DOI: 10.15514/ISPRAS-2022-34(6)-16



Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис

¹У.С. Гордеева, ORCID: 0000-0002-3499-001X <Uliana.Gordeev@yandex.ru> ²Ф.М. Шарипов, ORCID: 0000-0001-9372-2915 <sharipov@fisica.ufpr.br>

¹ МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, Россия, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1. ² Федеральный университет Параны, Бразилия 80060-000, штат Парана, Куритиба, ул. 15-го ноября, 1299

Аннотация. В работе моделируется процесс течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели Черчиньяни-Лампис (ЧЛ), которая использовалась в качестве новых граничных условий при расчете вероятности перехода. При моделировании использовался метод пробной частицы (метод Монте-Карло). Произведен расчет вероятности перехода молекул через лопаточный канал в прямом и обратном направлениях, результирующей вероятности перехода, степени повышения давления.

Ключевые слова: математическое моделирование; турбомолекулярные вакуумные насосы; метод Монте-Карло; динамика разреженного газа; модели взаимодействия газа с поверхностью; модель Максвелла; модель Черчиньяни-Лампис

Для цитирования: Гордеева У.С., Шарипов Ф.М. Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис. Труды ИСП РАН, том 34, вып. 6, 2022 г., стр. 197-206. DOI: 10.15514/ISPRAS-2022-34(6)-16

Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model

¹U.S. Gordeeva, ORCID: 0000-0002-3499-001X <Uliana.Gordeev@yandex.ru> ² F.M. Sharipov, ORCID: 0000-0001-9372-2915 <sharipov@fisica.ufpr.br>

¹ Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya st. 5, cmp. Moscow, 105005, Russia ² Universidade Federal do Paraná, Rua XV de Novembro 1299, Curitiba, State of Parana, 80060-000 Brazil

Abstract. In this paper the process of gas flow in the flow path of a turbomolecular vacuum pump using the Cercignani-Lampis (CL) model was simulated. CL model was used as new boundary conditions when calculating the transition probability. The test particle method (Monte Carlo method) was used in the

Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gassurface interaction model. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206

simulation. The calculation of the molecules transition probability through the blade channel in the forward and reverse directions, the transition resulting probability, the compression ratio was made.

Keywords: mathematical modelling; turbo molecular vacuum pumps; Monte-Carlo method; rarefied gas dynamics; gas-surface interaction models; Maxwell model; Cercignani-Lampis model.

For citation: Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model. Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2022-34(6)-16

1. Введение

Турбомолекулярный вакуумный насос (ТМН), изобретенный Беккером в 1957 году, стал выпускаться в 1958 году. С тех пор он нашел широкое применение во всех областях техники, где необходимо обеспечение высокого и сверхвысокого вакуума благодаря чистому, постоянному и создаваемому вакууму, простоте эксплуатации, и повышенной степении эксплуатационной надежности. ТМН является единственным механическим вакуумным насосом, который вместе с форвакуумным насосом может обеспечивать предельное остаточное давление не менее 10⁻⁹ Па.

Первая конструкция ТМН была предложена в 1913 г., когда Геде представил свой молекулярный насос, в котором эффект откачки обусловлен передачей импульса от быстро движущейся поверхности ротора частицам газа. Геде был одним из изобретателей диффузионного насоса, в котором использовалась передача количества движения от быстро движущихся молекул нагретого потока пара рабочей жидкости частицам газа.

При молекулярном течении газа частицы сталкиваются преимущественно с внутренними поверхностями, что приводит к эффективному процессу откачки. Поэтому насосы, использующие этот принцип работы, называются молекулярными насосами. При переходном и вязкостном течении газа действие насоса ограничивается частыми взаимными столкновениями частиц. Поэтому молекулярные насосы используются в сочетании с подходящими форвакуумными насосами для достижения эффективной работы и стабильных показателей.

В 1922 году Хольвеком была предложена улучшенная версия насоса Геде. Зигбан в 1940 году сконструировал еще один молекулярный насос с дискообразным ротором. Эти ранние молекулярные насосы не достигли широкого применения из-за их низкой быстроты действия и низкой надежности. Для достижения низкого предельного остаточного давления расстояния между вращающимися – роторными и неподвижными – статорными частями достигали сотые доли миллиметра. Поэтому любое изменение температуры или попадание твердых частиц могло привести к отказу насоса из-за останова ротора.

