



Écoulement dans une pompe à vide turbomoléculaire : modélisation et analyse par voie numérique

Ye Wang

► To cite this version:

Ye Wang. Écoulement dans une pompe à vide turbomoléculaire : modélisation et analyse par voie numérique. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Grenoble, 2013. Français. NNT : 2013GRENI062 . tel-01401145

HAL Id: tel-01401145

<https://theses.hal.science/tel-01401145>

Submitted on 20 Jan 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Mécanique des fluides, procédés, énergétique**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Ye WANG

Thèse codirigée par **Christophe CORRE** et
Jean-Paul THIBAUT

préparée au sein du
**Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels
(LEGI)**

dans l'**École Doctorale I-MEP²**

Ingénierie – Matériaux, Mécanique, Environnement, Energétique,
Procédés, Production

Ecoulement dans une pompe à vide turbomoléculaire : modélisation et analyse par voie numérique

Soutenance publique le **22 novembre 2013**
devant le jury composé de :

M. Luc MIEUSSENS

Professeur à l'Institut de Mathématiques de Bordeaux (Président)

M. Stéphane COLIN

Professeur à l'INSA de Toulouse (Rapporteur)

M. Sofiane KHELLADI

Maître de Conférences HDR aux Arts et Métiers ParisTech (Rapporteur)

M. Thibaut BOURRILHON

Ingénieur chez adixen Vacuum Products

M. Christophe CORRE

Professeur à l'ENSE3 de Grenoble, Directeur de thèse

M. Jean-Paul THIBAUT

Chargé de recherche CNRS au LEGI (Grenoble), Directeur de thèse



Cette thèse est dédiée à ma très chère maman qui m'a toujours soutenue !

Remerciements

Je tiens dans un premier temps à remercier Monsieur Stéphane Colin et Monsieur Sofiane Khelladi pour avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse, pour l'intérêt qu'ils ont porté et pour les remarques constructives qu'ils ont fait sur cette thèse. Je remercie également le président du jury, Monsieur Luc MIEUSSENS pour l'intérêt qu'il a manifesté envers mon travail.

Mes remerciements s'adressent ensuite à mon directeur de thèse, Monsieur Christophe Corre, Professeur des Universités et directeur adjoint du Laboratoire des écoulements géophysiques et industriels, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe pendant deux ans. Je lui suis très reconnaissant pour ses réactivités et le temps conséquent qu'il m'a accordé tout au long de ses trois ans de recherche malgré toutes les contraintes géographiques et industrielles que implique ce sujet thèse atypique, et également pour ses qualités pédagogiques et scientifiques, sa confiance et sa sympathie. Je le remercie également pour son aide inestimable lors de la rédaction de ce manuscrit de thèse.

Ma plus profonde gratitude à mon encadrant industriel, Monsieur Thibaut Bourrilhon, ingénieur chez adixen Vacuum Products, pour m'avoir accompagné dans les mondes de la recherche et de l'industrie et pour ses efforts substantiels consacrés au montage financier de cette thèse. Je dois beaucoup à nos longues discussions, au temps qu'il a pu me consacrer, aux conseils judicieux qu'il a su me prodiguer et aux encouragements dès que j'en avais besoin. J'ai beaucoup appris à ses côtés depuis plus de quatre ans et je lui adresse ma gratitude pour tout cela.

Un grand merci à Monsieur Olivier Dauvillier, le responsable du pôle technologique de la société adixen Vacuum Products pour m'avoir accueilli au sein de son équipe. Je lui suis très reconnaissant pour son attention de tout instant sur mes travaux, pour ses conseils avisés et son écoute qui ont été prépondérants pour la bonne réussite de cette thèse. Son énergie et sa confiance ont été des éléments moteurs pour moi.

J'adresse de chaleureux remerciements à mon co-encadrant de thèse, Monsieur Jean-Paul Thibault, chargé de recherches du Laboratoire des écoulements géophysiques et industriels, pour avoir suivi mes travaux pendant la durée de ma thèse. ses conseils et remarques, toujours pertinents, m'ont permis de clarifier ma pensée parfois embrouillée et ajuster mes travaux à des problématiques pratiques et réelles. J'ai pris un grand plaisir à travailler avec lui.

Au final, je remercie l'ensemble des personnes que j'ai côtoyées chaque jour au LEGI et à adixen et avec lesquelles j'ai eu plaisir à travailler.

Résumé

Cette thèse est consacrée à la modélisation et à l'analyse par voie numérique de l'écoulement dans une pompe à vide turbomoléculaire hybride, combinant une succession d'étages de type rotor et stator et un Holweck. Une approche de type Test Particle Monte Carlo 3D a été développée pour des configurations de pompes industrielles (géométries complexes d'aubes, gestion des étages rotor et stator) dans un souci d'optimisation des coûts de simulation. L'outil numérique développé a été validé pour des configurations académiques et industrielles, en s'appuyant notamment sur des résultats expérimentaux obtenus grâce au banc d'essai de l'entreprise aVP. L'apport de l'approche TPMC3D par rapport aux méthodes de design disponibles en début de thèse a été clairement démontré pour le régime moléculaire libre. Quelques préconisations de design ont également pu être formulées en utilisant le code développé. Le potentiel d'une approche de type Direct Simulation Monte Carlo, prenant en compte les interactions entre molécules du gaz, a également été établi en 2D pour le régime de transition.

Abstract

This thesis is devoted to the modeling and the numerical analysis of the flow in a turbomolecular vacuum pump of hybrid type, that is combining a succession of rotor and stator stages with an Holweck. A 3D Test Particle Monte Carlo approach has been developed for simulating industrial pump configurations (complex blade geometries, management of rotor and stator stages), with attention paid to the optimization of the computational cost. The numerical tool developed in the thesis has been validated for academic and industrial test cases, relying in particular on reference experimental results obtained on the test rig of the aVP company. The prediction improvement brought by the TPMC 3D approach with respect to the design tools available at the start of the thesis has been clearly demonstrated for the free molecular flow regime. Some design recommendations have also been formulated using the developed solver. The potential of a Direct Simulation Monte Carlo approach, taking into account the interactions between gas molecules, has also been established in 2D for the transition regime.

Table des matières

Introduction	1
1 Pompes à vide turbomoléculaires et régimes d'écoulement du gaz	4
1.1 Pompes à vide turbomoléculaires	4
1.1.1 Pompes TMPs	5
1.1.2 Pompes moléculaires Holweck	7
1.1.3 Description d'une pompe TMP hybride : ATHM	9
1.2 Caractérisation de la performance des pompes TMP/ MDP	14
1.3 Nombre de Knudsen et régimes d'écoulement du gaz	17
1.3.1 Interactions entre les molécules de gaz	21
1.3.2 Interaction gaz/paroi	23
2 État de l'art des méthodes de dimensionnement des pompes TMP/MDP	26
2.1 Méthodes de modélisation des gaz raréfiés selon le régime d'écoulement . .	27
2.1.1 Modélisation du régime continu	27
2.1.2 Modélisation du régime moléculaire libre	31
2.1.3 Modélisation du régime de transition	32
2.1.4 Approches unifiées	35
2.2 Méthodes de dimensionnement des pompes TMP/MDP	35
2.2.1 Pompage en régime moléculaire libre	36
2.2.2 Pompage en régime continu	40
2.2.3 Pompage en régime de transition	42
2.2.4 Modèle unique	44
2.3 Stratégie numérique retenue	44

3	Développement et validation d'un code TPMC 3D	47
3.1	Principes de l'approche TPMC	47
3.1.1	Application de l'approche TPMC dans un modèle 2D d'un rotor . .	49
3.1.2	Problématiques liées à la mise en œuvre d'un code TPMC 3D	52
3.2	Description du code TPMC 3D développé	53
3.2.1	Traitement numérique de la trajectoire	53
3.2.2	Limites de la trajectoire	60
3.2.3	Traitement des surfaces : approche hybride	63
3.2.4	Étude de sensibilité aux paramètres de discrétisation	64
3.2.5	Restriction à une portion angulaire périodique	67
3.2.6	Fermeture des jonctions surfaces facettées / surfaces analytiques . .	69
3.2.7	Passage des particules entre étages	72
3.2.8	Critère de convergence	79
3.3	Validation du code TPMC 3D par rapport à la littérature	81
4	Application du code TPMC 3D aux pompes aVP	84
4.1	Description du banc d'essai	84
4.1.1	Caractéristiques des moyens de mesure	87
4.1.2	Incertitude des mesures	89
4.2	Comparaison simulations TPMC 3D / expériences aVP	90
4.3	Démonstration d'intérêt de TPMC 3D	96
4.3.1	Démonstration sur un étage rotor	96
4.3.2	Démonstration sur une pompe multi-étagée	97
4.4	Analyses physiques utilisant TPMC 3D	104
4.4.1	Étude de sensibilité à la vitesse de rotation	106
4.4.2	Étude de sensibilité au jeu radial	109
4.4.3	Effet de couplage rotor/stator	110
5	Application de DSMC 2D au régime de transition	113
5.1	Principes de la méthode DSMC	113
5.2	Mise en œuvre d'un code DSMC 2D	117
5.3	Simulation à débit nul	120

5.4 Simulation à débit non nul	125
Conclusion & Perspectives	128
Bibliographie	131
Annexe : Assemblage des taux de transmission	135
Nomenclature	138
Liste des tableaux	142
Table des figures	143

Introduction

Les pompes à vide turbomoléculaires (TurboMolecular Pump, abrégé en TMP dans toute la suite du mémoire) ont été conçues en 1957 par Becker [36] afin de proposer une solution alternative aux pompes à diffusion qui étaient, avant l'apparition des TMPs, la seule solution pour atteindre un vide très poussé. Le principe de pompage des TMPs est basé sur un transfert de quantité de mouvement entre des pales en rotation à grande vitesse et les molécules du gaz d'où leur appellation de pompes turbomoléculaires. En général, les TMPs ne fonctionnent efficacement qu'avec une pression inférieure à 1 mbar au refoulement¹. Par conséquent, pour amener le flux de gaz à la pression atmosphérique, une TMP nécessite d'être associée à une pompe primaire qui assurera ce refoulement à pression atmosphérique. A très basse pression ($<1\text{mbar}$), les TMPs sont capables de produire des taux de compression nettement plus élevés que ceux des turbocompresseurs en aviation, types de machines qui présentent une grande similitude avec les TMPs au niveau de leur géométrie d'ensemble. Lorsqu'elles sont combinées avec une pompe primaire, les TMPs sont aujourd'hui les seules pompes à vide capables d'atteindre un vide très poussé ($<10^{-10}\text{Pa}$).

Depuis leur commercialisation en 1958 par Pfeiffer VacuumTM, les TMPs sont devenues l'une des solutions les plus répandues dans le domaine du vide et de l'ultravide grâce à leur performance consistante, leur propreté et leur fiabilité. Par rapport à d'autres types de pompes à vide (par exemple, les pompes volumétriques et les pompes moléculaires), l'un des avantages majeurs des TMPs est la vitesse de pompage (débit de gaz) qu'elles permettent d'atteindre. Les TMPs jouent ainsi un rôle-clé dans le processus de fabrication des semi-conducteurs en permettant d'extraire efficacement le ou les gaz au cours de ce processus. Afin de répondre plus particulièrement aux besoins de ce secteur industriel, qui évoluent très rapidement et conduisent à des exigences de conditions de vide sans cesse plus strictes, les fabricants des pompes à vide sont constamment poussés à augmenter le débit de leurs produits. Il devient donc désormais crucial pour ces fabricants de disposer de méthodes fiables qui permettent de concevoir plus rapidement de nouvelles pompes et d'optimiser leurs performances.

Durant ce dernier demi-siècle, la conception des TMPs a beaucoup évolué. La vitesse de rotation du rotor est ainsi passée de 150 m/s en extrémité de pale à plus de 500 m/s, grâce notamment à l'utilisation de palier magnétique. Le jeu fonctionnel entre la partie tournante et la partie fixe a pu être réduit jusqu'à quelques dixièmes de millimètre. Le profil des pales est devenu progressivement complexe puisque l'on est passé de simples pales droites à des pales vrillées assurant un niveau supérieur de performance. En associant sur le même arbre des TMPs à des pompes moléculaires (MDP, Molecular Drag Pump) dont le principe de fonctionnement est détaillé dans le chapitre 1, des pompes dites hybrides ont été développées afin de pouvoir refouler à de plus hautes pressions tout en conservant

1. Ce critère de pression peut être revu à la hausse dans le cas des gaz « lourds ».

une vitesse de pompage élevée. Toutes ces évolutions ont permis le développement des pompes de plus en plus compactes. Cependant, en dépit de ces progrès techniques et technologiques, des problèmes de dimensionnement subsistent, pour lesquels chercheurs et ingénieurs tentent de développer des solutions viables. Ainsi, l'une des difficultés majeures liées au développement des TMPs est le dimensionnement de leurs pales pour qu'elles s'adaptent aux différents régimes de l'écoulement qui peuvent coexister dans la pompe. En général, les niveaux de pression rencontrés dans ces pompes varient dans une gamme très large : de 10^{-5} Pa à 10^{-1} Pa à l'aspiration, de 10^0 Pa à 10^2 Pa au refoulement. L'écoulement interne à la pompe balaie donc l'ensemble des régimes d'écoulement possibles liés au degré de raréfaction du gaz, soit du régime visqueux au régime moléculaire libre, en passant par le régime intermédiaire. Les régimes moléculaire et intermédiaire présentent des caractéristiques physiques qui diffèrent radicalement de celles du régime visqueux et ne peuvent, en particulier, plus être traités à l'aide d'une approche continue classique.

La société « aVP » (adixen Vacuum Products) produit et commercialise des TMPs depuis plus de 20 ans. Au démarrage de cette thèse, deux types de méthode étaient opérationnelles au sein d'« aVP » pour effectuer les pré-dimensionnements nécessaires au développement des TMPs :

- une méthode dite « CFD 3D » qui consiste à résoudre (simulation numérique directe) les équations de Navier-Stokes instantanées dans la géométrie tridimensionnelle du prototype de pompe. Cette approche peut être appliquée au calcul de la zone de l'écoulement située au voisinage de la sortie de la pompe (où l'écoulement est proche du régime visqueux) et mise en œuvre pour optimiser la géométrie de cette partie de la pompe.
- la méthode statistique dite « TPMC 2D » (où TPMC signifie Test Particle Monte Carlo) qui s'appuie sur la théorie cinétique des gaz pour décrire des écoulements en régime moléculaire libre. Il a été établi par un rapport interne que cette approche est fiable et efficace pour dimensionner les pales dans le cas de pompes à petit diamètre (pour lesquelles les effets 3D restent faibles).

Pour décrire le régime d'écoulement dit intermédiaire qui concerne une grande partie de la pompe, l'approche actuellement retenue chez « aVP » consiste à extrapoler les résultats obtenus par la méthode TPMC 2D en appliquant des facteurs de correction empiriques qui s'appuient notamment sur l'extrapolation d'essais disponibles.

La présente thèse s'inscrit dans le cadre d'un projet de l'entreprise « aVP » qui vise à mettre en place une chaîne de pré-dimensionnement par voie numérique pour les TMPs afin de limiter le recours à l'expérience, coûteux à la fois en temps et en argent. On se situe donc dans le contexte classique d'une montée en puissance d'outils de simulation numérique dans le processus de conception d'un dispositif technologique. La spécificité majeure de notre étude tient à la présence des différents régimes d'écoulement du gaz qui nécessitent une modélisation qui va de la théorie cinétique des gaz à une classique description de type milieu continu. La stratégie « CFD 3D » a été en particulier développée dans le cadre d'un diplôme de recherche technologique antérieur à cette thèse, qui a conduit à la mise en place d'une chaîne de calcul faisant appel au logiciel commercial FluentTM modifié par des conditions aux limites pariétales adaptées au régime de transition [69]. La présente thèse est plus spécifiquement consacrée au régime moléculaire et, en premier lieu, au développement d'un outil de type « TPMC 3D » dont nous montrerons qu'il permet de prédire la performance des TMPs de façon plus fiable que la méthode « TPMC 2D » initialement disponible, tout particulièrement pour des pompes à grand diamètre qui constituent une demande de plus en plus pressante du marché car la vitesse de pompage

est proportionnelle au diamètre de la pompe.

Récemment, plusieurs publications [11] [68] [12] [35] ont montré la possibilité de simuler un ou plusieurs étages d'une TMP en régime intermédiaire en faisant appel à la méthode DSMC (Direct Simulation Monte Carlo). Bien qu'il s'agisse davantage d'études à caractère démonstratif sur des configurations académiques, les résultats obtenus laissent entrevoir la perspective de pouvoir dimensionner des TMPs industrielles avec cette méthode. C'est pour cette raison qu'un autre axe de recherche a été consacré dans cette thèse à la simulation du régime intermédiaire grâce à la méthode DSMC. Comme nous le détaillerons par la suite dans le mémoire, la méthode DSMC permet de décrire le régime intermédiaire dans la mesure où elle prend en compte les collisions inter-moléculaires, à la différence d'une approche TPMC qui ne tient compte que des seules collisions entre une molécule et les parois solides rencontrées au long de sa trajectoire.

Le présent mémoire de thèse est organisé en 5 chapitres. Le premier chapitre détaille la structure et le principe de fonctionnement d'une pompe TMP, objet central de cette étude, en soulignant la présence d'une large gamme de régimes d'écoulement pour les gaz qui y circulent. Le chapitre 2 passe en revue les choix de modélisation adaptés aux différents régimes d'écoulements à prendre en compte, du régime continu au régime moléculaire libre en passant par le régime de transition. Ce chapitre propose ensuite un état de l'art, plus spécifique, des outils de dimensionnement disponibles pour les TMPs : les approches existantes chez « aVP » ou dans la littérature pour dimensionner les pales des différents étages d'une TMP sont ainsi analysées et le choix de développer une méthodologie s'appuyant sur une approche de type TPMC en 3D est justifié. Les chapitres 3 et 4 décrivent la contribution majeure de cette thèse : on y présente le code TPMC 3D développé dans le cadre de nos recherches et qui permet de prédire la performance d'une TMP en régime moléculaire libre. Le chapitre 3 est plus spécifiquement consacré à la description des différents ingrédients spécifiques et originaux qui ont été introduits dans un code TPMC 3D développé *ex-nihilo* pour maximiser l'efficacité de l'outil numérique et faciliter ainsi son adoption dans le cadre d'un processus de design industriel au sein du bureau d'études de « aVP ». Nous présentons également un ensemble d'analyses permettant de soigneusement valider le code TPMC 3D par rapport à la littérature. Dans le chapitre 4, l'outil TPMC 3D développé est appliqué au design d'une pompe industrielle et comparé à d'autres outils de dimensionnement : les avantages qu'il apporte pour le dimensionnement des pompes de grand diamètre sont ainsi bien mis en évidence. Enfin, le chapitre 5 décrit le développement d'un outil de type DSMC 2D pour un étage rotor. Les problématiques liées à l'implémentation des conditions limites nécessaires au calcul de TMPs sont détaillées. Même si les contraintes de coût associées à l'approche DSMC ont limité notre analyse à un cas 2D, l'intérêt de cette stratégie DSMC par rapport à la méthode TPMC est mise en évidence pour le régime intermédiaire. Le manuscrit se clôt par une conclusion générale qui récapitule les principales contributions de cette thèse à l'analyse des écoulements dans les TMPs et propose des perspectives de travail à court et moyen terme, avec en particulier des propositions et suggestions précises pour de futurs développements des outils de simulation mis en place. On trouvera dans les annexes du mémoire des détails sur la structure des différents codes développés dans ces travaux, qui doivent faciliter la poursuite des développements du code TPMC3D et DSMC2D pour une prédiction toujours plus fiable de la performance des TMPs.

Chapitre 1

Pompes à vide turbomoléculaires et régimes d'écoulement du gaz

Ce chapitre 1 est consacré, dans sa première partie, à la présentation des pompes à vide turbomoléculaires (TMP pour Turbo Molecular Pump) et des pompes à vide moléculaires (MDP pour Molecular Drag Pump). Nous nous appuyons sur l'exemple d'une pompe de type ATHM, produit développé chez « aVP », pour détailler la structure d'une pompe TMP hybride, expliquer les principes de pompage utilisés dans cette pompe et préciser sa réalisation technologique. Afin de mieux comprendre les problématiques liées aux écoulements des gaz à l'intérieur des pompes TMP/MDP, la deuxième partie de ce chapitre est consacrée à une présentation synthétique des différents régimes d'écoulement qui caractérisent les gaz dits raréfiés.

1.1 Pompes à vide turbomoléculaires

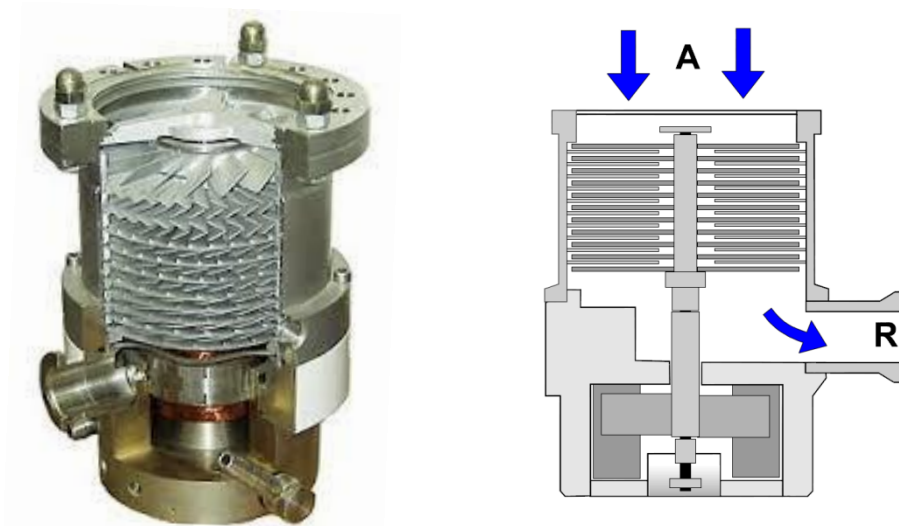


FIGURE 1.1 – Exemple d'une TMP et schéma simplifié de la machine.

Une pompe TMP est une pompe cinétique à entraînement mécanique. Elle est constituée d'un empilement de disques munis de pales, disques en rotation (rotors) et fixes (stators) disposés de façon alternée. Les pales sont inclinées en sens inverse selon qu'elles appar-

tiennent à un disque stator ou un disque rotor. Les pompes TMPs présentent des similitudes d'apparence globale avec des turbocompresseurs axiaux (comme l'illustre l'exemple de TMP présenté sur la figure 1.1, mais le profilage des pales est bien différent entre de tels turbocompresseurs et des TMPs. Dans les TMPs, l'angle d'inclinaison des pales varie considérablement le long de l'empilement des disques rotors et stators lorsque l'on passe du côté "vide poussé" (entrée ou admission (A) comme indiqué sur le schéma simplifié de la figure 1.1) du dispositif au côté "vide primaire" (sortie ou refoulement (R)).

1.1.1 Pompes TMPs

Une pompe TMP ne fonctionne efficacement qu'en régime moléculaire libre, régime dans lequel le libre parcours moyen des molécules est très grand par rapport aux dimensions caractéristiques de la pompe. Les collisions intermoléculaires sont alors négligeables et les seules collisions entre les molécules et les parois solides (surfaces des pales) peuvent être considérées. Le principe de pompage d'une TMP est illustré sur la figure 1.2. Lorsque le gaz à comprimer (flux de molécules indépendantes) parvient à l'aspiration de la pompe, le mouvement des pales du rotor, avec lequel il entre en contact, permet de donner aux molécules constitutives du gaz une direction privilégiée par le biais des chocs qui se produisent entre ces molécules et les pales inclinées. Le rôle des stators est ensuite de rediriger les molécules vers une autre pale de rotor. Ainsi, par chocs successifs entre les pales des rotors et des stators, le gaz (flux de molécules) est conduit à travers les différents étages de la pompe jusqu'à atteindre le refoulement.

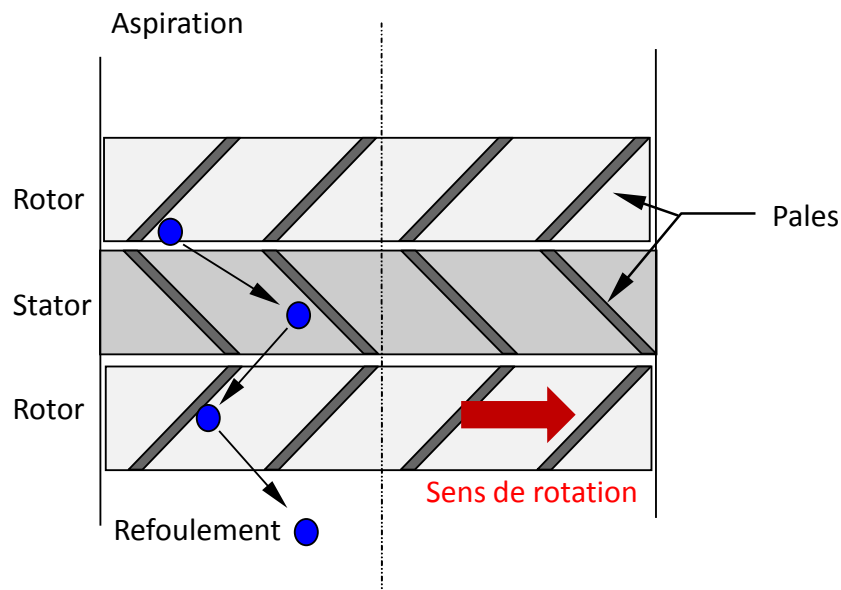


FIGURE 1.2 – Principe de pompage d'une TMP

La figure 1.3 illustre de façon schématique le principe d'agencement des pales d'une TMP. Chaque paire de disques rotor/stator joue le rôle d'un étage de compression ; l'espace entre le rotor et le stator est typiquement de l'ordre du millimètre. On peut ainsi superposer en série plusieurs étages pour obtenir le taux de compression désiré pour la pompe : des configurations courantes comprennent généralement une dizaine d'étages. À l'aspiration, les pales sont longues et ouvertes (faible angle d'incidence) afin de présenter une grande surface de passage et donc un débit important. Le gaz ensuite "emprisonné" dans ces étages

est conduit et pompé, par chocs successifs sur les pales rotor et stator, vers les étages de compression à pales beaucoup plus courtes et fermées. Au fil des étages, la densité moléculaire augmente, les chocs entre molécules deviennent possibles et le libre parcours moyen diminue de sorte que la limite du régime dit de transition est ainsi progressivement atteinte. Le régime de transition, que nous caractériserons plus précisément par la suite, est tel qu'il n'est plus possible de négliger les interactions entre molécules sans qu'il ne soit cependant encore possible de vérifier une hypothèse de milieu continu.

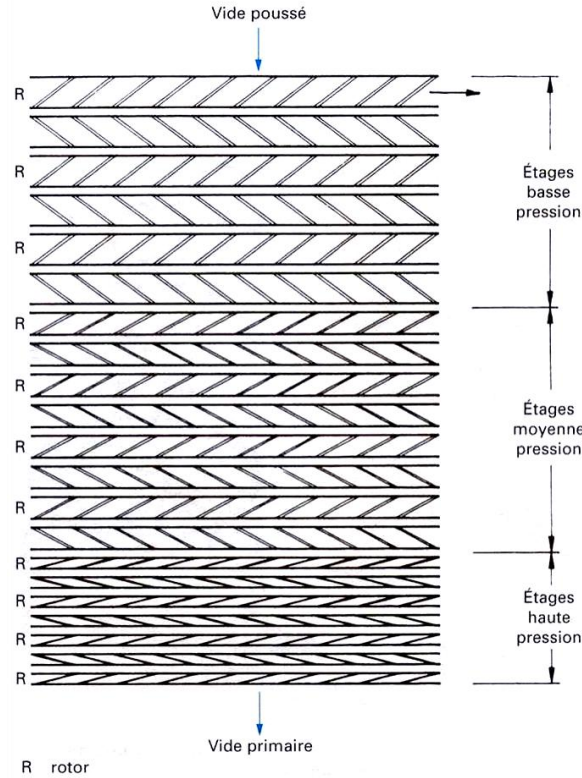


FIGURE 1.3 – Agencement typique des étages d'une TMP multi-étagée

Les pompes TMPs tournent en général à des vitesses très élevées, de 30000tr/min à 90000tr/min. La vitesse linéaire d'un point de la périphérie du rotor est ainsi de l'ordre de grandeur de la vitesse des molécules de gaz¹. Par conséquent, le guidage mécanique du rotor représente un enjeu crucial pour la conception mécanique de la pompe. Deux solutions sont souvent utilisées sur les pompes commerciales : le roulement à billes et le palier magnétique. Le roulement à billes de haute précision permet d'obtenir des jeux fonctionnels très faibles, ce qui est indispensable pour des pompes à taux de compression élevé. En revanche, sa durée de vie est limitée et une maintenance régulière est obligatoire pour assurer le bon fonctionnement de la pompe. Comme le roulement à billes nécessite une lubrification permanente, dans le cas des applications propres (domaine du semiconducteur) où seul un très petit nombre de molécules d'hydrocarbure (voire aucune) n'est toléré par le process, le roulement du côté de l'aspiration doit être remplacé par des paliers sans contact. Le palier magnétique, malgré son coût d'acquisition important, est la solution la plus répandue aujourd'hui dans les pompes commerciales. Dans ces pompes, la position du rotor est contrôlée de façon active en prenant en compte jusqu'à 5 axes de rotation. Comme il n'existe aucun frottement entre les pièces en rotation et les pièces fixes, les TMPs peuvent présenter une durée de vie très longue sans maintenance, ce qui les rend

1. Le rôle important joué par la vitesse de rotation sur la performance de la pompe est expliqué dans le chapitre 2.2.1.

moins coûteuses à utiliser. En supprimant tout type de lubrification, les TMPs à paliers magnétiques offrent également une propreté exceptionnelle et sont devenues désormais indispensables pour la fabrication des semi-conducteurs.

1.1.2 Pompes moléculaires Holweck

La pompe Holweck fait partie de la famille des pompes moléculaires (MDP, Molecular Drag Pump). Comme la TMP, la MDP est une pompe cinétique à entraînement mécanique, mais elle diffère de la TMP par sa façon de transférer la quantité de mouvement entre les molécules du gaz et les parois. Contrairement aux TMPs où le transfert de QDM entre le gaz et les pièces tournantes se réalise à l'aide de la force de contact normale entre les molécules et les surfaces qui se déplacent à grande vitesse, dans les MDPs, ceci se réalise à l'aide de la force de contact tangentielle. La première pompe de ce type a été introduite par Gaede en 1913. Dans la pompe Gaede, illustrée sur la figure 1.4.a, le gaz est entraîné et comprimé dans les canaux circulaires par un tambour tournant à grande vitesse. Ce concept est ensuite repris et modifié par Holweck pour créer la pompe Holweck en 1923, illustrée sur la figure 1.4.b. La pompe Holweck diffère de la pompe Gaede par la présence de canaux hélicoïdaux (développement dans la direction axiale de canaux initialement ortho-radiaux) creusés dans le stator à l'intérieur duquel tourne à grande vitesse un rotor en forme de tambour à paroi lisse. Les rainures du stator présentent une profondeur qui diminue de l'entrée à la sortie afin d'améliorer la performance de compression.

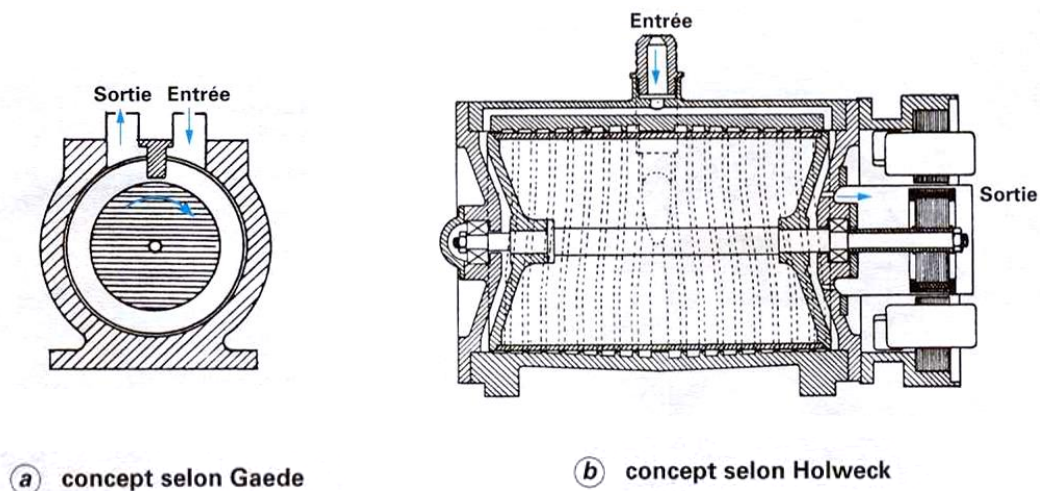


FIGURE 1.4 – Concepts des pompes MDPs

La figure 1.5 schématise le principe de pompage des pompes MDPs. Avant d'entrer en collision avec les parois, les molécules sont supposées présenter une distribution de vitesse homogène et isotrope. Lorsqu'elles frappent une paroi, ces molécules ne sont pas immédiatement réémises mais restent adsorbées un certain temps (temps de séjour), avant de retourner dans la phase gazeuse. A la désorption, elles acquièrent une vitesse moléculaire propre correspondant à la température de la paroi. L'angle de réémission est de plus totalement indépendant de l'angle d'incidence. Le nombre de molécules réémises dans la direction θ est proportionnel à $\cos \theta$. Si la paroi est elle-même animée d'une vitesse propre, les molécules acquièrent alors une composante de vitesse (celle de la paroi) qui s'ajoute à leur propre vitesse. Ainsi, une paroi mobile entraîne les molécules et crée un flux gazeux dont les molécules ont une distribution de vitesse privilégiée dans le sens de pompage.

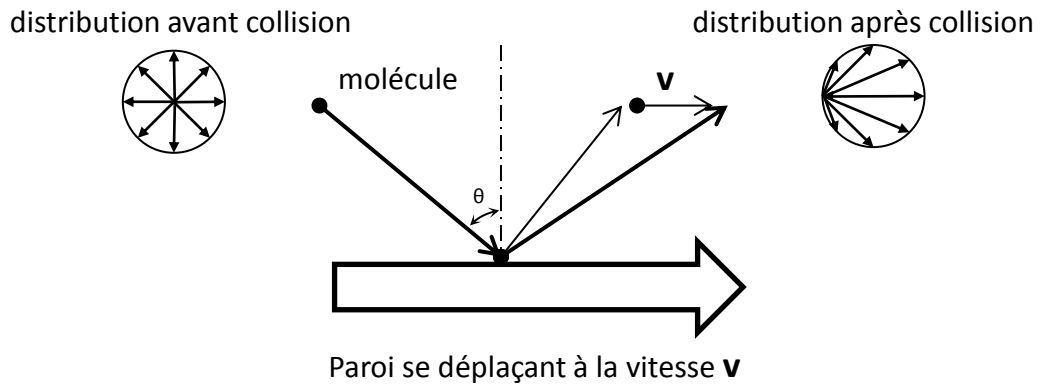
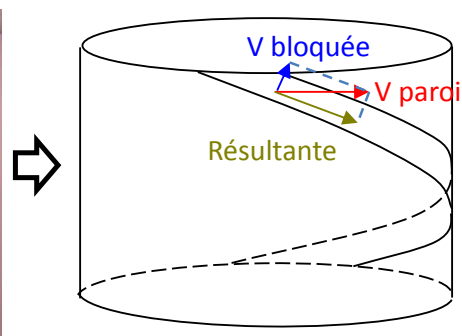


FIGURE 1.5 – Principe de pompage des MDPs

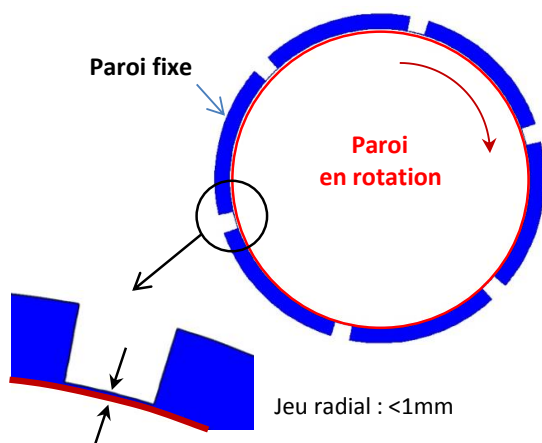
L'effet de pompage dépend bien sûr directement de l'importance de la vitesse de la paroi mobile. En particulier, la vitesse de la paroi doit être de l'ordre de grandeur de la vitesse propre des molécules pour que le pompage soit efficace.



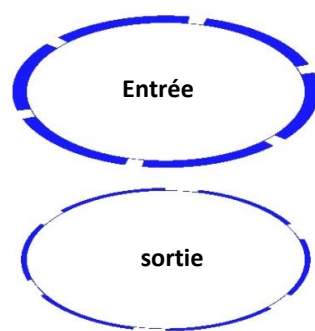
a.) Holweck (partie stator)



b.) Écoulement du gaz pompé



c.) Coupe z constante dans la zone fluide (en bleu)



d.) Variation de la section suivant de l'entrée à la sortie

FIGURE 1.6 – Exemple d'une pompe Holweck et son principe de pompage

La figure 1.6.a montre le stator d'une pompe Holweck. L'écoulement du gaz à l'intérieur d'une des rainures est analysé dans la figure 1.6.b : les rainures hélicoïdales redressent l'écoulement tangential du gaz crée par l'entraînement de la paroi en rotation pour que ce dernier soit transféré de l'entrée jusqu'à la sortie. La variation de la section de passage entre l'entrée et la sortie, illustrée par la figure 1.6.d, permet d'assurer une meilleure compression du gaz². Afin d'augmenter le taux de compression, l'espace entre le rotor et le stator est réduit au minimum (quelques dixièmes de millimètre) comme illustré par le zoom de la figure 1.6.c. Par conséquent, la déformation du rotor due au fluage du matériau peut poser de sérieux problèmes de durée de vie pour ces pompes.

L'un des principaux avantages des pompes MDPs par rapport aux TMPs est leur capacité à refouler à des "hautes" pressions (20 à 30 mbar). En revanche, la faible vitesse de pompage des pompes MDPs, due à leur très faible section de passage, limite leur usage dans la plupart des applications. En général, les pompes MDPs sont donc utilisées en combinaison avec les pompes turbomoléculaires en tant que derniers étages de compression. Les pompes dites hybrides ainsi conçues combinent les avantages des pompes TMPs et MDPs puisqu'elles sont capables de refouler à "haute" pression tout en conservant des vitesses de pompages élevées.

1.1.3 Description d'une pompe TMP hybride : ATHM

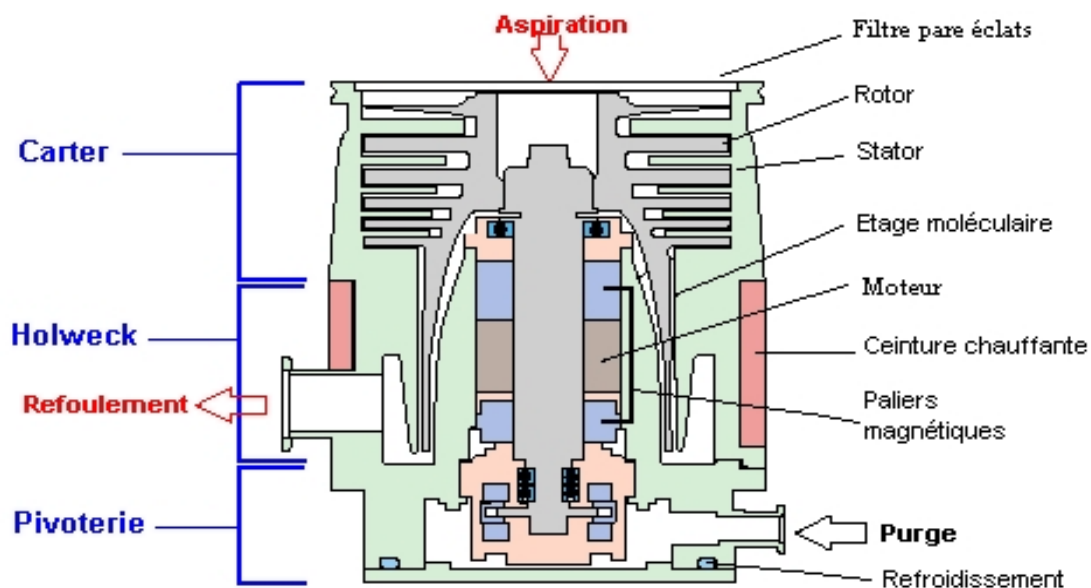


FIGURE 1.7 – Schéma simplifié d'une pompe ATHM

La pompe turbomoléculaire hybride, dénommée ATHM (pour Adixen pompe Turbomoléculaire Hybride sur palier Magnétique), est la combinaison d'une pompe TMP et d'une pompe Holweck. La figure 1.7 présente un schéma simplifié d'une pompe ATHM, comportant six étages rotor, six étages stator et un étage Holweck³. L'enjeu essentiel de cette thèse est de développer un outil de simulation numérique du comportement d'une telle

2. Comme il s'agit d'un écoulement compressible, la compression est créée non seulement par la réduction de section de passage mais aussi par l'augmentation de la masse volumique.

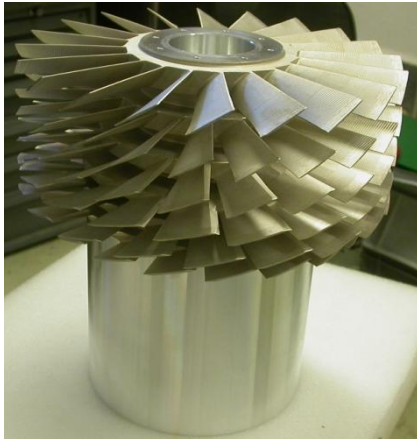
3. Afin de clarifier la signification du terme étage dans l'ensemble de ce manuscrit, on précise ici qu'un étage désigne soit un étage rotor, soit un étage stator. Un ensemble d'un étage rotor et d'un étage stator est appelé un assemblage (rotor/stator).

pompe qui permette de prédire ses performances pour une partie au moins de ses régimes de fonctionnement.

Les six étages rotor et le tambour lisse de l'étage Holweck sont taillés dans une seule pièce qui est montée sur un arbre guidé par un palier magnétique. Le moteur électrique est logé à l'intérieur du palier magnétique qui est lui-même logé à l'intérieur du tambour de l'Holweck. Une telle architecture permet de rendre cette pompe hybride très compacte.

Cellules de pompage

La figure 1.8 illustre les trois pièces principales qui constituent les cellules de pompage : le rotor monobloc, un des étages stator de la partie turbo(moléculaire), et le stator de la partie Holweck. Toutes ces pièces sont en alliages d'aluminium, ce qui rend leur usinage plus aisé. Les étages stator sont découpés en deux demi-disques pour qu'ils puissent être montés entre des étages rotor.



Rotor monobloc



Stator turbo



Stator Holweck

FIGURE 1.8 – Principales pièces d'une pompe ATHM

Les pales des étages rotor et stator diffèrent sensiblement par leur nombre, leur dimension et leur forme. En général, on trouve trois formes de pales dans les pompes ATHM, qui nécessitent chacune des méthodes d'usinages différentes. Les caractéristiques de ces trois types de pale sont récapitulées dans le tableau 1.1 et commentées ci-dessous.

Pale vrillée

Elle présente une section de forme globalement lenticulaire. Les bords d'attaque et bords de fuite sont cependant tronqués pour éviter une arête à angle vif pour des raisons d'usinabilité. Le choix des angles d'inclinaison de la pale au moment de la conception est *a priori* complètement libre en pied de pale, vers le moyeu, et en bout de pale, vers le carter. Les pales vrillées, également désignées par l'anglicisme « twistées » sont usinées par contour-nage à l'aide d'une fraise à pas fin. Ces pales sont les plus coûteuses à usiner parmi les

géométries de pales disponibles mais elles offrent en contrepartie la meilleure performance de pompage. Dans un souci de compromis coût / performance, ces pales sont utilisées uniquement sur le rotor dans les premiers étages d'une pompe afin d'optimiser sa vitesse de pompage.

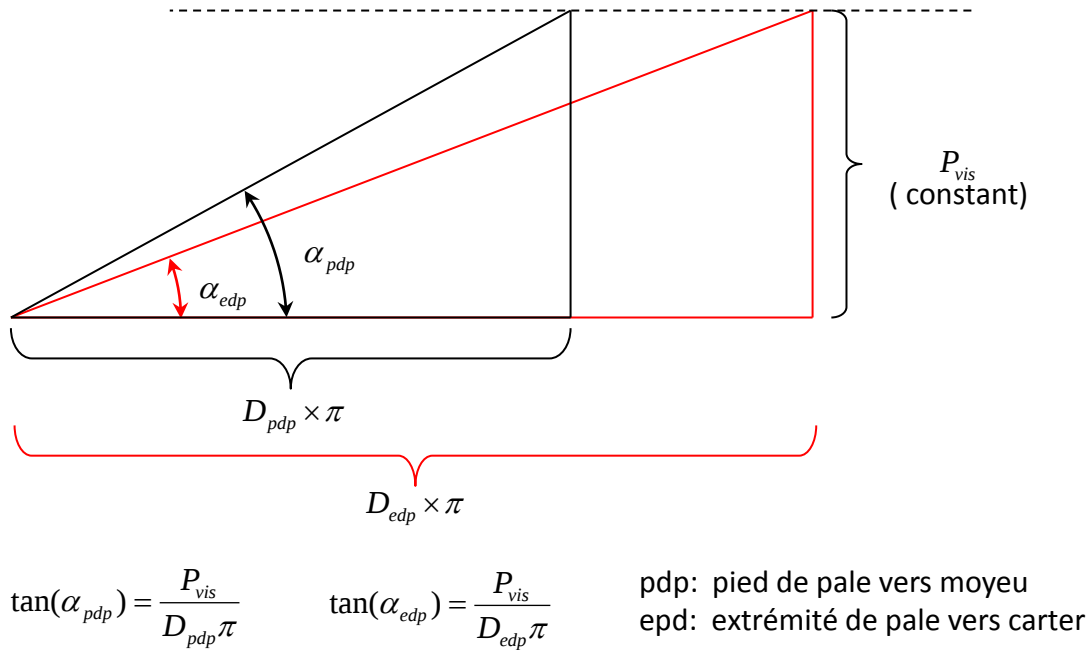


FIGURE 1.9 – Coupe radiale des pales hélicoïdales : relation entre l'angle d'inclinaison α , le diamètre de coupe D et le pas de vis de la machine de fraisage

Pale hélicoïdale

La section de cette pale est un parallélépipède; ses surfaces intrados et extrados sont composées de faces hélicoïdales qui imposent une relation illustrée dans la figure 1.9 entre l'angle d'inclinaison α , le diamètre D et le pas de la courbe hélicoïdale P_{vis} (distance axiale entre deux points décalés de 2π sur une courbe hélicoïdale, elle dépend du pas de vis de la machine de fraisage), soit $\tan \alpha = P_{vis}/D\pi$. D est le diamètre de la coupe radiale, il varie entre le diamètre du pied de pale D_{pdp} et l'extrémité de pale D_{edp} . Les pales hélicoïdales sont usinées par une combinaison du mouvement de la fraise et du mouvement de la pièce. La fraise se déplace en ligne droite (dans la direction axiale de l'étage à tailler) lorsque la pièce tourne sur elle-même. La relation entre la vitesse de rotation de la pièce ω et la vitesse de déplacement de la fraise V doit satisfaire l'équation $\tan \alpha = 2V/D\omega$ pour obtenir l'angle α . En général, ω et V étant réglés constants pour un usinage, on obtient la relation $\tan \alpha_{pdp}/\tan \alpha_{edp} = D_{pdp}/D_{edp}$. Cette relation imposée aux pales hélicoïdales conduit donc à un choix pour α_{pdp} et α_{edp} qui ne sont pas complètement libres.

En général, le temps d'usinage des pales hélicoïdales est très court. Cela rend les étages hélicoïdaux plus économiques à fabriquer par rapport aux étages à pales « twistées », notamment lorsque les pales sont identiques sur plusieurs étages car l'usinage peut alors être réalisé simultanément sur tous ces étages. Cette méthode d'usinage est parfaitement adaptée aux étages stator turbo car, les ébouches étant des disques empilés, on peut usiner simultanément le même étage pour plusieurs pompes. Cependant, comme le choix des angles d'inclinaison n'est pas complètement libre en raison de la technique d'usinage, la pale hélicoïdale est rarement optimale sur toute sa hauteur. Par conséquent, son utilisation

est souvent réservée à des rotors dans les dernières étapes d'une pompe pour réduire le coût de production, ou dans les étages stator de la partie "turbo" de la pompe hybride car on considère que ceux-ci jouent un rôle moins important dans le mécanisme de pompage que les étages rotor.

Pale droite

La section de cette pale est également un parallélépipède mais l'angle d'inclinaison reste constant sur toute la hauteur de la pale. Dans les pompes ATHM, les pales droites sont utilisées uniquement pour les derniers étages stator "turbo" afin de réduire le coût d'usinage car le temps d'usinage d'une pale droite est encore plus court que celui d'une pale hélicoïdale.

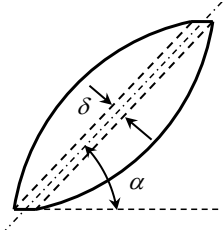
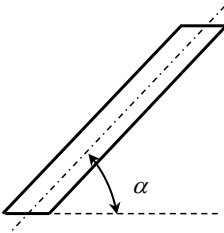
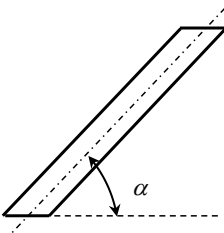
Forme	Section	Angle d'inclinaison	Performance	Temps d'usinage	Usage
vrillée		libre	bonne	long	rotor
hélicoïdale		$\tan \alpha \propto D$	moyenne	court	rotor stator
droite		fixe	mauvaise	très court	stator

TABLE 1.1 – Caractéristiques des différentes formes de pale

Autres éléments importants

En sus des pièces servant à comprimer le gaz, il existe d'autres éléments importants qui permettent d'assurer le fonctionnement de la pompe dans toute sa gamme de conditions d'utilisation.

Pivoterie

La pivoterie est un sous-ensemble mécatronique dans lequel sont logés le moteur électrique, le palier magnétique et les roulements de secours. Piloté par des cartes électroniques, le moteur permet de réguler la vitesse de rotation de l'arbre par rapport à l'ensemble des indicateurs de fonctionnement de la pompe qui sont collectés par différents capteurs. Le palier magnétique permet de maintenir la position de l'arbre dans les tolérances admises pour la direction radiale et axiale. Les tolérances radiales sont imposées par les jeux (environ 0.1mm) entre l'arbre et les roulements de secours. En cas de défaillance du palier magnétique, l'arbre peut "atterrir" sur les roulements de secours, ce qui protège la pompe car, à plus 30000tr/min, le moindre contact entre les pièces tournantes et les pièces fixes peut créer des dégâts importants voire détruire la pompe.

Carter Turbo

Il permet de maintenir en place les stators qui sont bloqués par des jeux d'entretoises. Ces entretoises sont percées afin de faciliter le dégazage des parois du carter. Le carter turbo est fabriqué en acier inoxydable pour pouvoir retenir les éléments de la pompe à l'intérieur de celle-ci en cas de "crash".

Circuit de refroidissement

Il est constitué par un serpentin en cuivre parcouru par de l'eau froide. Il permet de diminuer la température du rotor et d'étendre ainsi la plage de débit admissible.

Purge

Il s'agit de l'injection d'un gaz inerte (azote) à l'intérieur de la pivoterie. Les clients utilisent généralement un flux précis d'azote. Ce flux est réglé grâce à une fuite calibrée et permet de diminuer, voir d'éviter les risques de corrosion des différents éléments de la pompe (intérieur de la pivoterie : paliers magnétiques, roulements, etc.) en contact avec les gaz plus ou moins corrosifs utilisés dans les procédés de fabrication des semi-conducteurs. Elle chasse les molécules de la pivoterie vers le refoulement et permet d'abaisser la température du rotor.

Contrôleur ACT (Adixen Controller Turbo)

Il permet de piloter la pompe et de gérer la ceinture chauffante, la pivoterie, l'alimentation du moteur et le refroidissement.

Ceinture chauffante

Amovible, alimentée par l'ACT avec une température maximale de 75°C, cette ceinture chauffante se situe au niveau de l'étage Holweck et assure un chauffage homogène de la pompe. Elle est surtout utilisée pour la version destinée aux clients du secteur du semi-conducteur. Le chauffage des parties statiques en contact avec les gaz corrosifs des procédés permet d'éviter leur condensation et leur dépôt, surtout au niveau du refoulement où la pression est la plus élevée.

1.2 Caractérisation de la performance des pompes TMP/MDP

La figure 1.10 présente une vue schématique d'un banc d'essai destiné à la caractérisation des pompes TMP/MDP selon la norme ISO/FDIS 21360.

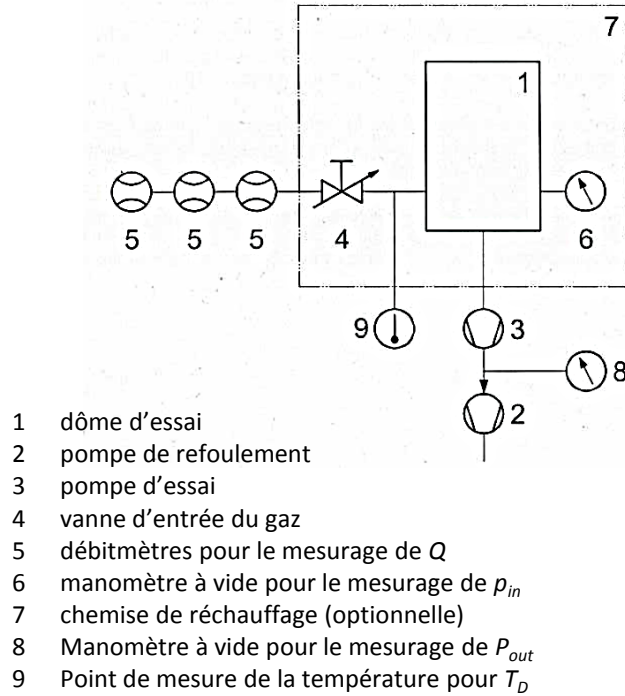


FIGURE 1.10 – Schéma du banc d'essai pour la caractérisation des pompes TMP/MDP

Pour caractériser la performance des pompes TMP/MDP, trois types de courbes sont utilisées :

- Courbes de vitesse de pompage S ,
- Courbes de taux de compression à débit nul K_0 ,
- Courbes d'isoflux.

