平成四年度　卒業研修　前刷

平成~~4~~5年　3月　11日

題目：磁気ディスクスライダーの分子流特性

担当学生　　井手　剛

1．まえおき

本研修で扱う対象はハードディスク装置を念頭に置いている．平滑な硬質磁気ディスクが空気を「引きずり」つつ何千rpmかの速度で回り，その上にヘッドがつかず離れず浮かんでいる．

近年の計算機の発展に応じて高精度・高密度の記録装置の開発が必要になってきている．そのためにはヘッド（以下スライダーと呼ぶ）と記録媒体の間をどのように空気が流れるか，より具体的にはスライダーはどれくらいの圧力を空気から受けるのかを知っていなければならない．従来からこの類の問題は固体の潤滑問題として，境界層方程式の一種であるレイノルズ方程式により扱われてきた．

しかし現在でさえ記録媒体とスライダーの間隔は0.1μmの程度であり，将来はこの値より更に小さくなるであろうと予測される．この値は常温常圧下での空気の平均自由行程λとほぼ同じオーダーである．つまりこの位のスケールでは空気はもはや連続的とはみられず，むしろ空間的に粗な分子流とみなさなければならない．従ってこの問題を解く唯一の正当なやり方は，気体分子の速度と位置についての確率密度関数を記述する方程式であるボルツマン方程式を解くことである．

本研修ではボルツマン方程式を確率的に解いて磁気ディスクスライダー表面の圧力分布を求め，その浮上特性を求める際の基礎的なデータを得ることを目的としている．

2．数値シュミレーションの方法　[1]

2．1　無衝突ボルツマン方程式

電磁場等外場のない空間におけるボルツマン方程式は

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t}+\boldsymbol{c}\cdot\frac{\partial(nf)}{\partial \boldsymbol{x}}=n^2\iint[f(\boldsymbol{c}')f(\zeta')-f(\boldsymbol{c})f(\zeta)]g\sigma d\Omega d\zeta \qquad (1)$$

指導教官　南部 健一 教授

ここでnは分子の数密度，fは分子の分布関数で，いずれも位置**x**と速度**c**の関数である．右辺は分子間衝突による分布関数の変化を表す（詳細は[2]）．

式(1)の解をある時間間隔dtごとに求めたい．以下nfを単にFと書く．もしある時刻tにおける分布関数が分かっていれば，時刻t+dtにおける分布関数は

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t+dt) = F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t) + dt\, \frac{\partial F}{\partial t}\bigg|_{t=t} \tag{2}$$

から求まる．また式(1)の右辺（衝突項）をJF，左辺第二項をDFとおくと式(2)は，O(dt^2)を無視する精度で次のように書ける．

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t+dt) = (1 - dtD)(1 + dtJ)\, F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t) \tag{3}$$

この式は分子の無衝突運動と分子間衝突が分布関数に与える効果が各々分離できることを意味する．

まえおきにも述べたように本研修で扱う系は分子の平均自由行程と代表長さの比すなわちクヌーセン数が1の程度である．こういう場合分子間衝突は現象にある程度の寄与をするものの，定性的傾向を支配するのは分子の無衝突的な運動と考えてよい．このとき時間に対し離散化されたボルツマン方程式(3)は，

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t+dt) = (1 - dtD)\, F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t) \tag{4}$$

これを形式的に書き換えると

$$F(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}dt, \boldsymbol{c}, t+dt) = F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{c}, t) \tag{5}$$

モンテカルロ直接法では分布関数を直接求めるのではなくそれから抽出した標本分子の振る舞いで系を表現するという考え方をとる．例えば系の領域を十分細かく分けると各々の小領域では場は一様と見なせるが，そこに速度｛$\mathbf{c}_i$｝を持つ分子集団があれば局所的な分布関数は

$$f(\boldsymbol{c}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \delta^3(\boldsymbol{c} - \boldsymbol{c}_i) \tag{6}$$