Конструкция ТМН Беккера позволила избежать этих недостатков [1]. В основном конструкция состоит из высокоскоростного ротора и неподвижного статора объединенных в корпусе. Вращающийся и неподвижный диски расположены последовательно. Расстояния между вращающимися и неподвижными частями находятся в диапазоне от нескольких десятых долей до нескольких миллиметров. Все диски имеют наклонные лопатки с каналами между ними, а лопатки роторов и статоров наклонены в противоположную сторону. Каждый канал на диске действует как элементарный молекулярный насос, подобный насосу Геде. Все каналы на одном диске соединены параллельно и вместе дают высокую быстроту действия. В дальнейшем компаниями Edwards Vacuum, Pfeiffer Vacuum была предложена конструкция с комбинированной проточной частью ТМН, которая объединила в одном корпусе лопаточные колеса и рабочие диски молекулярного насоса. Эта конструкция обладает преимуществом обеспечения высокой быстроты действия и низкого предельного остаточного давления [2, 3]. Имеются и некоторые недостатки в виде сложности промышленного исполнения, требований к оборудованию для изготовления высокоточной

Гордеева У.С., Шарипов Ф.М.. Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис. *Труды ИСП РАН*, том 34, вып. 6, 2022 г., стр. 197-206

проточной части, а также необходимость проведения сложных расчетов для определения оптимальных основных параметров ТМН. Кроме того, создание математической модели течения газа в проточной части ТМН позволит минимизировать количество экспериментальных образцов и повысить качество производства и эффективность работы ТМН.

В настоящее время ТМН используются в самых разных областях науки и техники: в массспектрометрах, нанесение покрытий, ускорителях элементарных частиц, течеискателях, при имитации условий космического пространства [4, 5]. Основные области применения ТМН приведены на рис. 1.





Задача совершенствования характеристик ТМН является достаточно актуальной в условиях необходимости получения технологического суверенитета Российской Федерации. Для ускорения процессов проектирования, разработки и экспериментальной обработки ТМН критическим условием является наличие точных математических моделей, описывающих процесс течения газа в проточной части ТМН.

На качество моделирования течения газа в проточной части ТМН достаточно сильно влияют особенности моделирования взаимодействия молекул откачиваемого газа с поверхностями насоса. В настоящее время в большом количестве работ в качестве граничного условия используется граничное условие Максвелла (диффузное рассеяние), что недостаточно точно отражает особенности взаимодействия газа с твердой поверхностью.

Таким образом, целью работы является моделирование процесса течения газа через проточную часть с применением нового граничного условия, которое показало свою перспективность в части более точного моделирования особенностей взаимодействия газа с твердой поверхностью – модель, предложенная Черчиньяни-Лампис, ЧЛ) (Cercignani-Lampis Model, CL) [6,7].

Для достижения цели работы необходимо выполнить следующие задачи:

- описание расчетной схемы моделирования процесса течения газа в проточной части ТМН при помощи метода пробной частицы с применением граничного условия Максвелла и Черчиньяни-Лампис;
- проведение численных экспериментов по определению основных параметров ТМН с использованием указанных граничных условий при различных геометрических параметрах межлопаточного канала и скорости вращения ротора ТМН;
- анализ результатов численных экспериментов и разницы в результатах моделирования, полученных при помощи граничных условий Макевелла и ЧЛ;

Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gassurface interaction model. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206

2. Описание расчетной модели

В ходе исследования моделировалась прямая *K*₁ и обратная *K*₁₁ вероятности прохождения молекул через межлопаточный канал ТМН.

Начальные условия моделирования: проводится численное решение уравнения Максвелла – Больцмана.

$$\begin{split} f_{(V_x,V_y,V_z)}(v_x, v_y, v_z) &= \frac{f_M(v)}{n} = \frac{1}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(v)^2}{2RT}\right] = f_{V_x}(v_x) f_{V_y}(v_y) f_{V_z}(v_z) \\ f_{V_x}(v_x) &= \frac{1}{(2\pi RT)^{1/2}} \exp\left[-\frac{v_x^2}{2RT}\right]. \end{split}$$

моделирование взаимодействия между стенками межлопаточного канала и молекулами моделируется двумя типами граничных условий.