Les courbes de vitesse de pompage S indiquent la capacité d'une pompe à évacuer du gaz pour des conditions de pression données. Elles sont très utiles pour les applications et généralement communiquées dans les catalogues des fabricants de pompes. Si on se réfère au schéma de la figure 1.10, les courbes de vitesse de pompage S sont réalisées pour différents flux de gaz injectés dans le dôme d'essai. On mesure, pour chaque point de fonctionnement, la pression d'aspiration P_{in} et la pression de refoulement P_{out} qui lui correspondent. Le débit volumique du flux est alors calculé par la formule :

$$S = \frac{\dot{m} c_p T_D}{P_{in}}$$

avec $\dot{m}$ le débit massique, P_{in} la pression dans le dôme, T_D la température du gaz et c_p la chaleur spécifique du gaz. La figure 1.11 montre un exemple de courbes de vitesse de pompage pour une pompe de taille moyenne. Pour les différents gaz utilisés (H_2 , N_2 , He et Ar), on peut observer un plateau à basse pression dans ces courbes S où le pompage

est au maximum. Les valeurs de vitesse de pompage au niveau de ces plateaux, notées généralement S_0 , jouent un rôle très important dans la conception d'une pompe. Lorsque la pression d'aspiration augmente, le pompage entre en régime de transition et devient moins efficace à cause des collisions intermoléculaires de plus en plus fréquentes. En général, la vitesse de pompage d'une pompe est directement proportionnelle à son diamètre d'entrée. C'est pour cette raison que les fabricants de pompe cherchent sans cesse à augmenter la taille de leurs pompes, afin de répondre aux besoins du marché pour des pompes à grand débit.

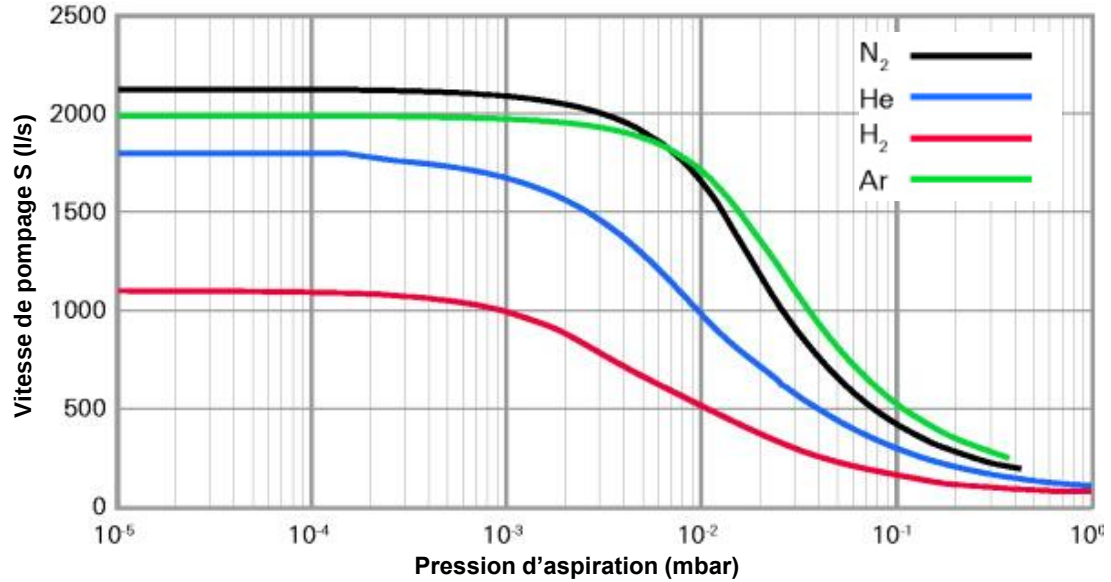


FIGURE 1.11 – Exemple de courbes de vitesse de pompage S

Les courbes de taux de compression K_0 se réalisent sans flux de gaz. Elles caractérisent la capacité d'une pompe TMP/MDP à atteindre des pressions très basses. En général, on considère que le taux de compression K_0 varie suivant une loi du type :

$$K_0 \propto e^{\sqrt{Mm \cdot \omega \cdot g}} \quad (1.1)$$

où ω est la vitesse de rotation du rotor, Mm est la masse molaire du gaz pompé, N est le nombre d'étages de type rotor et stator et g est un facteur qui traduit l'effet de la géométrie des pales.

Contrairement aux courbes de vitesse de pompage qui dépendent en partie de la pompe primaire utilisée au refoulement des pompes TMP/MDP lors des essais, les courbes de taux de compression dépendent uniquement des pompes testées.

Dans la phase de développement d'une pompe TMP/MDP, les courbes d'isoflux sont très souvent utilisées pour caractériser la performance de la pompe car elles fournissent des informations pour tous les points de fonctionnement de la pompe. Pour effectuer une courbe d'isoflux, un flux constant est injecté dans le dôme illustré sur la figure 1.10. Le premier point de mesure est réalisé avec une ouverture totale de la vanne entre la pompe turbo-moléculaire (pompe à tester) et la pompe primaire. Ensuite, on ferme progressivement cette vanne pour augmenter la pression de refoulement de la pompe testée. On relève, pour chaque point de mesure, la pression d'aspiration et la pression de refoulement qui lui correspondent. Un point de mesure est considéré comme validé si la variation de la pression d'aspiration est inférieure à 3% par minute selon la norme ISO/FDIS 21360. La figure 1.13 illustre le résultat d'un essai d'isoflux d'une pompe TMP/MDP en azote. En

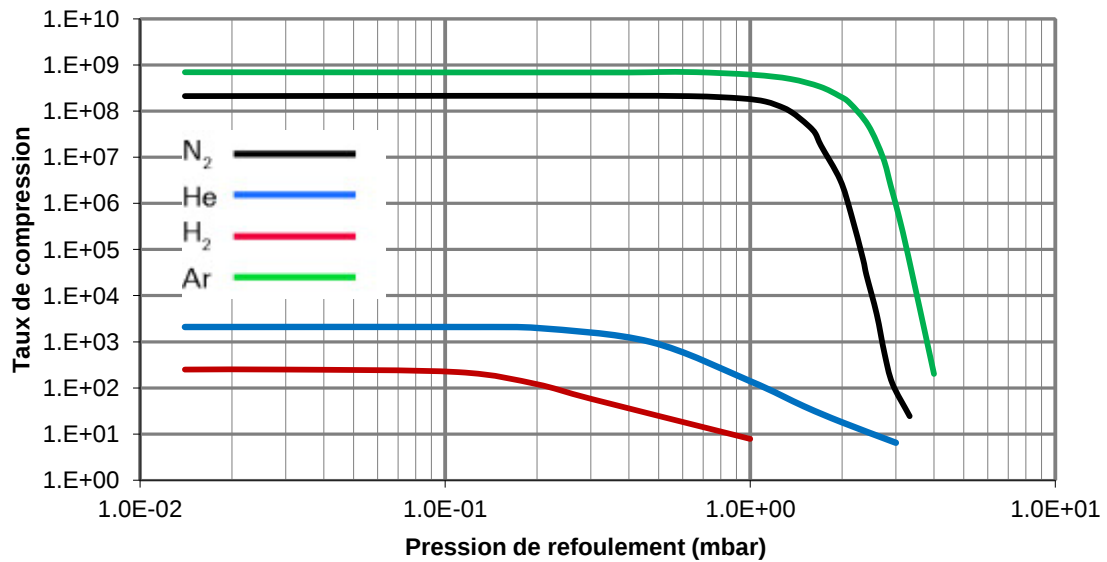


FIGURE 1.12 – Exemple de courbes de taux de compression K_0

général, on ne teste dans un essai d'isoflux que quelques flux (sept dans ce cas) afin de limiter le coût (surtout du gaz) et la durée de l'expérience. L'unité « sccm », qui signifie centimètre cube par seconde en condition standard, est une unité usuelle de débit massique dans le domaine du vide pour exprimer des flux de gaz très faibles. La condition standard étant définie par une température de 20°C et la pression atmosphérique, 1 sccm d'azote est équivalent à environ $2 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$.

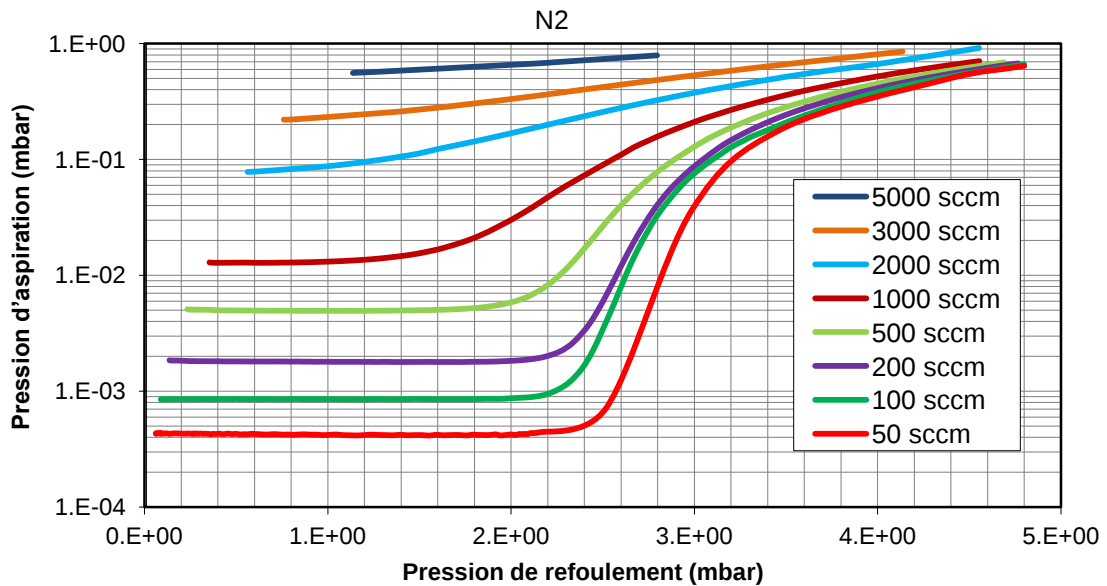


FIGURE 1.13 – Exemple de courbes d'isoflux

1.3 Nombre de Knudsen et régimes d'écoulement du gaz

Comme mentionné précédemment, les TMPs nécessitent une condition de très basse pression ($< 1\text{mbar}$) au niveau du refoulement pour fonctionner de façon efficace. Afin de mieux comprendre l'origine de cette contrainte imposée aux TMPs, la deuxième partie de ce chapitre est consacrée à la présentation des spécificités liées aux écoulements à très basse pression : écoulements de gaz raréfiés. Les caractéristiques particulières de ces écoulements exigent en général une modélisation par des méthodes "non-conventionnelles" au sens où elles ne sont pas disponibles "sur étagère" dans des codes de simulation adaptés aux géométries complexes de pompes industrielles. Nous présenterons plus en détail ces méthodes dans le chapitre 2 du mémoire.

Dans un écoulement de gaz raréfiés, le régime de l'écoulement peut être caractérisé par le rapport entre le libre parcours moyen des molécules du gaz et une longueur caractéristique de l'écoulement. Ce paramètre adimensionnel, introduit en 1909 par Knudsen, est connu depuis sous le nom de nombre de Knudsen [4] :

$$Kn = \frac{\lambda}{l_c} \quad (1.2)$$

où λ est le libre parcours moyen (la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions intermoléculaires) et l_c est une longueur caractéristique de l'écoulement. En fonction du nombre de Knudsen, les écoulements des gaz raréfiés peuvent être classés en trois régimes différents :

1. régime continu

où le libre parcours moyen λ est petit par rapport à la longueur caractéristique de l'écoulement l_c , soit $Kn < \sim 0.1$. Cela signifie que les collisions intermoléculaires sont dominantes par rapport à celles entre les molécules et les parois. Dans ces conditions, les propriétés de l'écoulement (masse volumique, pression, vitesse, température) ne peuvent pas varier de façon significative sur une échelle de quelques multiples du libre parcours moyen et le gaz peut être considéré comme un milieu continu. Par conséquent, la théorie de la mécanique des milieux continus peut être mise en oeuvre pour modéliser l'écoulement. Ainsi, celui-ci peut être correctement décrit par les équations de Navier-Stokes qui traduisent les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. On distingue parfois un sous-régime dit régime de glissement lorsque le nombre de Knudsen est inférieur à 0.1 mais supérieur à 0.001. Dans cette gamme de nombre de Knudsen, l'hypothèse d'adhérence à la paroi n'est plus valable et une condition aux limites de type glissement pour la vitesse du gaz et un saut de température doivent être appliqués au gaz en contact avec la paroi solide.

2. régime moléculaire libre

où le libre parcours moyen λ est grand par rapport à la longueur caractéristique de l'écoulement l_c , soit $Kn > \sim 10$. Pour fixer les idées, le cas limite ($Kn=10$) signifie statistiquement qu'une molécule doit parcourir dix fois la longueur caractéristique de l'écoulement l_c avant de rencontrer une autre molécule. Par conséquent, les collisions intermoléculaires sont suffisamment rares pour pouvoir être négligées devant les collisions entre les molécules et la paroi. On parle alors de régime moléculaire libre. Dans un écoulement en régime moléculaire libre, les grandeurs macroscopiques perdent leur sens physique. Les équations de

Navier-Stokes ne sont plus valables et l'écoulement est régi par l'équation de Boltzmann sans terme de collision intermoléculaire. En régime moléculaire libre, l'écoulement est influencé uniquement par le mécanisme de l'interaction moléculaire/paroi dont le principe est détaillé par la suite dans la partie 1.3.2

3. régime de transition

où le libre parcours moyen λ est du même ordre de grandeur que la longueur caractéristique de l'écoulement l_c , soit $\sim 0.1 < Kn < \sim 10$. Les collisions intermoléculaires jouent dans ce cas un rôle aussi important que celles entre les molécules et les parois dans l'évolution des caractéristique de l'écoulement. Par conséquent, les hypothèses de la mécanique des milieux continus ne sont pas vérifiées (même si on peut espérer étendre leur domaine de validité en jouant sur des conditions de glissement plus sophistiquées) et, de plus, les collisions intermoléculaires ne sont pas négligeables. Le régime de transition peut être décrit par l'équation de Boltzmann, équation intégral-différentielle dont la résolution numérique (notamment l'évaluation des collisions entre molécules) dans un contexte d'applications industrielles (telles que les TMPs) reste encore aujourd'hui dans une large mesure hors d'atteinte pour des raisons de coût prohibitif.

La figure 1.14 récapitule ces différents régimes en fonction du nombre de Knudsen ainsi que le modèle physique approprié pour chaque régime. Les valeurs limites du Kn pour les différents régimes doivent être interprétées comme des ordres de grandeur indicatifs car la transition d'un régime à un autre n'est pas brutale mais progressive.

Régime continu		Régime de transition	Régime moléculaire libre
Régime visqueux	Régime de glissement		
Navier-Stokes	Navier-Stokes + CL de glissement	Equation de Boltzmann	Equation de Boltzmann sans collisions

Kn

0.001 0.1 10 ∞

FIGURE 1.14 – Classification des régimes d'écoulements en fonction du nombre de Knudsen et modèle physique associé à chaque régime

À l'échelle moléculaire, le rapport entre la distance moyenne intermoléculaire δ et le diamètre moyen des molécules σ_d permet d'introduire la notion de gaz dilué pour lequel $\delta/\sigma_d \gg 1$. Dans un gaz dilué, les collisions binaires sont beaucoup plus probables que les collisions multiples. Si un gaz dilué est constitué des molécules identiques, le libre parcours moyen peut être calculé par l'expression :

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\sigma_d^2 n} \quad (1.3)$$

où $n = \delta^{-3}$ est la concentration moléculaire.

En utilisant la loi d'état d'un gaz parfait, $n = P/(k_B T)$, on peut exprimer le libre parcours

moyen à partir des grandeurs macroscopiques (pression P et température T) :

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \sigma_d^2 P} \quad (1.4)$$

où k_B est la constante de Boltzmann.

En remplaçant dans l'équation (1.2) le libre parcours moyen λ par son expression (1.4), on obtient une relation entre le nombre de Knudsen et la pression, soit :

$$Kn = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \sigma_d^2 P l_c} \quad (1.5)$$

Dans le cas de l'azote à 20°C, la relation (1.5) s'explique en :

$$\lambda \approx \frac{66}{Pl_c} \quad (1.6)$$

où P est donné en mbar et l_c en μm .

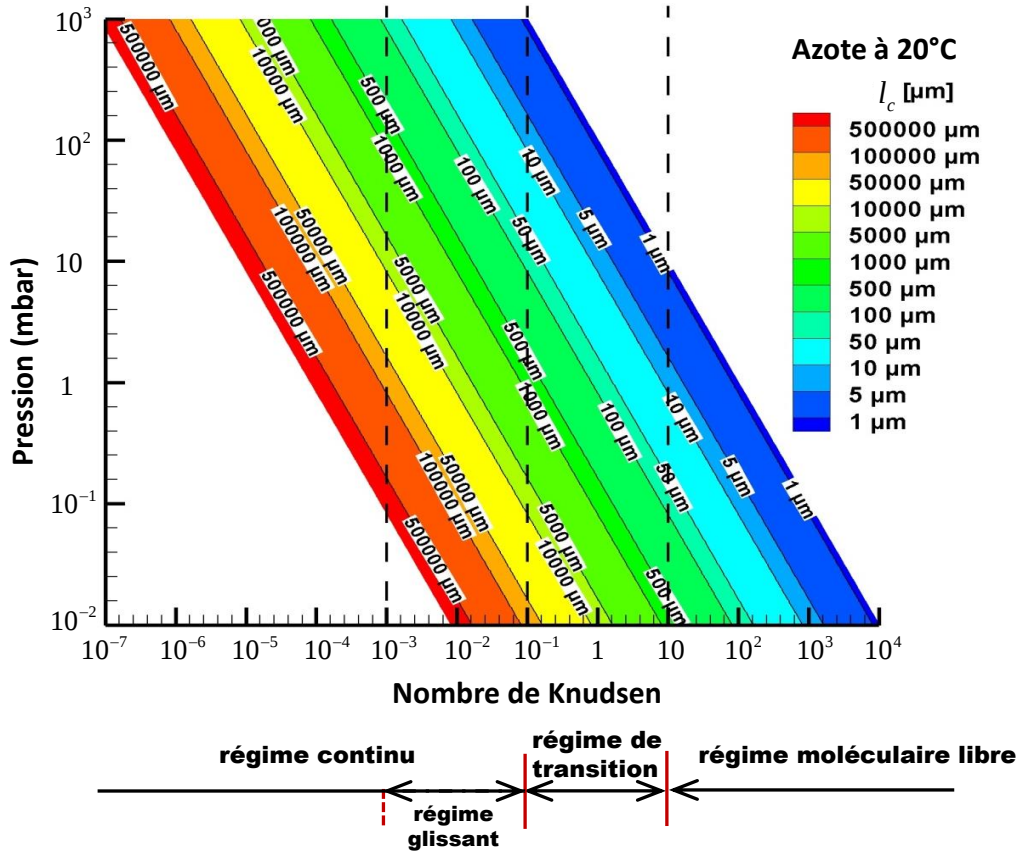


FIGURE 1.15 – Régimes d'écoulement des gaz dans le domaine du vide

Dans le domaine du vide secondaire, la pression du gaz varie entre la pression minimale atteignable (soit 10^{-13} mbar) et la pression atmosphérique. La figure 1.15 illustre la répartition des régimes d'écoulement en fonction de la longueur caractéristique et la pression pour les applications du vide secondaire. Sur cette courbe, l'axe des abscisses présente le nombre de Knudsen tandis que l'axe des ordonnées présente la pression (en mbar). A différents niveaux de pression atteints dans différentes zones de la pompe on peut associer

une longueur caractéristique l_c . Il est alors possible de tracer les lignes isovaleurs de l_c dans le plan (Nombre de Knudsen, Pression) pour obtenir la figure 1.15. Pour une pompe TMP, la pression varie entre la pression limite $<10^{-13}$ mbar et la pression de refoulement maximale acceptable (~ 1 mbar). Ainsi, l'ensemble de régimes détaillés précédemment sont concernés.

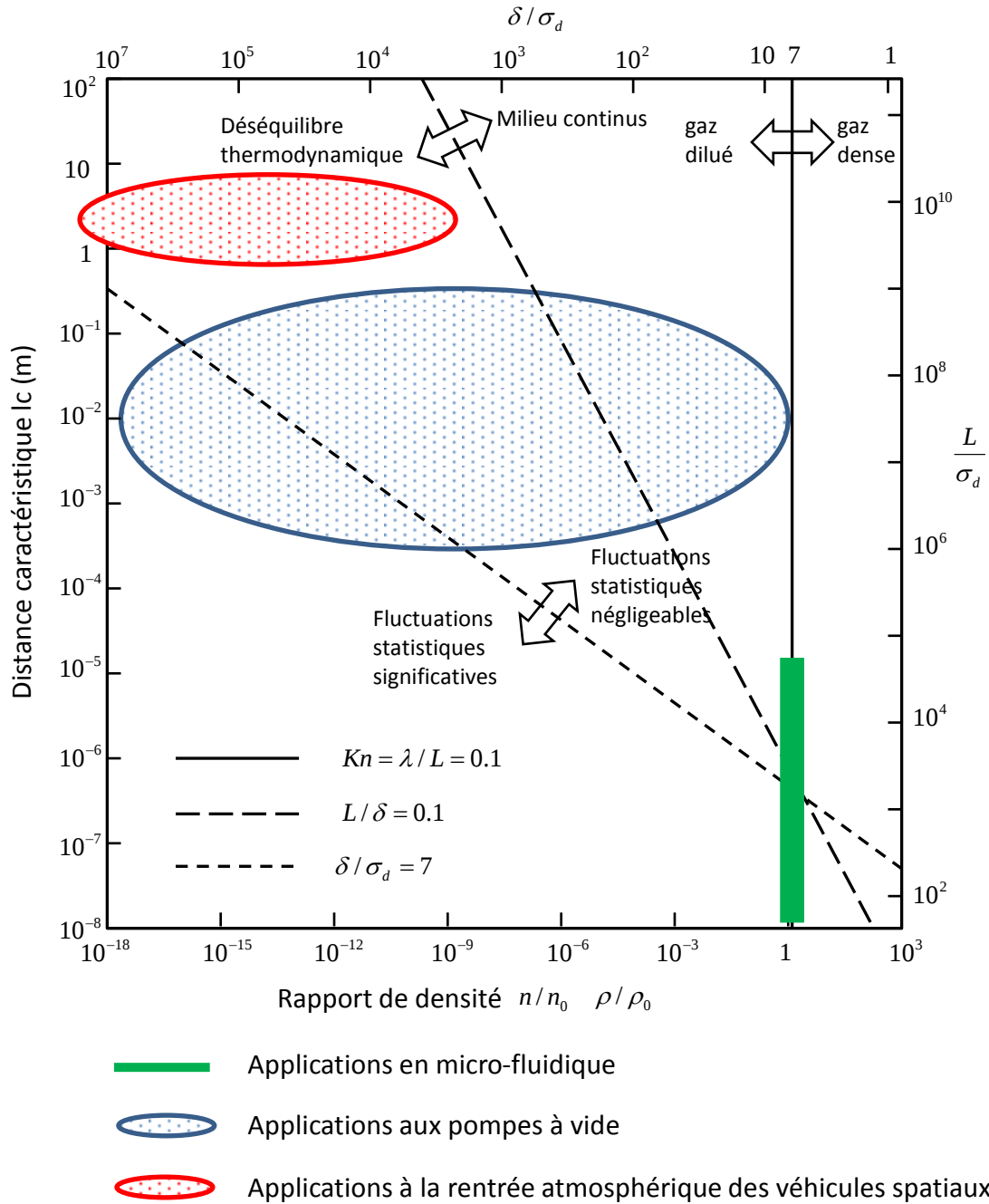


FIGURE 1.16 – Limites des différents régimes d'écoulements et hypothèses associées (voir [9], page 21) avec positionnement des applications aux pompes à vide, des applications en microfluidique et des applications à la rentrée des véhicules spatiaux

Dans la littérature, on peut constater que les écoulements de gaz raréfiés sont largement étudiés dans le domaine des écoulements microfluidiques et dans celui des écoulements hypersoniques lors de la rentrée de vaisseaux spatiaux (alors qu'ils le sont nettement moins

dans le domaine du vide). La figure 1.16 permet de différencier plus précisément ces trois domaines d'application qui impliquent tous de façon générique des écoulements de gaz raréfiés. Nous avons positionné sur cette figure les trois domaines applicatifs en fonction de :

- leurs longueurs caractéristiques respectives L_c , en ordonnée à gauche,
- les pressions typiques rapportées à la pression standard (1bar) en abscisse inférieure,

De plus, en choisissant l'azote comme gaz (diamètre moléculaire de $4.17 \times 10^{-10}m$), deux autres coordonnées sont ajoutées dans le graphique :

- le rapport δ/σ_d en abscisse supérieure, qui permet de distinguer le gaz dilué du gaz dense,
- le rapport entre la longueur caractéristique et le diamètre moléculaire en ordonnée à droite.

Même si les limites des différents régimes et hypothèses ne sont données dans cette figure que de façon très indicative, il est néanmoins possible d'observer que le domaine du vide couvre une zone bien plus large et sans intersection avec les deux autres domaines d'application.

Par ailleurs, si les gammes de nombre de Knudsen peuvent être tout à fait comparables entre les trois domaines d'applications, un deuxième nombre adimensionnel permet de bien les différencier : il s'agit du nombre de Mach Ma . Alors que Ma peut être proche de 1 dans le domaine du vide, il est souvent très faible dans le cas des écoulements en microfluidique et peut devenir grand (supérieur à 10) dans le cas de la rentrée de vaisseaux spatiaux. Ceci explique que les méthodes utilisées dans les domaines de la microfluidique ou du spatial ne soient pas directement transposables au domaine du vide. En outre, dans le cas des TMPs, les écoulements sont intrinsèquement instationnaires avec présence de parois fixes et mobiles (ce qui n'est généralement pas le cas dans les deux autres domaines). L'ensemble de ces observations permet de mieux cerner la spécificité du sujet d'étude de cette thèse.

1.3.1 Interactions entre les molécules de gaz

Selon la théorie cinétique des gaz, l'écoulement d'un gaz peut être modélisé par l'équation de Boltzmann à l'échelle moléculaire. L'équation intégrale-différentielle de Boltzmann décrit l'évolution de la fonction de distribution de la vitesse des molécules. Si $f \equiv f(\vec{r}, \vec{u}, t)$ désigne cette fonction de distribution, elle est telle que le nombre de molécules du gaz situées à l'instant t dans un volume infinitésimal de l'espace autour du point $\vec{r}$ et ayant une vitesse comprise entre $\vec{u}$ et $\vec{u} + d\vec{u}$ peut s'exprimer comme :

$$dN = f(\vec{r}, \vec{u}, t) d^3\vec{r} d^3\vec{u} \quad (1.7)$$

On admet ici sans démonstration que l'équation de Boltzmann traduisant l'évolution de la fonction de distribution f s'écrit dans le cas d'un gaz simple :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{u}} f = I(f, f') \quad (1.8)$$

où $\vec{F}$ est la force extérieure et $I(f, f')$ est l'opérateur intégral de collision qui décrit le bilan des interactions entre molécules et dépend de la force d'interaction entre ces molécules.

Dans le cas d'un gaz simple à molécules sphériques, la force d'interaction entre deux molécules est une fonction de la distance intermoléculaire comme illustré sur la figure 1.17.

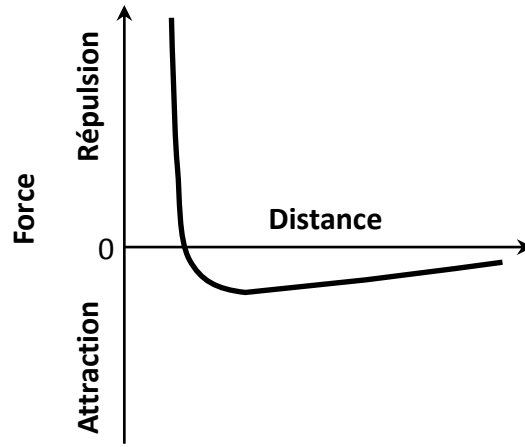


FIGURE 1.17 – Force intermoléculaire classique

Cette force est quasiment nulle si deux molécules sont très éloignées l'une de l'autre. Lorsque les deux molécules se rapprochent l'une de l'autre, cette force devient d'abord faiblement attractive avant d'atteindre un maximum d'attraction. Si la distance intermoléculaire continue à diminuer, la force intermoléculaire va diminuer jusqu'à s'annuler puis à devenir très répulsive pour des distances courtes. En général, la relation exacte entre la distance intermoléculaire et la force est trop complexe pour pouvoir être modélisée analytiquement ou même numériquement de sorte que différents modèles approchés ont été proposés afin de la simplifier. La plupart de ces modèles simplifiés négligent la partie attractive. La pertinence des simplifications opérées par un modèle donné doit être évaluée pour l'application visée en confrontant les résultats fournis par une simulation incluant ce modèle à des données expérimentales de référence.

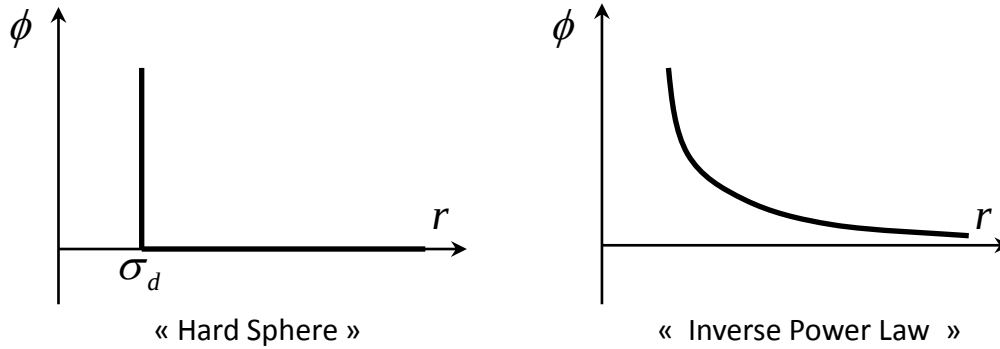


FIGURE 1.18 – Potentiel intermoléculaire des modèles répulsifs

Le modèle le plus simple est le modèle de sphère rigide impénétrable « Hard Sphere » ou encore « HS ». Selon ce modèle, illustré sur la figure 1.18, le potentiel intermoléculaire ϕ est défini par :

$$\begin{cases} \phi(r) = \infty & r < \sigma_d \\ \phi(r) = 0 & r > \sigma_d \end{cases} \quad (1.9)$$

où r est la distance entre les deux centres des molécules et σ_d est le diamètre moyen de la molécule supposée sphérique. Bien qu'il soit trop simpliste par rapport à la réalité, le modèle « HS » n'en demeure pas moins très intéressant pour des études analytiques.

Un modèle plus réaliste est le modèle de puissance inverse « Inverse Power Law », soit

« IPL ». Le modèle « IPL », illustré dans la figure 1.18, est défini par :

$$F = \kappa/r^\eta \quad (1.10)$$

ou

$$\phi = \frac{\kappa}{(\eta - 1)r^{(\eta-1)}} \quad (1.11)$$

avec κ et η deux constantes. Pour $\eta \rightarrow \infty$, on retrouve le modèle « HS ». Pour $\eta = 5$, on retrouve le modèle de Maxwell.

Les deux modèles illustrés par la figure 1.18 prennent en compte uniquement la partie répulsive de la force intermoléculaire et négligent complètement la partie attractive de cette force. Lorsque ces modèles sont insuffisants pour rendre correctement compte du comportement du gaz, des modèles plus complexes de type attractif-répulsif doivent être utilisés.

En remplaçant la partie attractive du modèle « HS » par un modèle de puissance inverse, on obtient ainsi le modèle de Sutherland dont le potentiel intermoléculaire est défini comme :

$$\begin{cases} \phi(r) = \infty & r < \sigma_d \\ \phi(r) = -\frac{\kappa'}{(\eta' - 1)r^{(\eta'-1)}} & r > \sigma_d \end{cases} \quad (1.12)$$

La combinaison des équations 1.12 et 1.11 fournit finalement le modèle le plus réaliste, dont le potentiel intermoléculaire s'écrit :

$$\phi = \frac{\kappa}{(\eta - 1)r^{(\eta-1)}} - \frac{\kappa'}{(\eta' - 1)r^{(\eta'-1)}} \quad (1.13)$$

Ce modèle présente quatre paramètres ajustables qui permettent de le caler par rapport aux expériences sur une large gamme d'applications. Il a été introduit par Lennard-Jones en 1924. Un cas particulier est connu sous le nom de potentiel (12-6) de Lennard-Jones avec $\eta = 13$ et $\eta' = 7$ soit :

$$\phi = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_d}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_d}{r} \right)^6 \right] \quad (1.14)$$

où ϵ est le minimum du potentiel qui apparaît à $\sqrt[6]{2}\sigma_d$ et σ_d est la valeur de r pour laquelle $\phi(r) = 0$.

Ces deux modèles attractif-répulsifs sont illustrés sur la figure 1.19.

Les modèles de l'interaction intermoléculaire jouent un rôle primordial dans la modélisation du régime de transition ($\sim 0.1 < Kn < \sim 10$). Nous discuterons ainsi au chapitre 5 les différents modèles de collisions intermoléculaires basés sur les modèles de l'interaction intermoléculaire qui viennent d'être succinctement décrits, ainsi que leur pertinence par rapport à une application aux pompes TMP/MDP.

1.3.2 Interaction gaz/paroi

Les interactions gaz/paroi jouent également un rôle important dans le comportement des écoulements des gaz raréfiés, tout particulièrement dans le contexte (interne) des TMPs ou

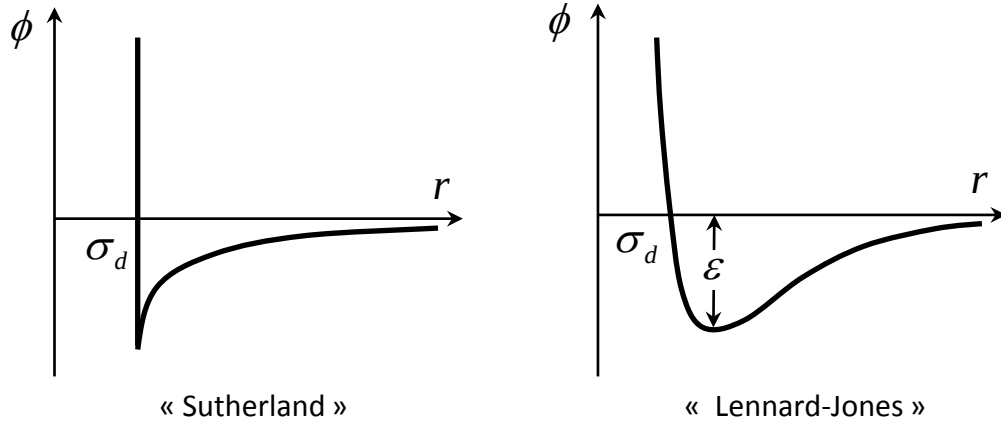


FIGURE 1.19 – Potentiel intermoléculaire des modèles répulsifs et attractifs

MDPs. Les premières observations des effets de l'interaction de gaz avec une paroi solide sont dues à Knuth et Warburg [32] qui remarquèrent que les débits mesurés à travers des tubes pour de très basses pressions étaient sensiblement plus grands que ce que prévoyait le modèle de Poiseuille issu des équations de Navier-Stokes. Ils expliquèrent alors cet effet par un glissement du fluide à la paroi solide. Très rapidement la complexité du phénomène de l'interaction gaz/paroi a conduit à de nombreuses contributions scientifiques sur le sujet.

La première base théorique du concept de vitesse de glissement a été développée par Maxwell en 1878. Maxwell a proposé la première expression de la vitesse de glissement à partir de la loi de distribution de vitesse établie par lui-même :

$$u_{slip} = u_{gas} - u_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \frac{\partial u}{\partial n} + \frac{3}{4} \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.15)$$

où u est la vitesse du gaz, n et t sont des directions normales et tangentielles à la paroi, λ est le libre parcours moyen des particules du gaz, μ est la viscosité du gaz, ρ et T sont la masse volumique et la température, σ_v est le coefficient d'accommodation du moment tangentiel, soit aussi TMAC (Tangential Moment Accommodation coefficient), dont nous préciserons ci-dessous la signification.

Le deuxième terme de l'équation (1.15) est lié au phénomène de transpiration thermique [16] : il traduit un glissement dans la direction d'accroissement de la température. En l'absence de variation de la température, ce terme disparaît et l'équation 1.15 prend la forme d'un simple glissement au 1^{er} ordre :

$$u_{slip} = u_{gas} - u_{wall} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \frac{\partial u}{\partial n} \quad (1.16)$$

Cette formule (1.16) est notamment celle qui est implémentée dans un logiciel commercial de simulation d'écoulements tel que Fluent pour traiter des problématiques d'écoulements à basse pression.

Le coefficient TMAC est introduit pour caractériser le comportement des molécules après que celles-ci soient entrées en collision avec une surface solide. Une valeur nulle ($\sigma_v = 0$) signifie que toutes les molécules sont réfléchies et une valeur 1 ($\sigma_v = 1$) signifie que toutes les molécules sont diffusées. Pour une surface ordinaire, la valeur du TMAC se situe entre 0 et 1.

Dans le cas d'une molécule réfléchie, celle-ci conserve sa vitesse tangentielle à la surface et voit sa vitesse normale à la surface inversée. La vitesse après la collision est donc

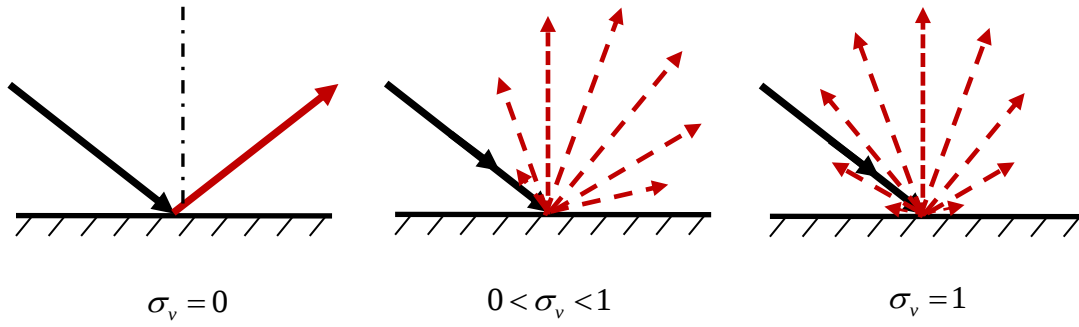


FIGURE 1.20 – Illustration sur une coupe en 2D de la signification des différentes valeurs du coefficient TMAC

complètement déterminée. Dans le cas d’une molécule diffusée, celle-ci aura une égale probabilité de se trouver après l’impact dans l’une des directions issues du plan tangentiel à la surface, quel que soit l’angle d’incidence de la molécule avant l’impact. Pour ce qui concerne l’angle de réémission par rapport à la normale de la surface de collision, sa distribution suit une loi en cosinus, (1.17), *i.e.* une molécule a le maximum de chance d’être réémise dans la direction normale à la surface et zéro chance d’être réémise dans la direction parallèle à la surface.

$$\frac{dn}{n} = \cos \theta d\theta \quad (1.17)$$

La valeur du coefficient TMAC est difficile à déterminer car elle dépend de la nature du gaz, du matériau constitutif de la paroi et de l’état de surface de la paroi. En général, une valeur très proche de l’unité (soit le modèle de diffusion) est utilisée pour la simulation des écoulements de gaz raréfiés. Néanmoins, il faut souligner que la compréhension du mécanisme de l’interaction entre la molécule et la surface reste toujours partielle dans la littérature actuelle. Ainsi, pour certains gaz, il est possible que le modèle de diffusion ne permette pas de reproduire correctement les comportements observés en réalité. Ce point sera à nouveau discuté dans les chapitres 4 et 5 du mémoire.

Nous avons décrit dans ce chapitre les principes de fonctionnement des pompes à vide turbomoléculaires et précisé la démarche de caractérisation des performances de telles pompes. Nous avons également mis en évidence la large gamme de régimes d’écoulement qui est décrite par le gaz pompé à travers une pompe à vide et souligné l’importance mais aussi la difficulté d’une modélisation adaptée de cet écoulement. Nous allons préciser au chapitre suivant l’état de l’art des méthodes de dimensionnement des pompes TMP/DMP et justifier notre choix stratégique de développer un outil d’estimation des performances d’une pompe à vide hybride qui soit basé sur une stratégie de type Test Particle Monte Carlo 3D.

Chapitre 2

État de l’art des méthodes de dimensionnement des pompes TMP/MDP

Comme on l’a vu au chapitre précédent, les régimes d’écoulement de gaz dans une pompe à vide, qu’elle soit de type TMP, MDP ou hybride, couvrent une large gamme de régime : du régime continu au régime moléculaire libre. De plus, nous avons d’ores et déjà souligné que le modèle physique décrivant l’écoulement devait être adapté au régime considéré. En théorie, les équations de la cinétique des gaz, équations de Boltzmann, permettent de décrire l’ensemble des régimes d’écoulement, quel que soit le nombre de Knudsen qui les caractérise. En pratique il en va bien autrement dans la mesure où la description moléculaire qui caractérise les équations de Boltzmann rend tout simplement impossible le calcul effectif des collisions inter-moléculaires dès lors que le nombre de Knudsen devient petit (typiquement inférieur à 0.1). Par ailleurs, il est inutile de chercher à estimer ces collisions inter-moléculaires pour un nombre de Knudsen suffisamment élevé (typiquement supérieur à 10) dans la mesure où leur effet devient négligeable par rapport à celui produit par les collisions des molécules avec les parois solides présentes dans le domaine. Nous approfondissons dans la première partie de ce chapitre la présentation des différentes méthodes numériques disponibles pour traiter les écoulements en régime raréfié en nous efforçant de situer rapidement leur degré de maturité et les points durs subsistants dans le contexte général de la simulation des écoulements raréfiés. Nous souhaitons souligner dès à présent que certaines des méthodes disponibles pour l’analyse d’écoulements de gaz raréfiés n’ont que peu ou pas été appliquées à la configuration de machine tournante multi-étagée à laquelle ces travaux de thèse sont consacrés. La seconde partie de ce chapitre est précisément consacrée à une revue des méthodes de dimensionnement existantes pour des pompes TMP/DMP. Nous repassons notamment en revue les méthodes décrites dans leur contexte général en première partie et précisons leurs conditions d’utilisation pour des calculs de pompes à vide. Nous concluons alors le chapitre en justifiant l’intérêt du développement d’un code de type Test Particle Monte Carlo (TPMC) 3D pour analyser l’écoulement en régime moléculaire libre dans une pompe hybride ainsi que l’intérêt d’explorer également la voie d’une approche de type Direct Simulation Monte Carlo (DSMC), qui est restée limitée au 2D dans le présent travail.

2.1 Méthodes de modélisation des gaz raréfiés selon le régime d'écoulement

Selon le régime considéré, un écoulement de gaz raréfié peut (et même doit si l'on souhaite pouvoir mener des calculs à la fois réalisables dans des temps de simulation raisonnables et suffisamment précis pour être prédictifs) être modélisé soit au niveau macroscopique soit au niveau microscopique.

L'approche macroscopique considère le gaz comme un milieu continu et le décrit avec les grandeurs physiques classiques comme la vitesse, la pression et la température d'une particule fluide assimilée à un point dans l'espace physique mais qui contient un nombre suffisant de molécules pour assurer une définition claire des quantités macroscopiques. L'évolution de ces quantités est décrite par les équations de Navier-Stokes, qui peuvent être obtenues en prenant des moments successifs de l'équation de Boltzmann ou bien établies à partir de principes de conservation macroscopiques.

L'approche microscopique modélise le gaz à l'échelle moléculaire et cherche à décrire l'évolution de la position et de la vitesse de ces molécules en s'appuyant sur l'équation de Boltzmann introduite au chapitre précédent sous la forme compacte (1.8). Pour un gaz simple, on peut écrire cette équation sous la forme un peu plus explicite suivante :

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla_r (nf) + \vec{F} \cdot \nabla_c (nf) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f_* f'_* - f f') c_r \sigma d\Omega dc' \quad (2.1)$$

Par rapport à l'équation (1.8) on note toujours f la fonction de distribution des vitesses des molécules, qui dépend du temps t , de la position $\vec{r}$ et de la vitesse ou célérité $\vec{c}$ des molécules (on a adopté ici la notation $\vec{c}$ plutôt que $\vec{u}$) et on désigne toujours par $\vec{F}$ une force extérieure, n est la densité moléculaire. Dans le terme de collision au second membre, davantage détaillé ici, on voit apparaître la fonction de distribution f' associée à la classe des molécules de célérité c' qui interagissent avec la classe des molécules de célérité c , l'indice $*$ indique des valeurs de distributions post-collision, c_r désigne la vitesse moléculaire relative entre les deux classes, σ est la section de collision et Ω représente l'angle solide. Le terme de gauche de l'équation (2.1) ne présente pas de difficulté particulière pour ce qui concerne sa résolution numérique : des schémas décentrés classiques peuvent par exemple être appliqués à la discrétisation des gradients. Toute la complexité de cette équation réside dans l'évaluation de l'intégrale de collision du membre de droite.

Dans le cas du régime moléculaire libre, le second membre de (1.8) peut être considéré comme nul et l'équation décrivant le comportement du gaz raréfié se simplifie en :

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla_r (nf) + \vec{F} \cdot \nabla_c (nf) = 0 \quad (2.2)$$

Comme nous le verrons par la suite, cette équation de Boltzmann sans termes de collision peut être efficacement résolue par une méthode de suivi de particules de type Test Particle Monte Carlo.

2.1.1 Modélisation du régime continu

Tant que l'écoulement du gaz dans la pompe peut être considéré en régime continu, la modélisation à privilégier est celle qui s'appuie sur les équations de Navier-Stokes traduisant au niveau macroscopique les lois de conservation de la masse, de la quantité de

mouvement et de l'énergie. De multiples stratégies numériques existent pour la résolution efficace et précise de ce système d'équations aux dérivées partielles : elles s'appuient sur une discrétisation spatiale et temporelle que nous désignerons de façon générale désormais par l'appellation "approche CFD". Le terme générique CFD (Computational Fluid Dynamics) désignera donc dans ce mémoire l'ensemble des approches classiques de discrétisation des équations décrivant le mouvement du gaz. Dans le contexte des applications industrielles visées dans cette thèse, le point clé est que ces stratégies CFD sont disponibles dans des codes commerciaux qui permettent une résolution dans les géométries complexes et mobiles caractéristiques des pompes hybrides. La discrétisation en géométrie complexe est rendue possible par l'utilisation de maillages non-structurés tandis que le traitement simultané des zones fixes (stators) et mobiles (rotors) dans le domaine de calcul est réalisé grâce à l'utilisation de référentiels multiples et à une gestion adéquate de l'interface entre zones. La principale difficulté qui pourrait apparaître dans la résolution des équations de Navier-Stokes tient au régime laminaire ou turbulent de l'écoulement. Pour des nombres de Reynolds suffisamment élevés, les écoulements turbulents ne peuvent plus raisonnablement être simulés à l'aide des équations de Navier-Stokes dans leur forme originelle : celles-ci doivent être moyennées ou bien filtrées de façon à modéliser tout ou partie des structures turbulentes (les plus petites échelles) afin de limiter le raffinement des maillages mis en oeuvre et de rendre réalistes les temps de calcul de ces écoulements. Pour les écoulements dans les pompes à vide, cette problématique de modélisation de la turbulence ne se pose pas comme nous allons le préciser maintenant.

Il est possible de relier la vitesse du son a et la viscosité cinématique ν à la célérité moyenne des molécules du gaz $\bar{c}$ via les expressions suivantes :

$$a = \bar{c} \sqrt{\frac{\pi\gamma}{8}} \quad , \quad \nu = \frac{1}{2} \lambda \bar{c} \quad (2.3)$$

où γ est le rapport des capacités thermiques massiques du gaz et où on rappelle que λ désigne le libre parcours moyen des molécules. Introduisons les nombres de Reynolds et de Mach associés à l'écoulement dans la pompe : $Re = VL/\nu$ et $Ma = V/a$, avec V la vitesse caractéristique (locale) de l'écoulement dans la zone de la pompe considérée et L une dimension caractéristique (locale). On déduit immédiatement de (2.3) et des définitions des paramètres de similitude, Mach et Reynolds, une relation entre Re , Ma et le nombre de Knudsen Kn :

$$Re = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \frac{Ma}{Kn} \quad (2.4)$$

Pour les écoulements de gaz raréfiés en régime continu, on peut supposer Kn de l'ordre de 10^{-3} et dans les pompes hybrides d'intérêt pour ce travail le nombre de Mach local Ma peut être considéré typiquement de l'ordre de 10^{-1} . Par conséquent, le nombre de Reynolds Re est de l'ordre de 10^2 ce qui caractérise un écoulement laminaire. L'écoulement est donc bien décrit dans ce cas par les équations de Navier-Stokes instantanées, ce qui élimine du coup les erreurs de modélisation qui auraient été inhérentes à la modélisation de la turbulence.

Pour les régimes ayant un nombre de Knudsen compris entre 10^{-3} et 10^{-1} , la laminarité de l'écoulement est naturellement préservée (sur la base de l'estimation du Reynolds) et la méthode CFD reste donc valable et bien adaptée mais la raréfaction du gaz rend nécessaire (cf. section 1.3.2) de modifier la condition aux limites appliquée au niveau d'une paroi solide en introduisant :

- un glissement de vitesse entre la paroi et le fluide voisin
- un saut de température entre la paroi et le fluide voisin

On trouvera notamment dans [38] [49] une revue détaillée des différentes formulations de la vitesse de glissement qui ont pu être proposées depuis la formulation initiale, dite du premier ordre (car faisant intervenir des dérivées premières de la vitesse et de la température) proposée par Maxwell en 1878 et rappelée dans l'équation (1.15).

La recherche de conditions de glissement pour la vitesse et de saut de température reste active dans le domaine de la simulation des gaz raréfiés : le degré de maturité élevé des codes CFD ainsi que leur efficacité (coût de mise en oeuvre réduit y compris en géométries complexes) rend en effet particulièrement attractive leur utilisation en régime glissant dès lors qu'une description judicieuse du comportement en paroi est obtenue par le biais des deux conditions mentionnées ci-dessus. La démarche suivie dans le développement de conditions pariétales adaptées au régime de glissement est généralement la suivante :

- des simulations sont menées pour des écoulements en régime glissant en faisant appel à des méthodes de résolution bien adaptées au régime de transition, telles que l'approche DSMC et les méthodes cinétiques ou encore les modèles d'ordre élevé que nous évoquerons ci-après.
- ces méthodes coûteuses et complexes présentent l'intérêt de ne pas introduire d'hypothèse sur les grandeurs macroscopiques au niveau des parois solides
- les résultats fournis par l'approche DSMC, les méthodes cinétiques ou les modèles d'ordre élevé peuvent donc être exploités pour identifier le comportement macroscopique de l'écoulement en paroi et en tirer des préconisations sur la forme à donner aux conditions décrivant les grandeurs macroscopiques (vitesse, température) au niveau de la paroi (voir par exemple [58] ou [21])
- les conditions ainsi proposées peuvent être intégrées dans des outils CFD et leur degré de validité évalué pour des configurations qui ne sont généralement pas accessibles aux méthodes précédentes (DSMC, méthodes cinétiques, modèles d'ordre élevé) en raison de leur complexité géométrique notamment.
- des insuffisances apparaissent alors souvent dans la qualité de prédiction du régime de glissement, les nouvelles conditions proposées sur la base par exemple de calculs moléculaires en géométrie simplifiée n'offrant qu'un degré limité de validité pour des géométries plus générales
- le processus d'amélioration continue des conditions de glissement peut se poursuivre si il est par exemple possible de réaliser à l'aide des méthodes bien adaptées au régime de transition de nouvelles simulations de configurations davantage représentatives de celles visées par l'approche CFD en régime de glissement.

Nous illustrons rapidement ce processus itératif. La condition de glissement classique développée par Maxwell pour une plaque plane [41] reste la description de la condition de glissement la plus simple et peut-être encore la plus utilisée ; elle ne dépend, cf (1.15), que du gradient normal de la vitesse à la paroi dans le cas isotherme. En 2007, Shen et al. [61] ont proposé une condition de glissement modifiée en s'appuyant sur la solution de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann : la condition de glissement proposée ne dépend plus seulement du gradient normal de la vitesse mais également du gradient de pression dans la direction de l'écoulement. Gökçen and MacCormack [24] ont également développé une condition de glissement qui se réduit à la classique condition de Maxwell dans la limite du régime continu et fournit par ailleurs la valeur correcte du cisaillement pariétal dans la limite du régime moléculaire libre. Comme précédemment indiqué, toutes ces conditions de glissement d'ordre 1 font appel à un paramètre libre ou de réglage qui est le coefficient d'accommodation de la quantité de mouvement tangentielle (TMAC) et

varie entre 0 et 1 selon la proportion de molécules du gaz réfléchies à la surface de façon spéculaire ou diffuse. Des conditions de glissement du second-ordre ont également été développées [19] [26] [38] [62], qui incluent un terme supplémentaire du second-ordre pour la variation normale de la vitesse. Dans les cas isothermes, elles peuvent être formulées d’une manière générale comme :

$$u_{slip} = u_{gas} - u_{wall} = C_1 \lambda \frac{\partial u}{\partial n} + C_2 \lambda^2 \frac{\partial^2 u}{\partial^2 n} \quad (2.5)$$

et font donc intervenir un coefficient de glissement d’ordre 1 noté $C_1 = \beta(2 - \sigma_v)/\sigma_v$ et un coefficient de glissement d’ordre 2 noté C_2 destiné à accroître la plage de validité du régime glissant vers des nombres de Knudsen plus élevés. L’apport de ces conditions du second-ordre est variable selon leur domaine d’application : ainsi des conditions de glissement développées dans le contexte de la micro-fluidique et y apportant une amélioration de la prédiction peuvent ne pas apporter d’amélioration par rapport à une simple condition de Maxwell lorsqu’elles sont mises en oeuvre dans le contexte des écoulements hypersoniques par exemple. L’obtention de valeur fiables pour les deux coefficients est également délicate et a généralement été réalisée pour des configurations (géométriquement) simples.

En ce qui concerne la condition sur le saut de température, la condition développée par Smoluchowski [67] est pilotée par le flux de chaleur dans la direction normale à la surface, suivant des arguments analogues à ceux utilisés par Maxwell pour la condition de glissement sur la quantité de mouvement. Gökçen et MacCormack ont également proposé dans [24] une condition qui fournit le transfert de chaleur correct dans le cas limite (très grandes valeurs du nombre de Knudsen) du régime moléculaire libre. Cette condition de saut sur la température dépend également d’un paramètre libre, le coefficient d’accommodation thermique qui varie lui-aussi entre 1 et 0 selon que l’échange d’énergie entre les molécules du gaz et la paroi est parfait ou inexistant.

Comme nous le détaillerons par la suite, la présence de paramètres libres dans les conditions aux limites exige une calibration de ces coefficients qui peut s’avérer délicate et est en tout cas généralement coûteuse. Certains auteurs, tels que Myong [44], ont proposé des conditions dites de Langmuir qui s’appuient sur l’isotherme d’adsorption de Langmuir pour traduire, au moins en partie, les processus physiques mis en oeuvre dans l’écoulement du gaz au niveau de la surface. Ces conditions ont fourni de bons résultats pour certains écoulements raréfiés en microfluidique, même si la calibration des coefficients des conditions usuelles est en quelque sorte remplacée par le choix de valeurs de référence pour la mise en oeuvre du modèle, qui sont elles-mêmes dépendantes du problème. L’application de ces conditions de Langmuir dans le contexte de l’aérodynamique ne s’est pas avérée satisfaisante en revanche ce qui a conduit [45] à proposer une formulation encore différente qui combine les conditions de Maxwell–Smoluchowski et l’isotherme d’adsorption de Langmuir.