と表される．こういう形の分布関数を念頭におきつつ式(5)を解釈すると次のようになる．ある時刻tにおける既知の分布関数から抽出された標本分子は時間がdtだけ進むことにより位置を**c**dtだけ変える．この位置が変わった標本分子群について再び上式より分布関数を構成すればそれが無衝突ボルツマン方程式の解になっている．

このように分布関数から抽出された標本分子を考えることにより外場のない無衝突ボルツマン方程式を解くことは，単に標本分子の幾何学的軌道計算の問題に帰着される．ただし後述のように境界条件と初期条件にある意味で任意性が残る．

2．2　分子境界条件

本計算においては二次元的な流れを仮定する．スライダーは空間的に静止し，媒体は一定速度Vで走っているものとする．計算領域の概形を図1に示す．

まず上流および下流側の自由境界について考える．連続体流体力学では固体壁において滑りなしの条件を課すのが普通であるが，この場合はそれは意味をなさないので，入口側速度V_1と出口側速度V_2もまた解の一部として求めなければならない．ここでは分子流束の保存条件よりV_1，V_2を逐次修正してゆくいわゆる池川の方法[3]によりこれらを決める．いまある境界面を上流側からある時間Kdtの間にN_u個の分子が通過し下流側からN_d個の分子が通過したとすると，その境界面における流速は

$$V_i = (N_u - N_d)/(n\,A\,Kdt) \qquad i=1,2 \tag{7}$$

のように決められる．ただしAは境界面の断面積，nは分子数密度である．入口側のnはスライダー端面によるせき止めの効果も考えて，一様流の数密度n_0を

$$n = \left(1 + \frac{V^2}{2RT}\right) n_0$$

と補正する．

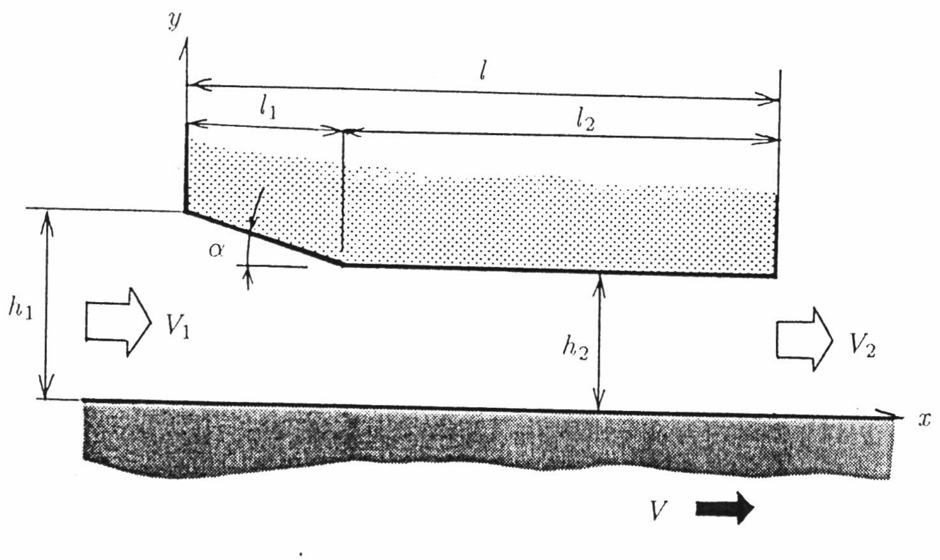

図1　計算領域の概形

上のようにしてV_1，V_2が求められたならば，計算領域に新たに入ってくる分子の速度を次の速度分布関数より無作為抽出する[4]．

$$f_1 = \frac{1}{RT\,K(s)} c_x \exp\left[-\frac{(c_x - V_i)^2}{2RT}\right] \tag{9}$$