• Модель Максвелла (диффузное рассеяние);

$$R_{\mathcal{M}}(\nu' \to \nu; \epsilon) = (1 - \epsilon)\delta(\nu - (\nu' - 2\nu'_n n)) + \epsilon \frac{m^2 \nu_n}{2\pi (kT_s)^2} \exp\left(\frac{-m\nu^2}{2kT_s}\right),$$

где ν' и ν скорости падащюей на поверхность и отраженной поверхностью молекулы,

- v_n нормальная составляющая скорости,
- т масса молекулы,
- T_s температура поверхности,
- **п** нормаль к поверхности,
- *k* постоянная Больцмана,

 $c_n =$

- $\delta(x)$ дельта функция Дирака
- Модель ЧЛ;

При использовании модели ЧЛ скорости молекул после столкновения со стенкой рассчитываются следующим образом:

$$\begin{split} c_{ct1} &= \sqrt{\alpha_t \cdot (2 - \alpha_t)} \cdot c_* \cdot \cos \cos \theta + (1 - \alpha_t) \cdot c'_{t1} \\ c_{ct2} &= \sqrt{\alpha_t \cdot (2 - \alpha_t)} \cdot c_* \cdot \sin \sin \theta + (1 - \alpha_t) \cdot c'_{t2} \\ \left[\alpha_n \cdot c_*^2 + (1 - \alpha_n) \cdot {c'_n}^2 + 2 \cdot \sqrt{\alpha_n \cdot (1 - \alpha_n)} \cdot c_* \cdot c'_n \cdot \cos \cos \theta \right]^{\frac{1}{2}} \end{split}$$

где c'_{t1}, c'_{t2}, c'_n – компоненты скорости молекул до взаимодействия со стенкой; c_{t1}, c_{t2}, c_n – компоненты скорости молекул после взаимодействия со стенкой; a_t, a_n – аккомодации тангенциального импульса и нормальной энергии, соответственно.

При моделировании использовались следующие допущения:

- пространственное распределение молекул на стороне высокого вакуума равномерное;
- высота межлопаточного канала является бесконечной;
- режим течения газа молекулярный (отсутствуют столкновения между молекулами газа);
- скорости молекул подчиняются распределению Максвелла;
- взаимодействие молекул газа со стенками ТМН описывается моделью Черчиньяни– Лампис и моделью Максвелла.

Расчетная схема моделирования приведена на рис. 2.

Гордеева У.С., Шарипов Ф.М.. Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис. *Труды ИСП РАН*, том 34, вып. 6, 2022 г., стр. 197-206





В данной работе рассмотрены следующие основные характеристики ТМН:

- результирующая вероятность перехода молекул газа через межлопаточный канал (пропорциональна быстроте действия насоса) K_{max};
- степень повышения давления τ_{max}

Результирующая вероятность перехода K_{max} рассчитывается по следующей формуле:

$$K_{max} = K_I - K_{II},$$

где K_I – вероятность перехода молекул через межлопаточный канал в прямом направлении; K_{II} – вероятность перехода молекул через межлопаточный канал в обратном направлении; Степень повышения давления τ_{max} рассчитывается по следующей формуле:

$$\tau_{max} = \frac{K_I}{K_{II}}$$

Вероятности прохождения молекул в прямом и обратном направлении определяются методом пробной частицы (метод Монте-Карло), который показал свою эффективность при расчете характеристик ТМН.

Вероятность перехода через межлопаточный канал в прямом направлении рассчитывается по следующей формуле:

$$K_I = \frac{N_I}{N},$$

где N_I – количество частиц, которые перешли со стороны высокого вакуума на сторону форвакума, N – общее количество частиц при моделировании.

Вероятность перехода через межлопаточный канал в обратном направлении рассчитывается по следующей формуле:

$$K_{II} = \frac{N_{II}}{N},$$

где N_{II} – количество частиц, которые перешли со стороны форвакуума вакуума на сторону высокого.

Укрупненный алгоритм моделирования методом пробной частицы показан на рис. 3:

Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gassurface interaction model. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206



Puc. 3. Укрупненный алгоритм моделирования методом пробной частицы Fig. 3. Enlarged modelling algorithm by the test particle method

Моделирование проводится в два этапа: моделирование прямого и обратного переходов молекул через межлопаточный канал. При прямом переходе частицы инициализируются на стороне высокого вакуума. При обратном переходе частицы инициализируются на стороне форвакуума. На каждом этапе моделируется движение каждой частицы в межлопаточном канале, подчитывается количество частиц, достигших форвакуума и высокого вакуума, соответственно.

Алгоритм реализован на языке GNU Octave (версия 5.1.0). При моделировании прямого и обратного перехода рассматривалось 10⁶частиц.