Citons également les travaux récents de Greenshields et al [25] qui ont reformulé les conditions aux limites hors équilibre en s’appuyant sur la méthode des moments de Grad : ils ont ainsi proposé une formulation alternative à la condition de Smoluchowski et également justifié l’importance de la prise en compte de la courbure dans la condition de glissement pour la vitesse. Enfin, des auteurs poursuivent le développement de conditions aux limites en régime de glissement pour des écoulements de mélange de gaz [70] .

2.1.2 Modélisation du régime moléculaire libre

En régime moléculaire libre, les collisions intermoléculaires sont tellement rares qu'elles peuvent être négligées. Le seul phénomène qui affecte l'évolution de l'écoulement du gaz est constitué par les collisions entre les molécules et les parois. Cette évolution peut être décrite par l'équation de Boltzmann sans terme de collisions inter-moléculaires (2.2). La résolution directe de cette équation est bien sûr grandement simplifiée par rapport à l'équation de Boltzmann complète mais reste néanmoins délicate pour des écoulements dans des configurations non-académiques. Pour modéliser l'écoulement en régime moléculaire, la méthode la plus efficace est la méthode dite TPMC (Test Particle Monte Carlo), introduite initialement par [17]. Dans cette approche, l'écoulement du gaz est modélisé en suivant dans leur mouvement un grand nombre de particules statistiquement représentatives. Le mouvement propre de ces particules et leurs seules interactions avec les parois solides présentes dans le domaine (fixes ou en mouvement) sont alors utilisées pour modifier leurs positions et leurs vitesses. Comme indiqué par Bird dans [8], l'appellation "Monte Carlo" tend à être utilisée pour toute méthode qui fait appel à des nombres aléatoires. Dans le cas des écoulements en régime moléculaire libre, deux événements aléatoires sont à gérer :

1. l'entrée des particules dans le domaine de calcul avec une distribution de position uniforme et une distribution maxwellienne de vitesse,
2. la réémission des particules après une collision avec les surfaces intérieures du volume de contrôle.

Pour l'événement 2, la réémission des particules peut être spéculaire ou diffuse en fonction du TMAC (voir 1.3.2).

Pour l'événement 1, il peut être généré à partir de la distribution de Maxwell-Boltzmann illustrée sur la figure 2.1.

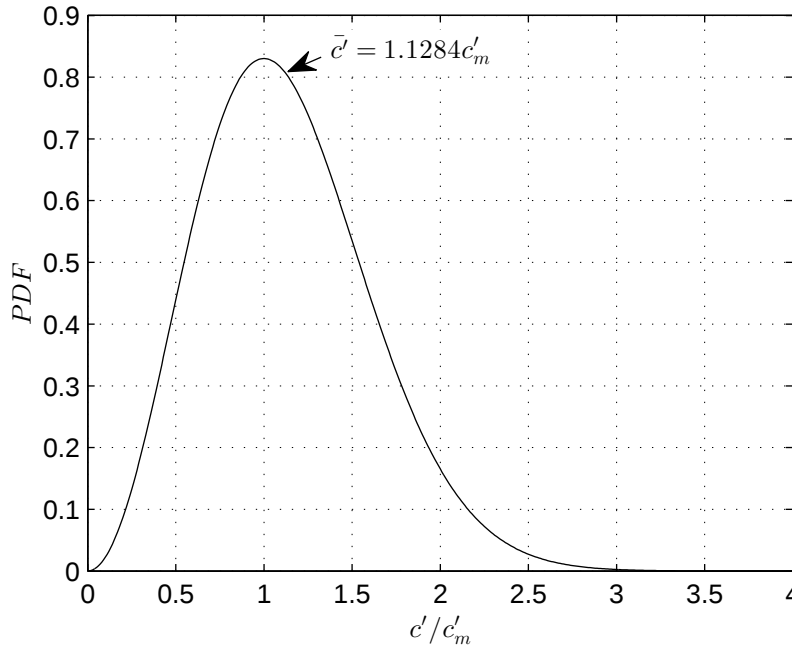


FIGURE 2.1 – Distribution des vitesses dans un gaz stationnaire et à l'équilibre

	H ₂	He	N ₂	Ar	SF ₆
$m(10^{-27}kg)$	3.34	6.65	46.5	66.3	224.5
$c'_m(m/s, T = 20^\circ C)$	1561	1104	417	349	183
$c'_m(m/s, T = 120^\circ C)$	1808	1278	483	404	212

TABLE 2.1 – Vitesse c'_m des gaz

Dans un gaz stationnaire et à l'équilibre, une molécule a une égale possibilité de se déplacer dans toutes les directions et la distribution des vitesses suit la loi de Maxwell-Boltzmann 2.6 qui donne la proportion des molécules ayant une vitesse comprise entre c' et $c' + dc'$.

$$\frac{dn}{n} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} c'^2 \exp \left(-\frac{m}{2\pi k_B T} c'^2 \right) dc' \quad (2.6)$$

où n est la densité des molécules, m est la masse moléculaire, k_B est la constante de Boltzmann et c' la vitesse thermique .

La distribution de Maxwell permet d'obtenir la vitesse la plus probable c'_m et la vitesse moyenne $\bar{c}'$ des molécules d'un gaz simple pour une température donnée :

$$c'_m = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (2.7)$$

$$\bar{c}' = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} c'_m. \quad (2.8)$$

Dans les applications des pompes turbomoléculaires, la température est régulée généralement dans une plage entre $20^\circ C$ et $120^\circ C$ pour des raisons mécaniques. Dans ce type de situations, la vitesse c'_m , qui joue un rôle essentiel dans le comportement des molécules, dépend principalement de la nature du gaz (masse moléculaire). Le tableau 2.1 liste les valeurs de c'_m pour les gaz classiquement rencontrés dans les applications du vide. En raison de la différence notable en termes de comportement de pompage dans les pompes turbomoléculaires entre les gaz ayant une vitesse c'_m élevée et ceux présentant une vitesse c'_m relativement faible, on distingue donc souvent deux familles de gaz : les gaz légers d'une part (hydrogène, hélium) et les gaz lourds d'autre part (azote, argon, SF₆, etc).

2.1.3 Modélisation du régime de transition

Le régime de transition est sans doute le plus complexe à modéliser parmi les trois régimes dans la mesure où il ne se prête à aucune des simplifications qui peuvent être adoptées pour les régimes continu et moléculaire libre : en régime de transition, les interactions entre particules ne peuvent plus être négligées mais dans le même temps l'hypothèse de milieu continu n'est pas encore valable et les équations de Navier-Stokes ne peuvent être utilisées pour modéliser l'écoulement. La démarche la plus "naturelle" consiste donc à chercher à résoudre l'équation de Boltzmann complète (2.1). Il existe deux grands types d'approches pour résoudre cette équation [50] :

- l'approche dite « **Direct Boltzmann CFD** » qui consiste à résoudre directement l'équation de Boltzmann en appliquant de classiques méthodes de discrétisation (différences finies, volumes finis, éléments finis). Pour réaliser le calcul du terme intégral de collision, l'espace des vitesses moléculaires est également discrétisé en un nombre fini de vitesses discrètes.

- l’approche « **Direct Simulation** » qui consiste non pas à résoudre l’équation aux dérivées partielles mais à simuler les phénomènes physiques décrits par cette équation. Comme dans le cas de l’approche TPMC, le comportement du gaz est modélisé à l’aide d’un (très) grand nombre de molécules de simulation (elles-mêmes représentatives d’une certaine quantité de molécules réelles) dont la position, la vitesse, et l’état interne sont suivis au cours de leurs trajectoires. Ces molécules de simulation se déplacent avec une vitesse constante, sauf en cas de collision intermoléculaire ou de collision avec une paroi, événements dans lesquels elles acquièrent une nouvelle vitesse constante dont la valeur est régie par la loi de réémission appliquée. La difficulté supplémentaire, de taille, par rapport à l’approche TPMC réside dans la prise en compte des collisions intermoléculaires.

L’une des premières difficultés liées à l’utilisation de l’approche « Direct Boltzmann CFD » réside dans la nécessité de discrétiser l’espace des phases ou vitesses des particules en sus de l’espace physique. La discrétisation de l’équation doit donc non seulement être réalisée en espace et en temps mais aussi en introduisant des valeurs discrètes des composantes des vitesses des particules (approche de type "discrete ordinate" ou "discrete velocity"). Une autre difficulté majeure de cette résolution directe (par discrétisation des EDP) de l’équation de Boltzmann tient au calcul du terme de collision qui implique une somme double sur les vitesses discrètes dans l’espace des phases. Si on suppose qu’il faut environ 10^2 valeurs discrètes pour chaque composante de vitesse afin d’obtenir une discrétisation de qualité correcte, cela signifie que 10^6 degrés de liberté sont utilisés pour la discrétisation de l’espace des vitesses ; s’ajoute bien sûr à cette discrétisation des vitesses la discrétisation de l’espace physique ainsi qu’une discrétisation en temps ; pour un écoulement 3D (dans une pompe turbomoléculaire par exemple), on atteint rapidement une taille de maillage spatial de l’ordre de 10^6 cellules soit au total de l’ordre de 10^{12} degrés de liberté , ce qui reste exorbitant vis-à-vis de la capacité des moyens informatiques actuels. L’approche « Direct Boltzmann CFD » est donc restée limitée jusqu’à présent à des géométries simples.

L’approche alternative dite « **Direct Simulation** » se décline en différentes méthodes selon la façon de gérer le terme de collision intermoléculaire : on distingue ainsi en particulier la méthode « MD » (Molecular Dynamics) qui emploie une méthode déterministe et la méthode « DSMC » (Direct Simulation Monte Carlo) qui emploie une méthode probabiliste. La méthode « MD », calcule la force et le potentiel intermoléculaire de façon très précise mais devient rapidement trop coûteuse dans le cas de la simulation de gaz raréfiés en raison du coût du calcul déterministe des collisions intermoléculaires. Cette difficulté est contournée par la méthode « DSMC » qui réduit considérablement le nombre de particules à suivre en utilisant la méthode de Monte Carlo pour gérer ces collisions intermoléculaires [48]. On peut considérer, très schématiquement, que la méthode DSMC constitue une version plus complète et plus développée de la méthode « TPMC » dans la mesure où cette méthode DSMC traite non seulement les collisions entre molécules et parois solides, mais aussi les collisions intermoléculaires qui constituent donc un type d’événements aléatoires supplémentaires à gérer par rapport aux deux types d’événements listés précédemment pour TPMC. Aujourd’hui, la méthode « DSMC », développée par G. Bird[9], constitue sans doute l’une des méthodes numériques les plus utilisées pour traiter le régime de transition dans une large gamme d’applications (microfluidique, applications spatiales, applications au domaine du vide que nous détaillerons ci-après). Même si l’approche DSMC reste coûteuse (le nombre de particules à suivre avant d’obtenir des résultats statistiquement convergés peut être considérable notamment pour des configurations tridimensionnelles), elle offre une voie réaliste pour accéder au régime de transition au prix de développements logiciels d’ampleur modérée - nous aurons l’occasion de revenir sur ce point à la fin du présent chapitre et dans le chapitre 5 où nous présenterons une approche

DSMC développée en deux dimensions d'espace.

Avant d'évoquer des stratégies alternatives à la résolution de l'équation de Boltzmann par des méthodes particulières, nous souhaitons mentionner l'utilisation possible de la méthode dite « Boltzmann sur réseaux » ou « Lattice Boltzmann » [13]. Cette approche résout l'équation de Boltzmann linéarisée sur un réseau ou une grille dont les segments constituent les supports de déplacement des particules d'un noeud à l'autre ; dans cette approche cinétique les collisions entre molécules sont modélisées par une relation linéaire avec temps de relaxation multiples. Cette approche a été largement mise en oeuvre comme alternative aux équations de Navier-Stokes pour le régime continu mais a également été appliquée pour décrire certains écoulements raréfiés par exemple dans des microcanaux [46] sans que les résultats obtenus puissent être qualifiés de convaincants pour des régimes ayant un nombre de Knudsen élevé.

Méthodes cinétiques

La principale complexité associée à la résolution de l'équation de Boltzmann complète réside dans l'évaluation du terme de collision intermoléculaire $Q(f, f)$. Les méthodes cinétiques proposent donc de modéliser de façon simplifiée ce terme de collision. Le modèle le plus connu est celui dû à Bhatnager, Gross et Krook [5] appelé de façon commune "équation BGK". Dans un gaz hors-équilibre, l'hypothèse est faite que l'effet des collisions intermoléculaires est de forcer la fonction de distribution f à retrouver une situation d'équilibre.

Puisque le terme $Q(f, f') = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f_* f'_* - f f') c_r \sigma d\Omega dc'$ au membre de droite de l'équation de Boltzmann décrit mathématiquement ce processus de retour à l'équilibre, l'idée de l'équation ou du modèle BGK est de remplacer ce terme complexe par un terme plus simple mais traduisant le même processus :

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla_r (nf) + \vec{F} \cdot \nabla_c (nf) = \nu(\vec{r}, t) ((nf_0) - (nf)) \quad (2.9)$$

On a introduit dans (2.9) la fonction de distribution locale f_0 qui correspond à une situation d'équilibre : il s'agit donc d'une distribution maxwellienne de forme connue. Le terme $\nu(\vec{r}, t)$ correspond à une fréquence de collision et l'expression modèle du membre de droite traduit le retour progressif de la fonction de distribution f vers la fonction de distribution f_0 associée à une situation d'équilibre. L'équation BGK (2.9) reste une équation intégral-différentielle dans la mesure où la distribution maxwellienne f_0 est une fonction de quantités macroscopiques (vitesse, température) qui sont obtenues par intégration de quantités microscopiques faisant intervenir la fonction de distribution f . L'intérêt pratique de la méthode BGK (et des méthodes cinétiques en général) réside dans leur coût beaucoup plus modeste que celui associé à la résolution de l'équation de Boltzmann. Ce coût est néanmoins significativement plus important que celui d'une approche CFD classique (résolution des équations de Navier-Stokes) dans la mesure où l'espace de discrétisation doit inclure, en sus de la discrétisation en espace et en temps, une discrétisation de l'espace des vitesses. Ce surcoût est le prix à payer pour disposer d'une approche permettant de décrire, un écoulement en régime de transition. Des travaux publiés dans les années 2000 [42] [43] [65] ont permis d'améliorer les propriétés (de conservation, d'efficacité) des schémas de résolution discrète de l'équation BGK et on peut trouver par exemple dans les travaux récents de Evans et al [20] des simulations (2D) réalisées en maillages non-structurés.

Modèles physiques d'ordre élevé

La méthode dite des moments s'appuie sur l'équation de Boltzmann pour construire des modèles hydrodynamiques d'ordre plus élevé que les équations de Navier-Stokes (développements d'ordre supérieur en termes de nombre de Knudsen). Ces équations de l'hydrodynamique dites « étendues » ou « généralisées » permettent de mieux prendre en compte les écarts de l'écoulement par rapport à une situation d'équilibre thermique. Les équations dites de Burnett sont ainsi valables aussi bien dans le régime continu que dans le régime intermédiaire. Cependant, la complexité des termes présents dans ces équations pour décrire les contraintes visqueuses et les transferts de chaleur rend leur résolution délicate même dans des géométries simples [37] et probablement inaccessibles à l'heure actuelle dans les géométries complexes qui nous intéressent.

2.1.4 Approches unifiées

Il semble intéressant de souligner que, pour certaines applications pratiques, l'écoulement passe de façon progressive d'un régime à l'autre à l'intérieur du domaine de calcul. Il est donc nécessaire dans ce cas de coupler différents modèles, plus ou moins bien adaptés à tel ou tel régime d'écoulement, et leurs méthodes de résolution associées. Typiquement, peut se poser ainsi le problème du couplage d'un code de type DSMC avec un code CFD classique (éventuellement étendu par des conditions de glissement) ou celui d'un code cinétique (résolvant l'équation BGK) et d'un code Navier-Stokes. La littérature présente quelques publications sur les approches dites hybrides qui assurent un tel couplage [33] [55] [64] [18]. Ces approches peuvent être très utiles, voire devenir indispensables, pour analyser par exemple une situation d'écoulement externe dans le domaine spatial où la localisation de la zone de transition entre régime moléculaire et visqueux ne serait pas connue a priori. Dans le cadre de cette thèse, nous n'avons pas approfondi la réflexion sur ce point car nous avons choisi d'orienter notre travail sur le traitement de régimes spécifiques d'écoulement (moléculaire libre puis de transition) au sein d'une pompe TMP mais nous mentionnerons à la fin de la section suivante les travaux qui existent sur ces stratégies unifiées dans le contexte des pompes turbomoléculaires.

Après ce tour d'horizon des approches numériques disponibles pour simuler des écoulements de gaz raréfiés, nous nous proposons de mettre l'accent dans la deuxième partie de ce chapitre sur notre objet spécifique d'étude, présenté au chapitre 1, à savoir les pompes TMP et MDP. Nous allons donc maintenant faire le lien entre les techniques rapidement décrites pour le régime moléculaire libre, le régime de transition et le régime continu et l'analyse des performances des pompes à vide.

2.2 Méthodes de dimensionnement des pompes TMP/MDP

Lorsque l'on évoque la notion de "performance" des pompes à vide turbomoléculaires, il est important de souligner la contribution importante des travaux de Kruger[34]. Kruger, étudiant de Shapiro au MIT à la fin des années 1950, a été le premier à percer le secret du fonctionnement de ce type de pompes et à en exposer une analyse théorique dans son mémoire de thèse en 1960. Depuis, de nombreux travaux de recherche ont été consacrés à la recherche de modèles toujours plus précis et plus efficaces qui permettent de réduire le temps et le coût du développement de ces pompes en ne faisant qu'au minimum appel à la réalisation (coûteuse) de prototypes. Nous allons rapidement passer en revue ces

travaux en les classant selon le régime de pompage considéré : moléculaire libre, visqueux ou intermédiaire. Il est possible que les trois régimes de pompage puissent coexister au sein d'une même pompe pour certains points de fonctionnement de la pompe, ce qui pousse les scientifiques à explorer la possibilité d'un unique choix de modélisation qui puisse offrir un compromis coût / précision acceptable pour tous les régimes d'écoulement. Malgré les difficultés encore rencontrées en la matière, les résultats de ces modèles seront très rapidement discutés à la fin de ce chapitre.

2.2.1 Pompage en régime moléculaire libre

Dans les travaux de Kruger [34], l'écoulement dans la pompe turbomoléculaire est considéré en régime moléculaire libre. Par conséquent, les collisions entre les particules et les pales sont dominantes par rapport aux celles entre les molécules. En négligeant les collisions inter-moléculaires, l'étude de l'écoulement du gaz se réduit à l'étude d'un flux de molécules indépendantes qui agissent sur les pales du rotor ou du stator. Le problème se ramène alors au calcul de l'état final d'un flux de molécules à partir de leur état initial en connaissant le modèle de collision entre les molécules et le positionnement des surfaces des parois. Dans la littérature, deux méthodes sont utilisées pour effectuer ce calcul de type statistique : la méthode intégrale et la méthode de Monte Carlo.

Méthode intégrale

La méthode intégrale consiste à calculer le flux surfacique sortant de molécules en intégrant toutes les sources de molécules possibles, soit d'une part les molécules provenant directement de l'entrée et dont le flux surfacique est décrit par une distribution de Maxwell, et d'autre part les molécules provenant de la réémission par la paroi des pales qui suit une loi de réémission en cosinus. Les limites de l'intégration sont données par les positions relatives entre les différentes surfaces, ce qui traduit bien le rôle joué par la géométrie des pales sur la performance de pompage d'un rotor ou stator. La méthode intégrale a connu notamment des applications réussies dans les travaux de Sawada [52] [53] où elle a été utilisée pour prédire la performance de pompes aux pales droites.

L'expérience montre que la méthode intégrale peut être efficace lorsque la géométrie à calculer reste simple. Lorsqu'il s'agit de géométries complexes (3D par exemple ou intégrant des formes de pales non-triviales), cette approche devient trop coûteuse (voir notamment l'article [30] pour une discussion sur le coût de calcul).

Test Particle Monte Carlo

L'une des originalités du travail très novateur de Kruger [34] a résidé dans l'utilisation d'une approche statistique de type Monte Carlo pour résoudre le problème de dynamique des gaz qui lui était posé. Cette approche, utilisée dans le but de prédire la performance d'une pompe turbomoléculaire, a connu un grand succès par la suite dans le domaine du calcul des écoulements de gaz en régime moléculaire sous la désignation d'approche « Test Particle Monte Carlo » ou TPMC mentionnée dans la section précédente.

TPMC 2D

Dans les travaux de Kruger, seule une pale droite présentant des surfaces planes a été étudiée. Pour simplifier le calcul - ayons bien en tête les moyens de simulation de l'époque - Kruger emploie un modèle 2D sur une coupe radiale pour représenter l'écoulement dans les étages rotor et stator. Cette simplification implique de négliger :

- les effets tridimensionnels,
- les effets dus à la présence du jeu radial entre l'extrémité des pales et le carter dans le cas du rotor,
- les effets dus à la présence du jeu radial entre le pied des pales et le moyeu dans le cas du stator,
- les effets dus à la présence des parois cylindriques du carter et du moyeu.

Rotor

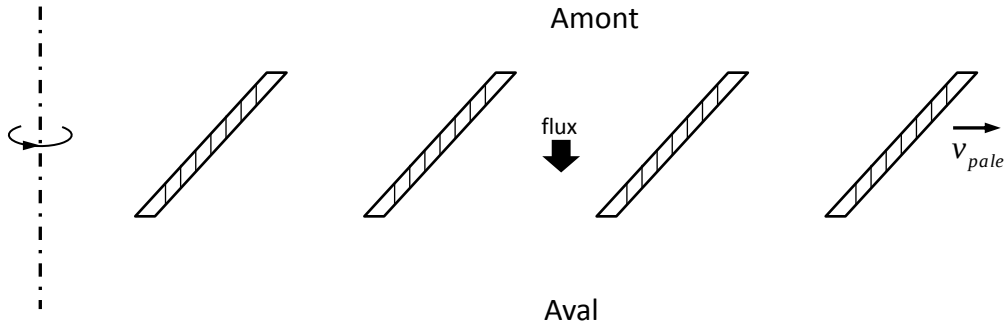


FIGURE 2.2 – Schéma du modèle 2D d'un étage rotor

La figure 2.2 illustre le schéma d'un rotor en 2D avec s la distance entre deux pales, b la longueur des pales, v_{pale} la vitesse de déplacement des pales et α l'angle d'inclinaison des pales par rapport à l'axe horizontal (l'axe de rotation étant vertical). Dans la figure 2.3, en considérant la distribution de vitesse des molécules dans le référentiel de pales, le principe de pompage du rotor peut s'expliquer par une déformation de la distribution de Maxwell produite par le déplacement des pales. Dans la figure 2.3, les pales sont à l'arrêt dans le cas a et se déplacent à une vitesse v_{pale} dans le cas b . Dans le cas a où les pales sont à l'arrêt, le cercle a , qui représente la distribution de Maxwell pour la vitesse des molécules, est homogène et isotrope. Les cercles a_{inlet} et a_{outlet} , qui décrivent la distribution a dans un demi-espace, représentent respectivement la distribution des vitesses de la fraction des molécules qui peuvent interagir avec les pales, avec a_{inlet} pour les molécules se situant à l'amont du rotor et a_{outlet} pour celles à l'aval. Comme a_{inlet} est équivalent à a_{outlet} , il n'y a pas d'effet de compression. Dans le cas b où les pales se déplacent à une vitesse v_{pale} , les distributions de vitesse des molécules se situant à l'amont et à l'aval du rotor représentées respectivement par b_{inlet} et b_{outlet} , ne sont plus équivalentes à cause de la vitesse de déplacement des pales : b_{inlet} est orientée dans le sens privilégié par l'inclinaison des pales tandis que b_{outlet} est globalement orientée dans le sens perpendiculaire aux pales inclinées. Ce déséquilibre entre b_{inlet} et b_{outlet} permet de créer un effet de compression de l'entrée à la sortie de l'étage.

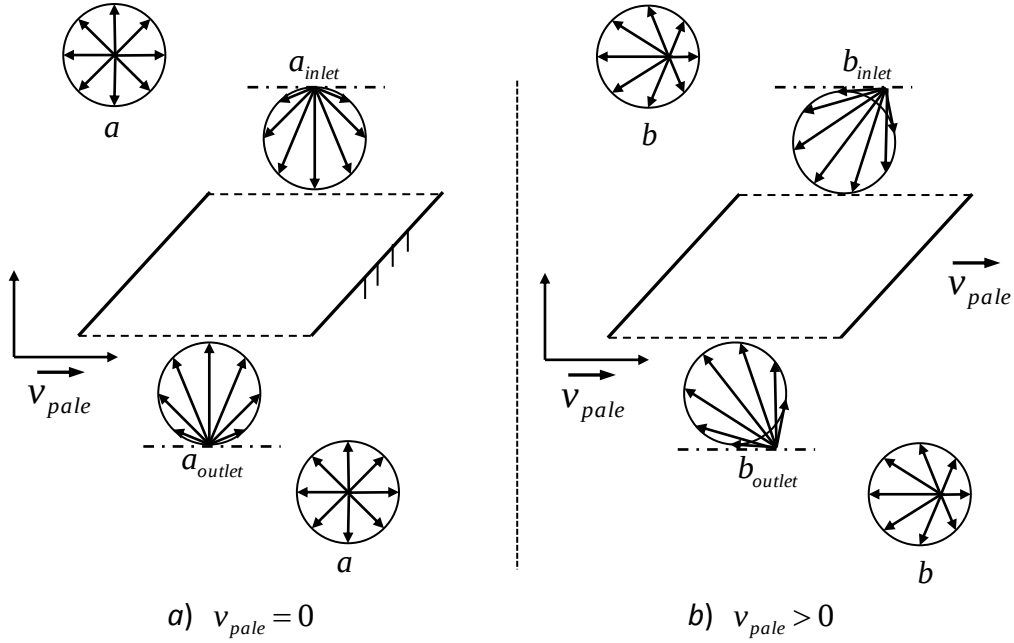


FIGURE 2.3 – Principe du pompage d'un rotor dans un modèle 2D

TPMC 2.5D

L'hypothèse de base du modèle 2D est que la coupe radiale au rayon moyen quadratique représente de façon relativement fidèle le modèle 3D équivalent. En réalité, le modèle 2D est fiable uniquement à condition que la variation de performance soit toujours linéaire dans la direction radiale. Dans le cas d'une pompe dite de Becker [34] où toutes les pales sont droites avec un angle d'inclinaison constant, cette hypothèse reste valable. En revanche, cette hypothèse n'est plus vérifiée lorsque l'on analyse des pompes industrielles développées plus récemment, pour lesquelles le profil des pales est devenu de plus en plus complexe. Le modèle dit 2.5D a donc été proposé ensuite pour mieux prendre en compte ces variations non-linéaires.

Le modèle 2.5D consiste à discrétiser le rotor dans la direction radiale en créant un certain nombre de tranches circulaires qui peuvent être assimilées au modèle 2D. La performance globale du rotor est assemblée ensuite en effectuant une moyenne géométrique de toutes les tranches créées précédemment.

TPMC 2.5D corrigé

Afin de prendre en compte les effets 3D dus à la hauteur radiale limitée des pales, Chu [15] a introduit deux paramètres correcteurs qui permettent de prédire d'une façon plus précise la performance des pompes turbomoléculaires dans certaines configurations.

La figure 2.4 présente une vue de dessus d'une coupe axiale d'un étage rotor avec h_r la hauteur des pales dans la direction radiale, d_1 la longueur circonférentielle entre les extrémités de deux pales voisines et d_2 celle entre les pieds de pale de deux pales voisines. Par rapport au modèle 2D où la hauteur radiale des pales est considérée comme infinie et où aucun effet de bord dans la direction radiale n'est considéré, le modèle de Chu est censé être plus pertinent grâce à la prise en compte de la paroi du carter et du moyeu. Selon

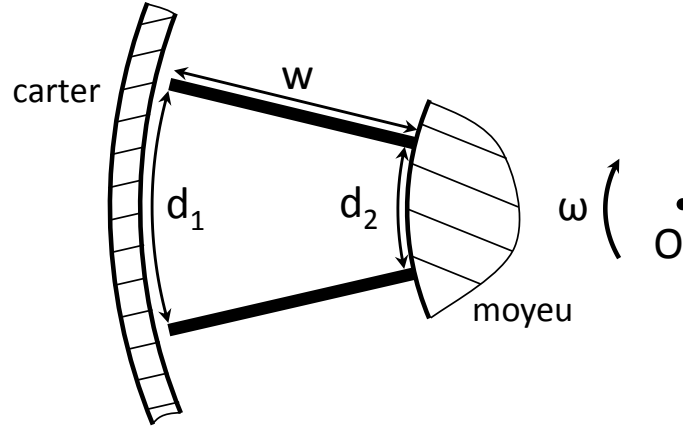


FIGURE 2.4 – Vue de dessus d'une coupe axiale d'un étage rotor

Chu, la vitesse de pompage S_0 doit être corrigée par un facteur η , donné par l'équation (2.10), car la surface du moyeu ne participe pas au pompage puisqu'elle tourne à la même vitesse que les pales. De même, le taux de compression K_0 augmente de ζ , donné par (2.11) en raison de la présence de la surface du carter qui renforce la compression.

$$\eta = \frac{2h_r + d_1}{2h_r + d_1 + d_2} \quad (2.10)$$

$$\zeta = \frac{d_1}{2h_r} \quad (2.11)$$

La vitesse de pompage effective S_0^* et le taux de compression effectif K_0^* sont donc exprimés :

$$S_0^* = S_0 \cdot \eta \quad (2.12)$$

$$K_0^* = K_0^{1+\zeta} \quad (2.13)$$

L'étude menée par Chu [15] montre que l'équation 2.13 permet effectivement de mieux prédire le taux de compression, notamment dans le cas de pompes multi-étagée dont le taux de compression global est très élevé. Concernant la vitesse de pompage, l'équation 2.12 n'a pas pu être vérifiée, car la correction apportée par η soit de 0.90 à 0.95 pour les pompes des années 80, est du même ordre de grandeur que les erreurs expérimentales.

TPMC 3D

La première étude tridimensionnelle de l'écoulement dans une pompe turbomoléculaire avec la méthode TPMC est apparue en 1995 dans l'article de Katsimichas [30]. Le calcul a été effectué pour un rotor ayant des pales droites dans un référentiel tournant, et le jeu radial entre l'extrémité des pales et le carter n'a pas été pris en compte par souci de simplicité. Les résultats ont mis en évidence l'intérêt du modèle 3D par rapport à l'approche 2D dont nous avons vu précédemment qu'elle suppose de nombreuses hypothèses (non nécessairement vérifiées en pratique dans les pompes actuelles) pour fournir une prédiction satisfaisante. Les résultats obtenus par [30] montrent que le modèle 2D est toujours plus pessimiste que le modèle 3D équivalent en ce qui concerne la prédiction du taux de compression.

Dans l'article plus récent d'Amoli [2], une étude a été réalisée dans le référentiel fixe et les surfaces des pales droites sont modélisées par des équations analytiques dans un repère

cylindrique. Ce choix a permis de calculer plusieurs étages avec une approche monolithique. Les résultats ont été validés par rapport aux mesures réalisées par Sawada [52] [53]. Il faut souligner cependant que la méthode proposée par Amoli est valable uniquement pour des pales droites, une topologie de pale que l'on ne trouve quasiment plus dans les pompes industrielles actuelles.

2.2.2 Pompage en régime continu

Comme dans d'autres domaines d'application, l'approche CFD (discrétisation des équations de Navier-Stokes) est utilisée de façon privilégiée comme outil de dimensionnement pour les pompes dites moléculaires ou de type MDP (« Molecular Drag Pump ») décrites en 1.6 et qui fonctionnent essentiellement en régime continu. La raison première de ce choix tient bien sûr au fait que la résolution des équations de Navier-Stokes offre le meilleur compromis coût / précision pour décrire le régime continu ou visqueux : il est bien sûr inutile de résoudre l'équation de Boltzmann ou l'équation BGK ou encore un modèle hydrodynamique d'ordre élevé si les "simples" équations de Navier-Stokes suffisent à décrire correctement l'écoulement. De surcroît, la maturité des solveurs CFD commerciaux permet de disposer "sur étagère" d'outils numériques intégrant géométries complexes et maillages mobiles ce qui est indispensable pour calculer les écoulements dans des pompes industrielles. Par conséquent, il existe une vaste littérature qui aborde la simulation du pompage en régime visqueux ; on peut notamment, sans chercher à être exhaustif, citer les articles [10] [22] pour des pompes de type Holweck, [23] pour des pompe Gaëde et [14] pour des pompes Siegbahn.

Dans le cas d'une pompe turbomoléculaire hybride en fonctionnement "standard", on considère non seulement que la partie MDP fonctionne en régime visqueux mais également une partie de la section turbo de la machine. L'écoulement du gaz dans cette partie de pompe a ainsi fait l'objet d'études antérieures par l'auteur du présent mémoire dans le cadre d'un Diplôme de Recherche Technologique (DRT) qui a précédé cette thèse [69]. Un modèle CFD a été développé pour la partie Holweck ainsi qu'une partie du turbo d'une pompe hybride en s'appuyant sur le logiciel Fluent. Le régime étudié étant en réalité un régime de glissement, les simulations CFD ont été menées en faisant appel à la condition de glissement disponible dans Fluent (de type Maxwell, cf. 2.1.1) et en évaluant différentes variantes de cette condition. Il a ainsi été établi, en comparant des résultats expérimentaux obtenus à Adixen et ceux fournis par le calcul CFD avec condition de glissement, la pertinence du modèle CFD pour la partie Holweck. A titre d'illustration, on présente sur la figure 2.5 les courbes d'isoflux (cf. 1.15 pour la signification de ces courbes) mesurées et calculées pour un écoulement d'Argon dans une géométrie Holweck 2303. Sur cette figure, les courbes associées aux mesures sont tracées en trait continu tandis que les courbes associées aux simulations avec condition de glissement sont tracées en pointillés ; l'accord obtenu entre calcul et expérience apparaît réellement excellent. L'étude de sensibilité du coefficient TMAC montre qu'une valeur de 0.8 est la plus probable pour l'argon, ce qui est légèrement inférieur par rapport aux valeurs rapportées dans la littérature (cf. [63] et [1]).

Nous avons souligné dans 2.1.1 la nécessité de calibrer les coefficients introduits dans les modèles de vitesse de glissement qui permettent d'étendre le domaine de validité des équations de Navier-Stokes. L'étude du coefficient TMAC initialement menée dans le cadre du DRT [69] pour le cas de l'azote a été poursuivie pour d'autres gaz (argon et hélium) et a permis ainsi de confirmer (cf. Fig 2.5 pour l'argon) les très bons résultats obtenus dans le cadre du DRT pour un écoulement d'azote. Les études numériques paramétriques menées

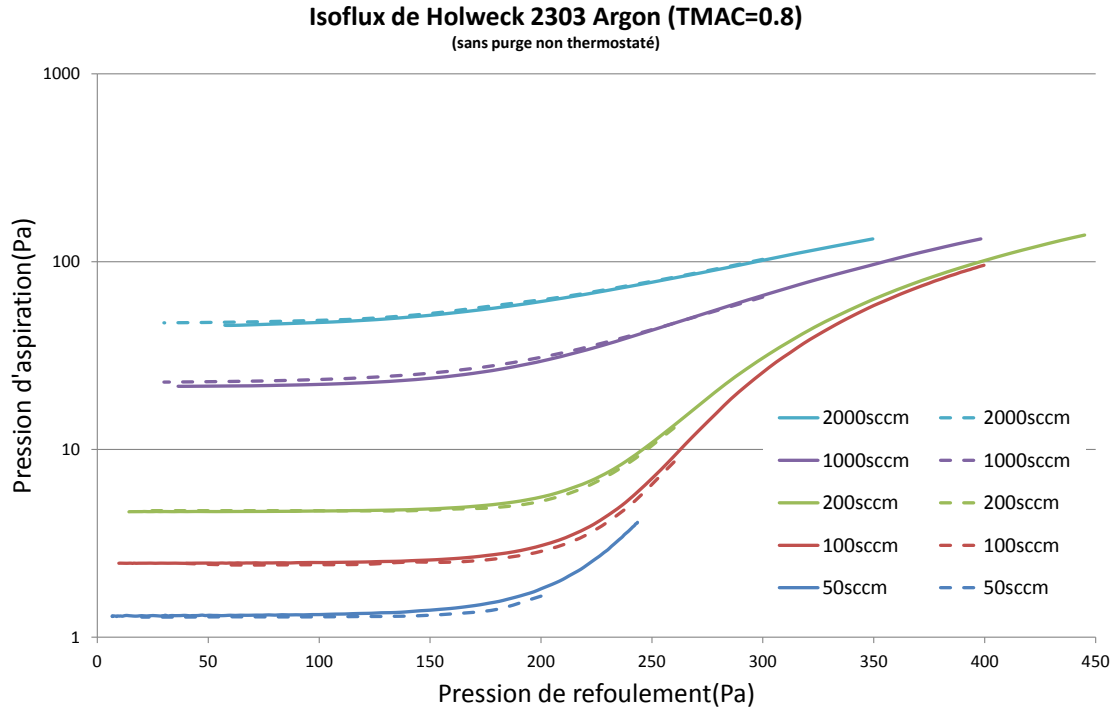


FIGURE 2.5 – Isoflux mesurées (en trait continu) et calculées (en pointillés) par CFD avec condition de glissement pour un écoulement d’Argon dans un Holweck 2303.

Gaz	Ref. [56]	Ref. [63]	Ref. [39]	Ref. [29]	Ref. [1]
Hélium	0.53	0.65	0.38-0.47		
Argon	0.81		0.86	0.334-0.75	0.893
Xenon	0.86			0.4	0.95

TABLE 2.2 – Valeurs de TMAC relevées dans la littérature

pour l’azote et l’argon et la comparaison avec les résultats expérimentaux disponibles a conduit à conclure qu’une valeur de TMAC égale à 0.8 devait être privilégiée pour des gaz lourds tels que l’azote et l’argon.

Le calage du coefficient TMC de l’hélium est réalisé sur un Holweck ayant la même configuration que celui de l’hélium. Les résultats sont présentés sur la figure 2.6. Une famille de courbes d’isoflux de 20 à 3000sccm issues des données expérimentales est tracée en couleur bleue, tandis qu’une famille de courbes obtenues par le calcul CFD à 200sccm en faisant varier le coefficient TMAC de 0.1 à 1 est tracée en couleur rouge. La valeur du coefficient TMAC qui permet une superposition des courbes expérimentale et numérique à 200 sccm est donnée par $\sigma = 0.3$. Si on écarte la possibilité d’une erreur de mesure significative dans la valeur expérimentale du débit massique, la valeur la plus probable pour le coefficient TMAC s’établit donc à 0.3. Le tableau 2.2 présente une synthèse des valeurs du TMAC de quelques gaz nobles telles que l’on peut les trouver dans la littérature. Pour ce qui concerne spécifiquement l’hélium, on observe donc qu’un TMAC de 0.3 semble constituer une valeur faible (même si les valeurs proposées dans la littérature présente une variabilité non-négligeable puisqu’elles semblent comprises, pour ce qui concerne en tout cas notre analyse de la littérature, entre 0.38 et 0.65.

On retient néanmoins cette valeur de TMAC à 0.3 pour l’hélium et on procède sur la figure 2.7 à une comparaison des courbes isoflux calculées (en pointillés) et mesurées (en

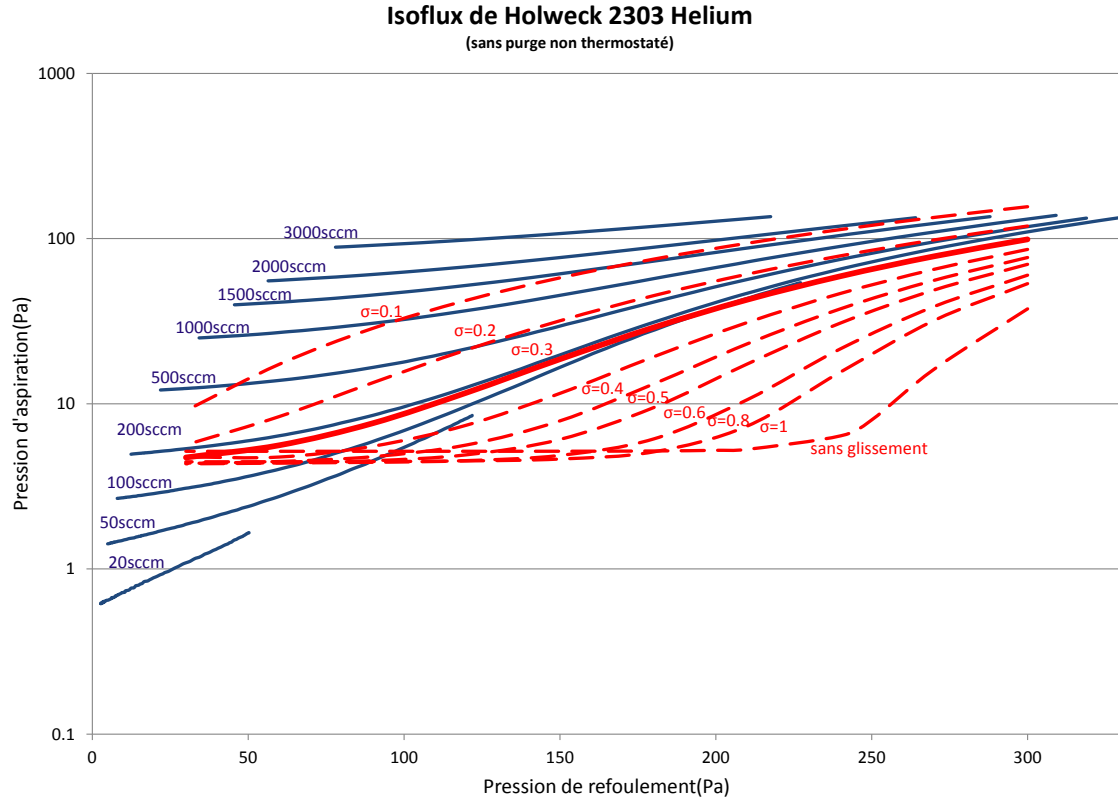


FIGURE 2.6 – Calage du coefficient TMAC pour un écoulement d’Hélium dans la géométrie d’Holweck 2303. En trait continu : mesures expérimentales ; en pointillés : simulations Navier-Stokes avec condition de glissement paramétrée par $\sigma = TMAC$.

trait continu). La concordance reste bonne pour les débits supérieurs à 200sccm mais se dégrade au fur et à mesure que le débit diminue. La tendance observée sur ces courbes pourrait laisser penser que le coefficient TMAC diminue lorsque la pression diminue. Une telle hypothèse a été discutée dans la thèse [4] mais semble rejetée par la communauté scientifique. Les écarts observés entre calculs et expériences pourraient peut-être être réduits en améliorant la condition de glissement utilisée (cf. discussion de la section 2.1.1) par exemple en faisant appel à une condition de glissement du second-ordre [62], [31]. Notre expérience personnelle avec le développement dans Fluent de conditions de glissement améliorées, via des "User Defined Functions", a montré qu’une telle tâche pouvait être techniquement délicate dans le contexte de simulations 3D de pompes industrielles.

2.2.3 Pompage en régime de transition

Lorsque l’on cherche à reproduire numériquement une courbe de vitesse de pompage (cf. 1.11 pour la signification d’une telle courbe et la figure 1.11 pour un exemple), une simulation en régime moléculaire libre ne permet de prédire que le plateau de la partie gauche qui correspond aux plus faibles valeurs de la pression d’aspiration. Lorsque la pression d’aspiration augmente (le nombre de Knudsen diminue) les collisions intermoléculaires jouent un rôle de plus en plus important dans les performances de la machine (ici donc la vitesse de pompage) et la partie droite, décroissante en fonction de la pression d’aspiration, de la courbe de vitesse de pompage doit nécessairement être prédite à l’aide d’une méthode adaptée au régime de transition. Parmi les différentes méthodes qui permettent de traiter

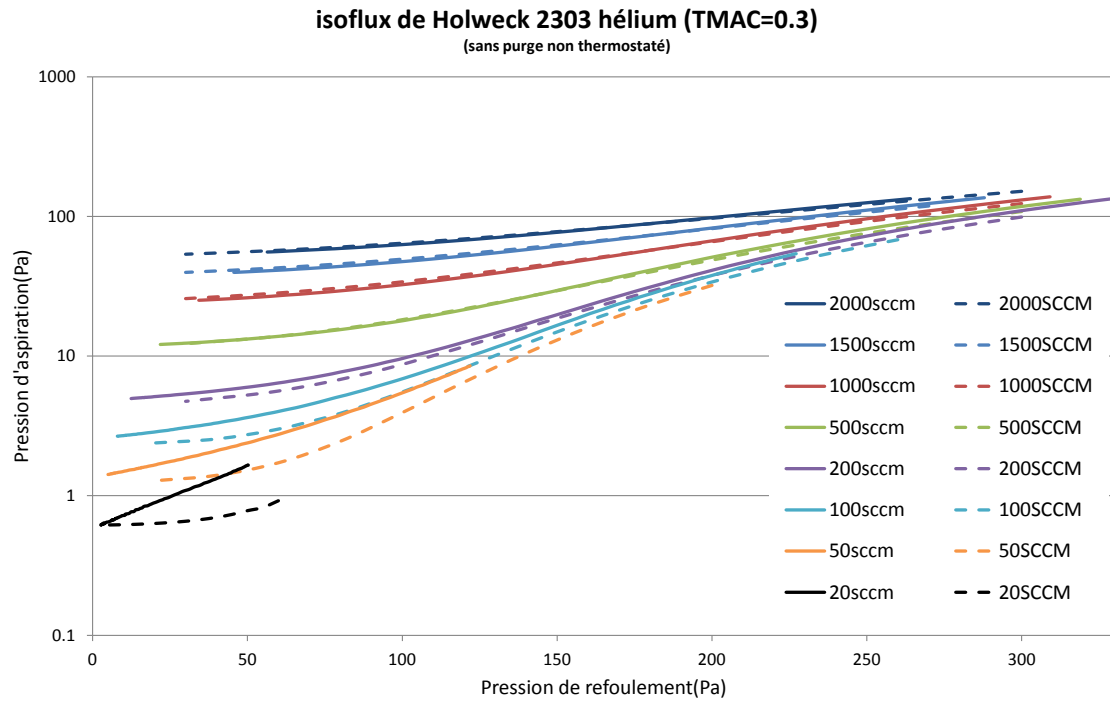


FIGURE 2.7 – Isoflux du Holweck2303 pour un écoulement d’hélium : simulations (trait continu) vs mesures (pointillés).

le régime de transition (CFD Boltzmann, Direct Simulation, voir 2.1.3), la méthode DSMC est sans doute la plus utilisée dans la littérature en raison d’une relative facilité de mise en oeuvre pour traiter des écoulements dans des géométries complexes et en dépit de son coût (très) élevé.

Dans la littérature, les premiers travaux sur la modélisation du pompage en régime de transition se trouvent dans la publication de Matsui [40]. Afin de simplifier le calcul, Matsui et ses collaborateurs de l’Université Nationale de Yokohama (Japon) ne considèrent que des pales droites dont la coupe radiale est un parallélépipède et ils imposent toujours un débit nul à ce modèle géométrique. A travers des calculs sur un modèle 2D d’une pompe à un puis plusieurs étages rotor/stator, Matsui et al mettent en évidence l’effet des collisions intermoléculaires sur le taux de compression maximal de la pompe. L’influence du jeu radial entre l’extrémité des pales et le carter a également été étudiée avec un modèle 3D d’un étage rotor/stator. Ces résultats, qui ont été validés par rapport aux résultats expérimentaux de Sawada [52] [53], montrent qu’il n’existe quasiment pas de différence entre le modèle 2D et 3D pour la configuration étudiée. Mentionnons que l’effet des collisions intermoléculaires sur la vitesse de pompage a également été étudié dans les travaux de Heo [27] mais la question de l’implémentation d’un débit non nul n’est pas abordée de façon claire.

Dans les travaux de Chang [11], on trouve une application de la méthode DSMC à un modèle 3D complet d’un étage rotor dont la performance fut mesurée par Sawada. Chang et al utilisent un modèle de collision de type VSS(Variable Soft Sphere) ainsi qu’un schéma NTC(No Time Counter) et imposent un débit nul dans leurs simulations. Nous reviendrons plus en détail dans le chapitre 5 sur les principaux ingrédients d’une méthode DSMC. Par rapport aux résultats expérimentaux publiés par Sawada, les résultats de simulation obtenus dans [11] sont pertinents en régime moléculaire libre et mais trop optimistes en

régime de transition. L'explication à ces écarts qui est donnée dans [11] met en avant la mauvaise qualité du maillage ("skewness" ou déformation géométrique élevée) d'un rotor aux pales à petit angle d'inclinaison. Les travaux de Wang [68] ont repris les travaux de Chang en remplaçant le modèle VSS par le modèle Generalized Soft Sphere (GSS). Les comparaisons entre ces résultats et ceux de Chang indiquent que le modèle GSS améliore l'accord entre les résultats des simulations DSMC et les mesures de référence de Sawada. Wang et al interprètent cette amélioration apportée par le modèle GSS par le fait qu'il est plus pertinent, par rapport au modèle VSS, pour modéliser un mélange de gaz entre N_2 et O_2 , soit l'air qui a fait en réalité l'objet des mesures réalisées par Sawada. Mentionnons également les travaux de [66] [57]

En sus des travaux précédents qui portent sur les pompe TMPs, on trouve aussi dans la littérature des travaux consacrés à la simulation numérique des pompes MDPs. On peut citer ainsi les travaux de Chang [12] et de Kwon [35] consacrés à une pompe MDP Siegbahn. Cependant, pour ce qui concerne spécifiquement la pompe ATHM qui constitue l'objet d'étude principal dans cette thèse, nous pensons que la méthode CFD est plus pertinente pour modéliser la partie Holweck de la pompe car celle-ci fonctionne essentiellement en régime visqueux glissant. La modélisation de la partie Holweck avec une méthode DSMC ne nous semble pas judicieuse en termes de rapport coût de simulation/ fiabilité de prédiction.

2.2.4 Modèle unique

En raison de la diversité des régimes rencontrés en pratique dans une pompe turbomoléculaire, la possibilité de décrire l'écoulement dans la pompe grâce à un unique modèle apparaît comme très attractive et fait donc toujours l'objet de recherches. De nombreux travaux ont ainsi été réalisés à cet effet, parmi lesquels on peut citer [3] qui fait largement appel à des formules empiriques ainsi que les travaux de Sharipov [59] et [60] basés successivement sur des méthodes cinétiques en 2005 puis sur l'approche DSMC en 2010. Cependant, même si Sharipov présente des analyses menées pour une large gamme de régime de fonctionnement / de nombre de Knudsen, il est important de souligner que ses travaux semblent pour le moment limités au 2D et dans des configurations 2D elles-mêmes simplifiées. Par rapport aux priorités de cette thèse, qui incluent la prise en compte des effets tridimensionnels de l'écoulement, ceci constitue une importante limitation.

2.3 Stratégie numérique retenue

Le tout premier élément dans le cahier des charges que nous avons établi pour définir notre stratégie de développement d'un outil de dimensionnement des pompes à vide est la capacité de cet outil à traiter des géométries de pompes réalistes. Ceci inclut donc la capacité à prendre en compte des géométries d'aubes non seulement droites mais aussi hélicoïdales ou vrillées. En outre, l'outil développé doit permettre de gérer des configurations multi-étagées incluant une succession de rotors et de stators pour la partie "turbo" de la pompe ainsi qu'un Holweck dans le cas d'une pompe hybride.

Le second élément que nous devons avoir à l'esprit est l'importance de pouvoir déployer l'outil développé dans le processus de conception de nouvelles pompes au sein de l'entreprise ADIXEN à l'issue de la thèse. Il s'agit d'une contrainte forte mais qu'il nous semble essentiel de respecter dans l'esprit de la convention CIFRE qui finance les présents travaux. Cette contrainte a deux conséquences principales :

- l’outil de dimensionnement développé doit conduire à des coûts de simulation compatibles avec les cycles de conception typiques de l’entreprise. L’estimation par voie numérique d’une courbe de pompage telle que celle présentée dans 1.11 doit donc pouvoir être menée pour des temps de restitution qui n’excèdent pas un jour ou au pire quelques jours mais sûrement pas au-delà. Ce temps de restitution doit également tenir compte des moyens de calcul de l’entreprise - pas de supercalculateur disponible ni d’accès à de telles machines à l’heure actuelle.
- le développement informatique de cet outil doit pouvoir être réalisé dans la durée de la thèse.

Le troisième élément-clé de notre cahier des charges est de nature beaucoup plus physique : il s’agit de "couvrir" l’ensemble des régimes de fonctionnement d’une pompe hybride. Comme indiqué précédemment dans notre allusion à des approches unifiées, les méthodes cinétiques reposant sur l’approche BGK ou un autre modèle de collision constituent de bons candidats pour une approche valable dans une large gamme de nombres de Knudsen. Nous avons cependant renoncé à explorer cette voie dès le début de la thèse faute de disposer d’une base logicielle existante. Il ne nous a pas semblé réaliste en effet de développer, *ab initio* et dans la durée de la thèse, un outil de simulation cinétique adapté à des géométries complexes et des maillages mobiles. L’évolution pendant la thèse des outils disponibles "sur étagère" nous conduira cependant à évoquer à nouveau cette stratégie dans les perspectives qui pourraient être données à ce travail.

