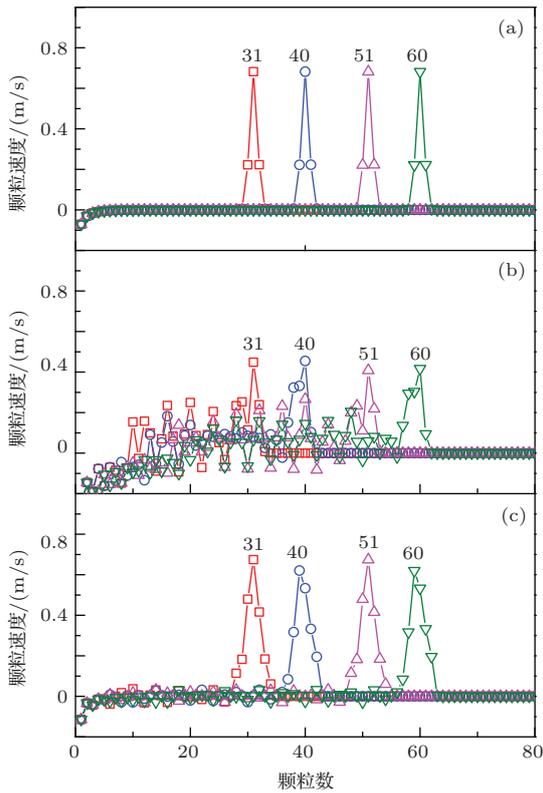


图2 孤立波传播至颗粒 31, 40, 51, 60 时, 重-轻颗粒链中颗粒的速度的分布关系 (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 0.5$; (c) $\gamma = 0.1$

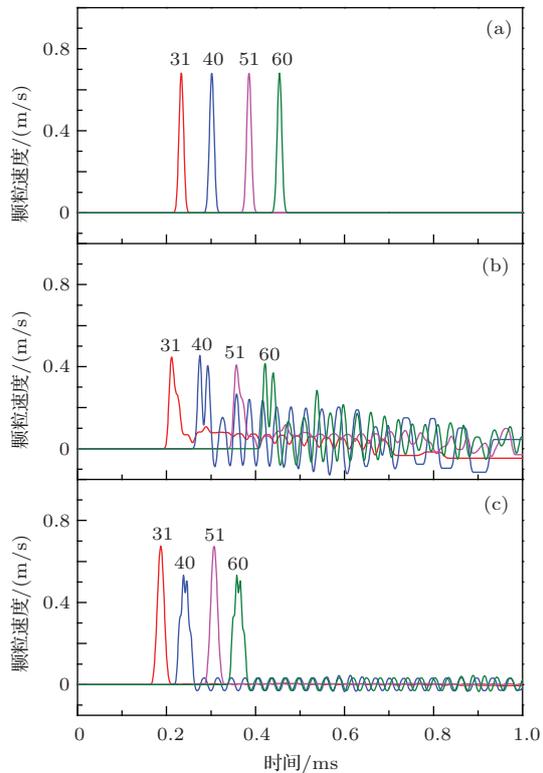


图3 颗粒 31, 40, 51, 60 的速度随时间的变化关系 (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 0.5$; (c) $\gamma = 0.1$

根据 Lindenberg 等的二体碰撞理论, 在孤立波的传播过程中, 相邻颗粒的速度峰值之比为

$$\frac{v_{i+1}}{v_i} = \frac{2}{1+s} \quad [22-25], \quad s = \frac{m_{i+1}}{m_i}$$