3. Описание численного эксперимента

В ходе численного эксперимента рассматривались следующие комбинации геометрических параметров межлопаточного канала (угол наклона лопаток α , соотношения сторон межлопаточного канала $\frac{a}{b}$) и соотношения окружной скорости лопаток ТМН к наиболее вероятной тепловой скорости молекул *C*

- значения C = [0.5, 1.0, 1.5, 2.0];
- значения $\frac{a}{b} = [0.6 \ 0.8 \ 1. \ 1.2 \ 1.4 \ 1.6];$
- значения *α* = [15, 30, 45].

Для каждой из моделей взаимодействия молекул и стенок межлопаточного канала (модель Максвелла и модель ЧЛ) моделируется процесс течения газа в молекулярном режиме при всех возможных вышеуказанных комбинациях геометрических параметров межлопаточного канала и соотношения скоростей.

Моделирование проводится отдельно с применением модели Максвелла и отдельно с применением модели ЧЛ со следующими значениями коэффициентов аккомодации тангенциального импульса $\alpha_t = 0.9$ и нормальной энергии $\alpha_n = 1.0$.

Гордеева У.С., Шарипов Ф.М.. Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис. *Труды ИСП РАН*, том 34, вып. 6, 2022 г., стр. 197-206

4. Результаты и обсуждения численного эксперимента

Результаты моделирования для случая угла наклона лопаток межлопаточного канала $\alpha = 15^{\circ}$ показаны на рис. 4.



Рис. 4. Результаты моделирования для случая угла наклона лопаток межлопаточного канала α=15°: (а) Значения К_{тах}, полученные при помощи модели ЧЛ, (б) Разница между значениями К_{тах}, полученными при помощи модели ЧЛ и значениями, полученными при помощи модели Максвелла; (в)

Значения T_{max}, полученные при помощи модели ЧЛ, (г) Разница между значениями T_{max}, полученными при помощи модели ЧЛ и значениями, полученными при помощи модели Максвелла

Fig. 4. Results of modelling for the case of the angle of inclination of the blades of the interscapular channel $a=15^{\circ}$: (a) K_max values obtained with the CL model, (b) Difference between the K_max values obtained with the CL model and those obtained with the Maxwell model; (c) T_max values obtained using the CL model, (d) Difference between the T_max values obtained using the CL model and those obtained using the Maxwell model

Результаты моделирования для случая угла наклона лопаток межлопаточного канала $\alpha = 30^{\circ}$ показаны на рис. 5.

Результаты моделирования для случая угла наклона лопаток межлопаточного канала α =45° показаны на рис. 6.

Из анализа полученных графиков можно сделать вывод, что особенности моделирования процесса течения газа с применением граничных условий, описанных моделью ЧЛ имеют большее воздействие применительно к параметру τ_{max} при меньших углах наклона межлопаточного пространства и больших значениях соотношения скоростей U.

Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gassurface interaction model. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206

При малом соотношении сторон межлопаточного канала a/b значительно возрастает количество частиц, ударяющихся о стенки межлопаточного канала, скорости которых после столкновения рассчитываются при помощи модели ЧЛ, которая значительно отличается от модели Максвелла (диффузное рассеяние). Следовательно, чем больше относительная длина межлопаточного канала, тем больше будет разница между результатами моделирования с граничным условием ЧЛ и граничным условием Максвелла.



Рис. 5. Результаты моделирования для случая угла наклона лопаток межлопаточного канала α=30°: (а) Значения К_{тах}, полученные при помощи модели ЧЛ, (б) Разница между значениями К_{тах}, полученными при помощи модели ЧЛ и значениями, полученными при помощи модели Максвелла; (в) Значения Т_{тах}, полученные при помощи модели ЧЛ, (г) Разница между значениями Т_{тах}, полученными

Suddenias T_{max} , полученные при помощи мосели Эл. (2) Газница межбу значениями T_{max} , полученными при помощи модели 4Л и значениями, полученными при помощи модели Максвелла Fig. 5. Results of modelling for the case of the angle of inclination of the blades of the interscapular channel

Fig. 5. Results of modelling for the case of the angle of inclination of the blades of the interscapital channel $\alpha = 30^{\circ}$: (a) K_max values obtained with the CL model, (b) Difference between the K_max values obtained with the CL model and those obtained with the Maxwell model; (c) T_max values obtained using the CL model, (d) Difference between the T_max values obtained using the CL model and those obtained using the Maxwell model

Результаты проведенных численных экспериментов показывают существенное расхождение между результатами моделирования, полученными при помощи моделей Максвелла и ЧЛ. Данное обстоятельство необходимо учитывать при проектировании новых и совершенствовании существующих образцов ТМН.