Si on se concentre plus spécifiquement sur le régime de transition, qui apparaît comme mal couvert par les outils de dimensionnement disponibles chez ADIXEN au début de la thèse, il semble judicieux de mettre en place une approche DSMC très bien adaptée à ce régime. Cependant, là-encore, l’absence de disponibilité d’une base logicielle rend très hypothétique le développement dans la durée de la thèse d’une approche DSMC3D (en géométries complexes et avec gestion de maillages mobiles). Plus précisément, des codes DSMC existent mais ne sont pas adaptés à nos besoins spécifiques. Ainsi, des logiciels tels que SMILE, MONACO ou encore DAC (cf. l’article de revue [50] pour des références plus précises sur ces logiciels) ne sont disponibles que pour des communautés réduites d’utilisateurs, qui ne nous sont pas accessibles. G. Bird, l’inventeur, le développeur et le principal promoteur de l’approche DSMC met à disposition des utilisateurs des codes DSMC 2D et même 3D (voir notamment le site Web de Graeme Bird : <http://www.gab.com.au>) mais ceux-ci ne sont disponibles qu’en version exécutable et ne sont clairement pas applicables en l’état à nos problèmes de pompes industrielles (avec en particulier présence de stators et de rotors donc de surfaces mobiles). Pour être tout à fait complet, il convient de mentionner les travaux récents de Bird [7], consacrés précisément à la simulation d’une pompe turbomoléculaire simplifiée (géométrie 2D et design de pales rectilignes par morceaux) ; Bird fait mention dans [7] d’une version "TURBO2V" du code DS2V, spécialement adaptée à l’étude de pompe turbomoléculaire (domaine qui constitue visiblement un nouveau "marché" pour son code et son expertise) et qui semble inclure notamment la gestion repère fixe pour stator / repère mobile pour rotor que nous détaillerons dans le chapitre suivant. Il est d’ailleurs intéressant de remarquer que cette publication de 2011, soumise en 2010, fait allusion à une version 3D en cours de développement mais dont nous n’avons trouvé depuis aucune trace - ce qui peut être interprété comme un indice du volume de développement associé à cette extension "TURBO" du code DS3V pourtant disponible. Dans le courant de la thèse, nous avons également noté le développement d’une "branche" DSMC dans le code Open Source OpenFoam [54] mais nous n’avons pas pris le risque d’opter pour une stratégie de développement dans cet outil (qui lui était bien disponible) car ceci supposait notamment de développer par nous-mêmes dans un code orienté-objet des fonctionnalités de maillage mobile. Une autre raison, encore plus technique, à ce choix

de ne pas exploiter cette option était liée à des problématiques de portabilité du code (d'un environnement Linux à un environnement Windows au sein de ADIXEN). Nous pouvons mentionner que ce code *dsmcFoam* a été tout récemment appliqué, 3 ans après la première publication décrivant son développement, à la simulation d'écoulements de gaz raréfiés dans des canaux avec coudes, en 2 dimensions d'espace. La prise en compte de la complexité géométrique et des surfaces mobiles ne semble pas avoir particulièrement progressé dans l'évolution du code ce qui nous conforte a posteriori sur la stratégie suivie.

Nous avons donc finalement opté pour une stratégie consistant à développer en premier lieu un code TPMC3D capable de prendre en compte une géométrie 3D et la présence d'étages multiples de type rotor et stator. Même si cette approche est, par construction, limitée au régime moléculaire libre, elle présente pour nous un double intérêt :

- elle permet tout d'abord d'évaluer l'importance des effets 3D par rapport aux approches 2D, 2.5D et 2.5D empiriquement corrigée qui sont actuellement disponibles au sein de la société ADIXEN. Nous analyserons en détail ce point dans le chapitre 4 du mémoire.
- elle prépare ensuite le terrain pour le futur développement d'une version DSMC3D puisque, comme le verrons plus en détail dans les chapitres qui suivent, le code TPMC3D contient déjà une partie non-négligeable des ingrédients numériques d'un code DSMC3D (à l'exception notable bien sûr de la prise en compte des collisions intermoléculaires).

Deux éléments supplémentaires nous ont confortés dans cette décision stratégique :

- le temps de développement d'une telle méthode TPMC3D et le coût d'exécution d'un calcul nous semblaient a priori compatibles avec les contraintes énoncées dans notre cahier des charges - nous verrons aux chapitres 3 et 4 qu'il en a bien été ainsi finalement ;
- le besoin en pompes à grande vitesse de pompage exprimé par les clients du domaine des semi-conducteurs conduit les fabricants de pompes à porter leur effort de développement sur des pompes à grand diamètre ($>DN300$). Pour de telles pompes, il apparaît en pratique que les outils de dimensionnement 2D/2.5D dont dispose « aVP » ne suffisent pas à fournir des réponses satisfaisantes.

Le chapitre 3 du mémoire est consacré à la description détaillée de l'outil TPMC3D développé dans le cadre de cette thèse. L'application de cet outil au calcul des performances d'une pompe industrielle est présenté au chapitre 4, avec une analyse précise de la valeur ajoutée apportée par ce nouvel outil de dimensionnement. Enfin, la possibilité de compléter la gamme d'outils disponibles par une approche DSMC, limitée au 2D à l'issue de cette thèse, est présentée dans le cinquième et dernier chapitre du mémoire.

Chapitre 3

Développement et validation d'un code TPMC 3D

Le présent chapitre est consacré au développement d'une approche Test Particle Monte Carlo (TPMC) en 3 dimensions d'espace, soit TPMC 3D, permettant de calculer l'écoulement en régime moléculaire libre dans une pompe turbomoléculaire hybride. Nous détaillons en premier lieu les principes (simples) d'une approche TPMC puis consacrons une large part de ce chapitre à la description précise des ingrédients numériques introduits dans le solveur TPMC 3D que nous avons développé afin de le rendre aussi efficace que possible pour le calcul de pompes industrielles. La dernière section de ce chapitre est consacrée à la validation du solveur développé pour une configuration traitée dans la littérature. L'application de ce solveur à l'analyse du dimensionnement d'une pompe hybride est abordée dans le chapitre 4 du mémoire.

3.1 Principes de l'approche TPMC

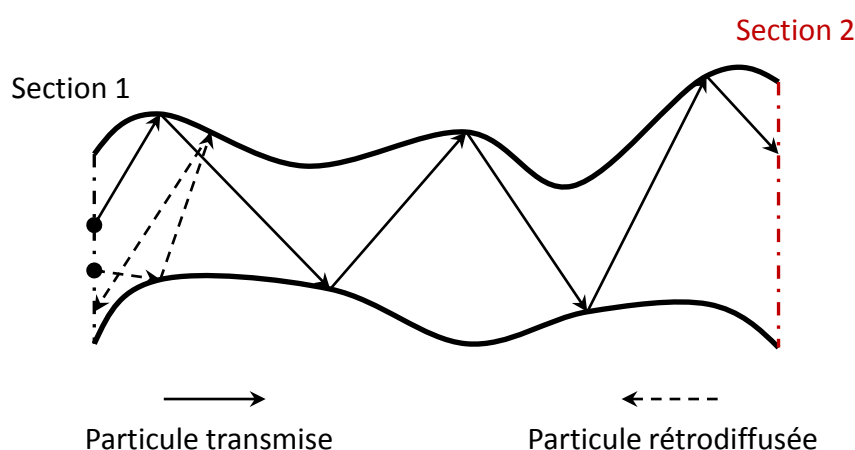


FIGURE 3.1 – Principes de l'approche TPMC : volume de contrôle typique pour un écoulement interne

Nous présentons sur la figure 3.1 un volume de contrôle typique pour la simulation d'un

écoulement interne : celui-ci est limité par des parois solides (en trait plein), qui peuvent être fixes ou en mouvement, et par deux sections en communication avec l'extérieur, notées sections 1 et section 2 et représentées par un trait en pointillés. Un calcul « Test Particle » consiste à suivre la trajectoire d'une particule depuis la surface où elle est générée ou émise soit la section 1 dans le présent cas d'analyse. Deux types de scénario sont alors envisageables après une succession de collisions avec les surfaces du volume de contrôle : la particule peut se trouver au final soit au niveau de la section 2 par laquelle elle va quitter le domaine de calcul / volume de contrôle en étant *transmise*, soit au niveau de la section 1 et dans ce cas la particule est dite *rétro-diffusée*. Une simulation de type TPMC consiste à répéter un nombre suffisamment grand de fois le suivi de particules émises depuis la section 1 afin d'évaluer de façon statistiquement convergée le taux de transmission associé au volume de contrôle analysé.

Le taux de transmission M_{12} du volume de contrôle est calculé par la relation :

$$M_{12} = \frac{N_{12}}{N_1} \quad (3.1)$$

où N_{12} est le nombre de particules transmises de la section 1 à la section 2 et N_1 le nombre de particules lancées ou émises depuis la section 1. Le taux de transmission défini par (3.1) atteint une valeur stabilisée (statistiquement convergée) au bout d'un nombre suffisamment élevé de lancers de particules depuis la section 1.

Similairement, on définit le taux de transmission M_{21} par la relation :

$$M_{21} = \frac{N_{21}}{N_2} \quad (3.2)$$

où N_{21} est le nombre de particules transmises de la section 2 à la section 1 et N_2 le nombre de particules lancées depuis la section 2.

Nous nous proposons maintenant de préciser le lien entre ces taux de transmission et les notions de vitesse de pompage et de taux de compression qui ont été précédemment introduites en chapitre 1.2 pour caractériser les performances d'une pompe turbomoléculaire. Si le gaz considéré est en équilibre thermodynamique et si le régime de l'écoulement est établi, alors le flux de molécules net par unité de surface qui traverse les sections 1 et 2 de l'extérieur vers l'intérieur du volume de contrôle peut être calculé par l'équation donnée par Bird [9] :

$$\dot{N}_i = \frac{n\bar{c}'}{4} \left[e^{-s^2} + \sqrt{\pi}s (1 + \operatorname{erf}(s)) \right] \quad (3.3)$$

où n est la densité de molécules, $\bar{c}'$ est la vitesse thermique moyenne donnée par l'équation 2.7, $s = c_0/c'_m$ est le rapport entre la composante de la vitesse moyenne des molécules suivant la direction normale à la section et la vitesse la plus probable des molécules.

Dans le cas d'écoulement internes où la vitesse moyenne du gaz est faible soit $s \approx 0$, l'équation (3.3) peut se simplifier en :

$$\dot{N}_i = \frac{n_i\bar{c}'}{4}. \quad (3.4)$$

En explicitant maintenant le fait que la section 1 est l'entrée du volume de contrôle et la section 2 la sortie de ce même volume, le flux de molécules net qui traverse le volume de contrôle est donné par :

$$\begin{aligned} \dot{N}_{net} &= \dot{N}_{i1}M_{12}A_1 - \dot{N}_{i2}M_{21}A_2 \\ &= \frac{\bar{c}'}{4} (M_{12}A_1n_1 - M_{21}A_2n_2) \end{aligned} \quad (3.5)$$

où A_1 et A_2 sont les surfaces des sections 1 et 2.

En divisant cette expression par la densité de molécules n_1 en amont du volume, on en déduit le débit volumique D_v :

$$D_v = \frac{\bar{c}}{4} \left(M_{12}A_1 - M_{21}A_2 \frac{n_2}{n_1} \right) \quad (3.6)$$

En considérant maintenant que le gaz est parfait, on peut relier pression, température et densité de molécules par l'équation d'état $P = nk_B T$. Pour un système isotherme, le rapport de densités de molécules n_2/n_1 est donc égal au rapport des pressions qui représente aussi le taux de compression du système :

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{P_2}{P_1} \quad (3.7)$$

Dans le cas d'un système de pompage au vide où $D_v \geq 0$ et $n_2/n_1 \geq 1$, le débit volumique, appelé aussi la vitesse de pompage S dans le domaine du vide, atteint sa valeur maximale S_0 lorsque le taux de compression est égal à 1, ce qui fournit finalement l'expression de la vitesse de pompage maximale en fonction des taux de transmission M_{12} et M_{21} :

$$S_0 = \frac{\bar{c}}{4} (M_{12}A_1 - M_{21}A_2) = \frac{c'_m}{2\sqrt{\pi}} (M_{12}A_1 - M_{21}A_2). \quad (3.8)$$

Par ailleurs, le taux de compression atteint son maximum K_0 lorsque le débit D_v est nul soit l'expression suivante en fonction des taux de transmission :

$$K_0 = (n_2/n_1)_{max} = \frac{M_{12}A_1}{M_{21}A_2} \quad (3.9)$$

Dans le cas des pompes turbomoléculaires, le mouvement des pales crée un forte déséquilibre entre les taux de transmission M_{12} et M_{21} , ce qui explique l'important effet de compression constaté dans ces pompes à l'échelle macroscopique. En revanche, dans le cas des canalisations sous vide où aucun mouvement relatif n'est possible entre les parois d'une conduite, le taux de compression reste égal à l'unité et le rapport de transmission est simplement l'inverse du rapport des surfaces des sections de passage.

3.1.1 Application de l'approche TPMC dans un modèle 2D d'un rotor

Après avoir fait le lien entre les taux de transmission issus d'un calcul TPMC et les caractéristiques de pompage, nous proposons une première application très simple de l'approche TPMC au cas d'un modèle de rotor en deux dimensions d'espace. La géométrie étudiée est décrite sur la figure 3.2.

En négligeant l'épaisseur des pales, la performance de ce rotor dépend uniquement de trois paramètres de similitude en régime moléculaire : l'angle d'inclinaison des pales noté α , le rapport de vitesse C et le rapport d'espacement S qui sont respectivement calculés comme :

$$S = \frac{s}{b} \text{ et } C = \frac{v_{pale}}{c'_m} \quad (3.10)$$

où c'_m est la vitesse la plus probable des molécules donnée par l'équation (2.8). On notera que pour ce simple modèle 2D, la dimension (absolue) du rotor ne joue pas de rôle dans sa

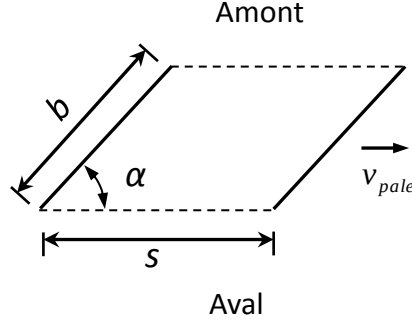


FIGURE 3.2 – Modèle 2D de rotor.

performance. Un rotor de $1mm$ de haut a la même performance qu'un rotor de $1m$ de haut dès lors qu'ils conduisent tous les deux à un même jeu de valeurs pour les 3 paramètres de similitude α , S et C . Nous nous proposons maintenant d'analyser les résultats fournis pour cette configuration de rotor 2D par une approche de type TPMC 2D dont nous ne détaillons pas ici les modalités de mise en oeuvre. Nous souhaitons en premier lieu illustrer les informations fournies par l'approche TPMC avant d'aborder dans la suite du chapitre les développements rendus nécessaires par le calcul d'une configuration 3D réaliste.

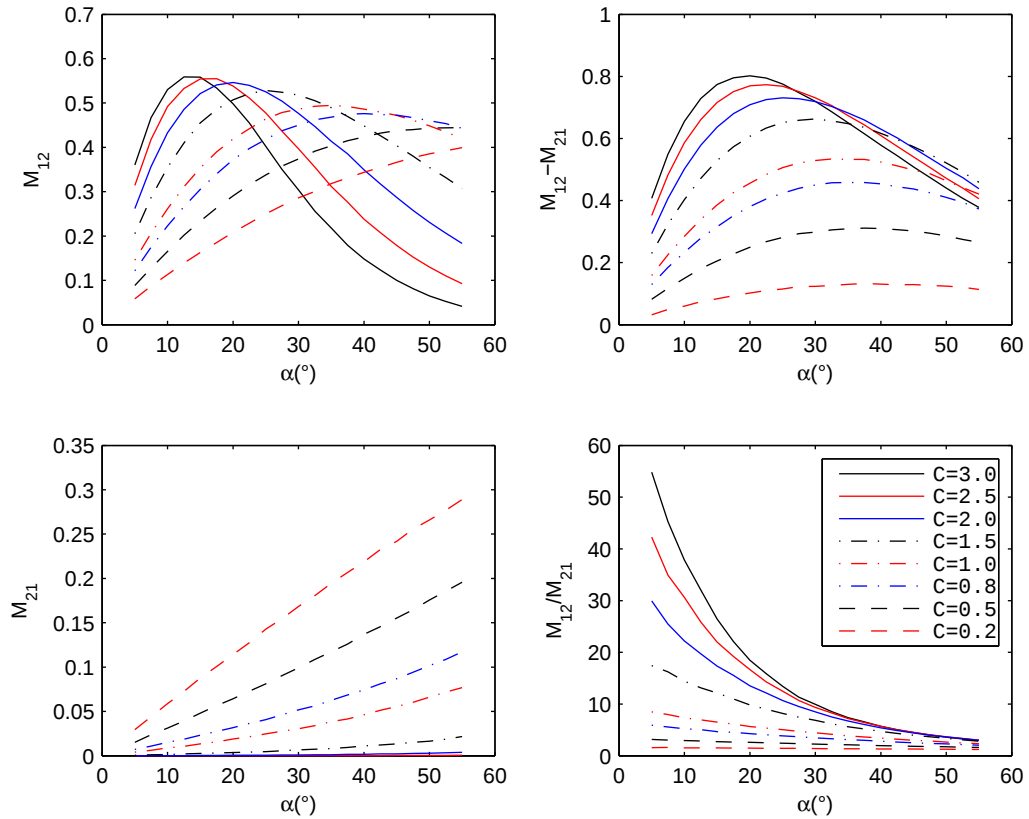


FIGURE 3.3 – Performances d'un modèle 2D de rotor obtenues à l'aide de TPMC (2D) dans le cas où $S = 1$. Les facteurs de transmission, leur rapport et leur différence sont tracés en fonction de l'angle α , chaque courbe correspondant à une valeur donnée de C .

On rassemble sur la figure 3.3 les résultats d'une étude paramétrique du rotor 2D obtenus par calcul des taux de transmission M_{12} et M_{21} à l'aide de l'approche TPMC (2D donc) en fixant $S = 1$ et en faisant varier les deux autres paramètres de similitude, α et C . Dans cette figure, chaque courbe M_{12} et M_{21} représente le taux de transmission du canal formé par les pales inclinées d'un angle α variable, pour un rapport de vitesse C donné. Dans le cas d'une pompe turbomoléculaire dont la vitesse de rotation est limitée par les contraintes mécaniques, le rapport de vitesse C dépend principalement de la nature du gaz. Dans le cas d'un rotor qui a un rapport C égal à 1 pour l'azote, le tableau 3.1 présente la valeur du paramètre C pour d'autres gaz.

	H_2	He	N_2	Ar	SF_6
C	0.27	0.38	1.00	1.19	2.28

TABLE 3.1 – Valeurs typiques du paramètre C dans une pompe turbomoléculaire selon la nature du gaz en écoulement.

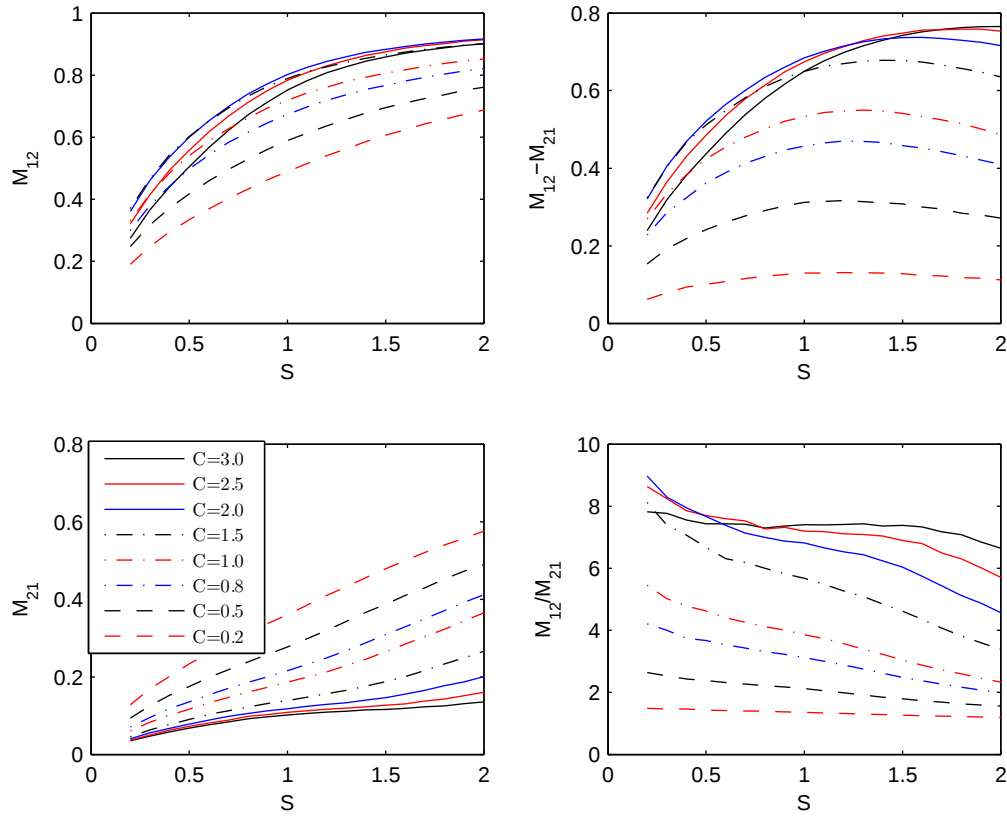


FIGURE 3.4 – Performances d'un modèle 2D de rotor obtenues à l'aide de TPMC (2D) dans le cas où $\alpha = 30^\circ$. Les facteurs de transmission, leur rapport et leur différence sont tracés en fonction du paramètre de similitude S , chaque courbe correspondant à une valeur donnée de C .

Lorsqu'un rotor a la même section de passage entre l'entrée et la sortie, les courbes décrivant l'évolution du rapport M_{12}/M_{21} représentent précisément le taux de compression maximal K_0 donné par l'équation (3.9) ; par ailleurs, la valeur de $M_{12} - M_{21}$ est proportionnelle à la vitesse de pompe maximale S_0 donnée par l'équation (3.8).

On observe sur la figure 3.3, plus précisément sur les courbes M_{12}/M_{21} , qu'une diminution de l'angle α permet d'augmenter le taux de compression K_0 pour un rapport C donné ; ceci est particulièrement vrai pour configurations telles que C est supérieur à 1. Pour un angle α fixé, le taux de compression maximal K_0 croît avec le rapport C et cette augmentation est d'autant plus marquée que l'angle α est petit. La courbe à $C = 0.2$, qui correspond typiquement au pompage de H_2 si on réfère au tableau (3.1), illustre bien la difficulté pour les pompes turbomoléculaires de pomper les gaz légers : le coefficient K_0 reste toujours très faible quel que soit l'angle d'inclinaison des pales α .

Concernant les courbes $M_{12} - M_{21}$, on observe qu'il existe un angle α optimal qui permet d'obtenir la plus grande vitesse de pompage S_0 pour chaque courbe. La valeur de cet angle optimal augmente lorsque le rapport de vitesse C diminue, ce qui signifie que l'angle optimal pour les gaz légers est en général plus grand que celui à privilégier pour les gaz lourds.

On trace ensuite sur la figure 3.4 l'évolution des taux de transmission et de leurs combinaisons (rapport, différence) en fixant l'angle α égal à 30° et en faisant varier les paramètres de similitude S et C . On observe ainsi qu'il existe un rapport S optimal qui permet de maximiser la vitesse de pompage S_0 d'un rotor pour chaque courbe de vitesse de pompage ($M_{12} - M_{21}$), ; cette valeur optimale de S augmente lentement avec C et se situe entre 1.2 et 1.5. En général, le taux de compression K_0 (courbe de M_{12}/M_{21}) augmente lorsque le rapport S diminue. On peut noter que le paramètre S a une influence beaucoup plus faible sur le taux de compression K_0 que l'angle α .

3.1.2 Problématiques liées à la mise en œuvre d'un code TPMC 3D

Comme nous l'indiquent les principes de l'approche TPMC, illustré en 2D sur la figure 3.1, la description de la trajectoire d'une particule de simulation peut comporter plusieurs calculs de l'intersection entre cette trajectoire (en ligne droite) et les parois intérieures du volume de contrôle. Dans le cas 2D, le calcul de ces intersections est trivial même pour des parois de forme complexe. Dans le cas 3D, les parois dont la surface est gauche peuvent poser des problèmes et la méthode utilisée pour calculer le point d'intersection dans ce cas s'inspire en général de la méthode utilisée dans la technique dite de « Ray Tracing ». Elle consiste à discrétiser les surfaces gauches à l'aide de mailles triangulaires (planes) et à calculer ensuite le point d'intersection entre la trajectoire (ligne droite) et l'ensemble de ces mailles triangulaires, comme l'illustre la figure 3.5.

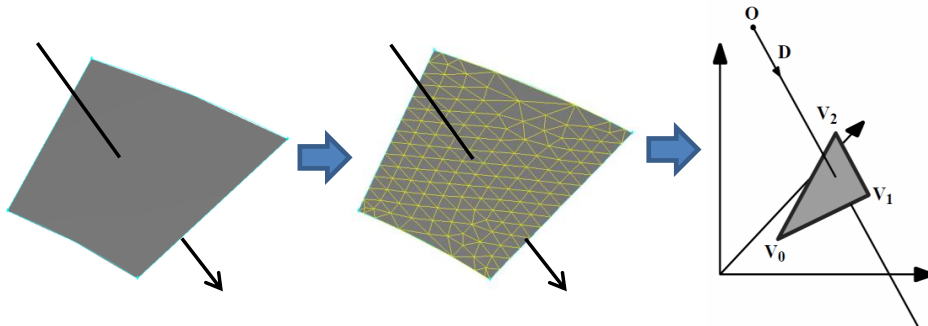


FIGURE 3.5 – Calcul d'intersection (inspiré de la technique de « Ray Tracing ») utilisé pour une surface gauche.

Cette méthode est efficace dans le cas du calcul de l'intersection entre une surface fixe et des trajectoires de particules qui sont des lignes droites. Dans le cas d'une surface gauche en rotation (qui correspond au cas d'un disque rotor de géométrie de pales non triviale), la recherche du point d'intersection peut devenir délicate en raison du mouvement de la paroi solide (ou bien de la courbure des trajectoires si on préfère raisonner dans le repère lié à la surface en mouvement). Il est important de souligner que le coût d'une approche TPMC 3D est lié au fait qu'un grand nombre de trajectoires doivent être suivies pour parvenir à une convergence statistique sur les taux de transmission. Par conséquent, le coût unitaire d'un calcul de trajectoire doit être le plus réduit possible pour autoriser une simulation en un temps de calcul raisonnable. Nous décrivons donc dans la section qui suit les points les plus saillants du code TPMC 3D que nous avons développé, *i.e.* les stratégies de calcul originales ou spécifiques dont nous pensons qu'elles jouent un rôle significatif dans la performance globale du code.

3.2 Description du code TPMC 3D développé

3.2.1 Traitement numérique de la trajectoire

Pour ce qui concerne le calcul de trajectoire d'une particule qui va interagir avec une surface mobile, deux approches sont possibles et utilisées dans la littérature pour calculer le point d'intersection entre la trajectoire de la particule et une surface gauche quelconque en rotation (aube de rotor) :

1. soit on se place dans le référentiel fixe et dans ce cas la trajectoire de particule est une ligne droite et la position de la surface en rotation varie en fonction du temps.
2. soit on se place dans le référentiel tournant et dans ce cas la surface en rotation est désormais immobile. En revanche, en raison de la force centrifuge et de la force de Coriolis, la trajectoire de la particule dans le référentiel tournant est désormais une ligne courbe et non plus une ligne droite.

Compte tenu de la complexité de la forme des pales dans les pompes industrielles, l'approche 2 est adoptée dans cette étude pour les étages de type rotor compte tenu de la simplicité qu'elle autorise au niveau de la discrétisation numérique de la surface. Notre analyse est qu'une trajectoire courbe est plus facile à traiter numériquement qu'une surface gauche en rotation. En revanche, dans le cas d'un étage stator pour lequel les pales sont fixes, l'approche 1 est adoptée pour ne pas créer de difficultés numériques inutiles. Par conséquent, l'utilisation conjointe des deux approches dans le calcul d'une pompe multi-étagée implique un changement de référentiel entre un étage rotor et un étage stator.

Trajectoire des particules dans un référentiel tournant

Selon la théorie cinétique des gaz, les molécules se déplacent toujours en ligne droite entre deux collisions. Leur trajectoire est décrite par l'équation suivante :

$$\vec{P}(t) = \vec{P}_0 + \vec{v}_0 \cdot t. \quad (3.11)$$

où $\vec{P}_0$ est la position initiale, $\vec{v}_0$ la vitesse initiale et $\vec{P}(t)$ la position à l'instant t .

Dans le cas de machines tournantes axiales, un repère cylindrique est le plus souvent utilisé et l'équation (3.11) s'écrit donc comme :

$$\begin{cases} r(t) &= \sqrt{(v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2) \cdot t^2 + 2 \cdot r_0 \cdot v_{r0} \cdot t + r_0^2} \\ \theta(t) &= \arctan\left(\frac{(v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2) \cdot t + r_0 \cdot v_{r0}}{r_0 \cdot v_{\theta0}}\right) + \theta_0 - \arctan\left(\frac{v_{r0}}{v_{\theta0}}\right) \\ z(t) &= z_0 + v_{z0} \cdot t \end{cases} \quad (3.12)$$

où (r_0, θ_0, z_0) sont les trois composantes de la position initiale et $(v_{r0}, v_{\theta0}, v_{z0})$ les trois composantes de la vitesse initiale.

Dans un étage rotor, la trajectoire d'une particule va se déformer sous l'action de la force centrifuge et de la force de Coriolis lorsqu'on se positionne dans un référentiel tournant. Pour un rotor qui tourne à vitesse constante ω , la trajectoire d'une particule peut être obtenue avec une approche cinétique en soustrayant ωt de sa composante orthoradiale θ , ce qui donne l'équation de trajectoire suivante :

$$\begin{cases} r(t) &= \sqrt{(v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2) \cdot t^2 + 2 \cdot r_0 \cdot v_{r0} \cdot t + r_0^2} \\ \theta(t) &= \arctan\left(\frac{(v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2) \cdot t + r_0 \cdot v_{r0}}{r_0 \cdot v_{\theta0}}\right) + \theta_0 - \arctan\left(\frac{v_{r0}}{v_{\theta0}}\right) - \omega \cdot t \\ z(t) &= z_0 + v_{z0} \cdot t \end{cases} \quad (3.13)$$

Dans un calcul de type TPMC, la vitesse initiale et la position initiale des particules injectées dans le domaine de calcul sont aléatoires. La trajectoire d'une particule peut donc prendre un très grand nombre de formes différentes, qui sont plus ou moins difficile à traiter numériquement comme on va le préciser par la suite. Le point clé de l'analyse est que l'expression (3.13) de la trajectoire d'une particule n'est valable qu'entre l'instant où la particule est injectée dans le domaine de calcul et l'instant où se produit la première collision de cette particule avec une paroi solide (en mouvement dans l'analyse présentée pour un étage rotor) puis entre deux collisions successives ultérieures. Les conditions initiales qui apparaissent dans (3.13) doivent donc être comprises comme les conditions d'injection dans le domaine ou les conditions post-collision avec une paroi. La démarche suivie par le code consiste donc schématiquement à :

- propager la particule initialement injectée en utilisant (3.13) jusqu'à ce la particule sorte du domaine sans collision ou bien jusqu'à ce que la particule entre en collision avec une paroi
- déterminer, le cas échéant, un nouvel état post-collision qui sera le nouvel état initial utilisé dans (3.13)
- propager à nouveau la particule depuis l'état post-collision jusqu'à une nouvelle collision ou sa sortie du domaine de calcul.

L'état post-collision, nouvel état initial de la trajectoire d'une particule, est déterminé en utilisant les principes décrits dans la section 1.3.2 et illustrés notamment sur la figure 1.20. Les trois composants de vitesse post-collisionnaires sont calculés avec la méthode donnée par Bird[9].

En apparence, le calcul d'une trajectoire et des occurrences de collision entre particules et parois des aubes peut apparaître comme relativement simple puisque l'on connaît l'équation de la trajectoire (entre deux passages par une frontière - entrée ou paroi solide ou sortie) et que l'on sait décrire les différentes frontières du domaine, de complexité géométrique variable (certaines surfaces sont gauches). En réalité, il faut bien garder en

tête que ces calculs de trajectoires vont devoir être réalisés pour un très grand nombre de particules afin de disposer d'un résultat statistiquement convergé pour les taux de transmission M_{12} et M_{21} - nous précisons dans la section 3.2.8 les ordres de grandeur du nombre de tests à réaliser pour obtenir de tels résultats convergés. Il est donc crucial d'optimiser ce calcul de trajectoires afin de minimiser le temps de simulation de l'approche TPMC 3D. Nous nous concentrons ici sur l'analyse d'un étage rotor dans la mesure où la trajectoire à analyser dans le repère mobile est courbe, contrairement au cas d'un étage stator où les particules suivent une trajectoire absolue dans le repère fixe utilisé.

Pour ce qui concerne spécifiquement le calcul d'une trajectoire dans un étage rotor, la stratégie adoptée consiste à discrétiser la trajectoire selon une procédure que nous allons préciser puis à calculer l'ensemble des points discrets retenus pour décrire cette trajectoire sur un intervalle de temps pré-défini et enfin à déterminer sur la base de cette trajectoire discrète l'éventuelle intersection de la particule avec les aubes (ou sa sortie par l'une des frontières d'entrée / sortie). Nous soulignons que cette stratégie nous apparaît comme la plus efficace à mettre en oeuvre. En particulier, cette stratégie est plus efficace que celle dans laquelle on chercherait à calculer précisément la trajectoire de la particule de l'entrée au premier point de collision avec une paroi par exemple. Cette stratégie de principe est ensuite déclinée de la façon suivante :

- on identifie en premier lieu le degré de courbure initial associé à la trajectoire d'une particule entrant dans l'étage. Ce degré de courbure sera quantifié par le rayon de courbure de la trajectoire.
- si le rayon de courbure initial est "suffisamment grand", cela signifie que la trajectoire suivie par la particule va être relativement rectiligne. Dans ce cas, on pourra choisir un pas de discrétisation de la trajectoire relativement grand.
- si le rayon de courbure initial est en-dessous d'une valeur seuil, on anticipe une courbure significative pour la trajectoire de la particule et on adopte alors une discrétisation à pas variable pour cette trajectoire.
- on calcule et on stocke l'ensemble des points de la trajectoire d'une particule et on analyse ensuite les intersections possibles entre cette trajectoire et les surfaces du domaine de calcul.
- si une collision a eu lieu le long de la trajectoire calculée, on détermine le point d'intersection de la trajectoire et de la surface impactée puis on définit (cf. ci-dessus) le nouvel état initial post-collision. On détaille dans 3.2.3 la gestion optimisée de ce calcul d'intersection.
- on reprend alors la première étape ci-dessus pour la nouvelle portion de trajectoire à décrire et on itère ce processus jusqu'à ce que la particule soit sortie du domaine de calcul - ce domaine de calcul peut inclure plusieurs étages comme nous le détaillerons dans la section 3.2.7.

Pour gérer la représentation discrète des trajectoires, de multiples options étaient disponibles avec en particulier l'utilisation de courbes splines d'ordre 2 ou plus. Après quelques tests préliminaires, nous avons finalement opté pour une simple représentation par segments successifs qui nous apparaît comme offrant le meilleur compromis coût / précision. Nous évaluerons dans la section 3.2.4 les erreurs introduites par ces choix de discrétisation.

Après avoir brossé de façon aussi synthétique que possible les principes de l'approche TPMC 3D développée, nous nous proposons maintenant d'en détailler les ingrédients les plus importants : choix du pas de discrétisation, analyse des rayons de courbure, discrét-

tisation adaptative et définition des limites *a priori* adoptées pour le calcul d'une portion de trajectoire.

Pas de discrétisation

Compte tenu du choix d'une discrétisation de la trajectoire par une succession de segments, la longueur de ce segment est déterminante pour la précision de la discrétisation. Le choix de cette longueur est piloté par le rayon de courbure local R_c de la trajectoire (cf. la fraction de trajectoire illustrée sur la figure 3.6). La précision de la discrétisation est directement liée à l'erreur qui est commise en remplaçant la trajectoire réelle par une trajectoire localement rectiligne, *i.e.* un segment de longueur l . L'écart maximal entre la courbe et le segment est donné par :

$$\epsilon_{tr} = R_c - \sqrt{R_c^2 - \frac{l^2}{4}} \quad (3.14)$$

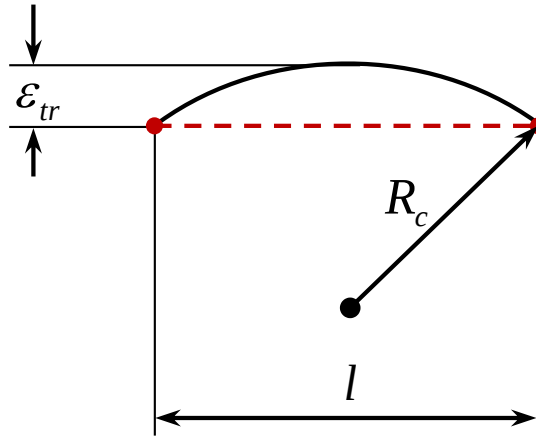


FIGURE 3.6 – Choix du pas de discrétisation de la trajectoire d'une particule

Si on se fixe un degré de précision ϵ_0 , on tire immédiatement de (3.6) une borne supérieure pour le pas de discrétisation :

$$l < 2\sqrt{(2R_c - \epsilon_0)\epsilon_0} \quad (3.15)$$

En général, on considère que $\epsilon_0 \ll R_c$, donc la condition (3.15) se simplifie comme :

$$l < l_{max} = 2\sqrt{2R_c\epsilon_0} \quad (3.16)$$

La relation (3.16) nous offre donc un critère pour fixer le pas maximal à adopter dans la discrétisation d'une trajectoire de particule. L'influence de la taille de discrétisation est discutée dans le chapitre 3.2.4.

Analyse de la courbure de la trajectoire

Le rayon de courbure d'une trajectoire quelconque est donné par l'équation (3.17) en repère cylindrique :

$$R_c(t) = \frac{ds^2}{d^2(tr)} = \frac{\|\dot{tr}\|}{\det[\dot{tr} \times \ddot{tr}]} \quad (3.17)$$

$$= \sqrt{\frac{\left((r\dot{\theta})^2 + \dot{r}^2 + \dot{z}^2\right)^3}{\left(-2\dot{r}\dot{\theta}\dot{z} - r\ddot{\theta}\dot{z} + r\dot{\theta}\ddot{z}\right)^2 + \left(-r\dot{\theta}^2\dot{z} + \ddot{r}\dot{z} - \dot{r}\ddot{z}\right)^2 + \left(r^2\dot{\theta}^3 + 2\dot{r}^2\dot{\theta} - r\ddot{r}\dot{\theta} + r\dot{r}\ddot{\theta}\right)^2}} \quad (3.18)$$

Les dérivées premières et les dérivées secondes de r, θ et z qui interviennent dans le calcul du rayon de courbure peuvent être obtenues à partir de l'équation (3.13), soit :

$$\begin{cases} \dot{r}(t) = \frac{(v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2) \cdot t + r_0 v_{r0}}{r} \\ \dot{\theta}(t) = \frac{r_0 v_{\theta0}}{r^2} - \omega \\ \dot{z}(t) = v_z \end{cases} \quad \begin{cases} \ddot{r}(t) = \frac{v_{r0}^2 + v_{\theta0}^2 - \dot{r}^2}{r} \\ \ddot{\theta}(t) = -\frac{2r_0 v_{\theta0} \dot{r}}{r^3} \\ \ddot{z}(t) = 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

On note désormais $RCTP$ le rayon de courbure d'une trajectoire de particule en référentiel tournant. Cette quantité se calcule donc en remplaçant $\dot{r}, \ddot{r}, \dot{\theta}, \ddot{\theta}, \dot{z}$ et $\ddot{z}$ par leurs expressions (3.19) dans la formule (3.17) du rayon de courbure. Comme les valeurs de $r_0, \theta_0, z_0, v_{r0}, v_{\theta0}$ et v_{z0} sont aléatoires dans un calcul TPMC, les différentes combinaisons qui peuvent être prises par ces valeurs conduisent à une distribution très étendue des rayons de courbure à $t = 0$ (ou à un instant post-collision). Naturellement, comme le montre les formules (3.17) et (3.19) la valeur de $RCTP$ évolue aussi en fonction du temps le long de la trajectoire d'une particule donnée. Cependant, cette dérive de $RCTP$ au cours d'un laps de temps qui reste très court (temps avant qu'une collision ne se produise) est en fait beaucoup moins importante que la variation de $RCTP$ d'une trajectoire de particule à une autre, due au caractère aléatoire des valeurs initiales de la vitesse et de la position de la particule.

Afin de mieux cerner les caractéristiques de la distribution initiale du $RCTP$, *i.e.* l'ensemble des $RCTP$ calculés au niveau de la surface d'entrée des particules dans le domaine également notés $RCTP_0$, on analyse sur la figure 3.7 les résultats d'un calcul effectué dans un étage rotor de rayon moyen 0.1 m et de hauteur radiale des pales égale à 0.09 m . La géométrie étant fixée, le paramètre de similitude que nous faisons varier dans l'analyse est le rapport entre la vitesse linéique de la pale et la vitesse la plus probable des particules soit le paramètre C introduit dans 3.1.1. La vitesse linéique de la pale est prise au rayon moyen soit environ à 0.1 m pour calculer C .

Les distributions de $RCTP_0$ tracées en partie basse de la figure 3.7 montrent que les valeurs de $RCTP_0$ peuvent s'étendre sur plus de quatre décades, de 10^{-3} m à 10 m pour des pompes turbomoléculaires industrielles qui présentent un paramètre de similitude C variant typiquement entre 0.2 et 2. Le rayon de courbure minimal est en général très petit ($< 1\text{ cm}$) de sorte que le pas maximal de discrétisation exigé par la condition (3.15) devient alors trop petit pour être utilisé de façon systématique (pas constant basé sur cette valeur initiale) pour discrétiser les trajectoires de particules. Par ailleurs, les courbes de distribution cumulée (CFD) présentées en partie haute de la figure 3.7 montrent que, pour des pompes turbomoléculaires industrielles qui présentent un coefficient C typiquement compris entre 0.2 et 2, plus de 90% des trajectoires ont un rayon de courbure supérieure à

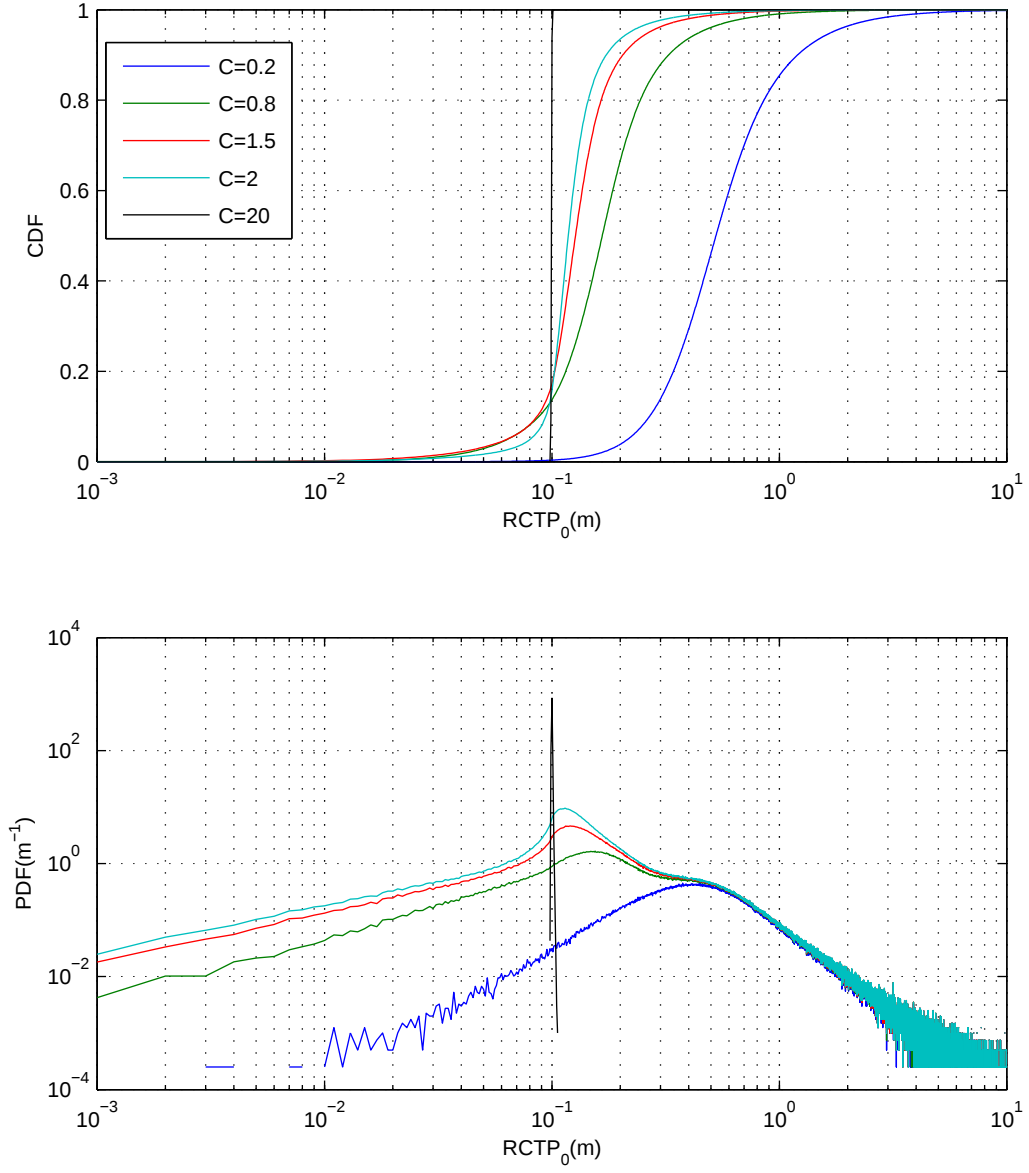


FIGURE 3.7 – Analyse des trajectoires pour un rotor 3D. Distribution du rayon de courbure initial $RCTP_0$ en fonction de C calculé au rayon moyen (≈ 0.1 m).

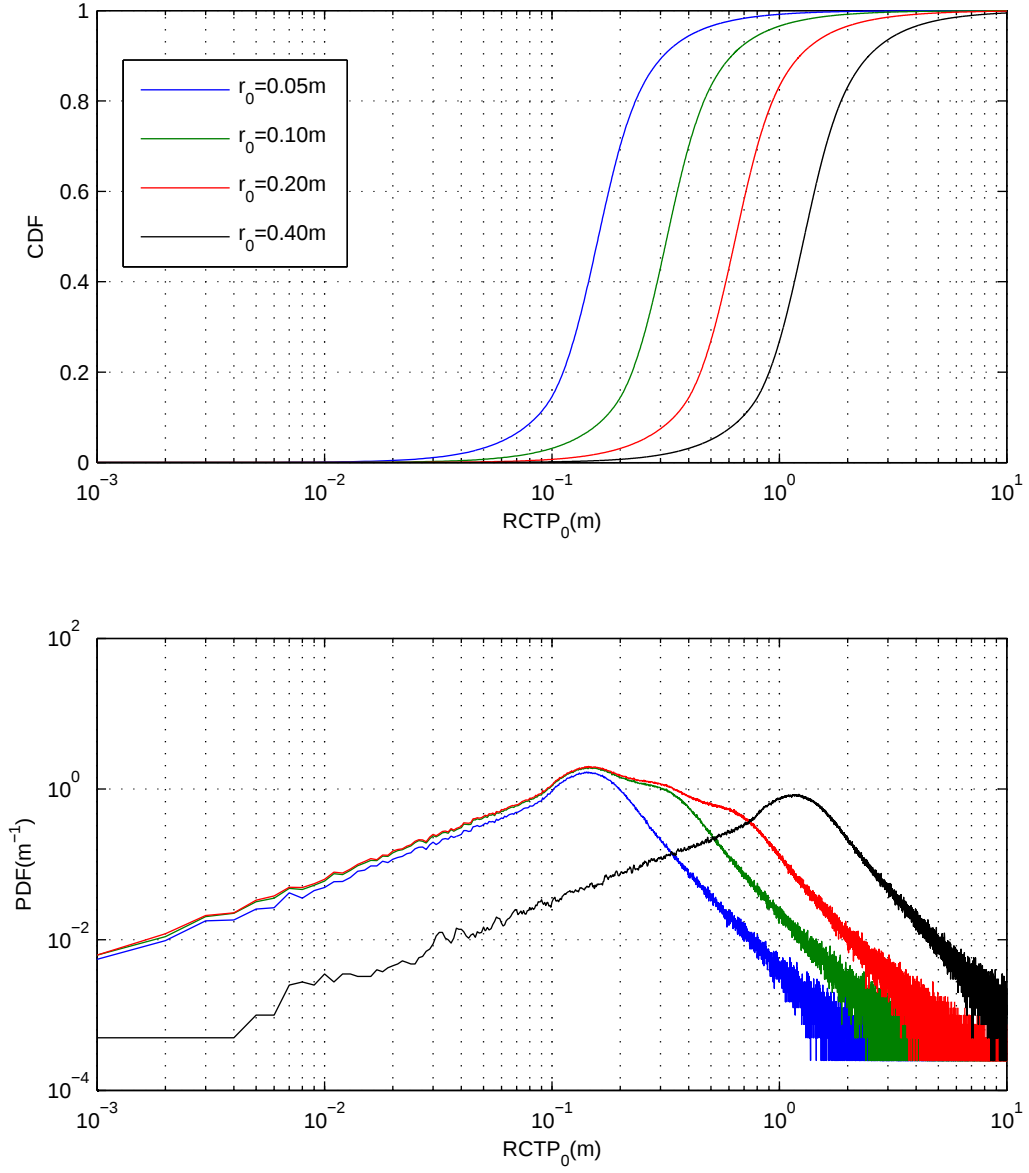


FIGURE 3.8 – Analyse des trajectoires pour un rotor 3D fonctionnant à $C = 0.8$. Distribution du rayon de courbure en fonction du rayon de départ

0.1 m , soit environ la distance maximale que parcourt une particule entre deux collisions dans la présente configuration. Ainsi, dans 90% des cas, on doit pouvoir se contenter d'un nombre réduit de segments pour discrétiser une trajectoire avec une précision qui reste satisfaisante. Les 10 % restants doivent bien sûr être traités avec précision : en particulier, il est important de décrire correctement la courbure de la trajectoire pour assurer un calcul correct de l'intersection de cette trajectoire avec les aubes du rotor ; nous préconisons donc une adaptation du pas de discrétisation de la trajectoire au rayon de courbure local (cf. paragraphe ci-dessous). Nous pouvons également remarquer sur la figure 3.7 que l'évolution des courbes des PDF (Probability Density Function) et des courbes des CDF (Cumulative Density Function) en fonction de C démontre une augmentation du pourcentage des trajectoires à faible rayon de courbure avec l'augmentation du facteur C soit typiquement l'augmentation de la vitesse de rotation du rotor. Puisque les trajectoires à faible rayon de courbure sont plus coûteuses à suivre (pas de discrétisation variable) on anticipe donc des temps de simulation plus long pour des rotors tournant à vitesse élevée. Dans le cas extrême où C est très grand (ici $C = 20$), la courbe PDF se resserre vers le rayon moyen du rotor car le mouvement de rotation domine la génération des trajectoires.

La figure 3.8 illustre l'évolution de la distribution de $RCTP_0$ en fonction leur rayon de départ pour un paramètre C constant à 0.8. Les courbes de CDF montre que l'augmentation du rayon de départ permet diminuer la portion des trajectoire à petit rayon de courbure, soit à C constant, le coût du calcul est moindre pour un rotor avec un rayon plus grand.

Discrétisation adaptative

Sur la base de l'analyse des $RCTP_0$ présentée ci-dessus, nous avons donc choisi de mettre en place une stratégie de discrétisation adaptative des trajectoires des particules. L'adaptation se situe à deux niveaux :

- selon la valeur du $RCTP_0$ de la trajectoire, on affecte ou non un pas de discrétisation fixe en utilisant la condition (3.15) pour fixer ce pas de discrétisation. On souligne bien que le $RCTP_0$ doit être compris comme le rayon de courbure de la trajectoire à chaque "réinitialisation", c'est-à-dire pas seulement au moment de l'injection de la particule dans le domaine de calcul mais aussi après chaque collision.
- pour les trajectoires de $RCTP_0$ faible, on utilise un pas de discrétisation variable en recalculant à chaque point de discrétisation de la trajectoire le rayon de courbure local et en appliquant localement la condition (3.15) pour déterminer le nouveau pas de discrétisation adopté. On illustre sur la figure 3.9 la discrétisation d'une trajectoire dont le rayon de courbure présente des variations non-négligeables au cours du temps.

On souligne ici que les tests effectués ont montré que le fait de négliger la variation du rayon de courbure pour des trajectoires de $RCTP_0$ suffisamment faible pouvait conduire à des imprécisions importantes sur la prédiction finale. Le surcoût associé à la prise en compte de la variation du rayon de courbure le long de la trajectoire est donc justifié par un souci de précision du calcul.

3.2.2 Limites de la trajectoire

Afin de maximiser l'efficacité du code de calcul, la trajectoire est discrétisée sur une longueur (ou pour une durée, un intervalle de temps) que nous choisissons de fixer *a priori*.

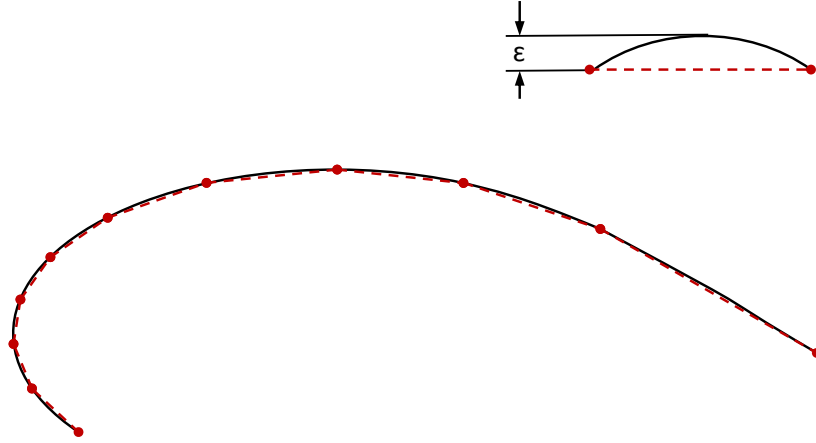


FIGURE 3.9 – Exemple de discrétisation adaptative d'une trajectoire à courbure variable

La longueur de trajectoire fixée *a priori* doit évidemment satisfaire les deux conditions suivantes :

1. elle doit être suffisamment grande pour que le point d'intersection de la trajectoire avec une paroi soit inclus, s'il existe.
2. elle ne doit pas être trop grande pour ne pas conduire à des calculs inutiles qui pénaliseraient l'efficacité du code.

En pratique, on se donne non pas une longueur mais un temps d'intégration de la trajectoire, t_{tot} .

Dans le cas d'une pompe, la vitesse initiale d'une particule suivant la direction axiale v_{z0} peut servir de "mètre-étalon" pour déterminer la durée minimale à prendre en compte à condition que v_{z0} soit assez importante par rapport à v_{r0} et $v_{\theta0}$. On choisit ainsi comme temps d'intégration de la trajectoire :

$$t_{tot} = \begin{cases} (z_{max} - z_0)/v_{z0}, & \text{si } v_{z0} > 0 \\ (z_{min} - z_0)/v_{z0}, & \text{si } v_{z0} < 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

où z_{max} , z_{min} désigne respectivement l'altitude de la frontière d'entrée de la particule selon qu'elle est injectée dans le domaine à l'amont (section 1) ou à l'aval (section 2).