$$f_2 = \frac{1}{2\pi RT} \exp\left[-\frac{c_y^2 + c_z^2}{2RT}\right] \tag{10}$$

ここで$f1$はx方向の分布関数，f_2はyおよびz方向の分布関数であり，K(s)は次のように定義される．

$$K(s) = \exp(-s^2) + \sqrt{\pi}s(1 + \mathrm{erf}\, s) \tag{11}$$

$$s = V_i/\sqrt{2RT} \tag{12}$$

２．３　壁面での境界条件

次に媒体およびスライダー表面における境界条件については，ここでは乱反射の仮定を採用することにする．乱反射では壁との衝突後の標本分子の速度は

$$c_x = \sqrt{-2RT\ \log(U_1)}\cos(2\pi U_2) \tag{13}$$

$$c_y = \sqrt{-2RT\ \log(U_1)} \tag{14}$$

によって与えられる．ただしU_1，U_2は(0,1)の一様乱数である．

２．４　初期条件

t=0で，速度については平衡分布（マクスウェル分布）から，位置については一様分布から無作為抽出するものとする．

２．５　壁面における圧力の計算

図２のように速度**c**をもつ標本分子が壁との乱反射後速度**c'**になったとする．

このとき壁の圧力は

$$p = w\frac{m}{A\tilde{T}}\sum(c_n - c_n') \tag{15}$$

で求められる．ただしmは分子の質量，wは実在分子w個が標本分子１個に相当することを表す．Aは壁の着目している部分の面積，$\tilde{T}$は適当な時間間隔であり，和はこのT内に面積Aに入射した全ての標本分子についてとられる．

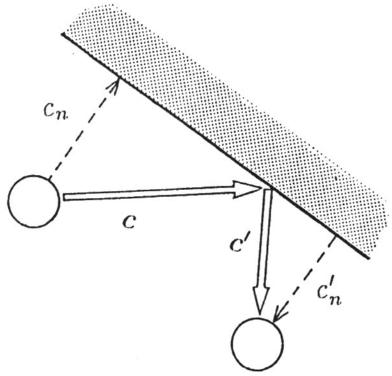

図２　壁面における圧力の計算

3．連続体潤滑理論

本計算で扱う系では流体力学におけるレイノルズ方程式の成立条件 [5]

$$\frac{ul}{\nu}\left(\frac{h}{l}\right) \ll 1$$

は満たされてはいるが，連続体の考え方そのものが成り立たない．hはスライダーと媒体の間隔の代表値を表す．しかし比較のため形式的に解を求めておく．2次元のレイノルズ理論では基礎方程式は，x方向の流速をu(x, y)として

$$\begin{aligned}\frac{dp}{dx} &= \mu\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\\ Q &= \int_0^{h(x)} u(x,y)\,dy = \text{const.}\end{aligned}$$

である．ただしh(x)は２つの固体壁間のy方向距離である．すなわち，

$$h(x) = \begin{cases} h_1 - \tan\alpha & 0 \le x \le l_1 \\ h_2 & l_1 < x \le l \end{cases}$$

これを境界条件

$$p(x=0) = p(x=l) = p_0\ (\text{大気圧})$$

$$u(x,0) = V \qquad\qquad u(x,h(x)) = 0$$

によって解くと，$k=h_1/h_2$として

$$p(x) - p_0 = \frac{6\mu}{h_1\tan\alpha(h_1 - x\tan\alpha)}\left[Vx\tan\alpha - Q\,\frac{x^2\tan^2\alpha - 2h_1 x\tan\alpha}{h_1(h_1 - x\tan\alpha)}\right]$$

$$0 \le x \le l_1$$

$$p(x) - p_0 = p(l1) + 12\mu\left(\frac{V}{2h_2^2} - \frac{Q}{h_1^3}\right)(x - l1) \qquad l_1 < x \le l$$

$$Q = V\,\frac{h_1(k-1) + l_2k^2\tan\alpha}{(k^2-1) + 2(l_2/h_2)k^2\tan\alpha}$$

となる．