

熱流束の数式解説 (compute_heat_flux.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

LAMMPS (compute_heat_flux.cpp) では、ある原子グループ G について熱流束（エネルギー流束）ベクトル

$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$

を対流項とビリアル項の和として評価している。以下ではその数式的定義を示す。

まず、各原子 i の運動エネルギー k_i 、ポテンシャルエネルギー u_i を用いて

$$e_i = k_i + u_i \tag{1}$$

と定義する。

■対流項 原子 i の速度ベクトルを \mathbf{v}_i とすると、対流に伴うエネルギー輸送は

$$\mathbf{j}_c = \sum_{i \in G} e_i \mathbf{v}_i \tag{2}$$

で与えられる。

■ビリアル項 LAMMPS では原子毎の応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}_i$ を「ビリアル × 体積」の次元で保持しており、単位変換定数

$$\gamma = \text{nktv2p}$$

を用いてエネルギー単位に戻す必要がある。座標系 (x, y, z) でのビリアル寄与は

$$\mathbf{j}_v = - \sum_{i \in G} (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{v}_i), \quad \mathbf{j}_v^{(E)} = \frac{\mathbf{j}_v}{\gamma} \tag{3}$$

である（符号は熱流束の慣例に合わせて負号が付く）。

■総熱流束 よって、体積で規格化していない（すなわち“熱流束 × 体積”）形の総熱流束ベクトルは

$$\mathbf{J} = \mathbf{j}_c + \mathbf{j}_v^{(E)} \tag{4}$$

となる。式 (??) を成分表示すれば

$$J_\alpha = j_{c,\alpha} + j_{v,\alpha}^{(E)}, \quad \alpha \in \{x, y, z\}. \tag{5}$$

■出力ベクトル 本 compute は MPI 並列全体で

$$(J_x, J_y, J_z, j_{c,x}, j_{c,y}, j_{c,z}) \tag{6}$$

の 6 成分をリダクションして返す。

■備考

- 本実装では体積 V による正規化を行っていないため、面積当たりの熱流束密度が必要な場合は J/V を用いる。
- 応力テンソルは対称ではない (LAMMPS の格納順序は $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$) ため、式 (??) のドット積展開は

$$j_{v,x} = - \sum_{i \in G} (\sigma_{xx}^{(i)} v_{ix} + \sigma_{xy}^{(i)} v_{iy} + \sigma_{xz}^{(i)} v_{iz}),$$

などとなる。

- γ (nktv2p) は

$$\gamma = \frac{k_B T}{(\text{エネルギー単位})}$$

に相当し、シミュレーション単位系ごとに定められている。