La pertinence de la condition (3.20) dépend en pratique de la valeur relative de la composante v_{z0} par rapport aux composantes v_{r0} et $v_{\theta0}$. On illustre ainsi sur la figure 3.10 deux cas de figures typiques. Dans le premier cas (Fig. 3.10(a)), favorable, la composante v_{z0} est du même ordre de grandeur que v_{r0} , $v_{\theta0}$. Les deux exemples présentés illustrent le fait que les trajectoires calculées contiennent effectivement le point d'intersection attendu et sont raisonnablement longues au-delà de cette intersection ; le compromis espéré est donc bien réalisé. Dans le second cas, illustré par la figure 3.10(b), la composante v_{z0} est très faible par rapport à v_{r0} et $v_{\theta0}$. Le choix d'une durée totale donnée par (3.20) peut alors poser problème en conduisant à une trajectoire inutilement longue. Dans le code TPMC 3D, des mesures spécifiques sont prévues pour les cas où $v_{z0} < 10\% \sqrt{(v_{r0})^2 + (v_{\theta0})^2}$; les tests effectués montrent que dans certains cas, statistiquement rares, la longueur de la trajectoire adoptée *a priori* peut être insuffisante. Comme toute augmentation de t_{tot} va

pénaliser l'efficacité générale du code, il nous a semblé préférable de mettre la priorité sur l'efficacité du code en acceptant quelques calculs de trajectoires incorrects dont l'effet global est négligeable par rapport aux très nombreux tests qui sont réalisés dans une approche de type Monte Carlo.

Par ailleurs, la figure 3.11 illustre le cas où il existe plusieurs points d'intersection entre une trajectoire et les surfaces présentes dans le domaine de calcul. Les algorithmes mis en place permettent de trier ces différents points d'intersection afin de sélectionner celui qui est physiquement réalisé (soit celui correspondant à la première surface rencontrée le long de la trajectoire).

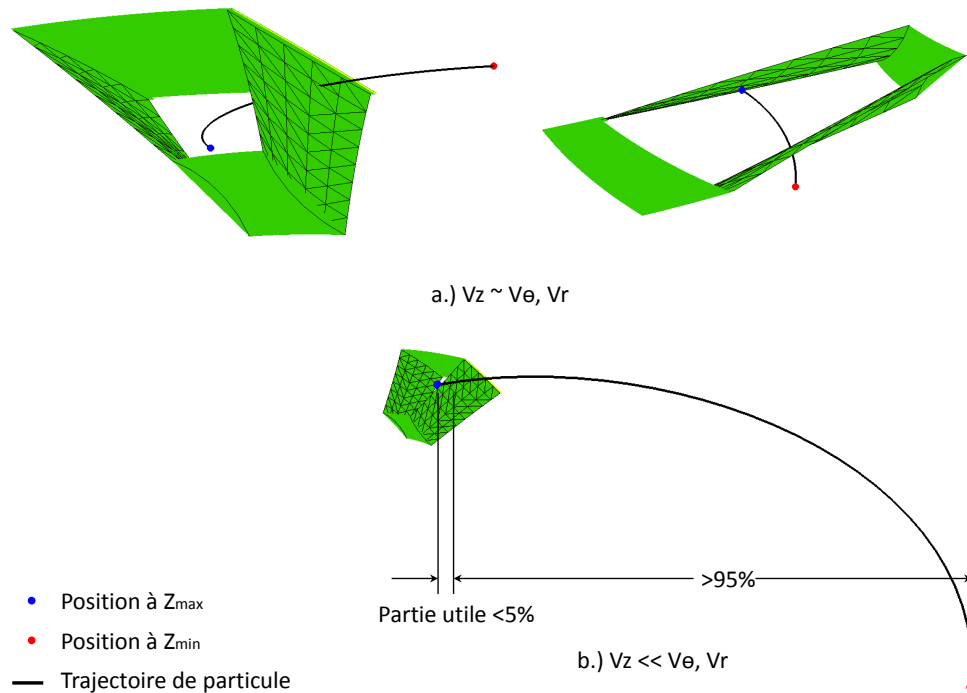


FIGURE 3.10 – Limite de la trajectoire discrète

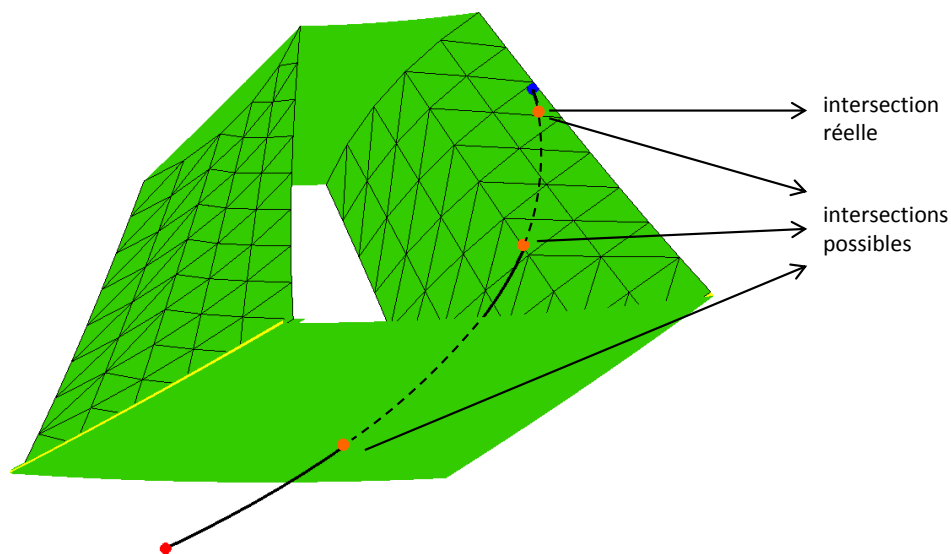


FIGURE 3.11 – Situation d'intersections multiples

3.2.3 Traitement des surfaces : approche hybride

Une fois l'étape de calcul discret de la trajectoire réalisée, il nous faut gérer le calcul de l'intersection des trajectoires avec les surfaces des aubes (et des plans d'entrée / sortie). Pour une pompe turbomoléculaire industrielle, les surfaces concernées sont listées dans le tableau 3.2 et réparties en deux catégories : les surfaces analytiques ou les surfaces complexes. Comme leur nom l'indique, les surfaces analytiques sont décrites analytiquement dans le repère cylindrique utilisé alors que les surfaces dites complexes (il s'agit typiquement des pales vrillées) sont représentées par un ensemble de facettes qui forment un pavage de la surface (voir Fig.3.12). Pour les surfaces analytiques, le point d'intersection avec la trajectoire des particules peut être calculé soit directement dans le cas de la surface à z constant et de la surface cylindrique, soit de façon itérative dans le cas de la surface ortho-radiale et de la surface hélicoïdale. Pour les surfaces complexes, on doit rechercher le point d'intersection de la trajectoire avec l'une des facettes de discrétisation de la surface dont l'équation est celle d'un plan.

Nous avons choisi d'adopter une méthode dite hybride pour gérer le calcul des intersections, au sens où nous distinguons donc deux stratégies selon la nature analytique ou complexe (discrète) de la surface considérée. Nous utilisons donc, afin de maximiser l'efficacité du code :

1. une méthode directe ou itérative pour les surfaces à z , r ou θ constant et pour les surfaces hélicoïdales.
2. une méthode discrète (recherche facette par facette) pour les surface complexes qui sont maillées.

rotor	surface analytique	interface	$z = C$
		ortho-radiale	$\theta = C$
		cylindrique	$r = C$
		hélicoïdale	$\theta = Az + B$
stator	surface complexe	pale vrillée	$\sum_{i=1}^n (A_i x + B_i y + C_i z + D_i = 0)$
	surface analytique	cylindrique	$r = C$
		pale droite	$Ax + By + Cz + D = 0$
	surface complexe	pale vrillée	$\sum_{i=1}^n (A_i x + B_i y + C_i z + D_i = 0)$

TABLE 3.2 – Classement des différentes surfaces gérées par le code TPMC 3D.

Discretisation des surfaces gauches

De façon analogue à ce qui a été mis en place pour la discrétisation des trajectoires de particules, une discrétisation adaptative pourrait être adoptée pour les surfaces gauches afin d'optimiser le nombre de mailles utilisées. Cette idée est intéressante dans son principe mais sa mise en œuvre pratique s'est avérée très compliquée et nous avons finalement opté pour une discrétisation à taille de maille constante (relativement à la dimension de la pale). En pratique, les rayons de courbure des surfaces à discrétiser sont en général assez grands et leur variation sur une surface donnée est assez faible de sorte que cette stratégie simple ne nous semble pas pénalisante.

La création du maillage surfacique est réalisée à l'aide du mailleur Gambit. Les surfaces des pales sont d'abord créées puis maillées dans Gambit. Ensuite, le maillage surfacique est exporté en format "neutre" pour pouvoir être lu par le code TPMC3D. Cette procédure de maillage des surfaces, illustrée par la figure 3.12, est entièrement automatisée dans le code TPMC 3D avec des scripts Gambit paramétriques pour permettre de façon souple des études de sensibilité à la géométrie des pales.

Compte tenu de la faible courbure des surfaces concernées (parois des pales) dans les pompes, une discrétisation à base de quadrangles pourrait sembler suffisante pour obtenir une précision correcte tout en créant moins de mailles que dans le cas d'une discrétisation à base de triangles. En pratique, nous avons observé des problèmes pour assurer un pavage satisfaisant des différentes surfaces des pales en utilisant les maillages à base de quadrangles générés à l'aide de Gambit. Faute de faire appel à un meilleur mailleur (dans le cadre de cette thèse), des maillages à base de triangles ont donc finalement été adopté car permettant d'assurer un pavage réellement satisfaisant quelle que soit le raffinement du maillage.

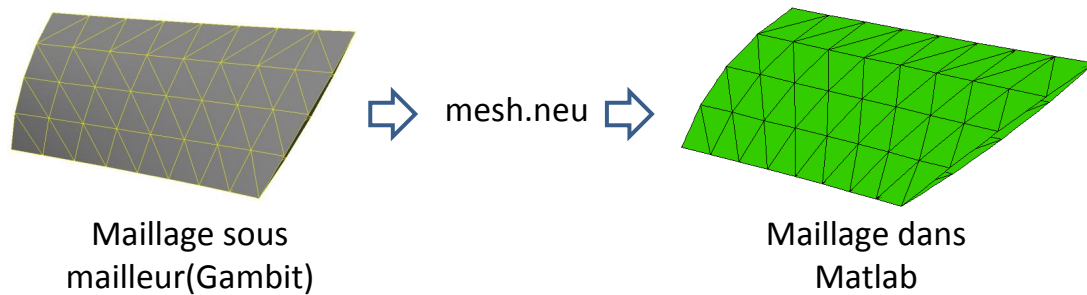


FIGURE 3.12 – Exemple de discrétisation de la surface d'une aube

Formes des pales

La figure 3.13 récapitule toutes les formes possibles pour les pales des étages rotor et stator - l'étage Holweck étant considéré comme un étage stator. Dans le code TPMC3D, des scripts paramétriques sont développés pour toutes ces formes de pale. Que ce soit pour un rotor ou un stator, le temps de calcul du code augmente avec le nombre de mailles nécessaires pour discrétiser les surfaces des pales. En général, les pales « twisted » nécessitent une discrétisation fine et les pales droites n'ont pas besoin d'être discrétisées comme nous l'avons synthétisé dans le tableau 3.2. Pour les pales hélicoïdales, une discrétisation grossière est généralement suffisante car elles restent proches des pales droites. L'ordre croissant du temps de calcul est donc : pale droite, pale hélicoïdale et pale « vrillée ».

3.2.4 Étude de sensibilité aux paramètres de discrétisation

La stratégie développée pour gérer les trajectoires des particules et les collisions de ces particules avec les surfaces présentes dans le domaine de simulation a fait apparaître deux types de discrétisation :

- la discrétisation de la trajectoire d'une part
- la discrétisation de certaines surfaces (surfaces gauches) d'autre part

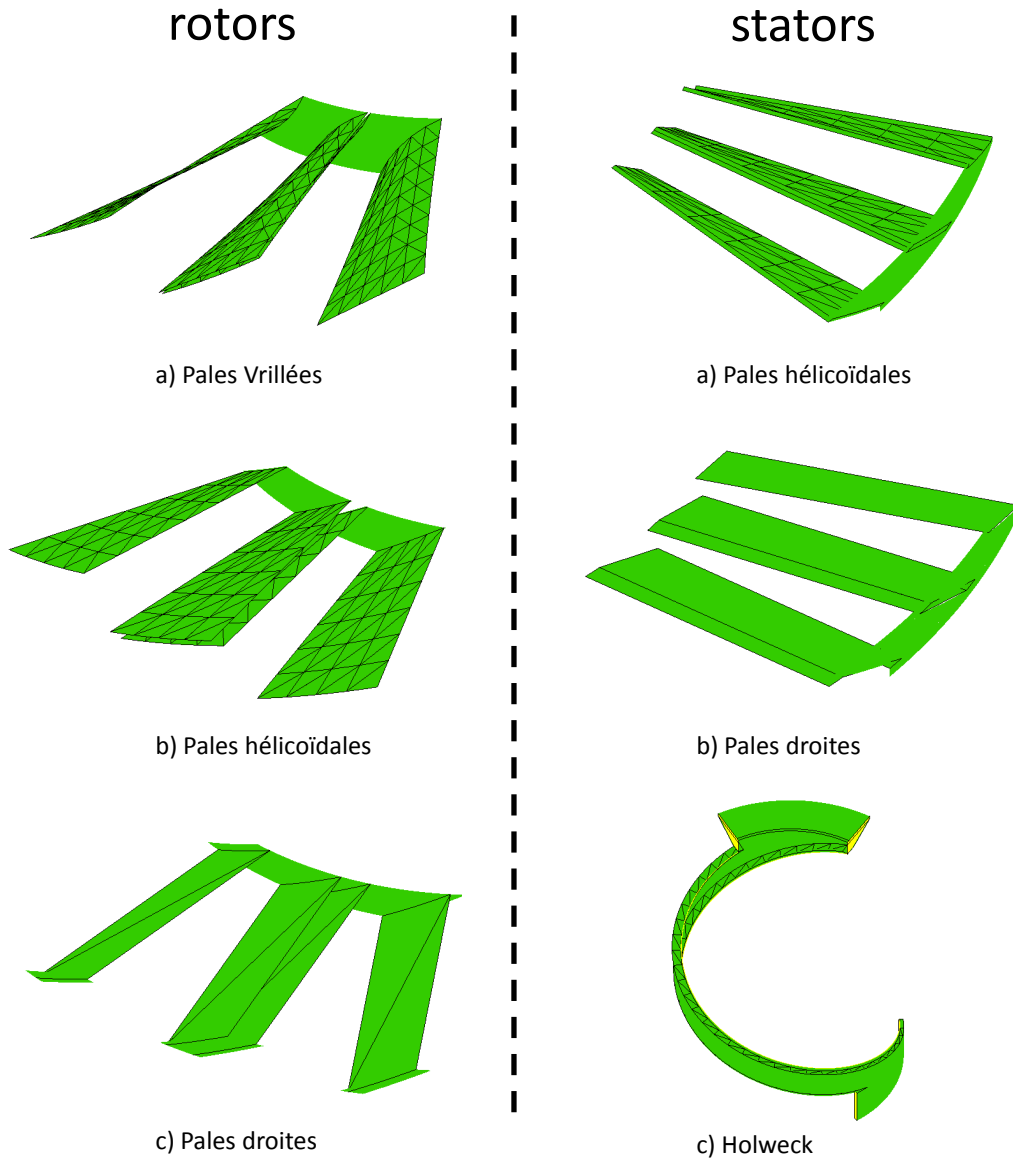


FIGURE 3.13 – Différentes formes des pales pour les rotors et les stators

Il nous a donc semblé utile de mener une étude de sensibilité des résultats fournis par le code TPMC 3D aux paramètres de discrétisation retenus; l'idée est d'identifier un compromis satisfaisant entre précision du résultat et coût du calcul. Les deux paramètres de discrétisation analysés sont la distance maximale ϵ_{tr} entre la trajectoire réelle et la ligne de discrétisation polygonale, donnée par l'équation (3.14), pour ce qui concerne la discrétisation de la trajectoire et la surface maximale σ_s d'une maille de discrétisation surfacique pour ce qui concerne la surface des pales.

On effectue un calcul de référence en choisissant une discrétisation très fine à la fois pour les trajectoires des particules et pour les surfaces des pales : on retient ainsi $\epsilon_{tr} = 0.01mm$ et $\sigma_s = 3.18mm^2$. On présente sur la figure 3.14 les différents maillages surfaciques d'une pale vrillée (du rotor 1 de la pompe ATH2303M) pour une taille de maille σ_s qui varie de $3.18mm^2$ à $114mm^2$.

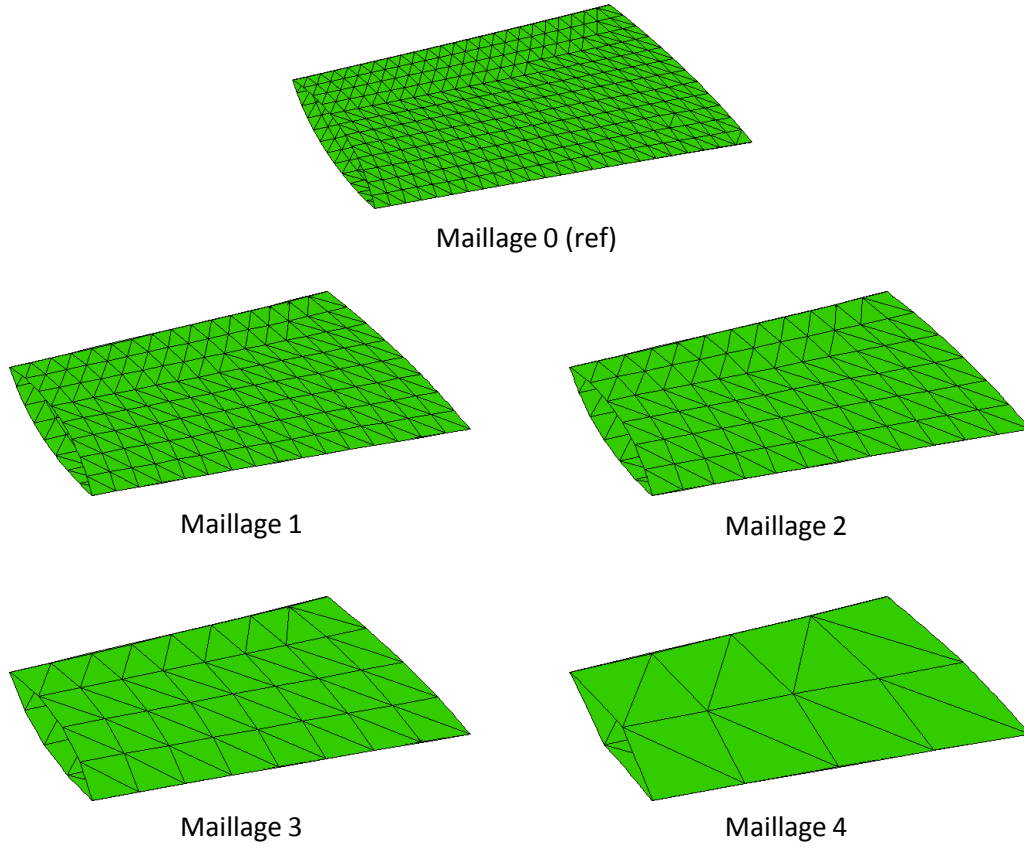


FIGURE 3.14 – Etude de sensibilité aux paramètres de discrétisation. Vue des différents maillages surfaciques pour σ_s variant de 3.18 mm^2 à 114 mm^2 .

Dans la mesure où les deux paramètres ϵ_{tr} et σ_s ne sont pas indépendants, une étude entièrement rigoureuse aurait dû balayer un ensemble de couples $(\epsilon_{tr}, \sigma_s)$. Nous adoptons ici une démarche simplifiée en fixant dans un premier temps $\epsilon_{tr} = 1 \text{ mm}$, ce qui correspond à une discrétisation grossière des trajectoires des particules et en faisant varier σ_s . Dans un second temps, nous retenons le meilleur compromis pour σ_s et faisons varier, pour ce choix, la valeur du paramètre ϵ_{tr} . La quantité physique utilisée pour quantifier la précision des simulations est le taux de compression maximal K_0 . L'erreur relative commise est calculée par rapport à la valeur obtenue avec les choix (les plus fins) de référence. On observe ainsi dans le tableau 3.3 l'évolution du taux de compression calculé en utilisant les maillages progressivement déraffinés illustrés sur la figure 3.14. On peut constater que le temps de calcul augmente très rapidement avec le nombre d'éléments. En revanche, l'erreur commise sur le taux de compression reste toujours très faible à partir d'une taille de maille de moins de 30 mm^2 . Si on se fixe une précision d'environ 1% sur le taux de compression calculé par TPMC 3D, on préconise donc (pour le cas étudié) l'utilisation du maillage 3.

Le tableau 3.4 illustre la variation de la valeur prédite pour K_0 lorsque le « Maillage 3 » est utilisé pour la discrétisation des surface des pales, avec ϵ_{tr} variant entre 0.05 mm et 1 mm . On observe à nouveau une augmentation significative du coût de calcul dès que l'on diminue ϵ_{tr} . Une discrétisation utilisant $\epsilon_{tr} = 0.5 \text{ mm}$ semble un bon compromis entre le temps de calcul et la précision du résultat puisqu'elle conduit à une erreur relative sur K_0 qui n'excède pas 1%.

	nb d'éléments	$E_{max}(mm^2)$	K_0	erreur	tps de calcul
Maillage 0 (ref)	1152	3.18	3.121	0.00%	220
Maillage 1	512	7.15	3.127	0.19%	78
Maillage 2	288	12.7	3.129	0.24%	44
Maillage 3	128	28.6	3.160	1.25%	20
Maillage 4	32	114	3.233	3.59%	6

$E_{max}(mm^2)$ la taille maximale des éléments,

K_0 le taux de compression.

TABLE 3.3 – Etude de sensibilité du calcul de K_0 par TPMC 3D. Sensibilité à la discrétisation des surfaces complexes

	$\epsilon(1mm)$	K_0	erreur	temps de calcul
cas 0 (ref)	0.01	3.121	0.00%	220
cas 1	0.05	3.122	0.02%	187
cas 2	0.1	3.124	0.09%	103
cas 3	0.2	3.132	0.36%	62
cas 4	0.5	3.141	0.62%	35
cas 5	1	3.160	1.25%	20

ϵ l'erreur de discrétisation,

K_0 le taux de compression.

TABLE 3.4 – Etude de sensibilité du calcul de K_0 par TPCM 3D. Sensibilité au pas de discrétisation de la trajectoire des particules

3.2.5 Restriction à une portion angulaire périodique

Afin de réduire le temps de calcul, la simulation TPMC d'un étage rotor ou stator peut s'effectuer seulement sur une portion angulaire unitaire de l'étage avec prise en compte d'une seule pale au lieu d'un étage complet avec toutes ses pales ; pour ce faire, il est nécessaire de créer des conditions périodiques rotationnelles. Comme illustré sur la figure 3.15, une paire de surfaces à conditions périodiques rotationnelles, notées ici A et B, est créée : ces deux surfaces sont identiques mais présentent un décalage angulaire $\Delta\theta$. Elles sont utilisées de la façon suivante : une particule qui sort du domaine de calcul par la surface A avec une vitesse V est réintroduite par la surface périodique B avec une vitesse V' , et vice versa. La relation entre V et V' est donnée par l'équation (3.21) en repère cylindrique ou l'équation (3.22) en repère cartésien où une rotation de $\pm\Delta\theta$ est appliquée aux composantes de la vitesse (cette rotation est appliquée automatiquement dans le cas du repère cylindrique).

$$\vec{V}'_{r\theta z} = \vec{V}_{r\theta z} \quad (3.21)$$

$$\vec{V}'_{xyz} = \begin{pmatrix} \cos(\Delta\theta) & \sin(\Delta\theta) & 0 \\ -\sin(\Delta\theta) & \cos(\Delta\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \vec{V}_{xyz} \quad (3.22)$$

En ce qui concerne la position de la particule réintroduite, il suffit d'appliquer un décalage de $-\Delta\theta$ à sa position ortho-radiale, les positions radiale et axiale restant les mêmes.

Il reste à préciser les choix de découpage d'un étage complet. La figure 3.16 illustre deux

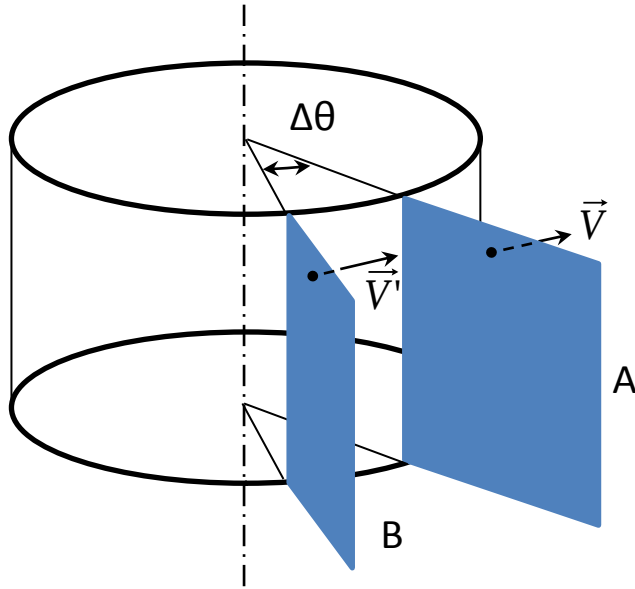


FIGURE 3.15 – Restriction du calcul TPMC au niveau d'un étage à une portion angulaire périodique. Conditions périodiques rotationnelles

façons de découper un étage pour obtenir une portion angulaire unitaire qui contient une seule pale :

- a. une pale entière est placée au milieu du volume restreint / découpé qui est formé avec deux surfaces qui passent entre les pales,
- b. deux demi-pales correspondant respectivement à l'intrados et à l'extrados de deux pales successives sont retenues pour limiter le domaine réduit, avec les surfaces périodiques qui passent donc au milieu de ces deux pales voisines.

La solution *a* est plus simple à mettre en place car le choix de la position et de la forme des surfaces périodiques est libre à condition qu'elles soient identiques et décalées de l'angle périodique d'un étage. Les surfaces intrados et extrados de la pale divisent alors le domaine en deux sous-volumes.

Dans la solution *b*, les surfaces périodiques passent au milieu de deux pales voisines et créent ainsi deux demi-pales. Par conséquent, un seul volume va être créé. La partie principale des surfaces périodique se situe à l'extérieur du domaine de calcul et seule la partie située entre l'extrémité des pales et le carter (soit le jeu radial) nécessite d'être prise en compte.

Les comparaisons effectuées montrent que la solution *a*, souvent utilisée dans les études de type CFD, est en fait beaucoup moins efficace que la solution *b*. En général, on constate que la solution *b* est trois fois plus efficace que la solution *a* pour le même rotor avec les mêmes paramètres physiques. Cette différence peut s'expliquer par le fait que la solution *a* conduit à davantage de calculs d'intersection entre les trajectoires des particules et les surfaces périodiques. Il nous a semblé important de souligner ce point qui est très spécifique aux méthodes particulières mises en oeuvre.

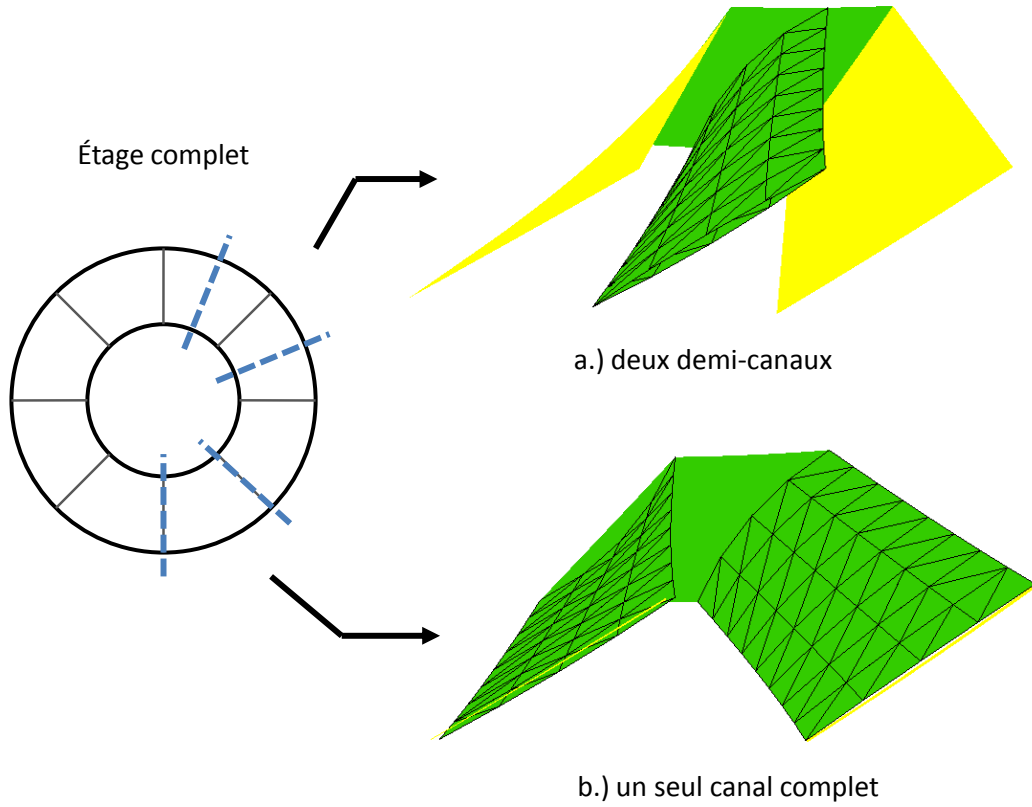


FIGURE 3.16 – Découpage périodique d'un étage : stratégies étudiées.

3.2.6 Fermeture des jonctions surfaces facettées / surfaces analytiques

Comme le calcul de l'intersection est très rapide pour des surfaces analytiques, il est intéressant d'utiliser ces surfaces le plus largement possible dans le domaine géométrique d'un calcul TPMC. Cependant, l'utilisation simultanée de surfaces analytiques et de surfaces facettées peut créer des problèmes supplémentaires au niveau de la jonction entre ces deux types de surface. Normalement, la frontière d'une surface facettée est une ligne polygonale tridimensionnelle tandis que la frontière d'une surface analytique est une relation simple entre θ , r et z dans un repère cylindrique, par exemple $\theta = f(z)$ dans le cas d'une surface cylindrique. En général, la fonction f est linéaire mais dans le cas d'une jonction entre surface facettée et surface analytique, la fonction f devient très complexe. Des traitements spéciaux doivent alors être mis en place afin d'assurer qu'il n'y ait ni chevauchement, ni espace vide entre les surfaces voisines. En général, il existe deux types de jonction qui nécessitent des traitements numériques différents pour assurer leur fermeture :

1. Jonction entre une surface facettée et une surface cylindrique

Comme illustré sur la figure 3.17, il existe une jonction entre la surface de la pale qui est une surface facettée et le moyeu qui est une surface cylindrique. Pour la surface de la pale, sa frontière peut être corrigée en s'appuyant sur le rayon constant de la surface cylindrique connectée.

La figure 3.18 montre dans le cas *a* la correction de la frontière d'une facette connectée au moyeu nommée F_m , et dans le cas *b* celle d'une facette connectée au carter nommé F_c .

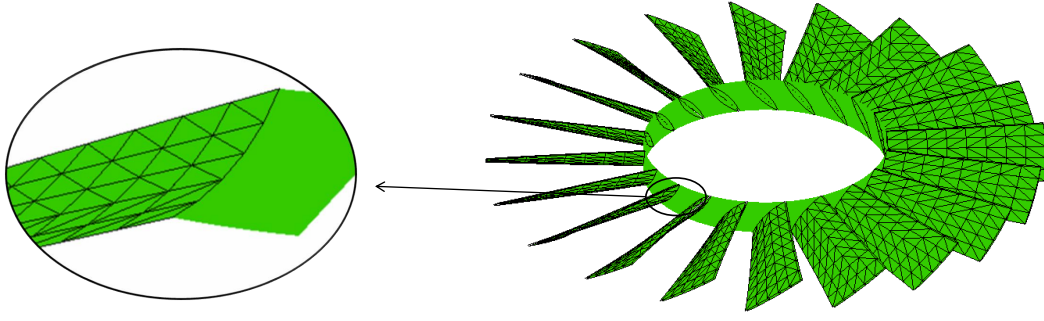


FIGURE 3.17 – Jonction entre une pale et le moyeu

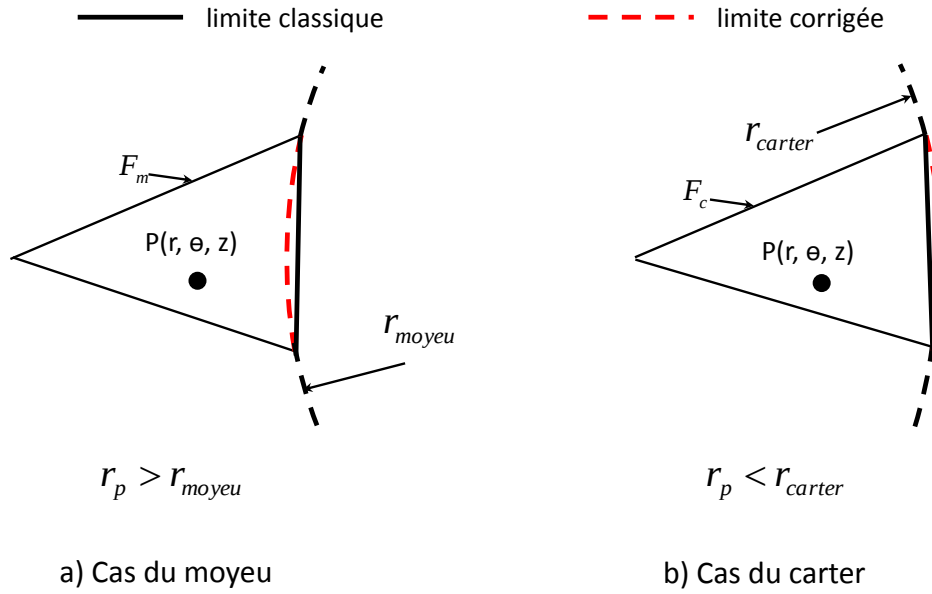


FIGURE 3.18 – Frontière corrigée d'une facette connecté à une surface cylindrique

La limite classique en ligne droite (trait noir foncé) d'une facette doit être remplacée par une ligne courbe (en trait pointillé rouge) lorsqu'on détermine si le point d'intersection P se situe à l'intérieur de la facette via une comparaison entre l'abscisse r du point P et le rayon de la surface cylindrique. La différence entre le cas a et b existe non seulement au niveau de la relation booléenne entre r_p et le rayon de la surface cylindrique, mais aussi au niveau algorithmique. Car, dans le cas du moyeu, comme la ligne rouge se situe à l'intérieur de F_m , la condition $r_p > r_{moyeu}$ est plus restreinte que celle donnée par la ligne droite. Au niveau de l'algorithme, cela se traduit par une surcharge de la fonction existante pour des limites classiques en ligne droite. Dans le cas du carter, la condition $r_p > r_{carter}$ est moins restreinte que celle donnée par la ligne droite avec la ligne rouge se trouvant à l'extérieur de F_c . Par conséquent, il faut créer dans ce cas une nouvelle fonction qui remplace la fonction existante.

La figure 3.19 illustre la correction de la frontière d'une surface cylindrique. La condition pour qu'un point d'intersection P_r sur la surface cylindrique nommée R_m soit à l'intérieur de sa frontière est que le point P_r soit situé à droite de la facette la plus proche, soit

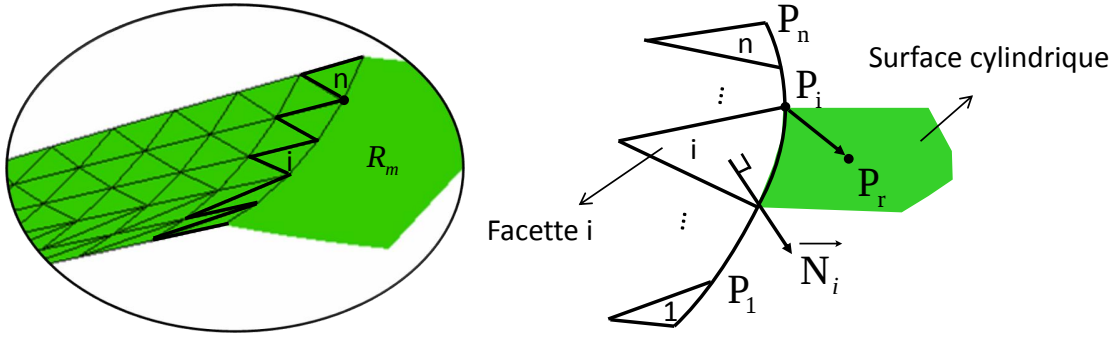


FIGURE 3.19 – Frontière corrigée d'une surface cylindrique connectée à une facette

la facette t , de toutes les facettes de connexion de 1 à n . En connaissant la normale à la facette i soit le vecteur $\vec{N}_i$ dont la direction positive est orientée vers l'intérieur de la surface R_m , cette dernière condition peut être formulée par l'équation 3.23 :

$$\vec{P_i P_r} \bullet \vec{N}_i > 0 \quad (3.23)$$

où le point P_i peut être un point quelconque sur la facette i .

2. Jonction entre une surface facettée et une surface à z constant

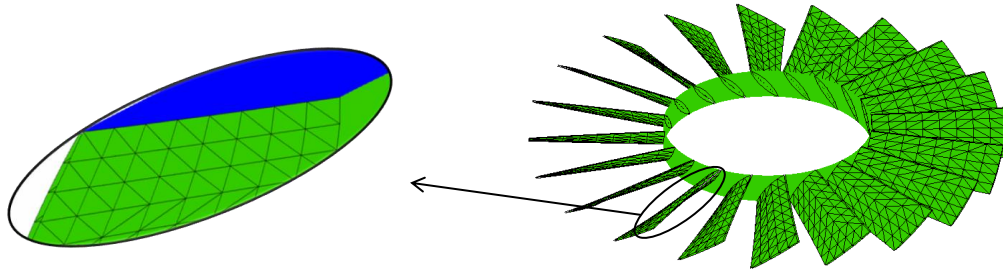


FIGURE 3.20 – Jonction entre une pale et l'entrée d'un étage

La surface à z constant est utilisée dans les étages de type rotor pour représenter l'entrée, la sortie et l'épaisseur des pales. La figure 3.20 illustre une jonction entre une pale et la surface d'entrée d'un étage, coloriée en bleu, qui est une surface à z constant. Dans le cas idéalisé d'une pale hélicoïdale sans épaisseur dont le bord d'attaque est une ligne radiale, la frontière de la surface d'entrée est une position orthoradiale constante. En réalité, les pales d'un rotor ont toujours une certaine épaisseur et peuvent avoir des formes très complexes. Dans un tel cas, le bord d'attaque des pales est représenté par un ensemble de lignes dont aucune n'est radiale.

Dans une vue de dessus d'une pompe illustrée par la figure 3.21, la condition pour que le point d'intersection P_z soit à l'intérieur de la surface Z_{in} est que le point P_z se trouve à droite de la ligne la plus proche parmi les lignes de $P_1 P_2$ à $P_{n-1} P_n$. Cette condition peut être formulée par l'équation (3.24) :

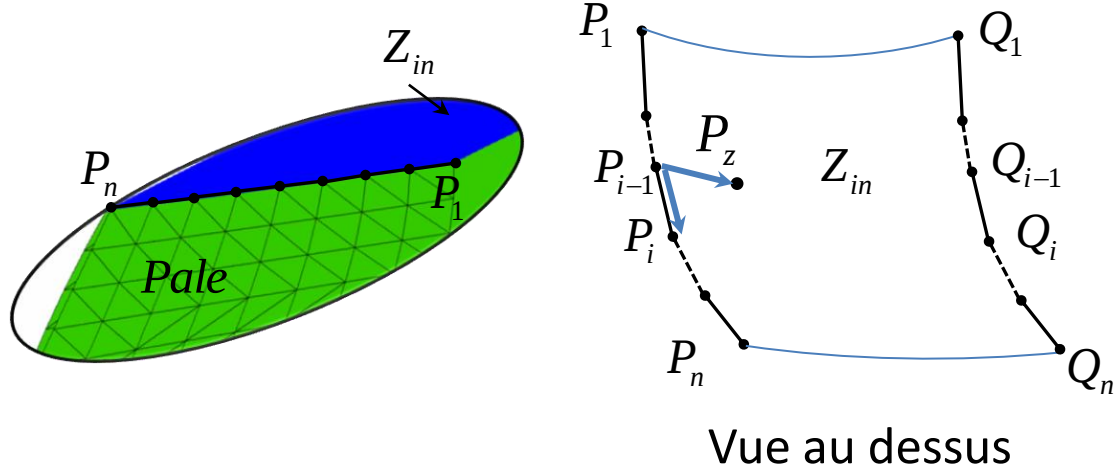


FIGURE 3.21 – Frontière corrigée d'une surface à z constant

$$\vec{P_{i-1}P_i} \times \vec{P_{i-1}P_z} \bullet (0, 0, 1) > 0 \quad (3.24)$$

où P_{i-1} peut être un point quelconque sur la ligne $P_{i-1}P_i$.

Dans le cas où la frontière à vérifier se trouve à droite de l'intérieur de la surface Z_{in} , soit la frontière de Q_1Q_2 à $Q_{n-1}Q_n$ dans la figure 3.21, l'équation (3.24) doit être remplacée par l'équation (3.25) :

$$\vec{Q_{i-1}Q_i} \times \vec{Q_{i-1}P_z} \bullet (0, 0, -1) > 0 \quad (3.25)$$

3.2.7 Passage des particules entre étages

Nous nous sommes concentrés jusqu'à présent sur la gestion des trajectoires des particules au niveau d'un étage donné de la pompe analysée. Comme nous l'avons déjà souligné à plusieurs reprises dans les chapitres 1 et 2, nous souhaitons analyser bien sûr des pompes multi-étagées. Ceci exige donc de nous doter d'une stratégie de calcul pour gérer le passage des particules d'un étage à l'autre.

La figure 3.22 illustre une coupe radiale d'une pompe qui comporte n étages dont deux étage voisins sont l'étage rotor i et l'étage stator $i + 1$. Le sens de pompage est de l'étage i vers l'étage $i + 1$. On rappelle que les choix de repère retenus pour effectuer les calculs de trajectoire sont un repère mobile lié au rotor pour l'étage rotor et un repère fixe pour l'étage stator. Sur cette figure, la surface de sortie de l'étage i , soit la surface i_{outlet} , est présentée comme écartée d'une certaine distance de la surface d'entrée de l'étage $i + 1$, soit la surface $(i + 1)_{inlet}$, mais il ne s'agit que d'un choix pratique de visualisation ; en réalité ces deux surfaces i_{outlet} et $(i + 1)_{inlet}$ sont confondues. Dans une approche dite *monolithique*, une pompe multi-étagées est analysée en prenant simultanément en compte l'ensemble de ses étages. Nous reviendrons au chapitre 4 sur cette stratégie, lorsque nous calculerons précisément des pompes incluant un grand nombre d'étages, pour lesquelles une stratégie alternative sera évaluée. Dans le cas d'une approche monolithique, une particule quittant l'étage i par la surface i_{outlet} doit être réinjectée à la surface $(i + 1)_{inlet}$ tout en conservant sa position et sa vitesse.

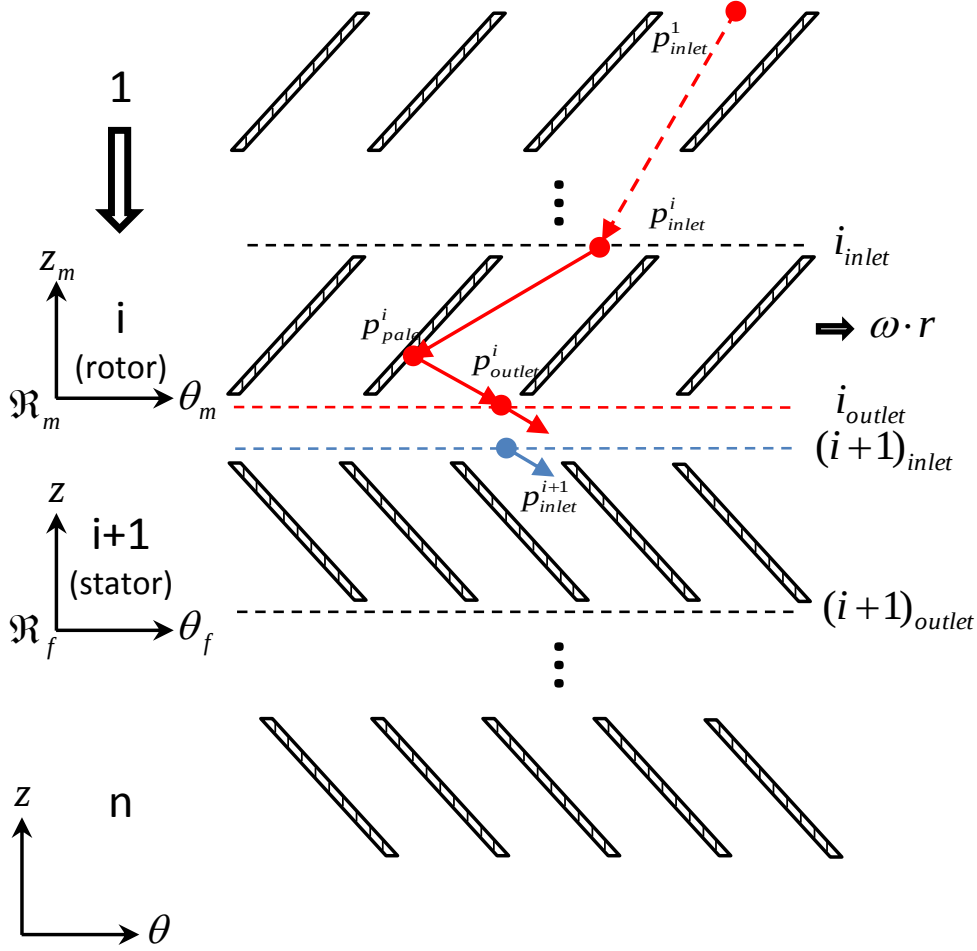


FIGURE 3.22 – Gestion du passage des particules entre étages voisins. Position du problème.

En travaillant dans un repère cylindrique, la conservation de la position z et θ et celle des trois composantes de la vitesse est facile à implémenter. Cependant, la conservation de la position θ peut poser des problèmes liés à la rotation des étages rotor. Puisque le repère $\mathcal{R}_f$ est fixe par rapport aux étages stator et que le repère $\mathcal{R}_m$ tourne à la même vitesse (constante) que tous les étages rotor, la position relative entre ces deux repères varie linéairement en fonction du temps, soit :

$$\theta_{m/f} = \omega \cdot \Delta t \quad (3.26)$$

On suppose que la position relative entre $\mathcal{R}_f$ et $\mathcal{R}_m$ est égale à $\theta_{m/f}^i$ lorsqu'une particule part de la position p_{inlet}^i sur la surface i_{inlet} (cf. Figure 3.22) et on suppose que la particule met un temps Δt^i pour traverser l'étage i et arriver à la position p_{outlet}^i sur la surface i_{outlet} . La nouvelle position relative $\theta_{m/f}^{i+1}$ entre les deux repères lorsque la particule arrive à i_{outlet} peut être calculée par :

$$\theta_{m/f}^{i+1} = \theta_{m/f}^i + \omega \cdot \Delta t^i \quad (3.27)$$

En connaissant l'ensemble de la trajectoire parcourue par la particule depuis l'entrée dans la pompe par 1_{inlet} , $\theta_{m/f}^i$ peut être calculé de la façon suivante :

$$\theta_{m/f}^i = \theta_{m/f}^1 + \sum_{x=\{i, \dots, n\}} \omega \cdot \Delta t^x \quad (3.28)$$

On notera bien que l'ensemble $\{i, \dots, n\}$ n'est pas une série de 1 à n mais l'ensemble des numéros d'étages traversés par la particule suivie. Les éléments de cet ensemble dépendent donc du parcours de la particule entre la position p_{inlet}^1 et p_{inlet}^i et une particule peut traverser un étage plusieurs fois aussi bien dans le sens de pompage que dans le sens inverse.

$\theta_{m/f}^1$ est la position relative initiale entre le repère $\mathcal{R}_f$ et $\mathcal{R}_m$. Pour une particule qui arrive de façon aléatoire sur l'entrée de la pompe, la valeur de $\theta_{m/f}^1$ a une distribution uniformément répartie entre 0 et 2π , soit :

$$\theta_{m/f}^1 = 2\pi R_f \quad (3.29)$$

où R_f est la fonction aléatoire entre 0 et 1.

Cependant, la valeur de $\theta_{m/f}^{i+1}$ n'est pas complètement déterminée à partir des équations (3.29), (3.28), (3.27). En effet, le temps de passage d'une particule dans un étage Δt ne dépend pas seulement de son temps de déplacement mais aussi du temps de résidence de la particule sur les parois en cas de collision, soit :

$$\Delta t = \sum_{translation} \Delta t_d + \sum_{collisions} \Delta t_r \quad (3.30)$$

Lorsqu'une molécule heurte une paroi solide, il se peut qu'elle perde suffisamment d'énergie pour rester un court instant à la surface de la paroi. Ce « temps de séjour » peut être calculé par l'équation :

$$\tau_a = \tau_0 e^{\Delta H_d / RT} \quad (3.31)$$

où ΔH_d est la chaleur d'adsorption qui dépend de la nature du gaz et du matériau de la paroi, et τ_0 est la période d'oscillation de la molécule adsorbée (10^{-13} s à 20°C). La table présentée sur la figure 3.23 illustre le temps de séjour pour quelques gaz classiques [36].

ΔH_d	Typical Cases	τ_a (s)
100 cal/mol	Helium	1.2×10^{-13}
1.5 kcal/mol	H ₂ physisorbed	1.3×10^{-12}
3.5–4 kcal/mol	Ar, CO, N ₂ , CO ₂ (physisorbed)	1×10^{-11}
10–15 kcal/mol	Weak chemisorption	3×10^{-6}
	Organics physisorbed	2×10^{-2}
20 kcal/mol	H ₂ chemisorbed	100
25 kcal/mol		6×10^5
		(1 week)
30 kcal/mol	CO chemisorbed on Ni	4×10^9
		(> 100 yr)
40 kcal/mol		1×10^{17}
		($\approx$ age of the earth)
150 kcal/mol	O chemisorbed on W	10^{1100}
		($\approx 10^{1090}$ centuries)

FIGURE 3.23 – Temps de séjour moyen pour des molécules adsorbées à 300K avec différentes chaleurs d'adsorption

En pratique, il est difficile d'obtenir dans la littérature des relations fiables pour évaluer Δt_r ainsi que son importance par rapport à Δt_d à l'échelle de dimension spatiale de notre application (environ $< 10\text{ mm}$).

Afin d'éviter de calculer de façon inutilement précise la valeur de $\theta_{m/f}$ tout en évaluant l'importance de ce paramètre sur la prédiction de la performance de la pompe, nous avons implémenté deux approches dans le code TPMC3D, soit :

- **l'approche dite " θ conservé"**, dans laquelle on suppose que Δt_r est négligeable et que Δt est la somme de tous les déplacements Δt_d ,
- **l'approche dite " θ redistribué"**, dans laquelle, à chaque passage d'une particule d'un étage à l'autre, la position ortho-radiale d'une particule est complètement oubliée et redistribuée avec une loi uniforme.

Notre idée, en comparant ces deux approches, est d'estimer le niveau d'erreur qui peut être introduit sur les quantités d'intérêt (vitesse de pompage, taux de compression) dans le cas où le transfert d'un étage à l'autre n'est pas réalisé de façon exacte (faute typiquement d'informations suffisantes disponibles par exemple sur le temps de résidence). Plutôt que de réaliser une étude de sensibilité à l'erreur commise sur ce temps de résidence, nous avons choisi d'évaluer l'approche " θ redistribué" comme point de comparaison.

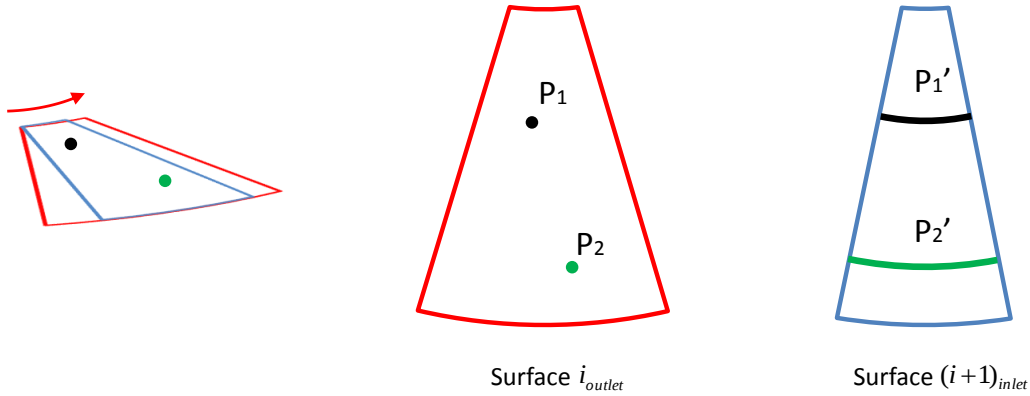


FIGURE 3.24 – Approche " θ redistribué"

Dans l'approche « θ redistribué » illustrée par la figure 3.24, les particules sortant de l'étage i par la position P_1 et P_2 vont voir leurs positions ortho-radiales redistribuées sur la ligne P_1' et P_2' de la surface d'entrée de l'étage $i + 1$ tout en conservant toutes les autres grandeurs physiques, soit leur position radiale et axiale et leur vitesse. Il s'agit donc de faire un changement brutal de la position ortho-radiale, de façon aléatoire. Dans le cas du repère cartésien, ce saut de la position ortho-radiale implique une rotation de ses trois composants de la vitesse. En revanche, cette rotation est automatique dans le cas du repère cylindrique en conservant simplement les trois composants de la vitesse. C'est pour cette raison que le repère cylindrique a été adopté pour tous les passages de particule entre les étages par la suite.

La figure 3.25 illustre une pompe qui comporte 4 étages, soit deux étages rotor 1 et 3 et deux étages stator 2 et 4. Les 4 étages sont identiques à l'exception de ce qui concerne l'inclinaison des pales. Chaque étage comporte 20 pales droites avec un angle périodique de 18° entre deux pales voisines. Les étages 2 et 4 sont parfaitement alignés dans la direction ortho-radiale et les étages 1 et 3 sont décalés de $\Delta\theta$ dont la valeur peut varier entre 0° et 18° (cf. figure 3.25). Lorsque $\Delta\theta$ est égal à 0 , la figure 3.26 synthétise l'écart des résultats

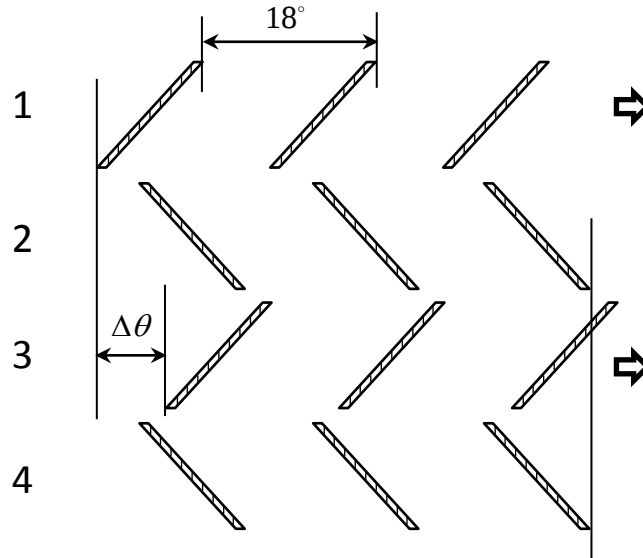


FIGURE 3.25 – Position ortho-radiale entre deux étages rotor

obtenus selon que l'approche « θ redistribué » ou l'approche « θ conservé » est mise en oeuvre. Ces résultats sont tracés en fonction de C^* qui est le paramètre de similitude C du rotor au rayon quadratique moyen (vitesse de rotation variable donc).