为相邻颗粒的质量比. 当 $s > 1$ 时, 颗粒的速度单调递减, 而当 $s < 1$ 时, 颗粒的速度单调递增. 为进一步与二体碰撞理论结果进行对比, 我们计算了重-轻颗粒链中孤立波通过每个颗粒时孤立波的波幅 (即颗粒的速度峰值), 如图 4 (a)、(b) 和 (c) 所示, 对应的质量比分别为 $\gamma = 0.8, 0.5$ 和 $\gamma = 0.1$, 图中实心圆和空心圆符号分别对应为重颗粒和轻颗粒, 虚线对应为 $\gamma = 1$ 时孤立波的波幅. 由图 4 可见, 对于单一颗粒链 ($\gamma = 1$) 来说, 孤立波的波幅在传播过程中保持不变. 而对于重-轻复合颗粒链 ($\gamma < 1$) 来说, 随着孤立波的传播距离的增大, 孤立波的波幅均出现不同程度的衰减, 散射现象普遍存在. 而且, 当质量比较大或较小时, 散射作用较弱, 而当质量比为中等时, 散射作用较强. 如图 4 (a), (b) 所示, 当质量比为 $\gamma = 0.8$ 和 0.5 , 模拟结果与 Lindenberg 等的二体碰撞近似所得的结果类似. 当孤立波由重颗粒传至轻颗粒时, 存在有颗粒的增速效应, 即轻颗粒可以获得大于入射重颗粒的速度. 而当孤立波由轻颗粒传至重颗粒时, 存在有颗粒的减速效应, 即重颗粒获得的速度小于入射轻颗粒的速度. 有趣的是, 当质量比较小时, 如 $\gamma = 0.1$, 增速效应和减速效应仅

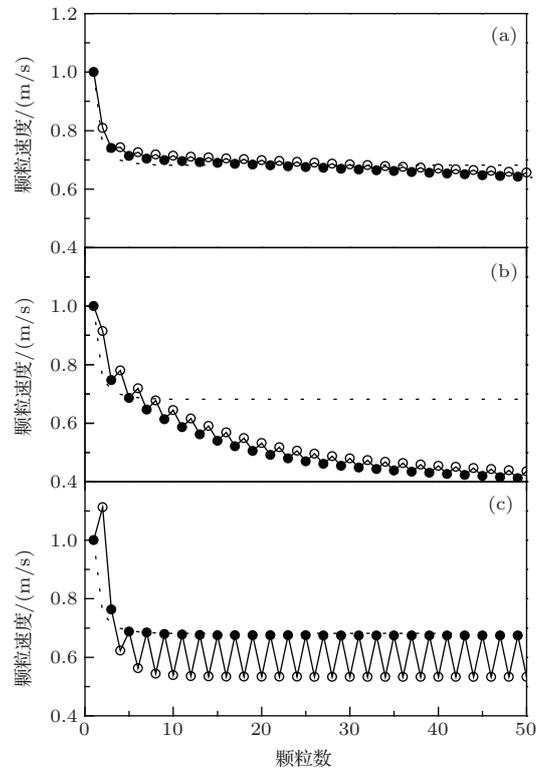


图4 颗粒的速度峰值的分布关系 (●和○符号分别对应为重颗粒和轻颗粒, 虚线对应为 $\gamma = 1$ 时颗粒的速度峰值) (a) $\gamma = 0.8$; (b) $\gamma = 0.5$; (c) $\gamma = 0.1$

仅在开始阶段发生,如图4(c)中的第二个颗粒(轻颗粒)的速度大于第一个颗粒(重颗粒)的速度. 然后,散射作用明显减弱,同时增速效应和减速效应消失,重颗粒的速度峰值始终大于轻颗粒的速度峰值. 而且,重颗粒的速度峰值更接近于孤立波在单一颗粒链中传播的情形. 这与Lindenberg等的二体碰撞近似所得的结果不同.

对于描述孤立波的特性来说,传播速度是另外一个重要的物理量,图5给出了不同质量比下孤立波在颗粒链中的传播速度的分布关系. 图5中的实心圆和空心圆符号对应的分别是孤立波通过重-轻颗粒界面和轻-重颗粒界面时的速度,虚线对应为 $\gamma = 1$ 时孤立波的传播速度. 这里,孤立波的传播速度的定义为

$$v_{sw} = \frac{2R}{\Delta t}, \quad (2)$$

其中, Δt 为孤立波通过相邻颗粒达到波幅的时间差.