При этом необходимо проведение дополнительных экспериментальных исследований для определения точных значений коэффициентов аккомодации в рамках модели ЧЛ применительно к требуемым типам откачиваемых газов (аргон, азот, гелий).

Гордеева У.С., Шарипов Ф.М.. Математическое моделирование процесса течения газа в проточной части турбомолекулярного вакуумного насоса с использованием модели взаимодействия газа с поверхностью Черчиньяни-Лампис. *Труды ИСП РАН*, том 34, вып. 6, 2022 г., стр. 197-206

Кроме того, в рамках данной работы были проведены расчеты исключительно в молекулярном режиме. В дальнейших работах необходимо произвести исследования влияния новых граничных условий не только в молекулярном режиме, но и в переходном и вязкостном режимах.





5. Выводы

В работе было проведено численное моделирование процесса течения газа в проточной части ТМН при помощи метода пробной частицы при помощи двух подходов к моделированию взаимодействия молекул газа и с поверхностью ТМН: модели Максвелла (диффузное рассеяние) и модели Черчиньяни-Лампис. При помощи вычислительного эксперимента было оценено влияние вышеуказанных моделей взаимодействия газа с твердой поверхностью в широком диапазоне геометрических (угол наклона межлопаточного канала и соотношение сторон межлопаточного канала) и кинематических (соотношение скорости лопаток и Gordeeva U.S., Sharipov F.M. Mathematical modeling the process of gas flow in the turbomolecular pump using the Cercignani-Lampis gassurface interaction model. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 34, issue 6, 2022. pp. 197-206

наиболее вероятной тепловой скорости движения молекул) параметров на основные характеристики ТМН (степень повышения давления и максимальная быстрота действия).

Результаты вычислительного эксперимента показывают существенную разницу между результатами, полученными при помощи модели Максвелла и модели Черчиньяни-Лампис, для определенных комбинаций параметров насоса, что необходимо учитывать при разработке и проектировании образцов ТМН.

Список литературы / References

- Becker W. The turbomolecular pump, its design, operation and theory; calculation of the pumping speed for various gases and their dependence on the forepump. Vacuum, vol. 16, issue 11, 1966, pp, 625-632.
- [2]. Sawada T. Performance of a Rotor with a Single Blade Row in the Transition Flow Regime. Bulletin of JSME, vol. 16, issue 96, 1973, pp. 993-1001.
- [3]. Heo J.-S., Hwang Y.-K. DSMC calculations of blade rows of a turbomolecular pump in the molecular and transition flow regions, Vacuum, vol. 56, issue 2, 2000, pp. 133-142.
- [4]. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows, second edition. Clarendon Press, 1994, 484 p.
- [5]. Demikhov K.E., Pyzhov I.I. A model for the gas-molecule transfer process by the intervane channels of the rotor of a turbomolecular vacuum pump. Chemical and Petroleum Engineering, vol. 13, issue 1, 1977, pp. 49-52.
- [6]. Sharipov F. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. European Journal of Mechanics - B/Fluids, vol. 21, issue 1, 2002, pp.113-123:
- [7]. Фролова А.А. Численное сравнение обобщенной модели Максвелла и модели Черчиньяни– Лэмпис. Журнал вычислительной математики и математической физики, том 60, вып. 12, 2020 г., стрю 2162–2176 / Frolova A.A. Numerical comparison of the generalized Maxwell and Cercignani– Lampis models. Computational Mathematics and Mathematical Physics, vol. 60, issue 12, 2020, pp. 2094-2107.

Информация об авторах / Information about authors

Ульяна Саидовна ГОРДЕЕВА – соискатель, выпускница кафедры «Вакуумная и компрессорная техника» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сфера научных интересов: разработка вакуумных систем, вычислительная газодинамика, математическое моделирование.

Uliana Saidovna GORDEEVA – PhD research, graduate of the department "Vacuum and Compressor Equipment" Bauman Moscow State Technical University. Research interests: vacuum systems' development, computational gas dynamics, mathematical modelling.

Феликс Маратович ШАРИПОВ – профессор кафедры физики Федерального университета штата Парана, Бразилия. Сфера научных интересов: численные методы динамики разреженного газа в микргидродинамике, вакуумной технике и аэротермодинамике.

Felix Maratovich SHARIPOV – professor at Department of Physics Federal University of Parana, Brazil. Research interests: numerical methods of rarefied gas dynamics applied to microfluidics, vacuum technology and aerothermodynamics.