On peut observer sur la figure 3.26 qu'il existe très peu de différence ($<3\%$) entre les taux de transmission calculés par les deux approches et globalement cette différence diminue lorsque la vitesse de rotation augmente. La différence en taux de compression est plus grande que celle en vitesse de pompage avec une sous-estimation du taux de compression par l'approche θ redistribué pour les deux gaz N_2 et H_2 . L'amplitude de cette sous-estimation est toujours plus grande en N_2 qu'en H_2 . Lorsque la vitesse de rotation augmente, l'écart entre les approches pour la prédiction du taux de compression augmente globalement avec un écart qui reste inférieur à 8% en N_2 et environ à 4% en H_2 .

La valeur du décalage angulaire $\Delta\theta$ entre étages rotor n'a pas d'impact sur les résultats de calcul avec l'approche θ redistribué mais peut en revanche influencer les résultats de calcul avec l'approche θ conservé. Pour une vitesse de rotation donnée à 31000 tr/min ($C^* = 0.8$), la figure 3.27 montre l'influence de $\Delta\theta$ sur la performance de la pompe calculée avec l'approche θ conservé pour trois gaz différents : N_2 , He et H_2 .

La figure 3.27 montre que $\Delta\theta$ peut avoir une influence maximale de $\pm 1\%$ pour la vitesse de pompage et $\pm 4\%$ pour le taux de compression.

Les résultats que nous avons obtenus dans cette étude sur l'influence de la gestion du passage des particules entre différents étages nous permettent de disposer d'une estimation de cette influence et, surtout, de la borner. Nous garderons ainsi à l'esprit les observations faites dans cette section comme pistes d'explication éventuelles pour expliquer des écarts entre simulations et données expérimentales que nous ne saurions expliquer par d'autres facteurs.

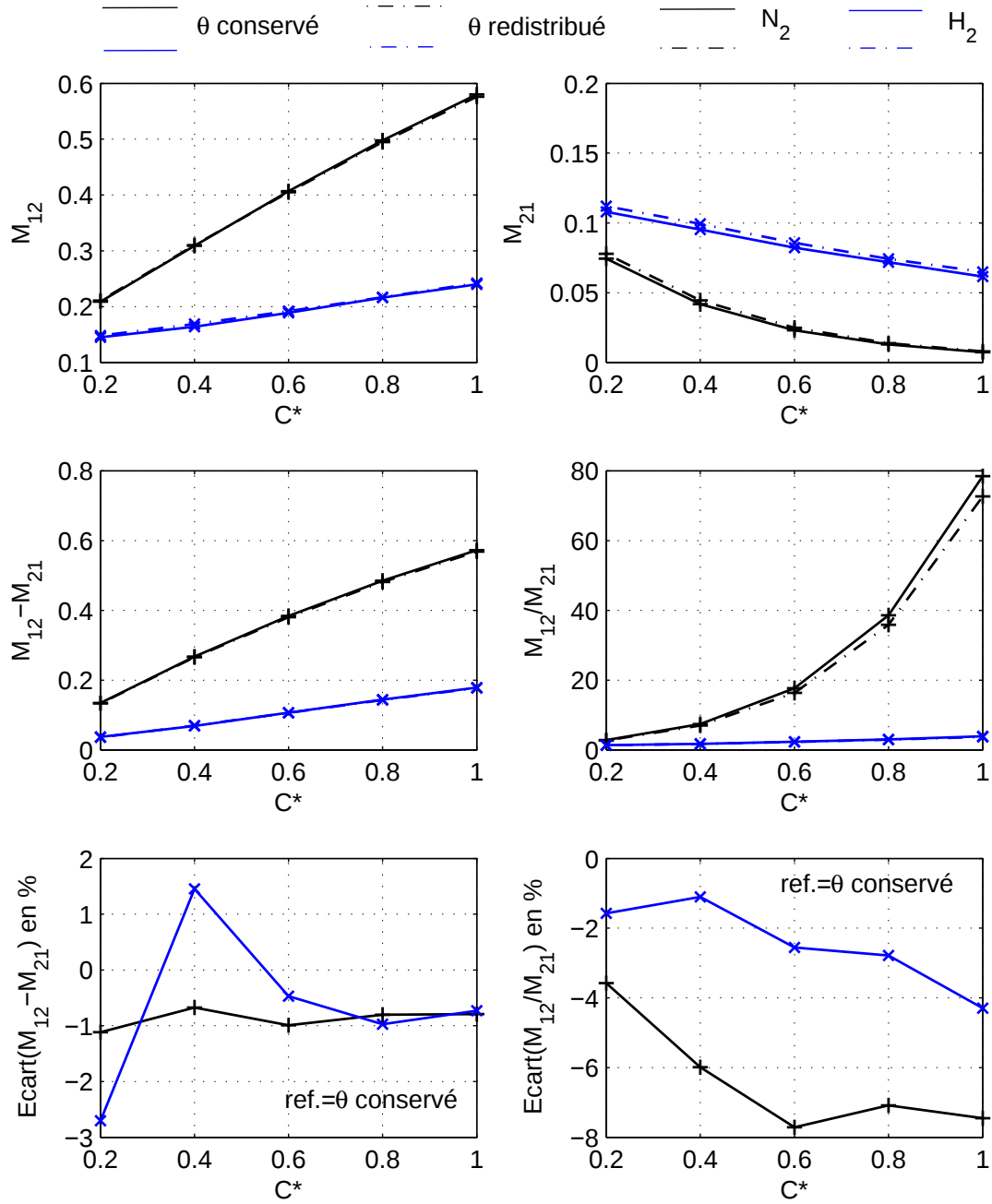


FIGURE 3.26 – Performance d’une pompe à 4 étages en fonction de C^* avec l’approche θ conservé et l’approche θ redistribué

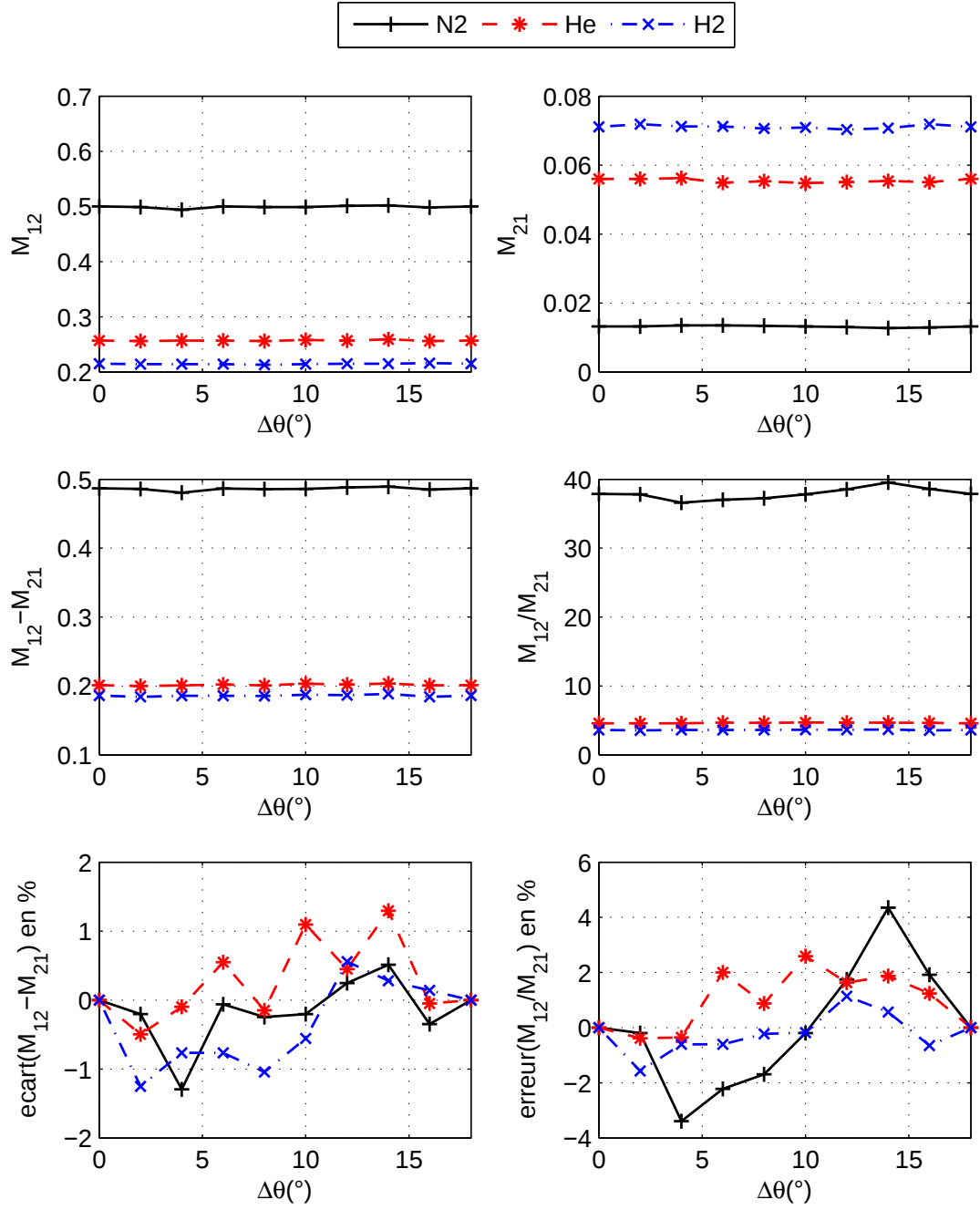


FIGURE 3.27 – Performance d'une pompe à 4 étages avec des positions ortho-radiales différentes pour les étages rotor. Traitement θ conservé.

3.2.8 Critère de convergence

Nous avons passé en revue les différentes opérations qui sont réalisées pour optimiser le calcul des trajectoires des particules. Avant d'appliquer le code développé à un cas de validation, nous souhaitons préciser le critère de convergence ou d'arrêt que nous avons retenu / développé pour mener nos calculs TPMC. Nous avons en effet évoqué depuis le début du chapitre le fait que les tests de particules sont menés jusqu'à ce que les quantités d'intérêt constituées par les taux de transmission soient statistiquement convergées mais nous n'avons pas défini de manière précise comment nous évaluons cette convergence statistique. Nous avons cherché à établir un tel critère de convergence en y introduisant, ce qui semble naturel, le degré de précision souhaité pour les valeurs cibles M_{12} et M_{21} .

Étant donnée une variable aléatoire X qui peut prendre la valeur 1 ou 0, la probabilité que cette variable prenne la valeur 1 peut être estimée par $\bar{X}$ en testant n fois la valeur X_i prise par X (n tirages aléatoires) :

$$\bar{X} = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n} \quad (3.32)$$

Selon la théorie central limite, la somme de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées tend vers une distribution gaussienne. En normalisant $\bar{X}$ par l'espérance p et la variance $p(1-p)$ de X , on définit une nouvelle quantité Z :

$$Z = \frac{\bar{X} - p}{\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}} \quad (3.33)$$

Compte tenu de la normalisation adoptée, Z tend vers la loi normale centrée et réduite $\mathbb{N}(0,1)$ lorsque n tend vers l'infini. Or, on sait par ailleurs que, pour une variable ayant une loi de distribution $\mathbb{N}(0,1)$, la probabilité que la valeur de cette variable se trouve dans l'intervalle $(-q, q)$ est donnée par :

$$P(-q < Z < q) = \text{erf}\left(\frac{q}{\sqrt{2}}\right) \quad (3.34)$$

Le tableau 3.5 fournit des valeurs représentatives de q et de $P(q)$ pour la loi normale centrée $\mathbb{N}(0,1)$.

P(q)	0.68	0.95	0.997
q	1.00	1.96	3.00

TABLE 3.5 – Valeurs de P et q

Compte tenu de la définition (3.33) de Z , la relation (3.34) peut aussi se mettre sous la forme :

$$P\left(-q\sqrt{\frac{1-p}{p \cdot n}} < \frac{\bar{X} - p}{p} < q\sqrt{\frac{1-p}{p \cdot n}}\right) = P(q) \quad (3.35)$$

Puisque $\frac{\bar{X}-p}{p}$ est la différence relative entre $\bar{X}$ et p , l'équation (3.35) fournit, pour une indice de confiance donné ($P(q)$ égal par exemple à 0.95 soit 95%), l'erreur relative commise en estimant l'espérance p par $\bar{X}$ (estimation basée sur un nombre de tests fini), soit $\text{err}(\bar{X}) = \pm q\sqrt{\frac{1-p}{p \cdot n}}$. On choisit d'approcher p par $\bar{X}$ dans cette dernière formule pour évaluer l'erreur relative commise sur l'estimation $\bar{X}$ soit :

$$\epsilon = \text{err}(\bar{X}) = \pm q\sqrt{\frac{1-\bar{X}}{\bar{X} \cdot n}} \quad (3.36)$$

Pour une précision ϵ donnée, le nombre de tests nécessaires à réaliser est donc estimé comme :

$$n = \frac{1 - \bar{X}}{\bar{X}} \left(\frac{q}{\epsilon} \right)^2 \quad (3.37)$$

L'équation 3.37 induit que le nombre de tests à réaliser est inversement proportionnel au carré de la précision souhaitée, *i.e.* une réduction de ϵ d'une décade implique une multiplication par 100 du nombre de tests à réaliser.

Dans le cas où $\bar{X}$ est faible, l'équation(3.37) peut se simplifier en :

$$n = \frac{1}{\bar{X}} \left(\frac{q}{\epsilon} \right)^2 \quad (3.38)$$

L'équation (3.38) indique donc aussi que le nombre de tests à réaliser est inversement proportionnel au taux de transmission à calculer (M_{12} ou M_{21} jouant le rôle de $\bar{X}$). Dans le cas d'une pompe multi-étages, le taux de transmission M_{21} peut devenir très faible (< 0.001) et son évaluation constitue alors le facteur de coût principal de l'approche TPMC.

Nous avons tracé sur la figure 3.28 l'évolution du nombre de tests n (calculée par (3.37)) en fonction de la précision (relative) ϵ souhaitée sur la quantité $\bar{X}$. Chaque courbe correspond à une valeur fixée de $\bar{X}$ que nous avons fait varier entre 0.99 et 10^{-5} . Cette courbe a été tracée pour un indice de confiance de 95% correspondant à $q = 1.96$. Nous pouvons donc observer par exemple pour $\epsilon = 1\%$ et $\bar{X} = 10^{-3}$ (choix représentatif du cas d'une pompe multi-étages pour le taux de transmission M_{12}) qu'un nombre de tests égal à environ 10^8 est nécessaire.

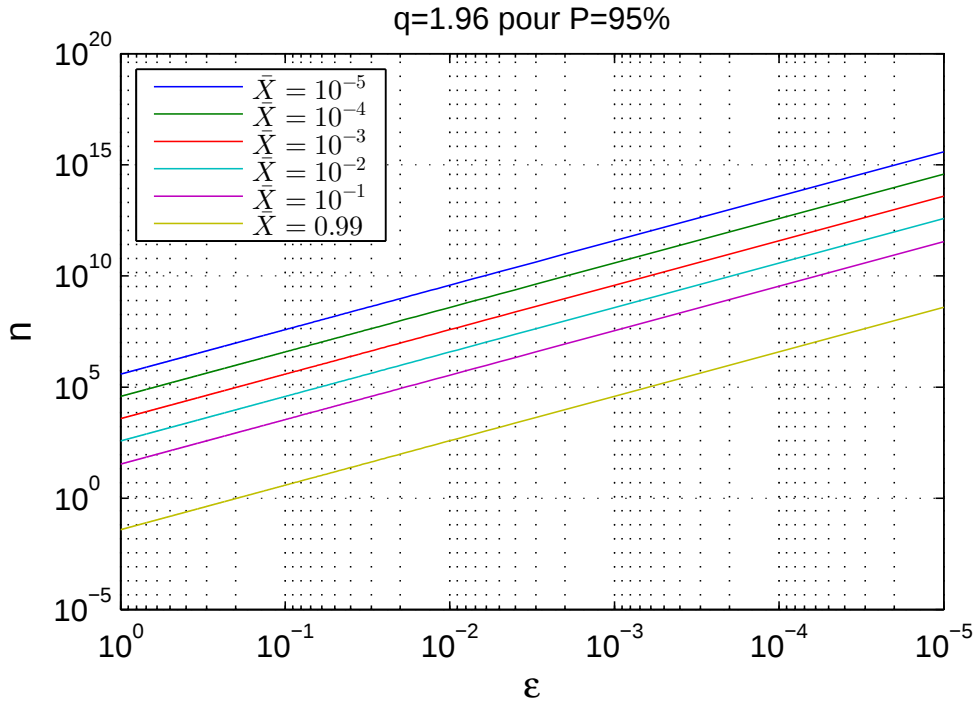


FIGURE 3.28 – Nombre de test nécessaire en fonction de la précision demandée pour une indice de confiance à 95%

3.3 Validation du code TPMC 3D par rapport à la littérature

Même si nous avons souligné dans ce chapitre les nombreux développements spécifiques qui ont été effectués pour permettre à notre code TPMC 3D de traiter des géométries de pompes industrielles, il nous semble utile de conclure ce chapitre par un cas simple de validation de ce code avant de l'appliquer dans le chapitre suivant au dimensionnement de pompes réelles. Dans la littérature, la publication la plus récente concernant la mise en œuvre de la méthode TPMC dans un modèle tridimensionnel d'une pompe TMP est celle d'Amoli et al. [2] en 2004. Dans les travaux d'Amoli et al., l'assemblage d'un étage rotor et d'un étage stator ainsi que celui de deux étages rotor et d'un étage stator ont été calculés dans un référentiel fixe en repère cylindrique ; le passage des particules entre rotor et stator est réalisé dans [2] avec l'approche de type " θ conservé". Afin de simplifier le calcul de l'intersection entre la trajectoire des particules et les pales, Amoli et ses collaborateurs utilisent des surfaces planes pour modéliser la surface des pales ; ce choix empêche de généraliser l'utilisation de leur méthode aux cas de géométries plus générales incluant d'autres formes de pale. Néanmoins, les résultats de ces travaux constituent pour nous un utile point de comparaison pour une première validation de notre code TPMC 3D.

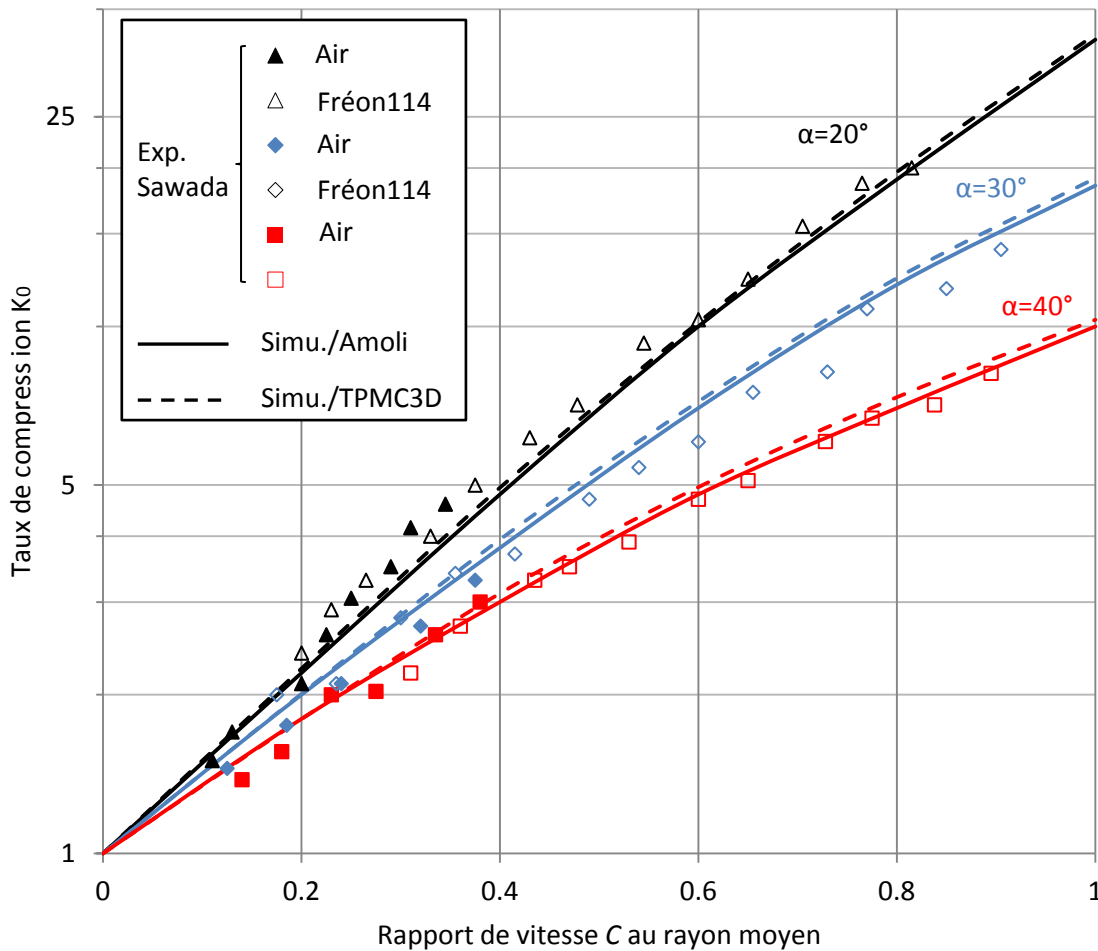


FIGURE 3.29 – Comparaison entre le code TPMC et les calculs d'Amoli pour un assemblage rotor/stator

La figure 3.29 présente l'évolution du taux de compression maximal K_0 en fonction du

rapport de vitesse C au rayon moyen de la machine. Trois séries de courbes sont présentées, qui correspondent à trois configurations géométriques différentes, récapitulées dans le tableau 3.6 et qui correspondent à l'assemblage d'un étage rotor et d'un étage stator à pales droites avec un angle d'inclinaison variant de 20° à 40° . Tous les rotors ou stators ont un diamètre intérieur de 144 mm et un diamètre extérieur de 180 mm. Le jeu radial entre l'extrémité des pales et le carter est de 0.3 mm et le jeu axial entre deux étages est de 1 mm. Les simulations réalisées par Amoli et al, pour un rapport de vitesse C qui varie entre 0.1 et 1, sont tracées sous forme de lignes continues. Nos propres simulations sont tracées sous la forme de lignes en pointillés. Enfin, on a également placé sur le graphique les résultats expérimentaux de Sawada [53] ; ces résultats expérimentaux sont représentés par des symboles : différents symboles sont utilisés selon la géométrie analysée par Sawada ainsi que selon la nature du gaz pompé dans l'expérience. Nous constatons en premier lieu qu'un excellent accord existe entre les simulations d'Amoli et al et nos propres simulations. En outre, nous observons également un accord globalement satisfaisant entre les simulations TPMC 3D et les mesures expérimentales - même si celles-ci présentent parfois une dispersion significative - quelle que soit la configuration géométrique considérée.

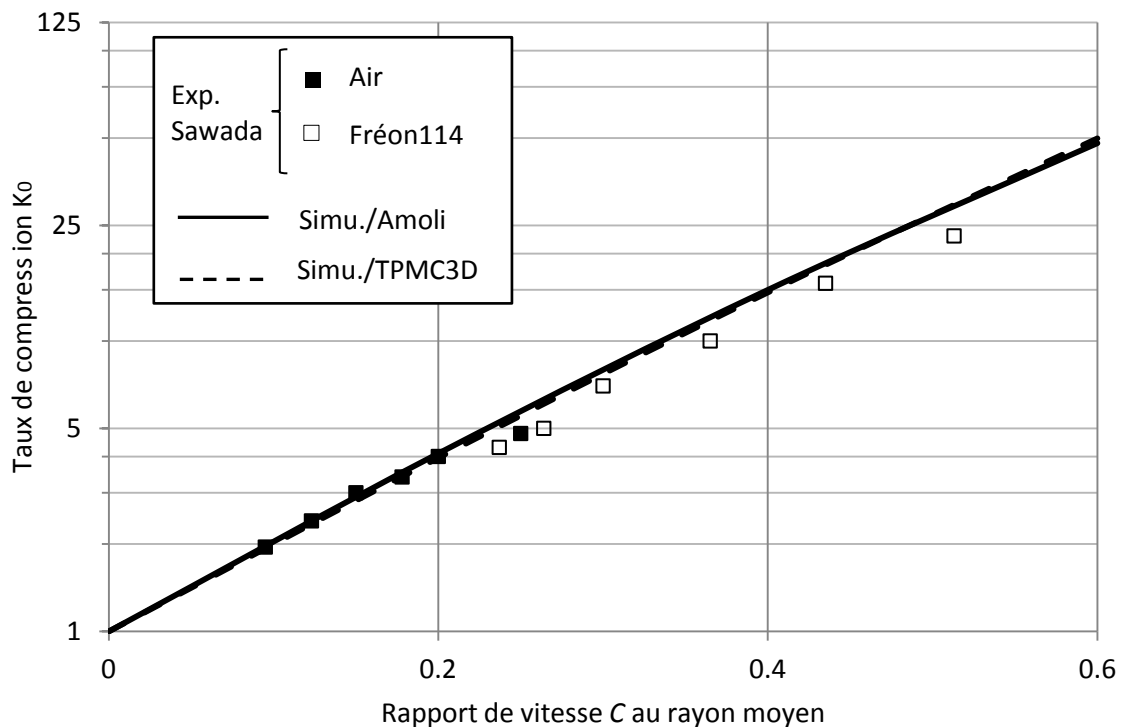


FIGURE 3.30 – Comparaison entre le code TPMC et les calculs d'Amoli pour un assemblage rotor/stator/rotor

Nous confortons cette analyse en calculant également un assemblage de trois étages, soit rotor 2, stator 2 et rotor 2. La figure 3.30 présente les résultats obtenus par Amoli et al. à l'aide de l'approche TPMC 3D qu'ils ont développée (limitée, rappelons-le à des pales droites), nos propres résultats TPMC 3D et les mesures expérimentales réalisées par Sawada. On constate à nouveau un accord globalement satisfaisant entre calculs et expérience et une quasi-superposition des résultats numériques.

Nous considérons donc à ce stade le code TPMC 3D comme partiellement validé - "partiellement" car tous les développements décrits dans la section précédente n'ont pas pu être testés compte tenu de la relative simplicité géométrique des configurations calculées.

	nb pales	angle(°)	épaisseur(mm)
rotor 1 & stator 1	24	20	3.2
rotor 2 & stator 2	36	30	3.1
rotor 3 & stator 3	48	40	3.1

TABLE 3.6 – Caractéristiques géométriques des trois pales associées aux pompes dont les performances ont été mesurées par Sawada [53].

Nous nous proposons donc dans le chapitre 4 qui suit de mettre en oeuvre l'outil TPMC 3D pour des configurations réellement complexes de pompes industrielles développées par « aVP » et pour lesquelles des résultats expérimentaux sont disponibles. Nous étudierons également avec soin l'apport de l'approche TPMC 3D dans la prédiction des performances d'une pompe. Notons pour conclure que nous n'avons pas été en mesure d'évaluer le niveau de performance de notre code par rapport à celui développé par Amoli et al par exemple car on ne trouve pas d'éléments dans la littérature sur ce volet "efficacité". Le chapitre 4 et les cas de pompes industrielles nous permettront donc également de vérifier que nous remplissons bien le cahier des charges évoqué à la fin du chapitre 2, avec un outil de dimensionnement dont le coût d'exécution est compatible avec les cycles de conception de l'entreprise.

Chapitre 4

Application du code TPMC 3D aux pompes aVP

Nous avons validé à la fin du chapitre précédent le code TPMC 3D développé dans le cadre de cette thèse, en nous appuyant sur un cas relativement académique pour mener à bien cette validation. Dans le présent chapitre, nous souhaitons évaluer le plein potentiel de l'outil développé en l'appliquant à l'analyse des performances de pompes industrielles développées au sein de l'entreprise « aVP ». Ce chapitre est organisé en 4 sections :

- dans une première section nous décrivons le banc d'essai existant chez « aVP » et qui va nous permettre de disposer de courbes caractéristiques expérimentales de référence pour une pompe hybride.
- dans une deuxième section, nous détaillons une comparaison calcul (TPMC 3D) / expérience pour une telle pompe hybride, qui permet d'établir la capacité du code développé à prédire les performances (vitesse de pompage, taux de compression) d'une pompe industrielle fonctionnant en régime moléculaire.
- dans une troisième section, nous comparons les résultats fournis par TPMC 3D à ceux disponibles auparavant grâce aux outils pré-existants au sein de l'entreprise « aVP » (cf. section 2.2 et la description des approches TPMC 2D, 2.5D et 2.5D corrigée) ; nous mettons ainsi en évidence la valeur ajoutée d'une approche réellement 3D dans le dimensionnement correct des pompes.
- enfin, dans la quatrième et dernière section du chapitre nous exploitons l'outil TPMC 3D pour établir certaines préconisations de design de pompes à vide industrielles.

4.1 Description du banc d'essai

Les études expérimentales de pompes à vide sont effectuées au sein de l'entreprise « aVP » dans le département R&D sur un banc d'essai récemment construit et mis au point. Une des nouveautés de ce banc est qu'il est entièrement automatisé, ce qui rend possible dorénavant de réaliser un grand nombre de points de mesure sans intervention humaine - une propriété utile pour établir efficacement des courbes d'isoflux, de vitesse de pompage, de taux de compression.

La figure 4.1 présente le schéma d'un banc d'essai qui est utilisé pour mesurer la performance d'une pompe TMP hybride. Rappelons que par hybride on entend ici que la

pompe comporte une partie « basse pression » de type turbo-moléculaire et une partie « haute pression » de type Holweck (voir chapitre 1.1.3). Ce banc d'essais repose sur la norme ISO/FDIS 21360 avec la particularité que le gaz circulant dans l'installation est alimenté par une bouteille haute pression. Le débit de gaz est détendu et contrôlé à l'aide de "mass flow controllers" (MFC). La ligne verte sur la figure 4.1 illustre le parcours du flux de gaz pur depuis son stockage dans la bouteille jusqu'à sa mise à l'échappement à l'atmosphère. Le flux du gaz alimente un dôme qui constitue la chambre amont « basse pression » alimentant la pompe testée. Le dôme, qui répond à la norme ISO/FDIS 21360, est équipé de diverses jauges de pression couvrant la gamme de mesure. Le refoulement de la pompe à tester est relié à une pompe primaire (Roots multi-étagée) qui refoule le gaz à l'atmosphère. Entre les deux pompes se trouve une vanne papillon automatique qui sert à régler la pression de refoulement de la pompe à tester ; celle-ci est mesurée par une jauge de pression intermédiaire (autour de 10 Torr¹). La figure 4.2 présente différentes vues

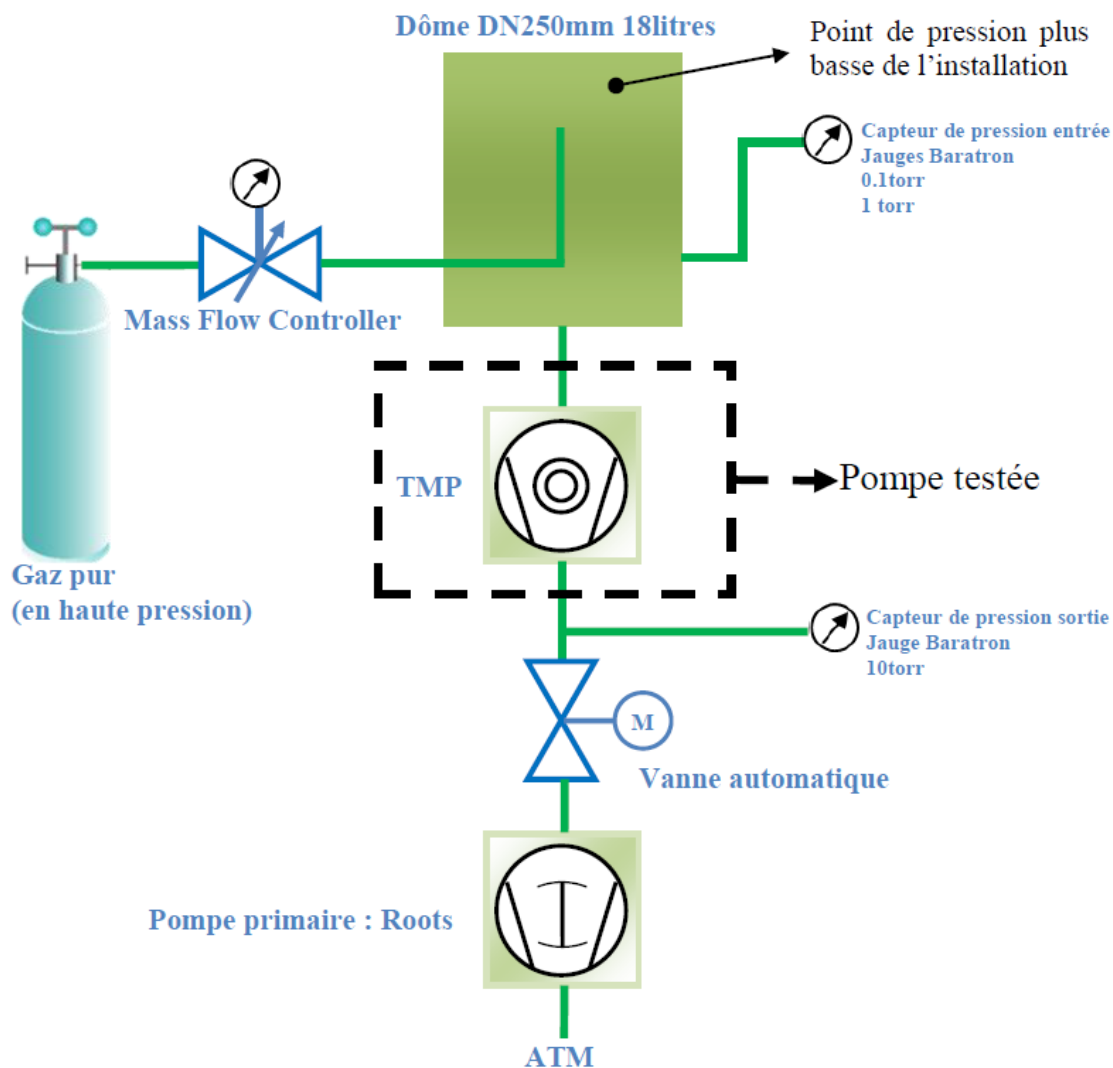


FIGURE 4.1 – Schéma du banc d'essai aVP

d'une expérience montée sur le banc. La pompe turbomoléculaire testée est montée sur un châssis rigide ; en effet, une fixation rigide est nécessaire pour assurer le bon fonctionnement du palier magnétique. Le dôme est entouré par un serpentin en cuivre connecté

1. Le Torr est une unité usuelle dans le métier du vide. Elle est équivalente à la pression exercée à 0 °C par une colonne d'un millimètre de mercure, soit $1\text{Torr} \approx 133\text{Pa}$.

sur un échangeur refroidisseur (Chiller), qui sert à réguler la température du dôme. Ce dernier dispositif, qui a été récemment ajouté, permet de réduire le temps caractéristique de stabilisation thermique du banc. La vue II de la figure 4.2 est une photo du boîtier de commande. Ce boîtier comprend 5 Mass flow controllers montés en parallèle permettant de mesurer des débits de 15 à 10000 sccm en azote ($1\text{sccm} \approx 2 \times 10^{-8}\text{kg/s}$ pour l'azote).

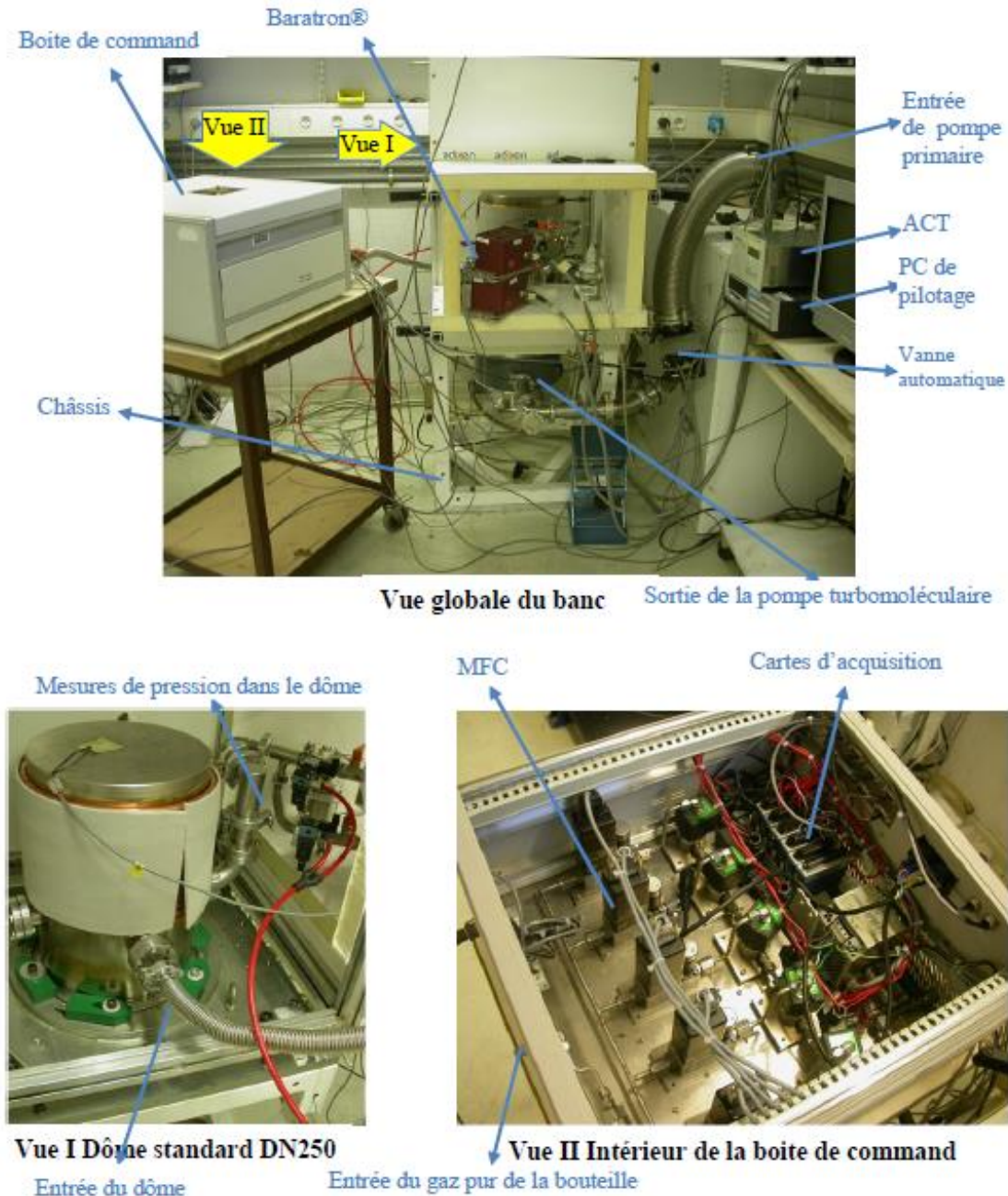


FIGURE 4.2 – Banc d'essai des pompes turbo aVP

Signalons qu'un second dôme peut être utilisé alternativement au dôme normalisé standard (cf. la figure 4.3). Ce dernier comporte un tube d'injection qui débouche en son centre. Le second dôme, quant à lui, est adapté à la mesure de température du rotor de la pompe à tester. Il comporte de ce fait un large conduit d'admission (diamètre 16 mm) aligné sur l'axe de la pompe qui exclut les mesures de pression précises. Ces dernières sont

réalisées sur le dôme standard.



FIGURE 4.3 – Dôme standard et dôme adapté au pyromètre

4.1.1 Caractéristiques des moyens de mesure

Contrôle et mesure du débit du gaz

Le flux du gaz est régulé par les MFC (Mass Flow Controller) fabriqués par Brooks (voir la figure 4.4). Ces appareils comportent un débitmètre massique à effet thermique, une vanne régulatrice et un circuit comparateur. Le fonctionnement de ces appareils repose sur un contrôle en boucle fermée. Ils sont capables de réguler avec une très bonne précision le débit massique du gaz ($\pm 3\%$ de la valeur mesurée sur la plage de mesure utilisable). Le principe de ces débitmètres est schématisé sur la figure 4.4. Une petite partie du débit est déviée, dans une proportion connue, par un « By-pass ». Ce débit dévié est chauffé par une résistance électrique. La puissance thermique apportée est déterminée par des mesures électriques. Elle est égale à celle que reçoit le débit dévié. Une mesure d'accroissement de température permet ainsi de déduire le débit massique de gaz dont la chaleur spécifique à pression constante c_P est connue. Le débit massique du gaz dévié peut être calculé par l'équation suivante :

$$\dot{m} = \frac{Q}{(T_2 - T_1)c_P} \quad (4.1)$$

Mesure de pression

Les deux pressions statiques (pression d'aspiration, pression de refoulement) sont mesurées par deux types de jauge de pression qui se différencient par leur plage de mesure :

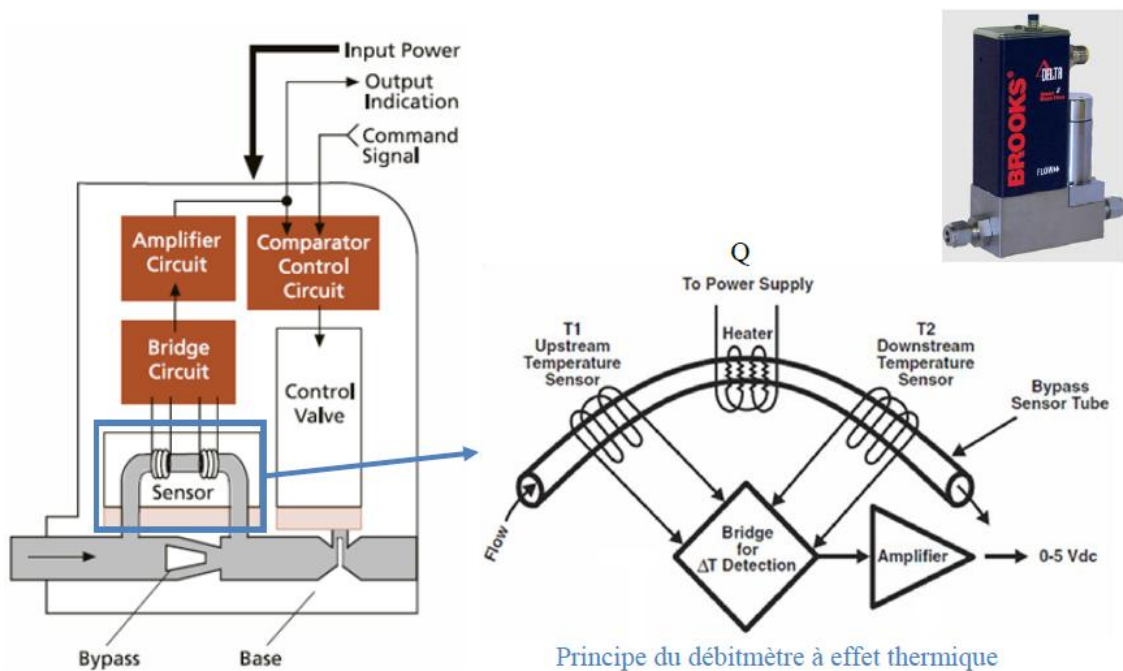


FIGURE 4.4 – Vue schématique d'un MFC et principe de fonctionnement

- les jauges de Baratron de différents gammes pour une plage de mesure de 10^{-3} Torr à 10 Torr,
- les jauges de pression Bayard-Alpert sur une plage de mesure de 10^{-3} Torr à 10^{-8} Torr.

Le fonctionnement des jauges de type Baratron™(voir la figure 4.5) repose sur un manomètre capacitif à membrane. La déformation de la membrane élastique dépend de la différence de pression créée par la pression à mesurer et celle de référence qui est stable et bien connue. Cette déformation est quantifiée par la variation de capacitance entre la membrane et la paroi en face qui est très rigide.

Ce type de jauge doit fonctionner avec une température ambiante stable (variation $< 2^{\circ}\text{C}$). Il faut donc impérativement attendre un temps de stabilisation (4-5h) avant d'effectuer des mesures pour que ces mesures ne soient pas faussées par l'effet Joule du propre circuit électrique de l'instrument de mesure. Cette consigne doit être respectée après chaque mise en tension de l'appareil.

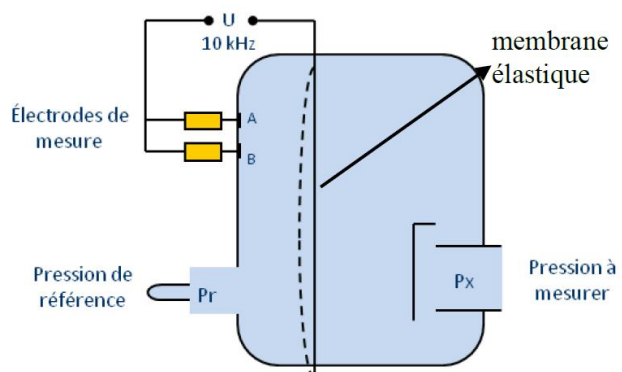


FIGURE 4.5 – Jauge de Baratron et son principe de fonctionnement

En ce qui concerne le fonctionnement des jauges de type Bayard-Alpert, un courant d'électrons régulé (typiquement 10 mA) est émis par un filament chauffé. Les électrons sont attirés par une grille hélicoïdale portée à un potentiel constant (typiquement 150 V). La plupart des électrons passent à travers la grille et entrent en collision avec des molécules de gaz dans le volume de mesure, entraînant une ionisation de ces molécules. Les ions gazeux formés sont collectés par un fil collecteur porté à une tension négative constante (typiquement - 30 V). Ce courant ionique (typiquement 1 mA / Pa) est amplifié. La mesure est convertie en pression en tenant compte de la composition du gaz puisque l'ionisation en dépend. Pour un gaz donné, le courant est directement proportionnel à la densité moléculaire dans le volume de mesure.

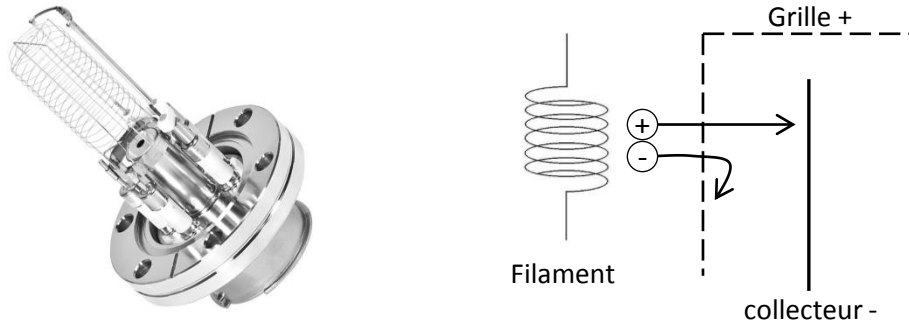


FIGURE 4.6 – Jauge Bayard-Alpert et son principe de fonctionnement

4.1.2 Incertitude des mesures

Les quantités qui font l'objet de comparaison simulations/mesures sont la valeur de mesure de la vitesse de pompage S et celle du taux de compression K_0 .

La vitesse de pompage S est calculée à partir de l'équation :

$$S = \frac{\dot{m} r T_D}{P_{in}} \quad (4.2)$$

où

- T_D est la température du gaz d'entrée mesurée par une sonde PT100 (thermistance) dont l'incertitude de mesure est de $\pm 2.5^\circ\text{C}$,
- $\dot{m}$ est le débit massique régulé par de différentes gammes de MFC de 80 sccm à 3000 sccm (soit d'environ 1.6×10^{-3} à 6×10^{-2} g/s en azote) dont l'incertitude maximale est de $\pm 3\%$ sur la plage de mesure exploitée,
- P_{in} est la pression d'aspiration mesurée par trois gammes de Baratron (soit 0.1 Torr, 1 Torr, 10 Torr) dont l'incertitude maximale est de $\pm 1\%$ sur la plage de mesure exploitée.

Il faut souligner que les incertitudes de mesure citées précédemment impliquent une bonne utilisation des appareils de mesure : les valeurs mesurées doivent être au-dessus de 10% de la pleine échelle pour un MFC et de 1% pour un Baratron. En connaissant l'incertitude de trois quantités mesurées, soit $\dot{m}$, T_D et P_{in} , l'incertitude de S peut être calculée par l'équation 4.3 qui donne une incertitude de $\pm 4.8\%$:

$$err(S) = err(\dot{m}) + err(T_D) + err(P_{in}) \quad (4.3)$$

L'erreur relative sur T_D est d'environ $\pm 0.8\%$, et elle est calculée avec une température du gaz stabilisée à environ 20°C .

Le taux de compression à débit nul est calculé avec l'équation 4.4

$$K_0 = \frac{P_{out}}{P_{in}} \quad (4.4)$$

La pression de refoulement est mesurée avec des Baratrons de 1 Torr et de 10 Torr qui donnent une incertitude de $\pm 1\%$ sur une plage de mesure de 0.01 Torr à 10 Torr. En général, la pression d'aspiration peut s'étendre entre 10^{-13} Torr et 1 Torr. Elle est mesurée par une jauge de Bayart-Alpert dont l'incertitude est de 5% . Donc, l'incertitude de K_0 peut être calculée avec l'équation 4.5, soit $err(K_0) = \pm 6\%$

$$err(K_0) = err(P_{out}) + err(P_{in}) \quad (4.5)$$

4.2 Comparaison simulations TPMC 3D / expériences aVP

Parmi les nombreuses pompes développées chez aVP, nous avons choisi dans un premier temps une pompe de taille moyenne pour réaliser la validation expérimentale du code TPMC 3D. La figure 4.7 illustre le modèle géométrique de la pompe ATH2303 qui comporte six étages rotor, cinq étages stator et un étage Holweck.

Signalons que, pour améliorer la lisibilité d'ensemble de la figure 4.7, les conventions de couleur suivantes ont été adoptées :

- les surfaces violettes sont des surfaces en rotation,
- les surfaces vertes sont des surfaces fixes,
- les surfaces jaunes sont des surfaces périodiques.

Les aubes des différentes étages sont :

- vrillées pour les premiers étages de type rotor côté aspiration
- hélicoïdales pour les étages rotor suivant
- hélicoïdales pour les premiers étages de type stator côté aspiration
- planes ou droites pour les étages stator suivants

La simulation de la pompe est réalisée à l'aide du code TPMC 3D en utilisant les préconisations issues du chapitre précédent. On peut ainsi noter sur la figure 4.7 le maillage des pales vrillées et hélicoïdales utilisé pour le calcul d'intersection trajectoires / surfaces et l'absence de maillage pour les pales droites où l'intersection est réalisée de façon analytique. Différents calculs ont été effectués pour différents types de gaz pompés (Azote N_2 , Helium He et Hydrogène H_2 soit un gaz lourd et deux gaz légers) : chaque simulation fournit une valeur du couple (S_0, K_0) pour la géométrie spécifique de la pompe ATH2303M et pour un gaz donné. Les simulations pour les gaz légers ont été réalisés par une approche dite monolithique dans laquelle un seul domaine de calcul est considéré, de l'aspiration de l'étage turbo au refoulement de l'étage Holweck. Des valeurs convergées des coefficients

ATH2303M

- entrée DN250
- 31000 tr/min
- 6 étages rotor
- 5 étages stator
- 1 Holweck

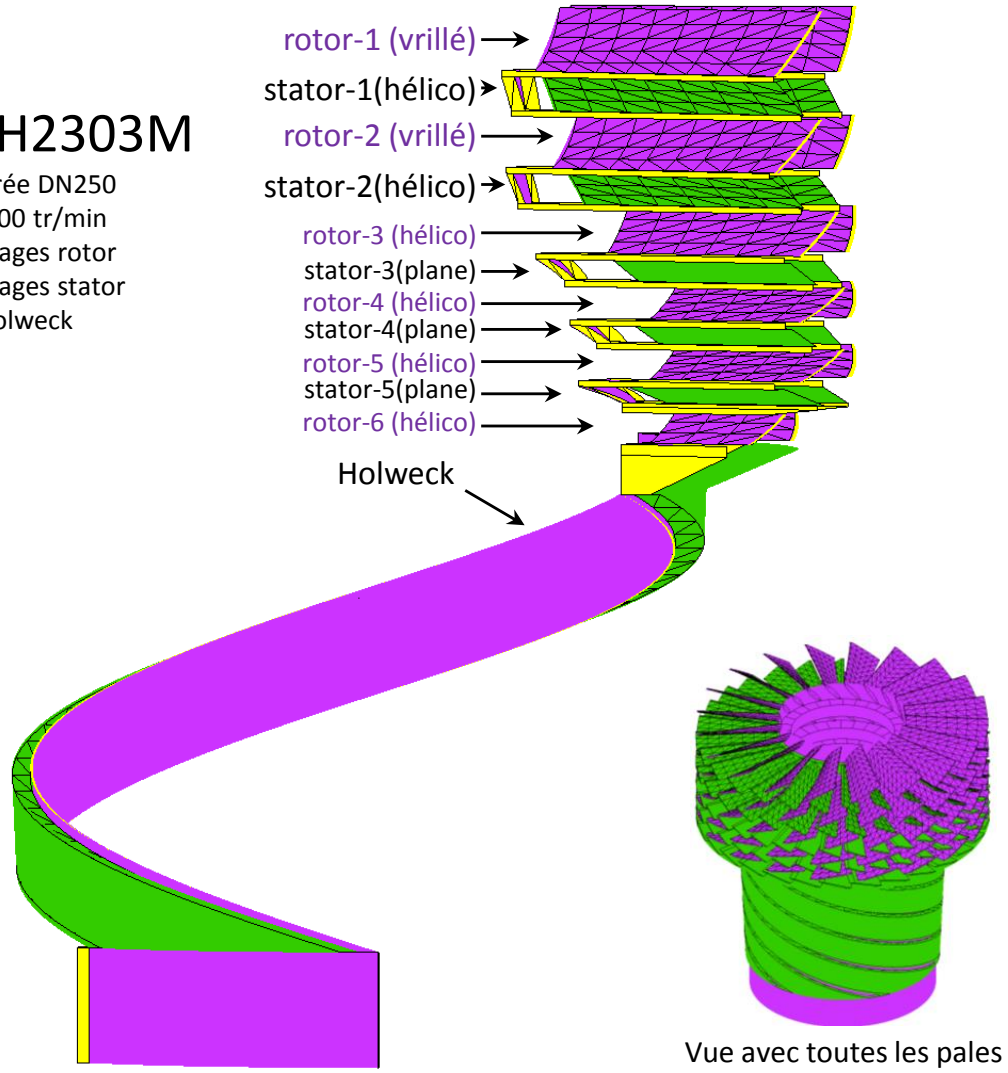


FIGURE 4.7 – Composition géométrique du domaine de calcul associé à la pompe ATH2303M. En bas à droite : vue d'ensemble de la pompe avec toutes ses pales et l'Holweck complet (périodicités appliquées).

de transmission ont été obtenues pour des nombres de particules testées variant entre 10^5 et 10^6 pour M_{12} et entre 10^6 et 10^7 pour M_{21} et en appliquant le critère de convergence décrit en 3.2.8. Si une telle approche monolithique est appliquée au gaz lourd, il apparaît que l'obtention d'une valeur convergée de K_0 nécessite un nombre de tests très important ($>10^9$) pour obtenir le M_{21} . Compte tenu des moyens de calcul disponibles chez aVP soit un cluster de 20 PC à 8 processeurs, une simulation de la pompe complète pour H_2 et H_e représente respectivement 1 heure et 2 heures de calcul. L'approche monolithique pour N_2 conduirait elle à un temps de simulation de l'ordre de 10^3 heures, ce qui n'est pas acceptable en pratique. Nous avons donc opté pour une stratégie consistant à réaliser deux simulations indépendantes de la partie turbo et de la partie Holweck, en supposant que le couplage entre les deux parties de la machine est faible. Nous reviendrons plus en détail dans 4.3.2 sur la comparaison approche monolithique / approche découplée pour le calcul de pompes multi-étagées.