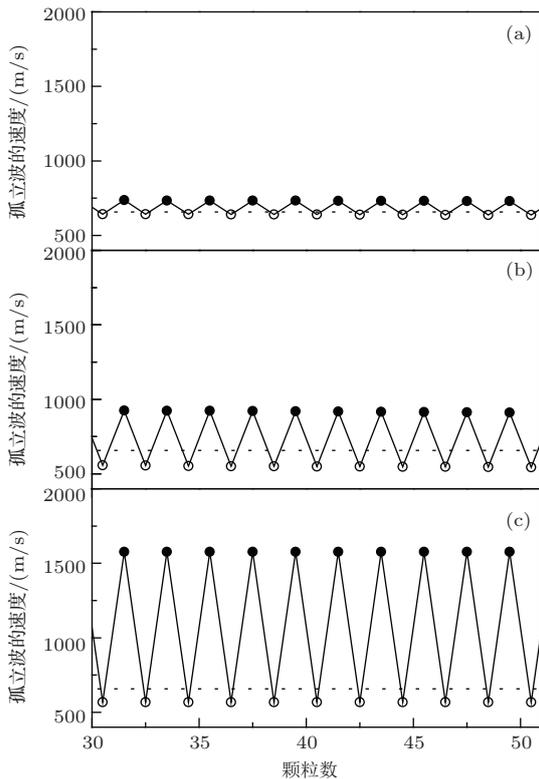


图5 孤立波在颗粒链中的传播速度的分布关系(●和○符号分别对应为孤立波由重颗粒传至轻颗粒和由轻颗粒传至重颗粒的速度,虚线对应为 $\gamma = 1$ 时孤立波的传播速度) (a) $\gamma = 0.8$; (b) $\gamma = 0.5$; (c) $\gamma = 0.1$

由图5可见,孤立波在复合颗粒链中传播速度与轻重颗粒的质量比紧密相关,同样存在有类似于颗粒的增速和减速效应. 一方面,孤立波通过重-轻

界面的传播速度相对较大,这里称之为孤立波的增速效应. 反过来,孤立波通过轻-重界面的传播速度始终具有较小的传播速度,这里称之为孤立波的减速效应. 而且,随着质量比的减小,增速效应明显增强,即孤立波通过重-轻颗粒界面的传播速度有较大的增长,导致孤立波通过重-轻和轻-重颗粒界面的传播速度差明显增大. 另一方面,在孤立波的传播过程中,散射作用始终存在. 随着传播距离的增加,孤立波无论是由重颗粒传至轻颗粒的速度还是由轻颗粒传至重颗粒的速度均出现衰减.

既然孤立波在通过不同质量比的颗粒界面的传播速度不同,孤立波在颗粒链中的传播时间也应该不同,我们分别计算了孤立波到达颗粒50, 100, 150和200时所需要的时间. 由图6可见,当孤立波在颗粒链的传播距离较短时,如传播至颗粒50处,传播时间随着质量比的增大而增加. 而当传播距离较大时,如传播至颗粒100, 150和200处,传播时间在质量比 $\gamma = 0.6$ 处存在有一个最大值.

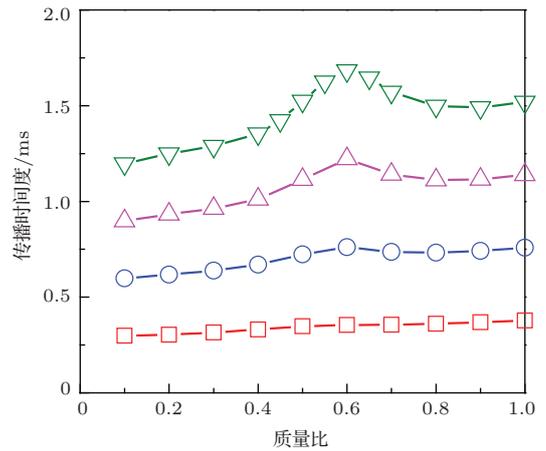


图6 传播时间随质量比的变化关系(□, ○, △和▽符号分别对应为孤立波传播至颗粒50, 100, 150和200所需要的时间)