La figure 4.9 illustre la comparaison des vitesses de pompage calculées par le code TPMC

3D aux courbes de vitesse de pompage mesurée pour différents gaz, tandis que la figure 4.8 illustre la comparaison des taux de compression à débit nul calculés aux courbes de taux de compression K_0 mesuré pour les différents gaz. Sur la figure 4.8 de K_0 , on peut constater une très bonne concordance entre les simulations et les mesures pour la partie gauche des courbes expérimentales (les valeurs uniques de S_0 et K_0 calculées par TPMC 3D sont présentées sous forme de traits pointillés sur la gamme des pressions d'aspiration afin de faciliter la comparaison calcul / expérience). Ceci signifie que la simulation est capable de prédire avec une bonne précision le taux de compression K_0 d'une pompe TMP hybride en régime moléculaire libre ($Kn > 10$). Pour ce qui concerne la courbe relative à l'azote, on note également un accord calcul / expérience satisfaisant en débit de l'approximation introduite par l'hypothèse de découplage. Notons que pour ce gaz lourd les valeurs expérimentales sont entachées par une incertitude de mesure plus forte que celle associée aux mesures pour les gaz légers ; les taux de compression élevés nécessiteraient des jauges de pression de plus grande précision.

Sur la figure 4.9 présentant les vitesses de pompage S_0 , les écarts entre simulations et mesures sont plus importants que les écarts obtenus pour les taux de compression K_0 . Cela est dû principalement au fait que sur la partie gauche des courbes l'écoulement n'est pas en régime moléculaire libre au moins dans une partie de la pompe. Le premier point de chaque courbe de vitesse de pompage correspond à un nombre de Knudsen d'environ 30 à l'aspiration, soit la limite du régime moléculaire libre. De l'aspiration au refoulement, le nombre de Knudsen Kn diminue avec l'augmentation de pression. Donc, la plupart des zones dans la pompe ne correspondent pas au régime moléculaire libre. A titre d'exemple, dans la figure 4.9, les nombres de Knudsen Kn sont d'environ 10^{-1} , 10^{-2} et 10^{-4} pour H_2 , He et N_2 , ce qui dépasse largement la limite de l'hypothèse de régime moléculaire libre. Les tableaux 4.1 4.2 4.3 récapitulent les résultats de simulation et les mesures pour

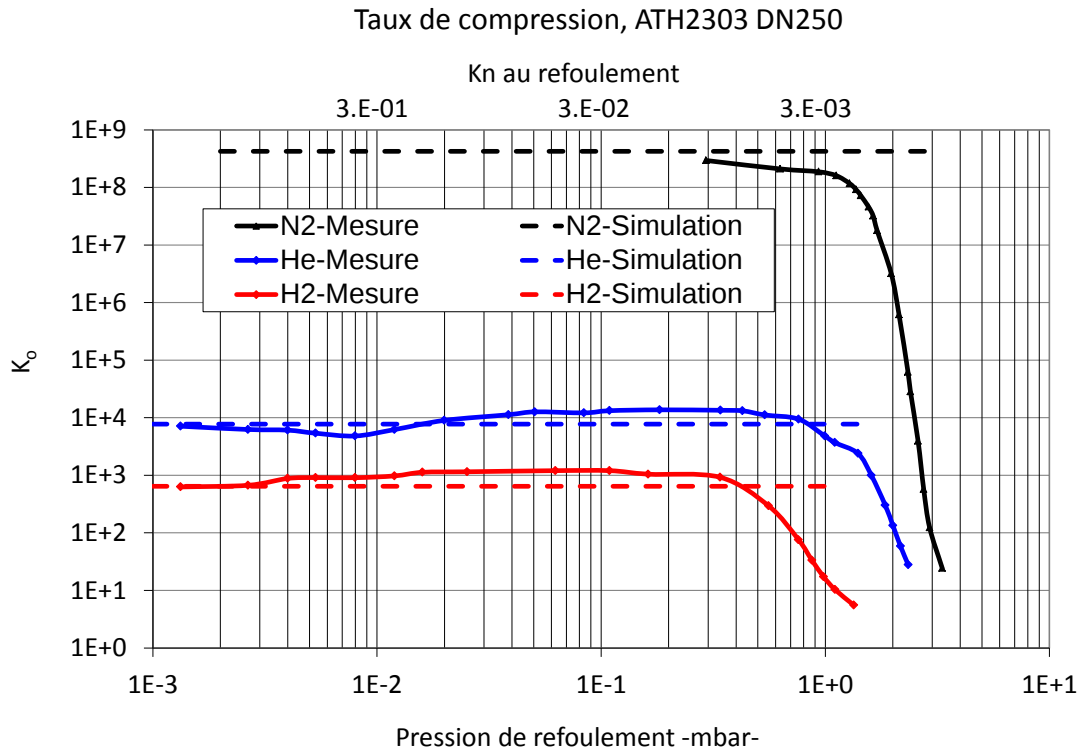


FIGURE 4.8 – Pompe ATH2303. Comparaison des taux de compression entre simulations TPMC 3D et mesures sur banc d'essai aVP.

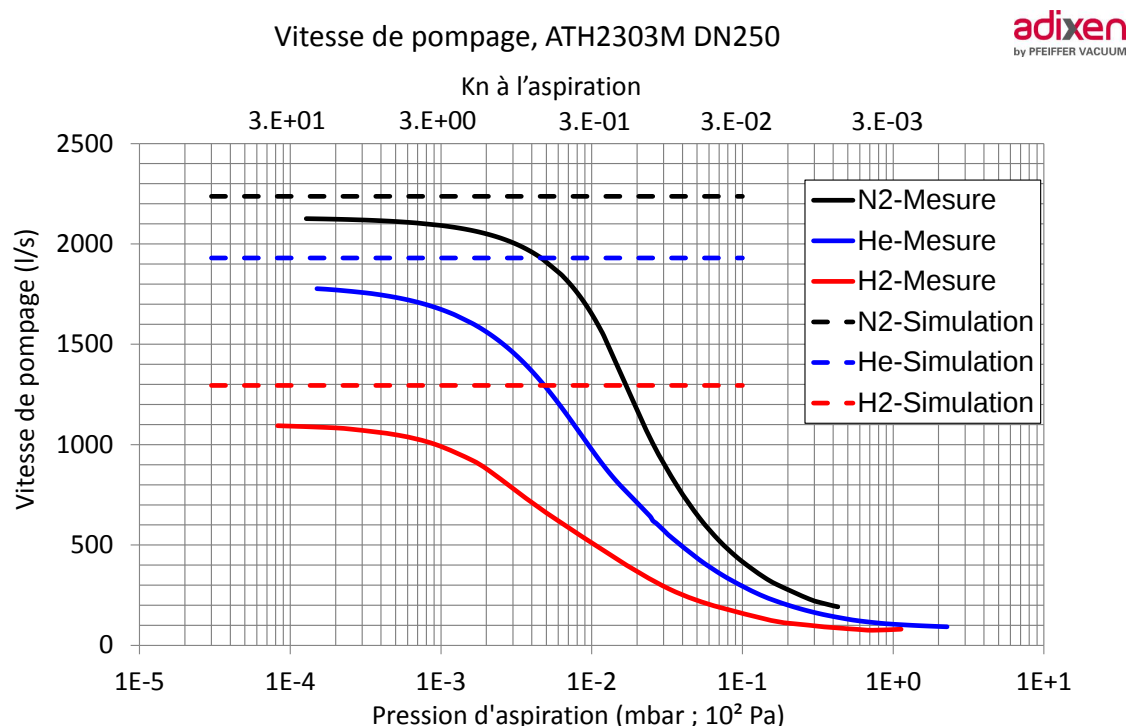


FIGURE 4.9 – Pompe ATH2303. Comparaison des vitesse de pompage entre simulations TPMC 3D et mesures sur banc d'essai aVP.

trois pompes différentes développées chez aVP : ATH2303M, ATH500M et ATP2300M. La pompe ATH2303M a un diamètre d'entrée d'environ 250 mm (DN250) ; la pompe ATH500M a un diamètre plus petit, d'environ 150 mm (DN150mm). Ces deux pompes sont également des pompes hybrides. La pompe ATP2300M est une pompe turbo-moléculaire qui a deux fois plus d'étages que la partie turbo-moléculaire de la pompe ATH2303M. Les écarts entre les simulations et les mesures présentés dans les trois tableaux montrent que **le code TPMC 3D est systématiquement capable de prédire avec un écart inférieur à 10% la vitesse de pompage d'une pompe TMP ou TMP hybride**. L'écart sur la prédiction de taux de compression est plus important mais l'accord reste satisfaisant dans la mesure où les résultats des simulations restent toujours dans le bon ordre de grandeur par rapport aux mesures, qui rappelons-le présentent une incertitude non négligeable.

ATH2303M	Vitesse de pompage (l/s)			Taux de compression	
	Simulation	Mesure	Écart	Simulation	Mesure
N2	2237	2123	5.2%	4.24E+08	2.94E+08
He	1930	1777	10.4%	7740	[7120, 13700]
H2	1295	1094	18.4%	644	[627, 1200]

TABLE 4.1 – Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATH2303M

On a donc établi à ce stade la capacité prédictive de l'outil TPMC 3D développé dans cette thèse pour des configurations d'intérêt industriel. En outre, les temps de restitution des simulations sont bien compatibles avec les cycles de conception de l'entreprise, à condition de recourir à une stratégie découplée pour les simulations de gaz lourd tel que l'azote. Ce point important étant établi, nous souhaitons évoquer en conclusion de cette section le rôle

ATH500M	Vitesse de pompage (l/s)			Taux de compression	
	Simulation	Mesure	Écart	Simulation	Mesure
N2	598	549	8.9%	3.11E+07	[7.0E+06, 8.0E+06]
He	464	396	17.2%	1820	[2.0E+03, 1.0E+04]
H2	176	195	-9.7%	216	[210, 280]

TABLE 4.2 – Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATH500M

ATP2300M	Vitesse de pompage (l/s)			Taux de compression	
	Simulation	Mesure	Écart	Simulation	Mesure
N2	2142	1955	9.6%	NA	NA
He	2189	2036	7.5%	2.92E+05	NA
H2	1820	1688	7.6%	6930	[6490, 7210]

TABLE 4.3 – Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATP2300M

joué par la condition de paroi et la coefficient d’accommodation TMAC dans la prédiction numérique. Nous démontrerons ensuite la valeur ajoutée de l’approche TPMC 3D par rapport aux approches disponibles ; nous n’avons à ce stade fait que comparer nos résultats aux expériences et avons ainsi démontré leur fiabilité sans justifier encore la nécessité de cette démarche pleinement 3D par rapport aux stratégies approchées dont l’entreprise disposait auparavant. Enfin, nous donnerons quelques exemples des enseignements qui peuvent être tirés de simulations TPMC 3D pour le design des pompes.

Étude de sensibilité au coefficient TMAC

Les simulations précédentes ont toutes été réalisées avec un coefficient TMAC égal à l’unité. Ce choix revient à appliquer un modèle de diffusion à toutes les collisions particules/parois (cf. description de la section 1.3.2). Lorsqu’on introduit un coefficient TMAC inférieur à l’unité, on considère qu’une partie des particules est réémise avec un modèle de réflexion. Une étude de sensibilité du coefficient TMAC est réalisée dans le but de justifier le choix réalisé d’un TMAC unitaire.

La figure 4.10 présente ainsi les taux de transmission M_{12} , M_{21} , la vitesse de pompage S_0 et le taux de compression K_0 calculés pour une gamme de valeurs du coefficient TMAC compris entre 1 et 0.1. Cette série de calculs a été réalisée pour la pompe ATH2303M pompant . Sur cette figure, on peut observer que la réduction de TMAC conduit à augmenter la vitesse de pompage S_0 prédite et à réduire le taux de compression K_0 prédit. Il apparaît que le meilleur choix pour l’accord simulations / mesures est bien obtenu pour un coefficient TMAC égal à l’unité.

Le résultat de cette étude nous conduit à retenir une valeur de 1 pour le coefficient TMAC des simulations en hélium et en hydrogène. Par ailleurs, une série complète (*i.e.* pour des valeurs de TMAC variant de 1 à 0.1) de calculs n’a pas été effectuée pour l’azote en raison du temps de calcul considérable représenté par une telle série (même en faisant appel à une stratégie découplée). Cependant un calcul réalisé en azote pour TMAC égal à 0.9 montre que l’influence de TMAC en azote semble comparable à celle observée en hélium et hydrogène. Nous en concluons donc que nous pouvons retenir un coefficient TMAC qui vaut 1 pour tous les gaz dans une approche moléculaire. Cette conclusion n’est pas en

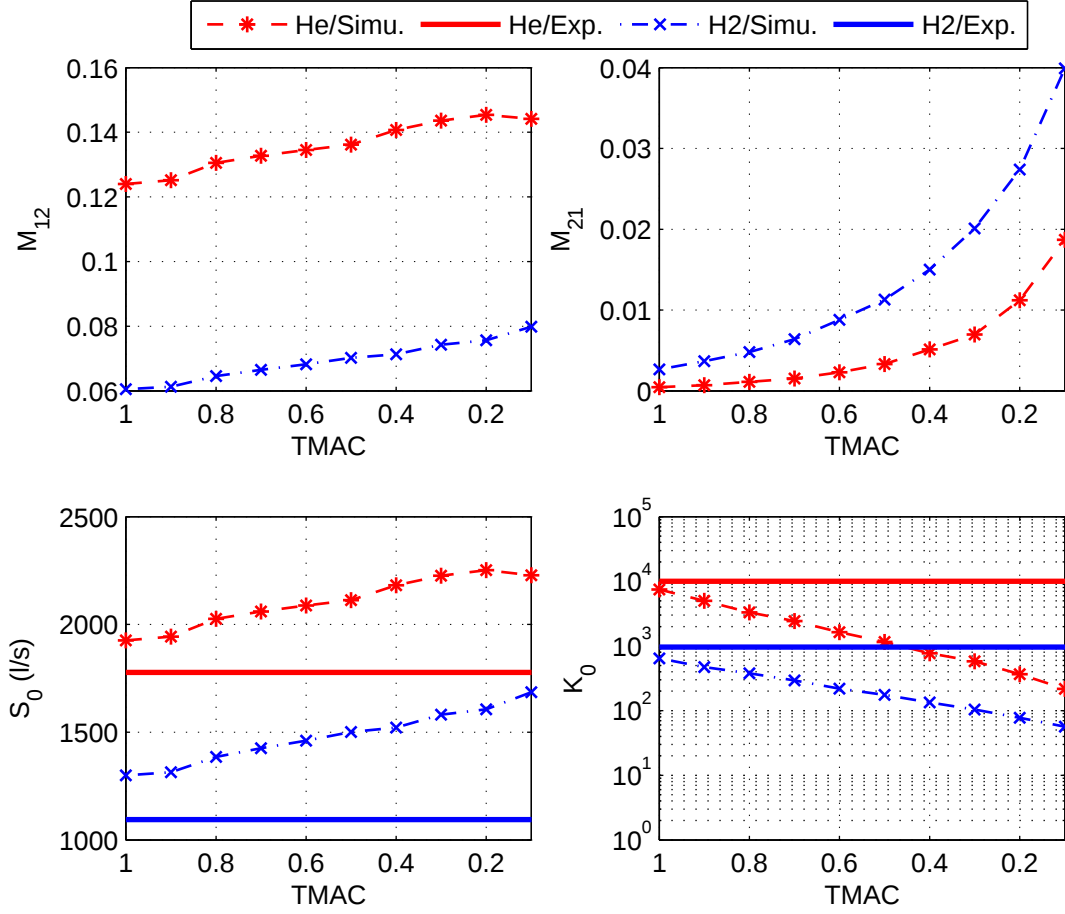


FIGURE 4.10 – Influence du coefficient TMAC sur les résultats de simulation de la pompe ATH2303M

conformité avec les observations que nous avons pu réaliser en régime continu (régime de glissement) en faisant appel à une approche CFD et que nous avons récapitulées dans la section 2.2.2. Nous trouvons notamment des valeurs recommandées de TMAC nettement plus faibles que 1 pour un gaz léger tel que l'Helium. Puisque le TMAC est un coefficient physique lié au comportement du gaz près de la paroi, sa valeur ne devrait pas dépendre de la méthode numérique dans laquelle la condition de paroi est implémentée - même si les régimes d'écoulement considérés dans l'approche CFD et l'approche TPMC 3D sont bien différents. Nous pensons qu'une étude détaillée de l'influence de TMAC devra être menée à l'avenir sur chaque partie de la pompe pour tenter de résoudre cette contradiction sur la valeur du coefficient TMAC.

4.3 Démonstration d'intérêt de TPMC 3D

Nous vérifions maintenant la cohérence entre le code TPMC 3D nouvellement développé dans cette thèse et d'autres codes / outils plus anciens, disponibles chez aVP et qui sont connus pour leur fiabilité dans des cas d'applications précis (cf. la section 2.2.1). Nous établissons également les cas d'application pour lesquels le nouveau code TPMC 3D apporte une valeur ajoutée (précision de la prédiction numérique) par rapport à ces outils bien établis.

4.3.1 Démonstration sur un étage rotor

Notre première étude porte sur un étage rotor isolé à pales droites schématisé sur la figure 4.11. Nous introduisons le paramètre géométrique adimensionnel β défini comme le rapport entre la distance circonférentielle s entre deux pales voisines (au niveau du rayon moyen des pales) et la hauteur w des pales dans la direction radiale (cf. Fig. 4.11). Les diamètres intérieur et extérieur de la machine sont constants, égaux respectivement à 150 mm et 300 mm. L'angle d'inclinaison des pales est fixé à 30° . Pour que β varie de 1 à 10^{-3} , le nombre de pales augmente de 10 à 3000. L'épaisseur des pales est fixée à zéro afin d'éviter l'interférence entre pales voisines, notamment lorsque le nombre des pales est élevé - nous ne cherchons pas ici à comparer nos résultats à des mesures mais à comparer entre elles différentes modélisations numériques. La hauteur axiale du rotor est adaptée à chaque nombre de pales pour que le paramètre de similitude S (cf. 3.1.1) reste égal à 1 dans le modèle 2D quelle que soit la valeur de β . Nous comparons les résultats du code TPMC3D

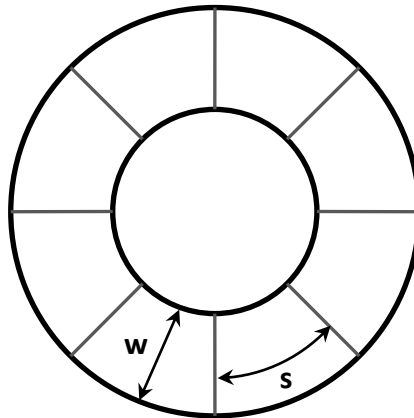


FIGURE 4.11 – Définition des paramètres géométriques du rotor : distance circonférentielle s entre deux pales voisines (au niveau du rayon moyen des pales) et hauteur w des pales dans la direction radiale. Le rapport s/w caractérise l'importance des effets tridimensionnels associés à l'étage.

à ceux fournis par trois autres codes aVP :

- le code 2D repose sur un modèle géométrique (cylindrique) dont le rayon est pris égal au rayon quadratique moyen des pales.
- le code 2.5D calcule la moyenne d'une série de simulations 2D réalisées aux différents rayons du rotor.
- le code 2.5Dc ("c" pour "corrigé") introduit deux coefficients de correction par rapport

au code 2.5D afin de prendre (empiriquement) en compte les effets dus à la présence du carter (rayon extérieur) et du moyeu (rayon intérieur).

On renvoie à 2.2.1 pour plus de détails sur ces 3 codes.

La figure 4.12 présente en partie haute les résultats de calcul en valeurs absolues (taux de transmission M_{12} , M_{21} , leur différence et leur rapport) et en partie basse les erreurs commises (en pourcentage) sur la différence des taux de transmission (représentative de la vitesse de pompage S_0) et le rapport des taux de transmission (représentatif du taux de compression K_0) en prenant les résultats TPMC 3D comme valeurs de référence. Lorsque β est inférieur à 10^{-2} , les résultats des codes 3D, 2.5D et 2.5Dc sont très proches les uns des autres car l'effet tridimensionnel reste négligeable pour cette gamme de valeurs de β . L'écart important qui apparaît pour le code 2D, notamment pour le calcul de M_{12} , par rapport aux trois autres codes est dû au fait que le modèle 2D pris au rayon quadratique moyen n'est plus équivalent au modèle 2.5D à cause d'une hauteur de pales trop importante (75mm). Lorsque β est supérieur à 0.1, les écarts des codes 2D, 2.5D, 2.5Dc par rapport au code 3D deviennent tous importants. Les courbes de M_{21} montrent que le code 2.5Dc (version corrigée de 2.5D) permet de retrouver d'une façon qualitative l'effet tridimensionnel du rotor, contrairement aux codes 2D et 2.5D. Ceci permet au code 2.5Dc de mieux calculer le taux de compression du rotor ($M_{12} - M_{21}$) par rapport aux codes 2D et 2.5D avec lesquels l'erreur peut atteindre 60%. En revanche, les courbes d'écart ($M_{12} - M_{21}$) montrent que la correction du code 2.5Dc amplifie l'erreur commise par ce code sur la vitesse de pompage avec une augmentation de la valeur de l'erreur de 12% jusqu'à 28% dans le cas où β est égal à 1. Aujourd'hui, les pompes qui existent chez aVP présentent une valeur maximale de β égale à environ 0.1 pour leur premier étage rotor. Avec le code 2.5Dc qui est utilisé jusqu'à ce jour comme outil de dimensionnement, l'écart par rapport au code TPMC 3D est de moins de 10% sur la vitesse de pompage et moins de 5% sur le taux de compression. Le code 2.5Dc présente donc des performances satisfaisantes - d'autant plus que son coût est bien sûr bien inférieur à celui du code 3D. En revanche, pour les pompes de plus grand diamètre qui sont destinées aux futurs marchés, la valeur de β va inexorablement augmenter afin d'optimiser la vitesse de pompage de ces pompes. Pour ces nouvelles pompes de grande dimension, l'approche TPMC 3D va donc s'avérer indispensable.

4.3.2 Démonstration sur une pompe multi-étagée

Il existe deux méthodes qui permettent de calculer la performance d'une pompe multi-étagée :

Méthode itérative

Il s'agit de la méthode utilisée jusqu'à présent chez aVP pour dimensionner les pompes multi-étagées. Elle consiste à calculer le taux de transmission global en assemblant les taux de transmission de tous les étages calculés indépendamment. Le taux de transmission de chaque rotor est calculé avec le modèle présenté dans les paragraphes précédents. Dans le cas d'un stator placé entre deux rotors, les molécules en amont et en aval du stator sont considérées comme répondant à une distribution Maxwellienne à laquelle s'ajoute une vitesse de déplacement $\vec{v}_{pale}$ créée par l'entraînement des pales des rotors voisins. Par conséquent, un tel stator a la même capacité de pomper les gaz qu'un rotor à angle d'inclinaison équivalent. Dans le cas où un stator est le dernier étage d'une pompe, le gaz en aval du stator est considéré comme stationnaire (sans vitesse d'entraînement), les

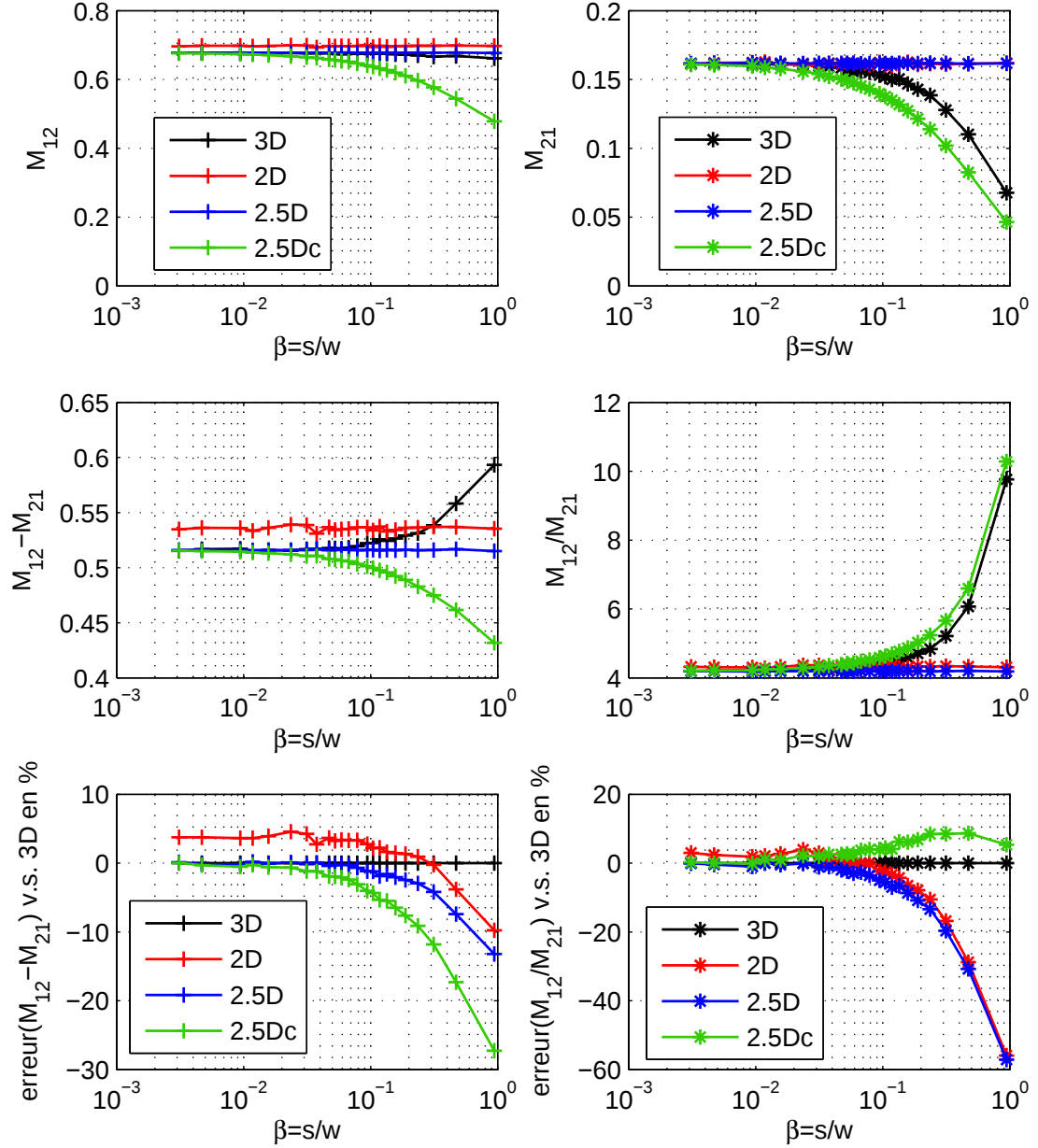


FIGURE 4.12 – Comparaisons entre codes 3D, 2D, 2.5D et 2.5Dc pour un étage rotor à pales droites de paramètre β variable.

molécules ayant une distribution Maxwellienne.

En général, le taux de transmission global d'une pompe multi-étagée est calculé de façon itérative en ajoutant à chaque itération un étage à partir de l'entrée de la pompe. En connaissant les taux de transmission de l'étage 1 à l'étage $n - 1$, les taux de transmission de l'étage 1 à l'étage n peuvent être calculés par les relations :

$$\frac{1}{M_{12}^{1n}} = \frac{1}{M_{12}^{1(n-1)}} + \frac{M_{21}^{1(n-1)}}{M_{12}^{1(n-1)}} \frac{1}{M_{12}^n} - \frac{M_{21}^{1(n-1)}}{M_{12}^{1(n-1)}} \quad (4.6)$$

$$\frac{1}{M_{21}^{1n}} = \frac{1}{M_{21}^{1(n-1)}} + \frac{M_{12}^n}{M_{21}^n} \frac{1}{M_{21}^n} - \frac{M_{12}^n}{M_{21}^n} \quad (4.7)$$

où $M_{12}^{1(n-1)}$ et $M_{21}^{1(n-1)}$ sont les taux de transmission de l'ensemble de l'étage 1 à l'étage $n-1$, M_{12}^n et M_{21}^n sont les taux de transmission de l'étage n et M_{12}^{1n} et M_{21}^{1n} sont les taux de transmission de l'ensemble de l'étage 1 à l'étage n , soit les taux de transmission globaux à rechercher.

Afin de prendre en compte l'épaisseur des pales, un facteur fp qui représente la portion de surface bloquée par les pales dans une section de passage doit être introduit. Les taux de transmission effectifs d'un étage deviennent alors : $M_{12}^* = (1 - fp)M_{12}$ et $M_{21}^* = (1 - fp)M_{21}$.

Les équations (4.6) et (4.7) sont valables à condition qu'il n'y ait pas de changement de section de passage entre des étages voisins, *i.e.* si les pales de différents étages ont toutes la même longueur radiale. Si tel n'est pas le cas, Tu [28] a proposé deux équations modifiées tenant compte de l'éventuel changement de section entre deux étages. A partir des taux de transmission M_{1j} , M_{j1} , $M_{j(j+1)}$ et $M_{(j+1)j}$, les taux de transmission globaux de l'assemblage $M_{1(j+1)}$ et $M_{(j+1)j}$ sont calculés par :

$$M_{1(j+1)} = \frac{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)})A_J M_{1j} M_{j(j+1)}}{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)})A_J M_{j(j+1)} + (A_J + A_{\epsilon J})A_{J-I} M_{j1} - A_{J-I} A_J M_{j1} M_{j(j+1)}} \quad (4.8)$$

$$M_{(j+1)j} = \frac{(A_J + A_{\epsilon J})A_{J-I} M_{j1} M_{(j+1)j}}{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)})A_J M_{j(j+1)} + (A_J + A_{\epsilon J})A_{J-I} M_{j1} - A_{J-I} A_J M_{j1} M_{j(j+1)}} \quad (4.9)$$

où les notations utilisées sont illustrées sur la figure 4.13. L'étage J se trouve entre deux surfaces fictives j et $j+1$ qui permettent de délimiter les étages. Il est alimenté par deux flux de molécules N_{Jj} et $N_{J(j+1)}$ à travers les surfaces j et $j+1$. A_J est la surface effective de pompage de l'étage J et $A_{\epsilon J}$ est la surface de blocage. M_{1j} est le taux de transmission de la surface 1 à la surface j , M_{j1} celui de j à 1, $M_{j(j+1)}$ celui de j à $j+1$, $M_{(j+1)j}$ celui de $j+1$ à j , etc. On trouvera une démonstration des relations (4.8) et (4.9) dans l'annexe 1 du mémoire.

Dans le cas où l'étage $J-I$ est plus long que l'étage J , $A_{\epsilon J}$ est remplacé par :

$$A_{\epsilon J} = (A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) - A_J \quad (4.10)$$

Dans le cas contraire, $A_{\epsilon(J-I)}$ est remplacé par :

$$A_{\epsilon(J-I)} = (A_J + A_{\epsilon J}) - A_{J-I} \quad (4.11)$$

Méthode monolithique

Cette méthode calcule une pompe multi-étagée en la considérant comme un ensemble (cf. figure 4.14). Par rapport à l'approche itérative précédente, elle est plus précise puisqu'aucune hypothèse n'est faite sur la distribution de la vitesse et de la position des molécules au niveau de l'interface entre deux étages. En revanche, l'approche monolithique nécessite beaucoup plus de temps de calcul car le suivi de la trajectoire des particules doit être effectué dans l'ensemble de l'espace interne de la pompe. Lorsqu'il s'agit d'une pompe ayant un taux de compression très élevé, le calcul avec l'approche monolithique est très long (voire irréalisable actuellement compte tenu des moyens de calcul disponibles localement) à cause du très grand nombre de tests à réaliser pour calculer le taux de transmission M_{21} . L'approche monolithique est indissociable d'une modélisation 3D pour calculer une pompe multi-étagée à section variable.

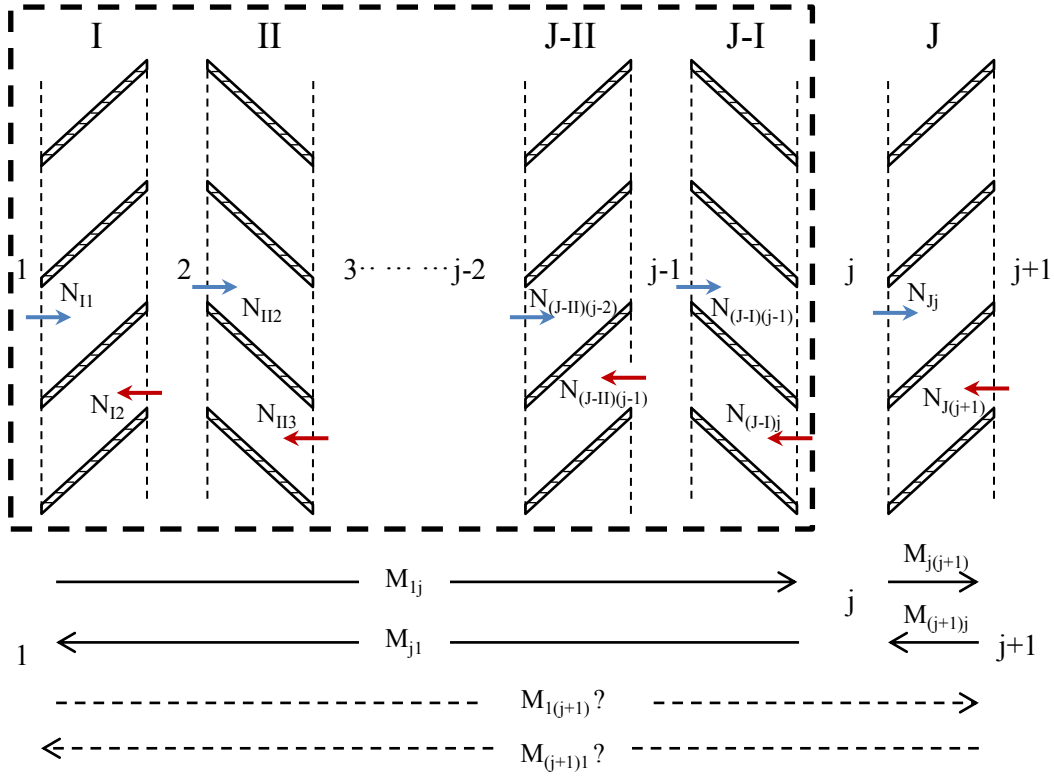


FIGURE 4.13 – Assemblage des taux de transmission pour une pompe multi-étagée

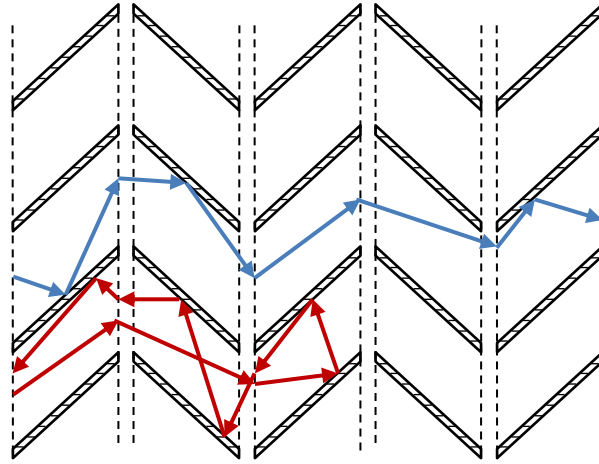


FIGURE 4.14 – Simulation TPMC d'une pompe multi-étagée en approche monobloc ou monolithique.

Une étude comparative entre la méthode itérative 2.5Dc et la méthode monolithique 3D a été réalisée pour une pompe multi-étagée formée d'un empilement d'étages rotor et stator de géométrie analogue à celle du rotor isolé étudié dans la section précédente 4.3.1. La valeur de β est égale à 0.1 pour la géométrie de tous les étages rotor comme stator. Deux gaz ont été pris en compte : l'azote et l'hydrogène. Les simulations ont été réalisées pour un nombre d'étages variant de 1 à 10 pour l'azote et variant de 1 à 16 pour l'hydrogène. Les figures 4.15 et 4.16 présentent les courbes produites par les deux modèles respectivement dans le cas de l'azote N_2 et de l'hydrogène H_2 . Afin de permettre une analyse complète,

on présente les taux de transmission calculés en fonction du nombre d'étages ainsi que leur différence (représentative de la vitesse de pompage) et leur rapport (représentatif du taux de compression) ; enfin, on donne également l'écart en % entre les prédictions des taux de transmission, écart qui peut aussi être considéré comme une erreur en considérant l'approche TPMC 3D comme celle produisant les résultats de référence. L'erreur présentée est donc celle commise par l'approche itérative 2.5Dc par rapport à l'approche monolithique 3D.

Les courbes obtenues montrent des différences notables selon la nature du gaz (lourd (N_2) ou léger (H_2)) de sorte que nous allons les analyser de façon séparée.

L'analyse des résultats obtenus pour l'azote indique que l'erreur commise par l'approche itérative 2.5Dc sur la prédiction du terme ($M_{12} - M_{21}$) tend à se stabiliser à environ 10% (sous-estimation) à partir de 5 étages. Les fluctuations constatées sur les courbes du code 3D, qui conduisent aux fluctuations observées sur $M_{12} - M_{21}$, sont dues à la différence entre rotor et stator en terme de performance de pompage. Le code 2.5Dc n'est pas capable de prédire ces phénomènes car il est basé sur l'hypothèse que le stator participe au pompage de la même façon que le stator (cf. 4.4.3). Les courbes de la quantité M_{12}/M_{21} montrent que le code 2.5Dc surestime le taux de compression par rapport au code TPMC 3D. Globalement, l'écart entre les deux code sur cette quantité M_{12}/M_{21} augmente de façon exponentielle avec le nombre d'étages en partant de 20% pour un étage à plus de $5 \times 10^3\%$ pour 10 étages.

Dans le cas de l'hydrogène, les écarts entre les deux approches sont moins importants : 3% environ pour la vitesse de pompage à partir de 5 étages et 40% pour le taux de compression pour 15 étages. En comparant les prédictions en H_2 et celles en N_2 , l'évolution en fonction du nombre d'étages de l'écart entre méthodes pour la quantité $M_{12} - M_{21}$ est très similaire. En revanche, l'évolution de l'écart pour la quantité M_{12}/M_{21} est nettement différente. En effet, dans le cas de l'hydrogène, les courbes d'écart (M_{12}/M_{21}) montrent globalement une augmentation linéaire en fonction du nombre d'étages, avec une sur-estimation du taux de compression par l'approche 2.5Dc pour une pompe à moins de 6 étages et une sous-estimation pour une pompe à plus de 6 étages avec une erreur maximale de l'ordre de 40% pour une pompe à 15 étages.

En conclusion, la méthode itérative 2.5Dc, qui est beaucoup moins consommatrice en temps de calcul que l'approche 3D monolithique, présente des résultats (en matière de vitesse de pompage et même de taux de compression) qui restent acceptables dans le cas hydrogène. En revanche, cette même méthode itérative introduit des niveaux d'erreur qui ne sont pas acceptables pour une situation de pompage de gaz lourd (tel que l'azote). Dans une telle situation (gaz lourds et grands nombres d'étages), c'est la méthode 3D monolithique qui doit être retenue. Nous avons toutefois souligné dans la section précédente 4.2, consacrée au calcul d'une pompe industrielle hybride, que l'approche monolithique pouvait conduire à des coûts de calcul excessifs pour des gaz lourds. On peut envisager dans ce cas une approche plus ou moins découplée à l'aide de l'approche TPMC 3D mais nous n'avons pas exploré de façon systématique une telle stratégie.

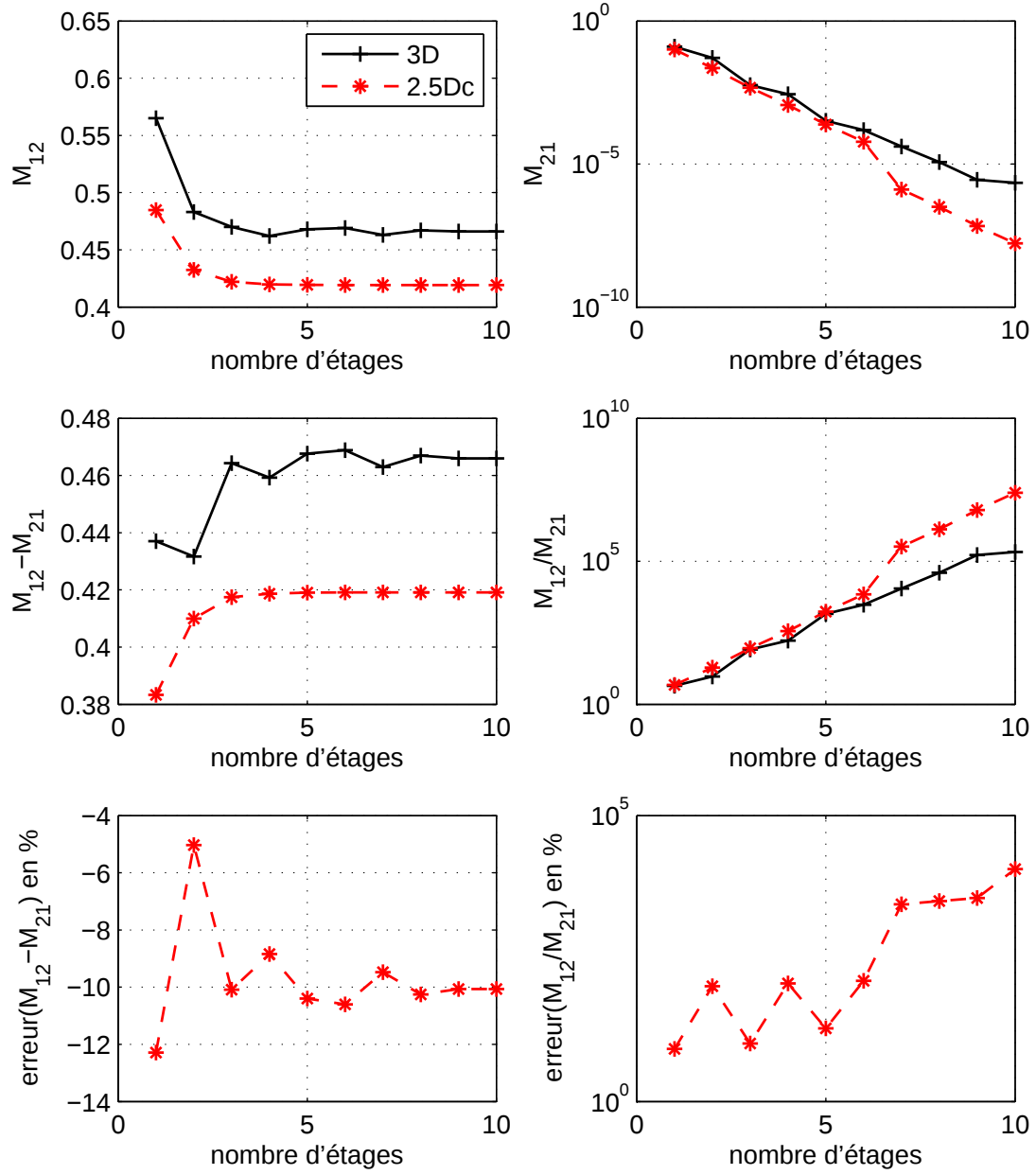


FIGURE 4.15 – Comparaison entre approche 3D monolithique et approche itérative 2.5Dc pour l'assemblage des étages d'une pompe à pales droites (gaz pompé : N_2)

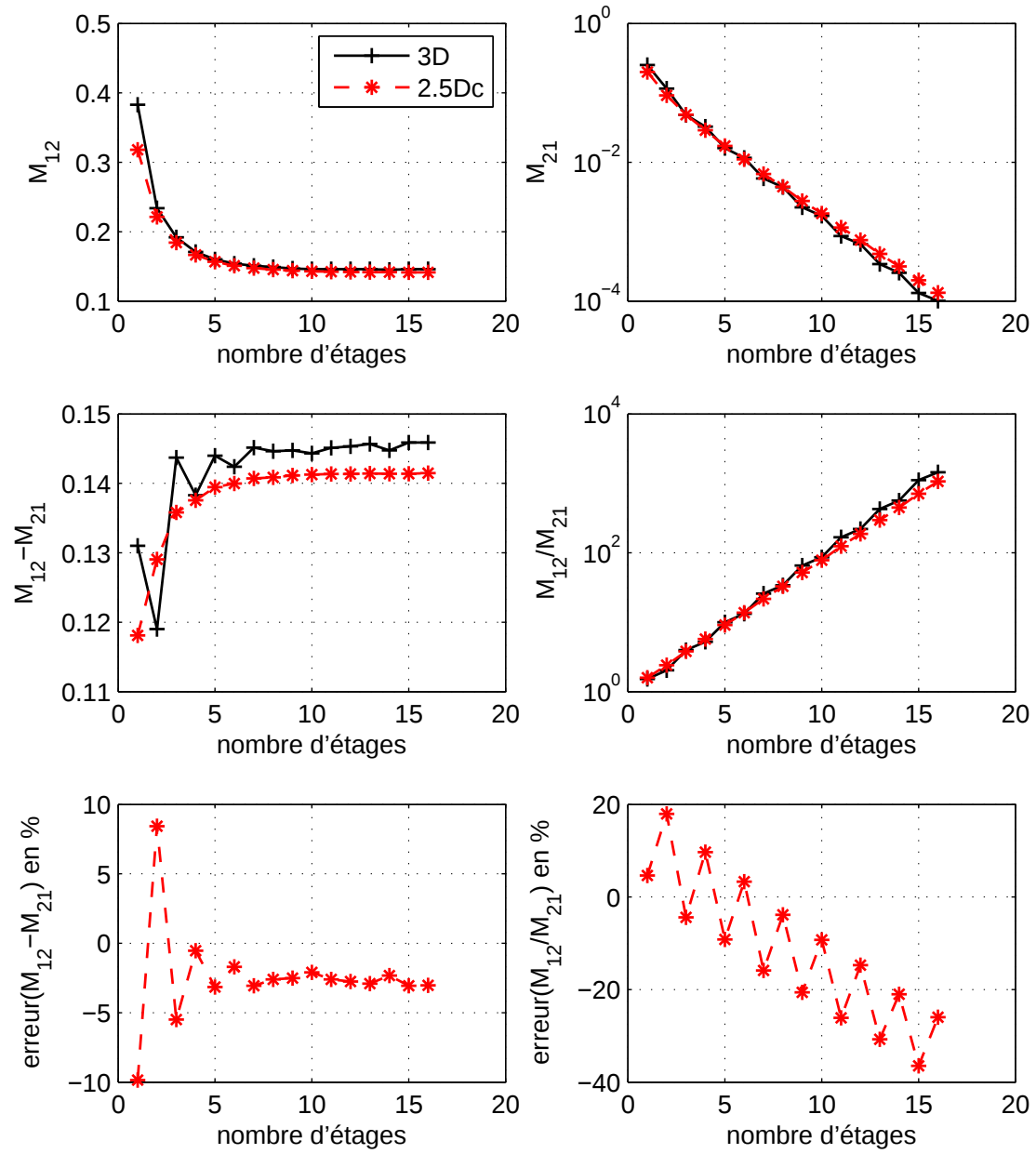


FIGURE 4.16 – Comparaison entre approche 3D monolithique et approche itérative 2.5Dc pour l'assemblage des étages d'une pompe à pales droites (gaz pompé : H_2)

4.4 Analyses physiques utilisant TPMC 3D

Avec l'approche « Test Particle », une analyse plus fine de l'écoulement peut être réalisée au travers de la distribution de la vitesse et de la position des particules sur les surfaces d'entrée et de sortie du domaine. La figure 4.17 présente une vue schématique de la répartition des flux passant dans un volume délimité par la section d'entrée $S1$ et la section de sortie $S2$; on distingue ainsi :

- le flux de particules Fg_{S1}^0 qui proviennent de l'amont du volume. Celui-ci se décompose lui-même, après passage dans le volume de contrôle, en deux flux :
 - Fg_{S1}^2 flux transmis jusqu'à la surface $S2$
 - Fg_{S1}^1 flux rétrodiffusé vers la surface $S1$
- le flux de particules Fg_{S2}^0 qui proviennent de l'aval du volume. Ce flux se décompose lui-même, après passage dans le volume en deux flux :
 - Fg_{S2}^1 flux transmis jusqu'à la surface $S1$
 - Fg_{S2}^2 flux rétrodiffusé vers la surface $S2$

Les particules qui se situent sur $S1$ sont donc alimentées en permanence par trois flux de particules : Fg_{S1}^0 , Fg_{S2}^1 et Fg_{S1}^1 tandis que celles qui se situent sur $S2$ sont alimentées par Fg_{S2}^0 , Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^2 .

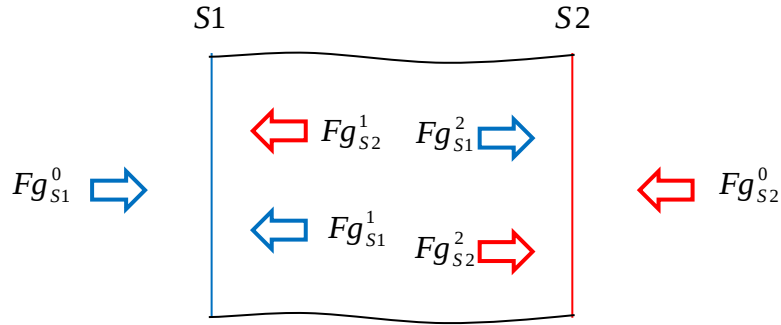


FIGURE 4.17 – Vue schématique des flux de particules qui alimentent les surfaces d'entrée et de sortie d'un volume de contrôle

Si on désigne de façon générique par λ l'une des trois composantes de la vitesse ou de la position des particules, la fonction de distribution f_λ de la quantité λ pour la surface $S1$ est la combinaison des fonctions de distribution des trois flux décrits ci-dessus, soit $f_\lambda(Fg_{S1}^0)$, $f_\lambda(Fg_{S2}^1)$, $f_\lambda(Fg_{S1}^1)$ pondérées par l'intensité de chaque flux, soit le nombre de particules qui traverse chaque surface par unité de temps (cf. équation (3.3) du chapitre 3). Ce raisonnement s'applique également à la surface $S2$: $f_\lambda(S2)$ est la combinaison de $f_\lambda(Fg_{S2}^0)$, $f_\lambda(Fg_{S2}^2)$ et $f_\lambda(Fg_{S1}^2)$, pondérée par l'intensité de chaque flux.

L'analyse des distributions a été réalisée pour un étage rotor ayant 20 pales droites d'inclinaison 38° et d'épaisseur 1 mm avec une vitesse de rotation fixée à 31000 tr/min . Le diamètre du pied de pale est de 123 mm et celui de l'extrémité est de 258 mm , ce qui correspond à la même section d'entrée du 1^{er} étage que la pompe ATH2303M. Le jeu radial entre l'extrémité de la pale et le carter est de 1 mm . Le gaz étant de l'azote à 20°C , le paramètre de similitude C pris au rayon quadratique moyen est égal environ 0.8.

La distribution radiale des différents flux est tracée sur la figure 4.18. Les courbes noires correspondent à la distribution de Maxwell (homogène uniforme) associée au flux amont entrant ou au flux aval entrant. Les courbes bleues, de façon cohérente avec le code couleur adopté sur la figure 4.17, correspondent aux particules venant de $S1$ tandis que les courbes rouges correspondent à celles venant de $S2$. Les courbes en trait plein correspondent aux particules transmises et les courbes en trait mixte aux particules rétrodiffusées. Les courbes $f_r(Fg_{S1}^0)$, $f_r(Fg_{S1}^2)$ et $f_r(Fg_{S1}^1)$ représentent les flux Fg_{S1}^0 , Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 dans la figure 4.18.a et les courbes $f_r(Fg_{S2}^0)$, $f_r(Fg_{S2}^1)$ et $f_r(Fg_{S2}^2)$ représentent les flux Fg_{S2}^0 , Fg_{S2}^1 et Fg_{S2}^2 dans la figure 4.18.b.

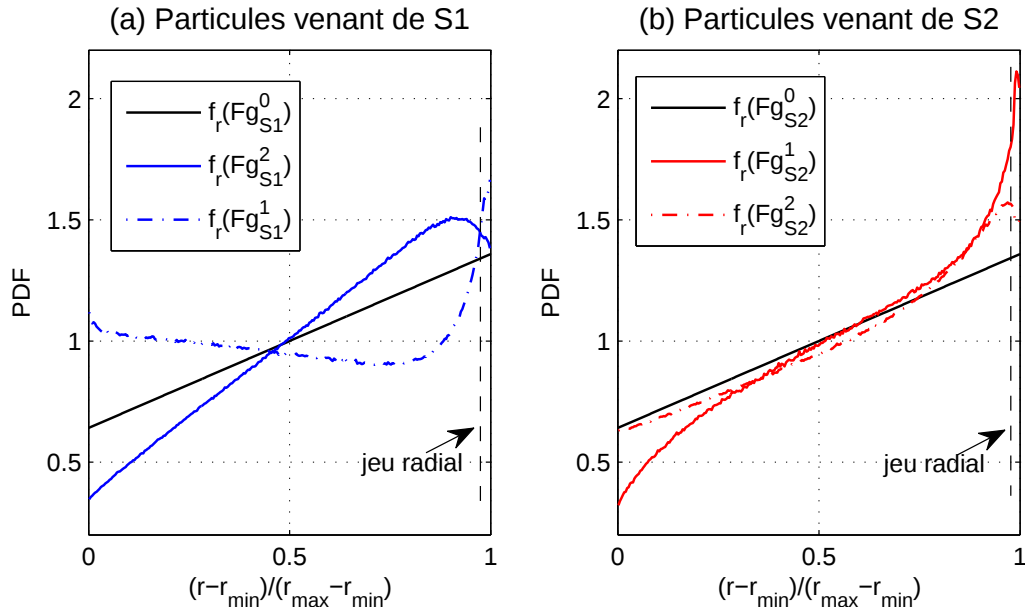


FIGURE 4.18 – Distribution de la position radiale des différents flux de particules

Dans la figure 4.18.a, l'allure de la courbe $f_r(Fg_{S1}^2)$ (en trait plein bleu) indique que les particules transmises de $S1$ à $S2$ se concentrent vers la zone à plus grand rayon sur la surface $S2$. La concentration des particules augmente avec le rayon avant de diminuer vers l'extrémité de la pale en raison de la présence du carter qui est fixe. Au contraire des particules transmises, les particules rétrodiffusées dont la distribution est représentée par la courbe $f_r(Fg_{S1}^1)$ présentent une concentration croissante vers les petits rayons (moyeu). On peut en déduire que, pour les particules se situant à l'amont du rotor, le pompage du gaz se produit vers le carter (grand diamètre) et la fuite du gaz se produit vers le moyeu (petit diamètre).