根据以上散射作用和孤立波的增速效应的讨论,不难理解孤立波在不同质量比的颗粒链中传播时间的不同. 当孤立波在较短的距离内传播时,散射作用有限,孤立波仍然具有较高的速度,同时,孤立波的增速效应使得孤立波由重颗粒传至轻颗粒大于其在均匀颗粒链中的传播速度,所以,在较小的质量比情况下,孤立波的增速效应占主导地位,孤立波在重-轻颗粒链中的传播时间较短. 当质量比增大时,增速效应减小,从而导致传播时间的较长. 当孤立波的传播距离较大时,一方面,在质量比较小时,孤立波的增速效应超过散射作用的减速

效应,使得孤立波在质量比小的颗粒链中的传播时间相对在质量比大的颗粒链中的传播时间较短.另一方面,在质量比为中等的情况下,散射作用较强,颗粒速度的衰减较快,相应的孤立波的速度也衰减较快,从而导致了孤立波在颗粒链中的传播时间最长.而当质量比较大时,散射作用减弱,孤立波的增速效用增强,从而使得孤立波在颗粒链中的传播时间减小.

4 结 论

本文通过计算机模拟研究了孤立波在一维重-轻复合颗粒链中的传播特性.模拟结果表明,当轻重颗粒的质量比较大或较小时,散射作用较弱,颗粒的速度和孤立波的速度均衰减较慢,孤立波可在较长距离内传播.而当轻重颗粒的质量比为中等时,散射作用较强,颗粒的速度和孤立波的速度均衰减较快.而且,当孤立波从重颗粒传至轻颗粒时,增速效应可以提高孤立波的传播速度.反之,当孤立波由轻颗粒传至重颗粒时,减速效应可以降低孤立波的传播速度.进一步的研究发现,在较短距离内,散射作用较弱,孤立波的增速效应占主导地位,孤立波在质量比较小的复合颗粒链内的传播时间较短.而在较长距离内,散射作用超过孤立波的增速作用,孤立波在质量比中等的复合颗粒链内的传播时间较长.根据本文的结果,通过改变相间排列的轻、重颗粒的质量比,可以实现调控脉冲作用在重-轻颗粒链中传播过程中颗粒的速度和孤立波的传播速度,相信该结果对研制新型力学缓冲器和声整流器等有着重要的参考价值.

参考文献

- [1] Nesterenko V F 1983 *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **5** 733
- [2] Avalos E, Sun D K, Doney R L 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046610
- [3] Hoogeboom C, Theocharis G, Kevrekidis P G 2010 *Phys. Rev. E* **82** 061303
- [4] Chong C, Kevrekidis P G, Theocharis G, Daraio C 2013 *Phys. Rev. E* **87** 042202
- [5] Nesterenko V F, Daraio C, Herbold E B, Jin S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 158702
- [6] Boechler N, Theocharis G, Daraio C 2011 *Nature Materials* **10** 665
- [7] Nesterenko V F 2001 *Dynamics of Heterogeneous Materials* (New York: Springer-Verlag)
- [8] Coste C, Falcon E, Fauve S 1997 *Phys. Rev. E* **56** 6104
- [9] Herbold E B, Nesterenko V F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 144101
- [10] Takato Y, Sen S 2012 *Eur. Phys. Lett.* **100** 24003
- [11] Daraio C, Nesterenko V F, Herbold E B, Jin S 2006 *Phys. Rev. E* **73** 026610
- [12] Szelengowicz I, Hasan M A, Starosvetsky Y, Vakakis A, Daraio C 2013 *Phys. Rev. E* **87** 032204
- [13] Daraio C, Nesterenko V F 2006 *Phys. Rev. E* **73** 026612
- [14] Daraio C, Nesterenko V F, Herbold E B, Jin S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 058002
- [15] Spadoni A, Daraio C 2010 *PNAS* **107** 7230
- [16] Molinari A, Daraio C 2009 *Phys. Rev. E* **80** 056602
- [17] Nesterenko V F, Herbold E B 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 261902
- [18] Wang P J, Xia J H, Li Y D, Liu C S 2007 *Phys. Rev. E* **76** 041305
- [19] Wang P J, Xia J H, Li Y D, Liu C S, Yan L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 014501 (in Chinese) [王平建, 夏继宏, 刘长松, 刘会, 闫龙 2011 物理学报 **60** 014501]
- [20] Vergara L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 108002
- [21] Tichler A M, Gómez L R, Upadhyaya N, Campaman X, Nesterenko V F, Vitelli V 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 048001
- [22] Harbola U, Rosas A, Epsosito M, Lindenberg K 2009 *Phys. Rev. E* **80** 031303
- [23] Harbola U, Rosas A, Romero A H, Epsosito M, Lindenberg K 2009 *Phys. Rev. E* **80** 051302
- [24] Doney R L, Sen S 2005 *Phys. Rev. E* **72** 041304
- [25] Chen Q, Yang X Q, Zhao X Y, Wang Z H, and Zhao Y M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 014501
- [26] Kuwabara G, Kono K 1987 *Jpn. J. Appl. Phys. Part. I* **26** 1230
- [27] Schafer J, Dippel S, Wolf D E 1996 *J. Phys. I France* **6** 5
- [28] Huang D C, Lu M, Sen S, Sun M, Feng Y D, Yang A N 2013 *Eur. Phys. J. E* **36** 41
- [29] Huang D C, Lu M, Sun G, Feng Y D, Sun M, Wu H P, Deng K M 2012 *Phys. Rev. E* **85** 031305
- [30] Huang D C, Feng Y D, Xie W M, Lu M, Wu H P, Hu F L, Deng K M 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 124501 (in Chinese) [黄德财, 冯耀东, 解为梅, 陆明, 吴海平, 胡凤兰, 邓开明 2012 物理学报 **61** 124501]

Simulation study on the propagation of solitary waves in a one-dimensional composite granular chain*

Huang De-Cai^{1)2)†} Chen Wei-Zhong²⁾ Yang An-Na¹⁾ Sun Min¹⁾
Hu Feng-Lan¹⁾ Zhao Min¹⁾³⁾

1) (*Department of Applied Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*)

2) (*Key Laboratory of Modern Acoustics of Ministry of Education, Institute of Acoustics, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

3) (*School of Electric and Information Engineering, Hefei Normal University, Hefei 230601, China*)

(Received 17 February 2014; revised manuscript received 4 March 2014)

Abstract

The propagation of solitary wave in a one-dimensional composite granular chain with heavy and light particles by turns is investigated by using molecular dynamics simulation. Under the condition of larger or smaller mass ratio of light to heavy particles, scattering effect is weaker and both particle velocity and solitary wave velocity decay slowly. In the intermediate range of mass ratio, the scattering effect becomes stronger, resulting in a faster decay of particle velocity and solitary wave velocity. Moreover, effect of increasing velocity happens when the solitary wave travels across the heavy-light interface, indicating that the solitary wave velocity is increased. Effect of increasing velocity is enhanced when the mass ratio of light to heavy particles decreases. Due to the combined action of scattering effect and the effect of increasing velocity, the traveling time of solitary waves can be modulated by altering the mass ratio of light to heavy particle.

Keywords: granular chain, solitary wave, molecular dynamics method

PACS: 45.70.-n, 46.40.Cd, 47.11.Mn

DOI: [10.7498/aps.63.154502](https://doi.org/10.7498/aps.63.154502)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10904070, 10847146, 11174145, 11334005), and the NUST Young Scholar Foundation (Grant No. 200705).

† Corresponding author. E-mail: hdc@njust.edu.cn