En revanche, pour les particules venant de l'aval du rotor, on n'observe pas cette différence de comportement entre les particules transmises et celles qui sont rétrodiffusées. En effet, la figure 4.18.b (courbes rouges) montre que ces particules se concentrent toujours vers le carter, mais avec une concentration qui est beaucoup plus forte pour les particules transmises que pour les particules rétrodiffusées.

Par ailleurs, le mécanisme de compression peut être expliqué par le changement de distribution de la vitesse axiale comme l'illustre la figure 4.19. Dans cette figure l'abscisse est la vitesse axiale adimensionnée par la vitesse la plus probable. Après passage dans le rotor, les particules transmises de $S1$ à $S2$ représentées par la courbe bleue pleine, présentent une distribution décalée vers la droite. Ceci signifie qu'elles ont des vitesses plus élevées que celles de la distribution de Maxwell (courbe noire). Donc, l'écoulement de gaz dans le

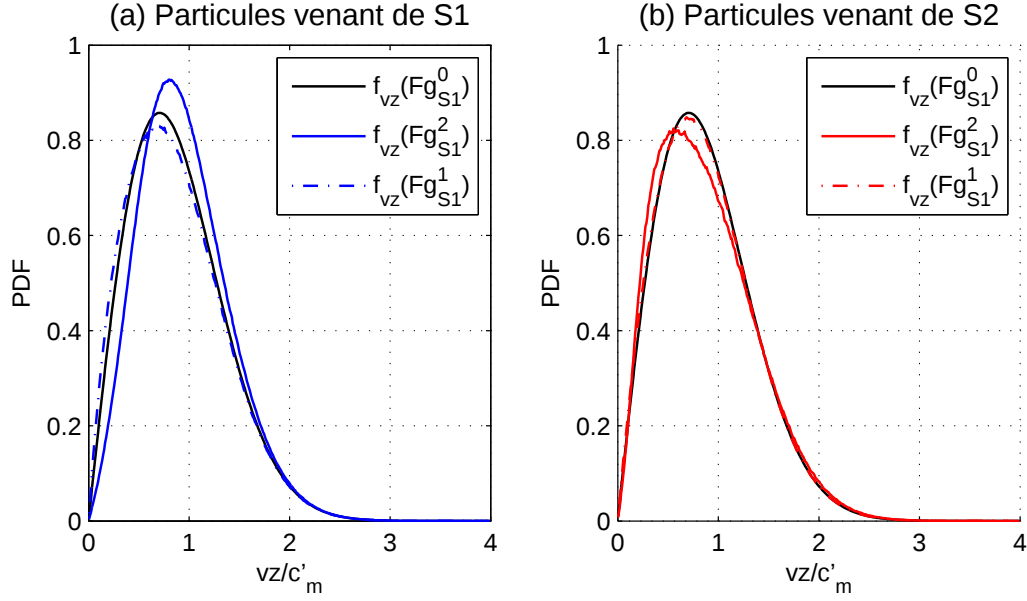


FIGURE 4.19 – Distribution de la vitesse axiale des différents flux de particules

sens de pompage est favorisé. En revanche, les particules transmises de $S2$ à $S1$ représentées par la courbe rouge pleine, ont une distribution décalée vers la gauche c'est-à-dire des vitesses plus faibles. Donc, l'écoulement de fuite est défavorisé. Le mécanisme de pompage peut être expliqué par les différents effets créés par la rotation des pales sur la distribution de la vitesse axiale des particules venant respectivement de l'amont et de l'aval du rotor. Par contre, comme la distribution des particules rétrodiffusées représentées par les courbes pointillées reste proche de la distribution de Maxwell, celles-ci ne contribuent quasiment pas au pompage.

La figure 4.20 illustre la distribution des vitesses ortho-radiales des différents flux de particules. Elle montre la façon dont les particules sont accélérées par la rotation des pales. Dans cette figure, on peut observer que la fonction de distribution de tous les flux se déplace vers la droite, à part celle de $Fg(S1)^2$. Cette particularité peut être interprétée par le fait qu'une bonne partie des particules du flux $Fg(S1)^2$ traverse le rotor sans être frappées par les pales; elles conservent donc leur distribution originale soit celle de Maxwell. En revanche, les particules qui sont frappées par les pales vont avoir des vitesses augmentées, ce qui explique le déplacement important de la courbe bleue en trait mixte dans la zone à grande vitesse.

4.4.1 Étude de sensibilité à la vitesse de rotation

Comme le mouvement de rotation des pales est à l'origine de l'effet de compression du rotor, l'étude de l'influence de la vitesse de rotation sur les distributions de la position et la vitesse des particules permet de mieux comprendre le principe de pompage. L'étude de sensibilité à la vitesse de rotation est réalisée avec une vitesse qui varie entre $10^4 tr/min$ et $10^5 tr/min$ par intervalle de $10^4 tr/min$ ou $2 \times 10^4 tr/min$, soit un paramètre de similitude C pris au rayon quadratique moyen compris entre 0.25 et 2.5.

La figure 4.21 illustre l'évolution de la distribution de la position radiale pour les flux de particules Fg^2_{S1} et Fg^1_{S1} en fonction de la vitesse de rotation du rotor. Les courbes

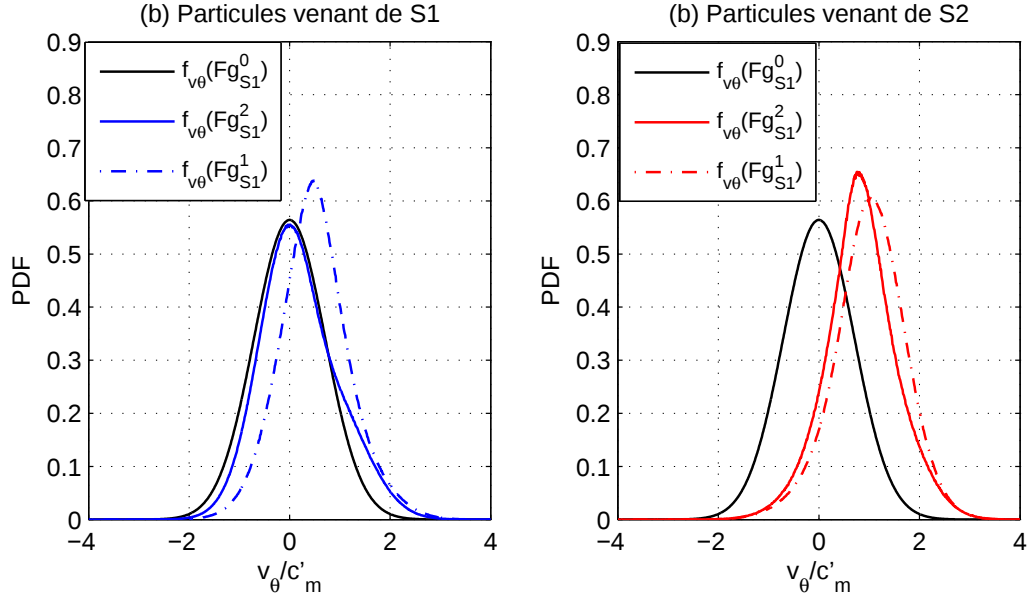


FIGURE 4.20 – Distribution de la vitesse ortho-radiale des différents flux de particules

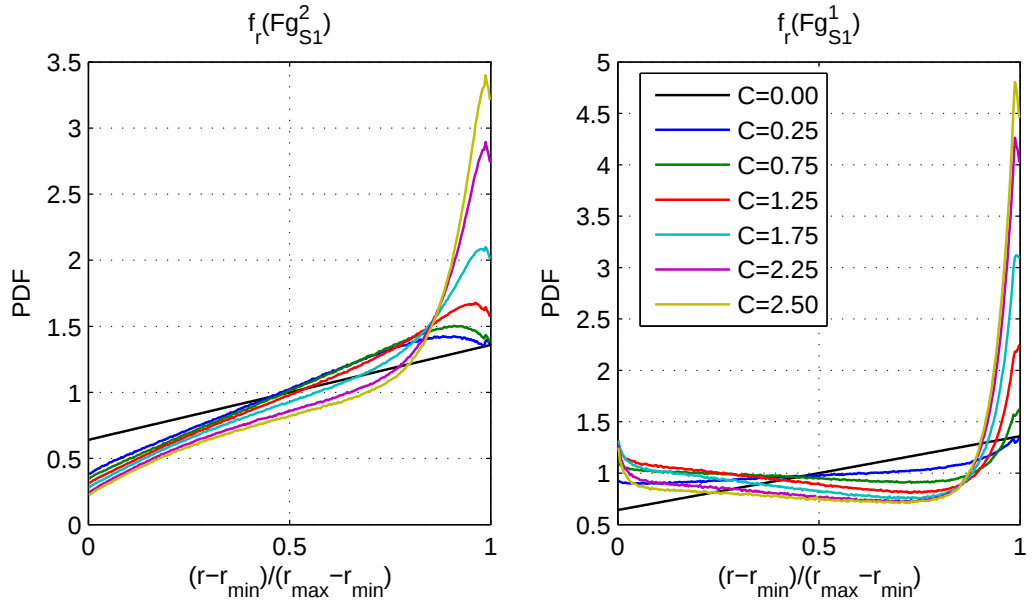


FIGURE 4.21 – Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction de la vitesse de rotation

montrent que les particules du flux Fg_{S1}^2 se concentrent de plus en plus vers le carter avec l'augmentation de la vitesse de rotation. Pour les particules du flux Fg_{S1}^1 , l'augmentation de la vitesse de rotation entraîne une augmentation des concentrations à la fois vers le carter et le moyeu tandis que la concentration diminue vers le milieu des pales.

La figure 4.23 illustre l'évolution de la distribution de la vitesse axiale pour les flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation du rotor. Le flux de particules Fg_{S1}^2 , qui représente le flux de gaz pompé, voit sa fonction de distribution se déplacer systématiquement vers la droite avec l'accroissement de vitesse. Le flux de particules Fg_{S2}^1 ,

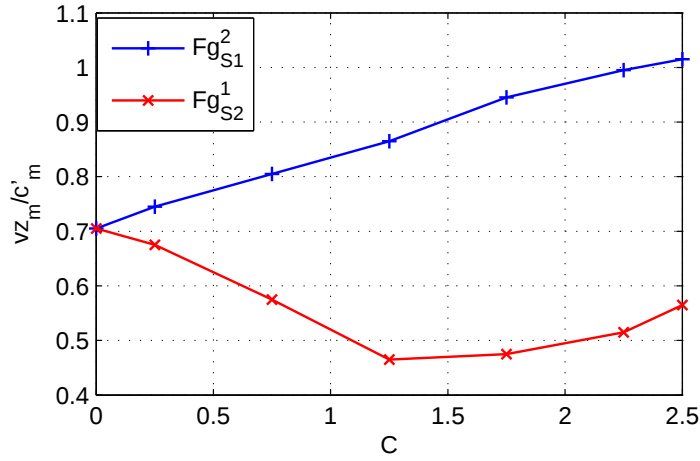


FIGURE 4.22 – Evolution de la vitesse verticale la plus probable des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation

qui représente le flux de fuite, voit sa fonction de distribution qui se déplace d'abord vers la gauche puis vers la droite avec l'augmentation de vitesse. En représentant la vitesse la plus probable dans ces courbes, la figure 4.22 montre que la vitesse la plus probable du flux Fg_{S1}^2 augmente presque linéairement en fonction de la vitesse de rotation, alors que celle du flux Fg_{S1}^2 présente un minimum aux vitesses intermédiaires vers $C = 1.25$.

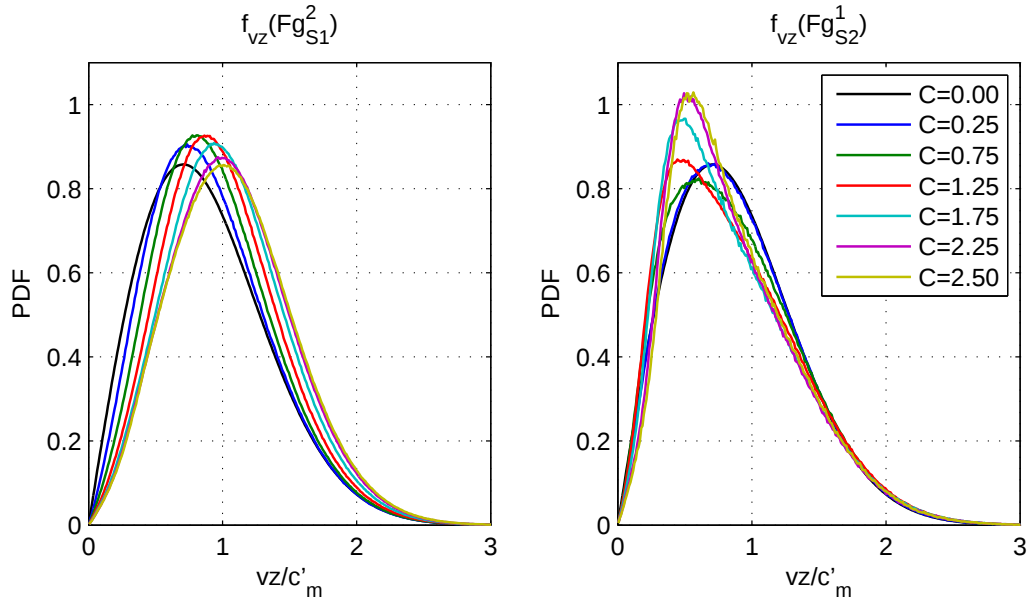


FIGURE 4.23 – Evolution de la distribution de la vitesse verticale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation

La figure 4.24 illustre l'évolution de la distribution de la vitesse ortho-radiale pour les flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation du rotor. Les courbes Fg_{S1}^2 montrent que, lorsque la vitesse de rotation est faible, la distribution de vitesse ortho-radiale reste proche de la distribution de Maxwell car une bonne partie des particules traversent le rotor sans être frappées par les pales. Lorsque la vitesse de rotation devient plus élevée, l'impact des particules sur les pales engendre une population de particules ayant une distribution gaussienne de vitesse dont la moyenne est proche de la vitesse de

déplacement moyenne de la pale (qui est inférieure à C car C est pris au rayon quadratique moyen). Dans les courbes Fg_{S1}^2 , les fonctions de distribution se déplacent vers la droite en conservant la forme gaussienne lorsque la vitesse de rotation est relativement faible ($C < 1.25$). Lorsque $C \approx 1.25$, un pic de vitesse plus probable se crée autour de $C = 0$. Il correspond au minimum observé pour la vitesse axiale dans la figure 4.23.

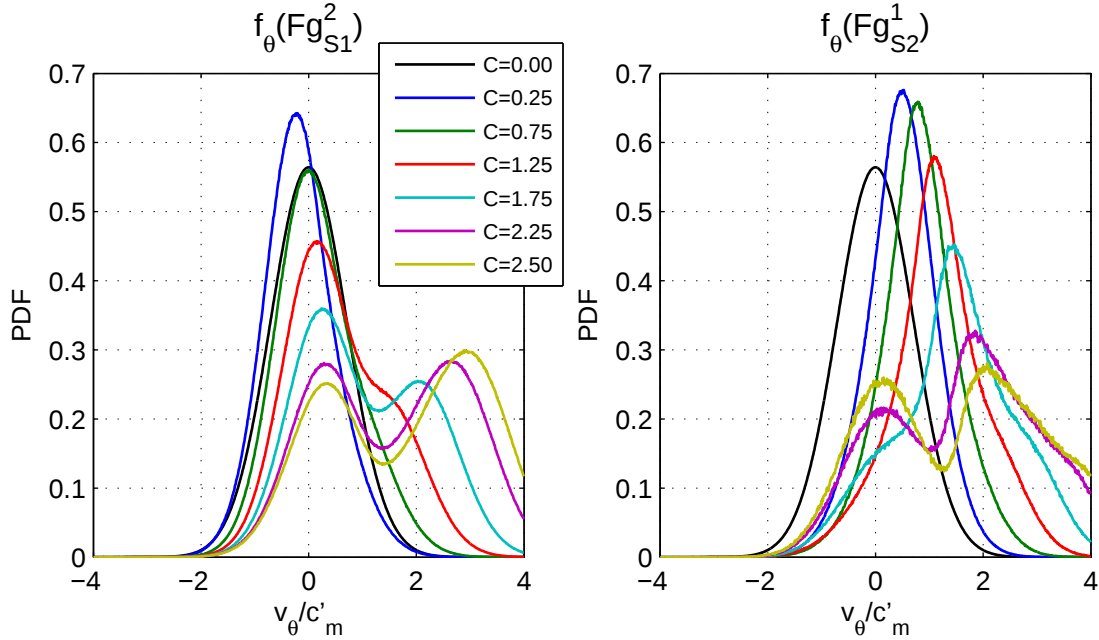


FIGURE 4.24 – Evolution de la distribution de la vitesse ortho-radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation

4.4.2 Étude de sensibilité au jeu radial

L'étude de sensibilité au jeu radial a été réalisée avec un jeu radial, entre l'extrémité de la pale et le carter, qui varie entre 1 mm et 5 mm par pas de 1 mm.

La figure 4.25 illustre l'évolution de la performance du rotor en fonction du jeu radial. On peut observer que les quantités $M_{12} - M_{21}$ et M_{12}/M_{21} , représentatives respectivement de la vitesse de pompage et du taux de compression, décroissent linéairement lorsque le jeu radial augmente. La baisse du taux de compression est quasiment deux fois plus rapide que celle de la vitesse de pompage. Lorsque le jeu radial augmente de 400%, la vitesse de pompage baisse de 10% et le taux de compression baisse d'environ 20%. M_{12} étant relativement stable, la baisse de $M_{12} - M_{21}$ et de M_{12}/M_{21} est due principalement à l'augmentation presque constante de M_{21} en fonction du jeu radial.

La figure 4.26 illustre l'évolution de la distribution de la position radiale des particules en fonction du jeu radial. Ces courbes montrent que l'influence du jeu radial est plus forte sur les particules venant de la section $S1$ que sur celles venant de la section $S2$. Ceci s'explique par le fait que l'augmentation de M_{21} , avec l'augmentation du jeu radial, est plus forte que la baisse de M_{12} .

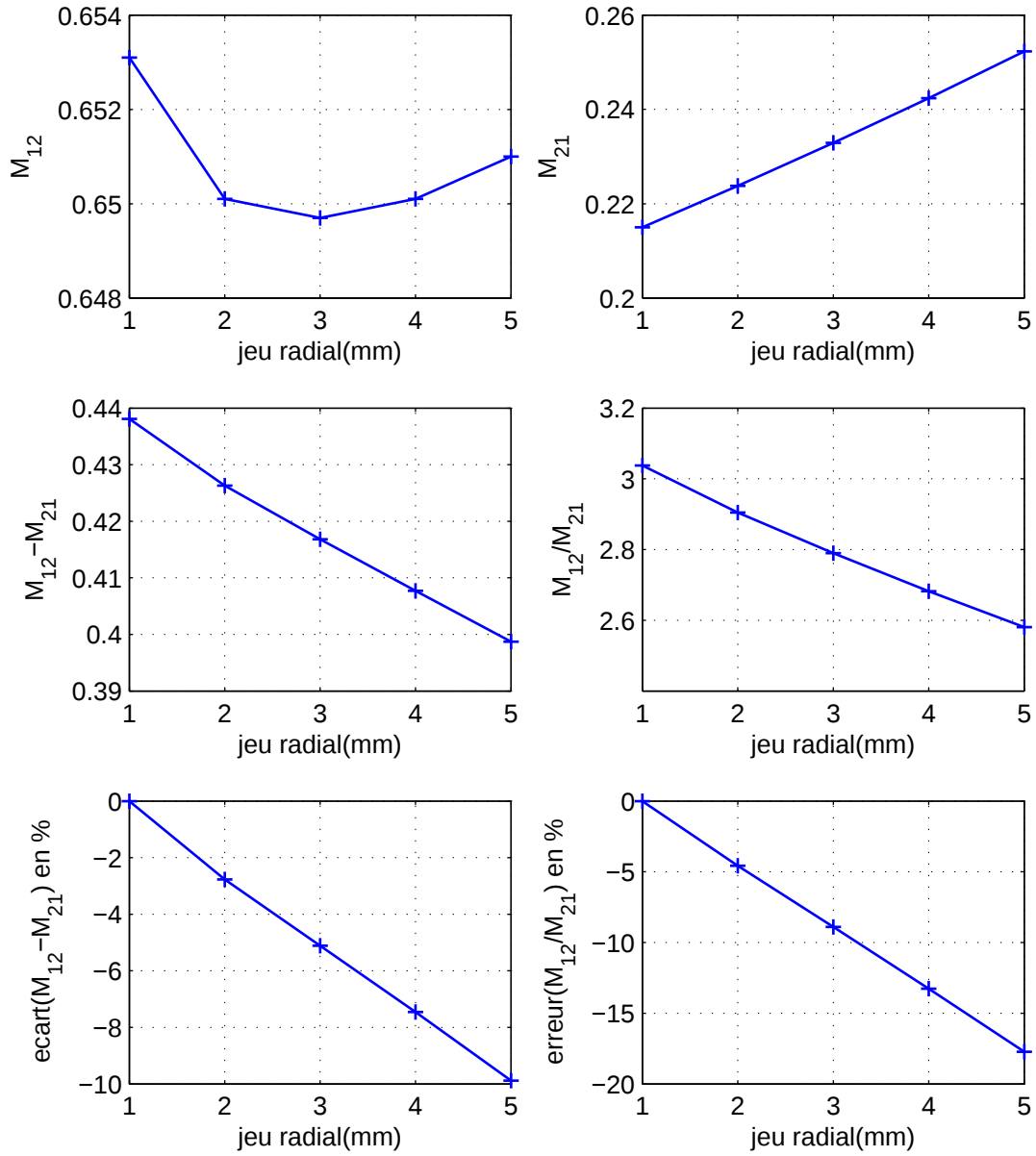


FIGURE 4.25 – Évolution de la performance d'un étage rotor en fonction du jeu radial

4.4.3 Effet de couplage rotor/stator

L'étude de l'effet de couplage rotor/stator est réalisée en faisant varier le nombre d'étages d'un seul étage rotor à quatre étages rotor et stator, ce qui correspond à quatre pompes nommées respectivement $P1$, $P2$, $P3$ et $P4$. La géométrie de chaque étage est identique à celle de l'étude de sensibilité du jeu avec un jeu radial de 1 mm . La distribution de la position et la vitesse des particules est étudiée uniquement sur la surface d'entrée et de sortie de chaque pompe.

La figure 4.27 illustre l'évolution de la distribution de la position radiale des particules

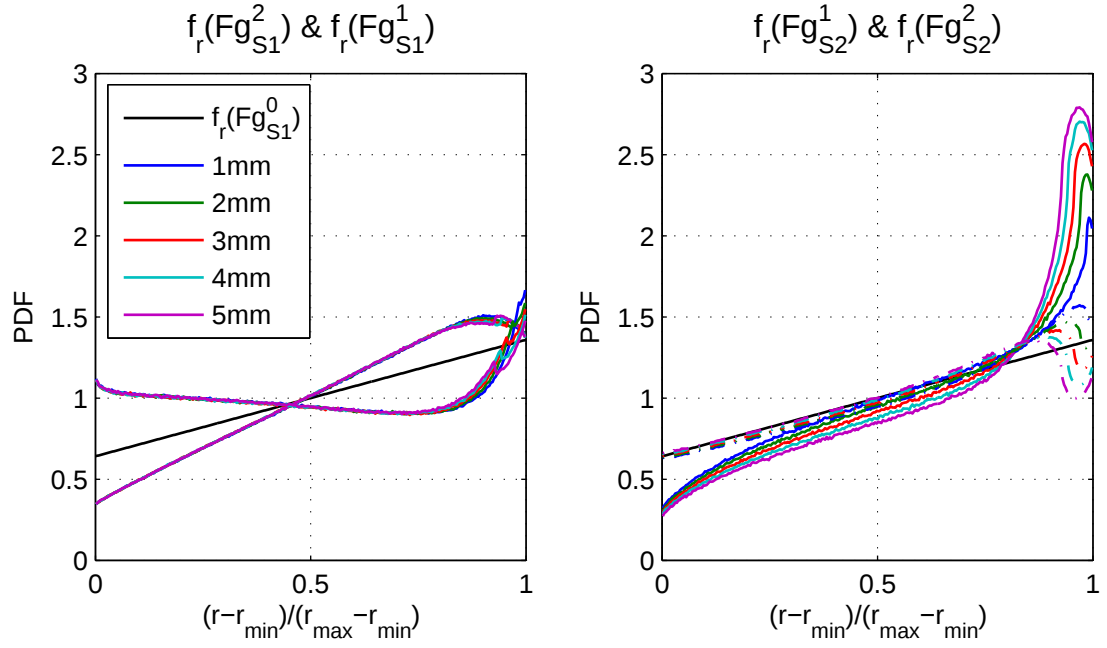


FIGURE 4.26 – Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction du jeu radial

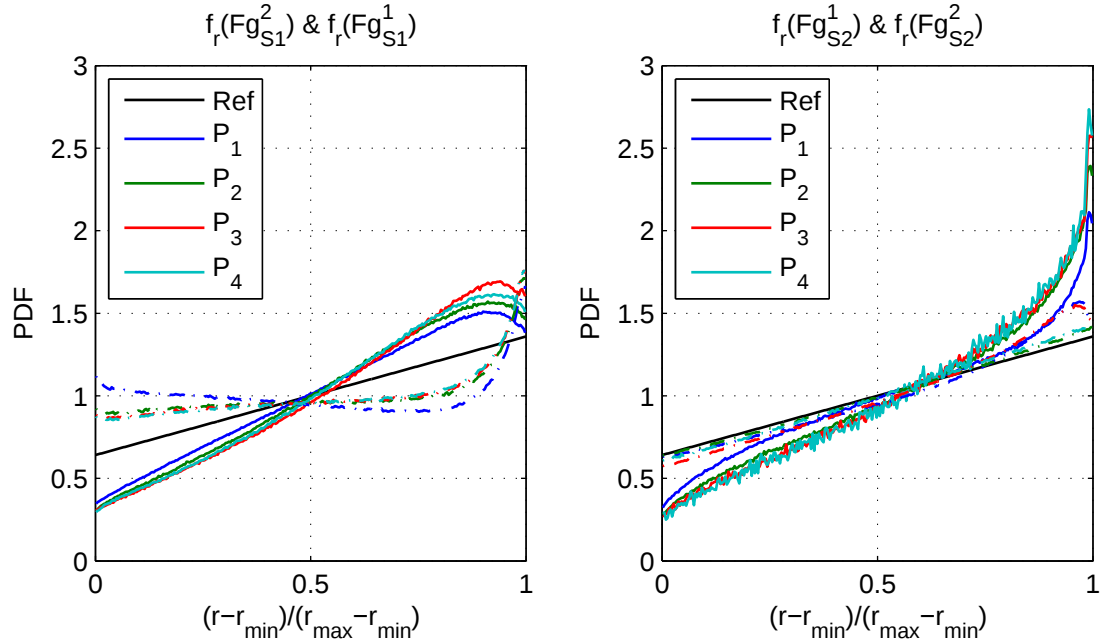


FIGURE 4.27 – Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction du nombre d'étages.

en fonction du nombre d'étages. Les courbes des cas $P2$ et $P4$ montrent que le stator n'est pas capable de ramener la distribution spatiale des particules à une distribution uniforme. Cependant il permet de réduire la concentration des particules vers le carter. Cette tendance s'observe notamment en comparant les courbes des cas $P4$ et $P3$ dans le graphique de gauche ($f_r(Fg_{S1}^2)$ & $f_r(Fg_{S1}^1)$). La figure 4.28 illustre la distribution de la vitesse ortho-radiale. Elle montre que l'accélération de l'écoulement par le rotor et le redressement de l'écoulement par le stator ne sont que très partiels. Pour les particules sortant du rotor, seule une faible proportion est accélérée comme le montre la partie droite des courbes $f_{v\theta}(Fg_{S1}^2)$ des cas $P1$ et $P3$. Pour les particules sortant du stator, dont la situation est illustrée en particulier par les courbes $f_{v\theta}(Fg_{S1}^2)$ des cas $P2$ et $P4$, la valeur moyenne la plus probable est bien supérieure à 0 (environ 0.5) et s'éloigne fortement du cas référence (courbe noire).

Ces résultats, obtenus grâce à l'outil TPMC 3D, mettent en lumière les faiblesses intrinsèques au code 2.5Dc puisque celui-ci est fondé sur l'hypothèse que le rotor et le stator participent également au pompage. Il ressort des simulations TPMC 3D que dans une pompe turbo-moléculaire multi-étagée, le rotor contribue beaucoup plus à la compression du gaz que le stator. De plus le rôle redresseur de ce dernier n'est que très partiel. La méthode TPMC 3D constitue donc un outil d'analyse indispensable aussi bien pour prendre en compte des aspects tridimensionnels de flux de particules que des effets géométriques comme le jeu en extrémité de pale. Les résultats présentés ici constituent une illustration, qui nous semble prometteuse, du potentiel de cette méthode TPMC 3D et démontrent également le caractère opérationnel de sa mise en œuvre à l'issue de cette thèse.

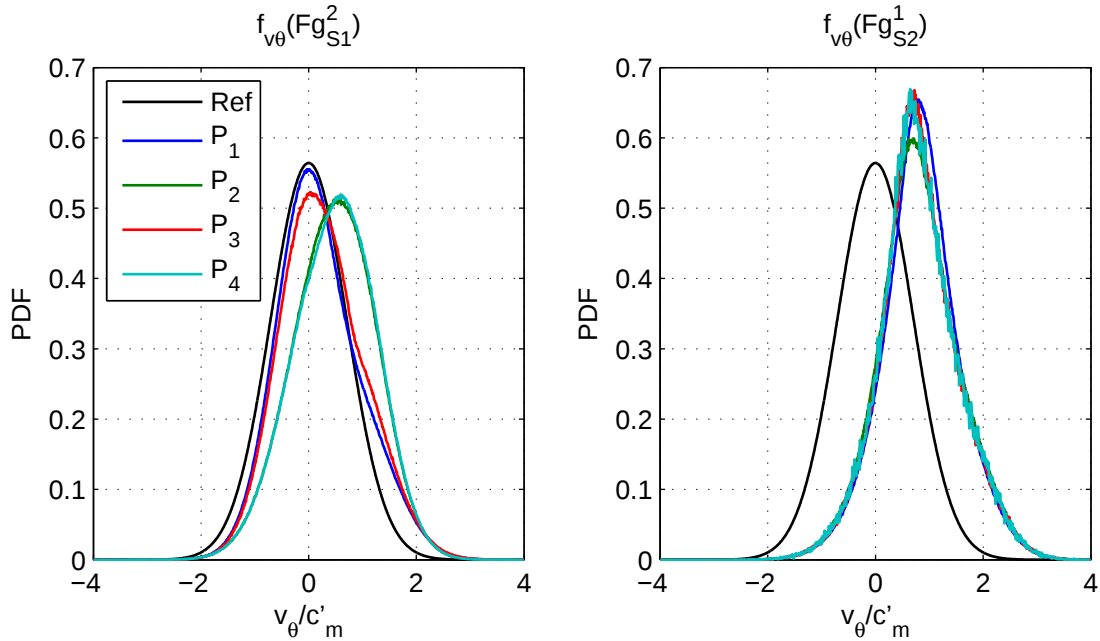


FIGURE 4.28 – Evolution de la distribution de la vitesse ortho-radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction du nombre d'étages

Chapitre 5

Application de DSMC 2D au régime de transition

La méthode TPMC, malgré sa pertinence et son efficacité pour prédire la performance d'une pompe en régime moléculaire libre, ne peut en aucun cas modéliser les points de fonctionnement en régime de transition ou en régime continu, où les collisions intermoléculaires jouent un rôle primordial dans la prédiction correcte de l'écoulement du gaz. Par rapport à une courbe caractéristique d'une pompe TMP (que ce soit une courbe de vitesse de pompage ou une courbe de taux de compression, cf.1.2), la méthode TPMC ne permet de prédire que la partie gauche de la courbe (soit la partie plateau) pour laquelle, aux plus faibles valeurs de la pression d'aspiration, le régime est effectivement moléculaire libre. La chute de vitesse de pompage ou de taux de compression observée en partie droite de ces courbes, pour les valeurs plus élevées de la pression d'aspiration, est essentiellement due aux effets des collisions intermoléculaires que la méthode TPMC ne prend pas en compte.

Comme nous avons eu l'occasion de le préciser au chapitre 2 du mémoire, dans les sections 2.1.3 et 2.2.3, la méthode DSMC constitue une stratégie attractive pour modéliser le régime de transition. De plus, dans la mesure où nous avons développé une approche TPMC bien adaptée au calcul de pompes industrielles, nous comptons réutiliser dans le cadre de l'approche DSMC une bonne partie des outils implémentés dans le code TPMC, notamment le calcul d'intersection entre la trajectoire d'une particule et les parois. Conceptuellement, la difficulté nouvelle majeure introduite par le code DSMC par rapport au code TPMC est la prise en compte des collisions intermoléculaires. Nous allons donc tout particulièrement détailler ce point dans les deux premières sections de ce chapitre. Nous verrons en particulier que la complexité introduite par le traitement des collisions intermoléculaires a limité les développements effectués dans le cadre de cette thèse à des cas bidimensionnels. Nous présenterons ensuite de premiers résultats de simulation à débit nul, dont nous montrerons qu'ils sont encourageants et nous incitent à poursuivre les développements DSMC entamés dans cette thèse. Enfin, nous concluerons ce chapitre en soulignant les difficultés rencontrées dans la définition de conditions aux limites adaptées pour une simulation à débit non-nul.

5.1 Principes de la méthode DSMC

L'hypothèse essentielle de la méthode DSMC est la possibilité de découpler le déplacement des molécules de la collision intermoléculaire sur un laps de temps très court, qui corres-

pond au pas de temps de la simulation. Durant chaque pas de temps Δt d'une simulation DSMC, on doit donc effectuer deux opérations :

- le déplacement à vitesse constante (propre à chaque molécule) de toutes les molécules sur une durée Δt . Dans le cas où une collision entre les molécules et la paroi intervient dans cet intervalle de temps, la vitesse des molécules concernées doit être recalculée avec la loi de réémission.
- le calcul d'un nombre représentatif de collisions intermoléculaires, nombre adapté au choix du pas de temps Δt .

La figure 5.1 synthétise l'algorithme associé à la méthode DSMC pour le calcul d'un écoulement stationnaire.

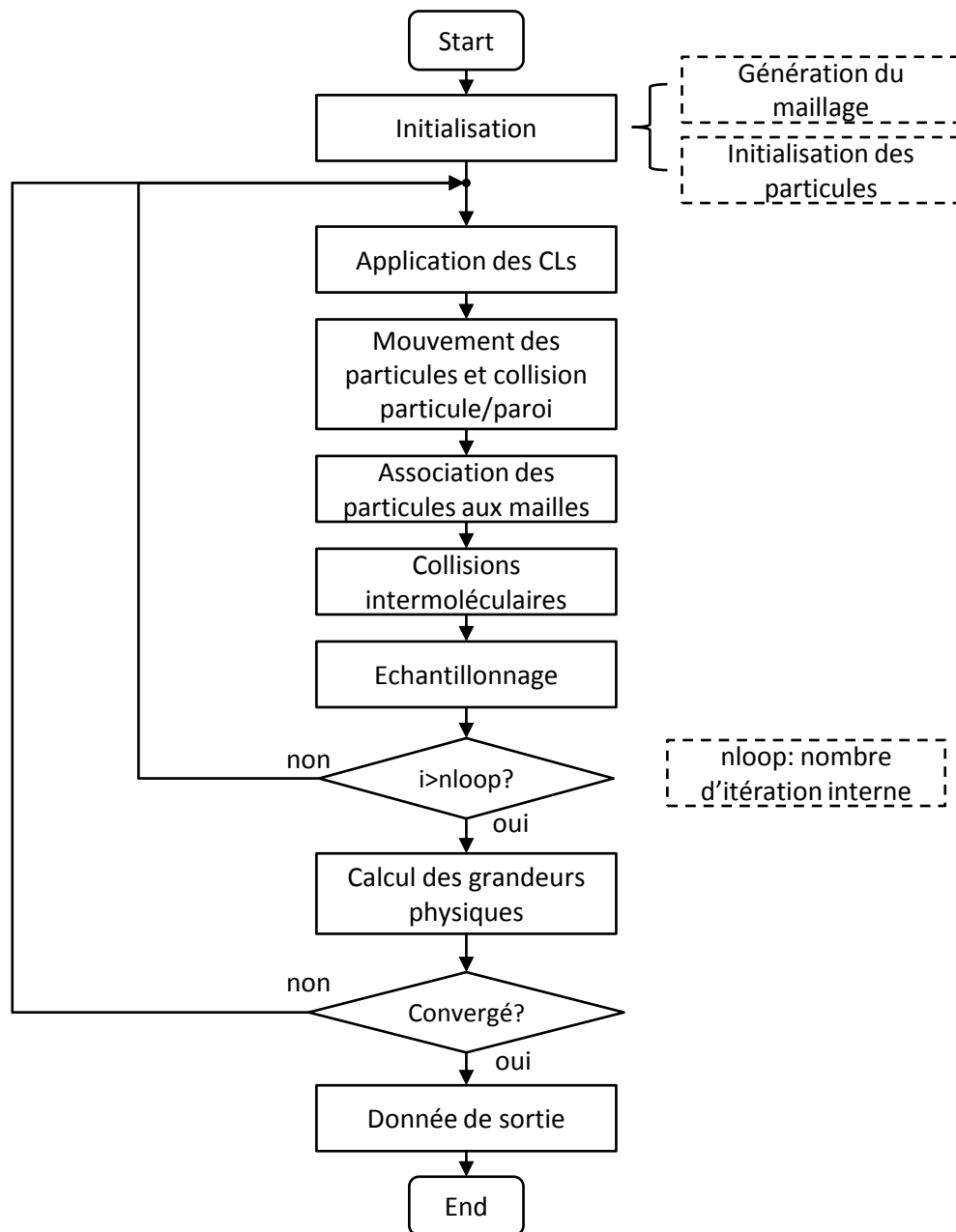


FIGURE 5.1 – Algorithme de la méthode DSMC

Par rapport à la méthode TPMC, un maillage de l'ensemble du domaine de calcul (donc volumique pour un écoulement 3D) est nécessaire à la méthode DSMC. Les cellules localisées dans une même cellule du maillage sont utilisées pour appliquer les opérations stochastiques qui modélisent les collisions intermoléculaires. L'expérience montre que les résultats d'une simulation DSMC sont indépendants de la valeur de Δt à condition que ce pas de temps de simulation soit plus court que le temps de collision moyen local du gaz $\bar{t}_{collision}$ qui est égal à λ/c'_m . Afin de garantir cette condition, la taille maximale d_{max} d'une cellule ne doit pas dépasser le libre parcours moyen λ du gaz et le pas de temps est fixé de telle sorte qu'une particule se déplaçant à la vitesse la plus probable ne sort pas d'une maille pendant l'intervalle de temps Δt .

Même si l'hypothèse de découplage déplacement/collision ne semble pas vraiment réaliste, la méthode de DSMC reste néanmoins fiable car elle permet de reproduire la fréquence de collision réelle du gaz par des collisions entre les particules de simulation. Selon la théorie cinétique des gaz, dans le cas d'un gaz dilué, le nombre de collisions se produisant dans une cellule de volume ΔV pendant un pas de temps Δt peut être estimé par l'équation (5.1) :

$$N_C = \frac{1}{2} n^2 \overline{\sigma_T c_r} \Delta t V_C \quad (5.1)$$

où n est la densité de molécules et $\overline{\sigma_T c_r}$ est la moyenne des produits entre la section efficace σ_T et la vitesse relative c_r de toutes les paires de molécules possibles qui se trouvent à l'intérieur de la cellule ayant un volume V_C .

Selon Bird [9], la probabilité pour que deux particules qui se trouvent à l'intérieur d'une cellule entrent en collision doit être égale à $P(collision)$ donné par la relation (5.2) :

$$\frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{max}} > R_d \quad (5.2)$$

où R_d est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 ; la collision a lieu si l'inégalité est vérifiée et n'a pas lieu sinon. Dans cette équation, la quantité $\sigma_T c_r$ est calculée avec une paire de particules tirées aléatoirement et $(\sigma_T c_r)_{max}$ est la valeur maximale parmi toutes les valeurs de $\sigma_T c_r$ existantes à l'intérieur de la cellule (la valeur $(\sigma_T c_r)_{max}$ doit être actualisée à chaque pas de temps de la simulation). Pour générer numériquement cette loi de distribution des collisions entre les particules soit $P(collision)$, la méthode dite d'acceptation / rejet peut être utilisée. La procédure de collision concernant une cellule consiste à répéter ces deux étapes, soit :

1. le tirage aléatoire de deux particules qui se trouvent à l'intérieur de la cellule
2. la collision (ou pas) selon la loi de distribution générée par la méthode d'acceptation / rejet.

jusqu'à ce que le nombre de collisions effectuées atteigne N_C donné par l'équation (5.1).

La méthode présentée ci-dessus implique que le temps de calcul des collisions intermoléculaires à l'intérieur d'une cellule (notamment lié au calcul du N_C) est proportionnel au carré du nombre de particules qui se trouvent à l'intérieur de cette cellule.

Afin de réduire le temps de calcul d'une cellule tout en préservant l'estimation de la fréquence de collision d'une cellule, trois schémas sont proposés dans la littérature : « TC » (Time Counter), « NTC » et « MFS » (Majorant Frequency Scheme)

Pour éviter de calculer la quantité N_C d'une cellule, le schéma « TC » définit un paramètre de temps t_c . La démarche consiste alors à effectuer un certain nombre de collisions représentatives dont chaque collision réalisée fait avancer t_c d'une durée égale à :

$$\Delta t_c = \left[\frac{1}{2} n N \sigma_T c_r \right]^{-1} \quad (5.3)$$

avec N le nombre de particules de simulation qui se trouvent à l'intérieur de la cellule. Le nombre de collisions est considéré comme suffisant lorsque Δt_c dépasse le pas de temps de la simulation, soit Δt . Ce schéma, proposé par Bird, permet de réduire le temps de calcul d'une cellule à une valeur proportionnelle au nombre de particules à l'intérieur de celle-ci (au lieu du carré de ce nombre dans l'approche de base), tout en préservant la fréquence de collision (une démonstration analytique est proposée par Bird en 1976). Cependant, le schéma « TC » peut créer des problèmes lorsque une collision à faible probabilité se produit, qui peut alors faire avancer le compteur de temps de plusieurs pas de temps de simulation.

Le schéma « NTC » est proposé par Bird en 1986 comme alternative au schéma « TC ». Sa démarche consiste à effectuer le test de collision uniquement sur une population réduite parmi toutes les paires de particules possibles dans une cellule, dont le nombre est calculé par :

$$N_C^{NTC} = \frac{1}{2} N \bar{N} F_N (\sigma_{TCr})_{max} \Delta t / V_C \quad (5.4)$$

avec la probabilité de collision donnée par l'équation (5.2) pour chaque paire de particules de simulation. F_N est le nombre de molécules réelles représentées par une particule de simulation (qui est en général très grand, de l'ordre de 10^{20}) et $\bar{N}$ est le nombre de particules de simulation dans une cellule, moyenné dans le temps. Ce schéma permet non seulement d'éviter le problème créé par des collisions à faible probabilité dans le schéma « TC », mais aussi de vectoriser la procédure de collision en connaissant *a priori* le nombre exact de tests de collisions à effectuer. La valeur de $(\sigma_{TCr})_{max}$ peut être fixée de façon approximative à une valeur élevée (mais raisonnable) au départ et ensuite être mise à jour à chaque itération.

Cependant, le schéma « NTC » peut devenir inefficace lorsqu'il y a très peu de particules dans une cellule. Dans le cas extrême où il y a une seule particule dans une cellule, il n'est pas possible d'effectuer des collisions même si $N_C^{NTC} > 1$. Afin de résoudre ce problème, le schéma « MFS » est proposé en supposant *a priori* que la variation de $\bar{N}$ suit la loi de Poisson. Avec cette hypothèse, l'analyse montre que $N\bar{N}$ peut être remplacé par $N(N-1)$, *i.e.* le nombre de tests de collisions dans le schéma « MFS » est égal à :

$$N_C^{MFS} = \frac{1}{2} N(N-1) F_N (\sigma_{TCr})_{max} \Delta t / V_C \quad (5.5)$$

Pour réaliser les collisions intermoléculaires, une fois leur nombre déterminé, différents modèles de collision ont été proposés dans la littérature. En 1983, Bird a introduit le concept de modèle de sphère rigide variable « VHS » (Variable Hard Sphere), qui s'appuie sur un modèle de sphère dure « HS », mais contrairement à ce dernier, le diamètre de la zone effective de collision dépend de la vitesse relative des molécules. En 1991, Koura et Matsumoto ont affiné le modèle « VHS » en introduisant la notion de sphère molle variable « VSS » (Variable Soft Sphere). Par rapport au modèle « VHS », « VSS » a ajouté la partie attractive de la force intermoléculaire dans le modèle (cf. 1.3.1). En 1992, Hassan et Hash ont développé le modèle de sphère dure généralisée « GHS » (Generalized Hard Sphere) qui permet de modéliser la partie attractive d'une façon plus précise en couplant le modèle « IPL » et celui de Lennard-Jones (cf. 1.3.1). Dans le contexte général de la modélisation des gaz raréfiés, le modèle « VHS » (Variable Hard Sphere) est le plus souvent utilisé car il est simple, efficace et souvent suffisamment précis ; c'est celui que nous retiendrons par la suite. Le modèle « VSS » est plus pertinent que « VHS » pour traiter les écoulement à haute température où l'effet de gaz réel n'est plus négligeable. Dans les écoulement à faible température, le modèle « GHS » est nécessaire pour mieux prendre en compte les forces attractives entre les molécules.

La dernière étape d’une approche DSMC est le passage des quantités microscopiques (vitesses des particules) aux grandeurs macroscopiques (vitesse de l’écoulement, température et pression) qui peuvent être définies dans chaque cellule du maillage (cf. 5.3).

5.2 Mise en œuvre d’un code DSMC 2D

Après avoir succinctement décrit dans la section précédente les principes de modélisation associés à la gestion des collisions intermoléculaires (méthode d’estimation du nombre de collisions à réaliser, modèle de collision proprement dit), nous nous proposons de détailler dans cette section les choix retenus dans le code DSMC (2D) développé dans le cadre de cette thèse. Nous nous consacrons plus précisément à la simulation des caractéristiques de pompage de l’étage rotor, à pales droites, présenté sur la figure 5.2. Cette configuration a été retenue d’une part pour sa relative simplicité de mise en oeuvre (à ce stade d’évaluation préliminaire du potentiel de DSMC 2D) et d’autre part car des résultats expérimentaux sont disponibles qui constitueront donc un point de référence pour nos calculs. Comme illustré sur la coupe radiale d’un étage rotor en partie droite de la figure 5.2, un seul passage inter-aubes est modélisé dans les simulations réalisées. Le domaine de calcul est donc délimité par quatre surfaces de type périodique (2 à l’amont et 2 à l’aval) et comporte deux demi-pales (extrados et intrados). Afin de simplifier le calcul de l’intersection entre les trajectoires des particules et les parois, l’ensemble de l’écoulement est considéré dans un référentiel qui se déplace à la même vitesse que celle des pales, similairement au choix retenu pour TPMC 3D.

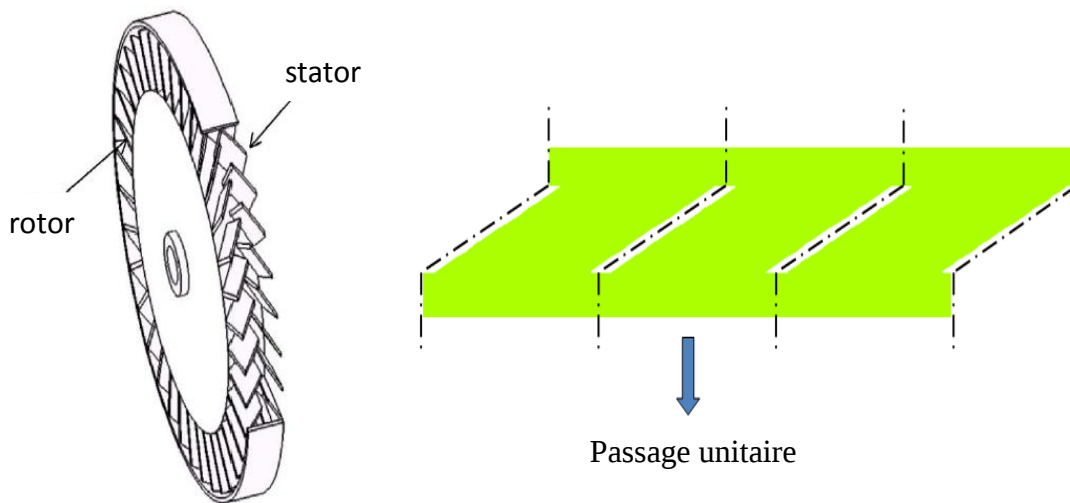


FIGURE 5.2 – Coupe radiale au rayon quadratique moyen d’un étage rotor pour une simulation DSMC 2D

Par rapport à une approche TPMC, une nouvelle étape importante dans la méthode DSMC est la création d’un maillage (surficiel dans le cas 2D étudié, volumique en 3D) dont chaque cellule servira de sous-domaine de l’espace dans lequel seront appliquées les collisions entre molécules présentes dans cette cellule. Les principes de l’approche DSMC stipulent que la taille d’une maille ne peut pas dépasser le libre parcours moyen mais ne donnent pas d’indication *a priori* sur une limite inférieure de taille de maille. L’intuition laisse penser qu’une réduction de la taille de maille peut améliorer la précision mais il faut

également éviter d'affiner le maillage d'une façon excessive car cela entraîne un surcoût de calcul inutile. Cette contradiction incite à chercher une taille de maille optimale qui permet de minimiser le temps de calcul tout en conservant la précision des résultats. Cependant, cela semble irréalisable en pratique car il existe rarement des écoulement où le libre parcours moyen ne varie pas en fonction des positions. Pour contourner ce problème, on peut réaliser dans un premier temps un maillage à taille variable avec une stratégie de raffinement local. Mais sans connaissance *a priori* des champs de pression et de température de l'écoulement, il est difficile de prévoir la variation nécessaire au maillage. Dans la littérature, on trouve une intéressante discussion par Bird [6] de l'intérêt d'un maillage auto-adaptatif utilisant le libre parcours moyen local de l'écoulement au cours de l'avancement de la simulation. Dans le cas d'une pompe TMP, cette idée est particulièrement intéressante car le taux de compression d'une TMP est en général très élevé et il est évidemment absurde d'appliquer partout la même taille de maille.

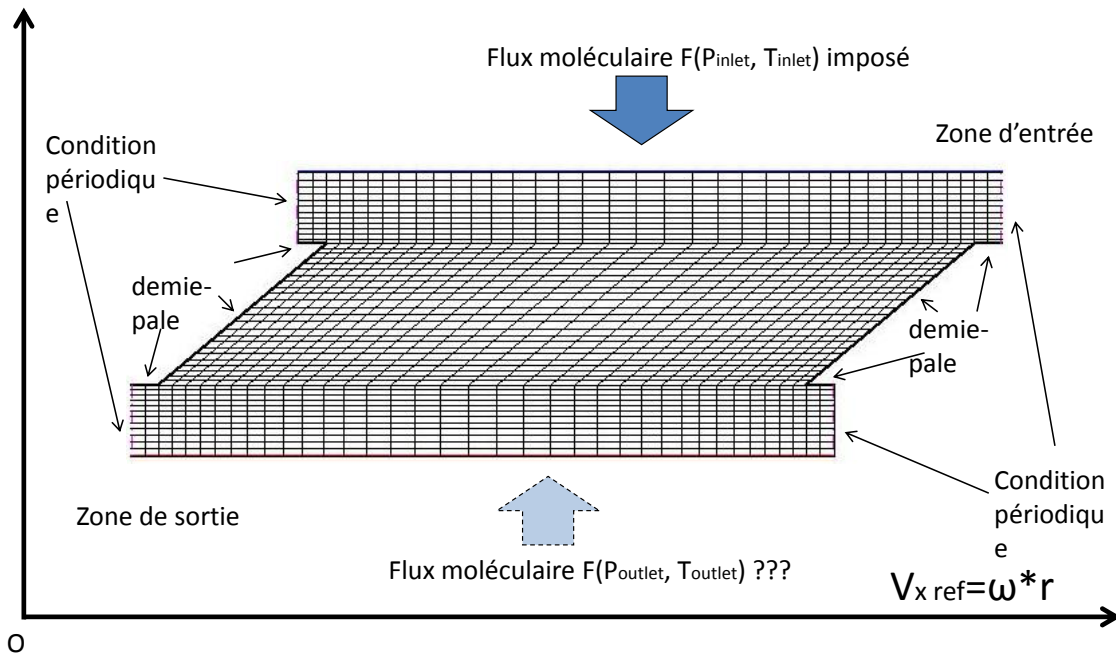


FIGURE 5.3 – Maillage et conditions aux limites d'une simulation DSMC d'un étage rotor

Maillage et indexation des particules

Dans le cas d'un rotor, par simplicité nous avons adopté un maillage structuré à taille uniforme. Ce choix est dû au fait que le calcul de l'indexation des particules de simulation par rapport au maillage est très rapide dans le cas d'un maillage structuré dont la topologie et la numérotation des mailles sont implicites. Comme l'illustre la figure 5.4, l'appartenance d'une particule à une maille peut être simplement déterminée par comparaison entre les coordonnées de la particule et les dimensions de la maille dans un maillage structuré¹. En revanche, dans un maillage non structuré, la localisation d'une particule par rapport aux cellules du maillage doit s'effectuer par des tests entre les coordonnées de la particule et la frontière de chacune des mailles qui existent dans le domaine de calcul - ce qui est nettement plus coûteux.

1. La démarche est un peu plus compliquée dans le cas d'un maillage à pas variable mais on peut tout de même calculer ix et iy par deux équations.

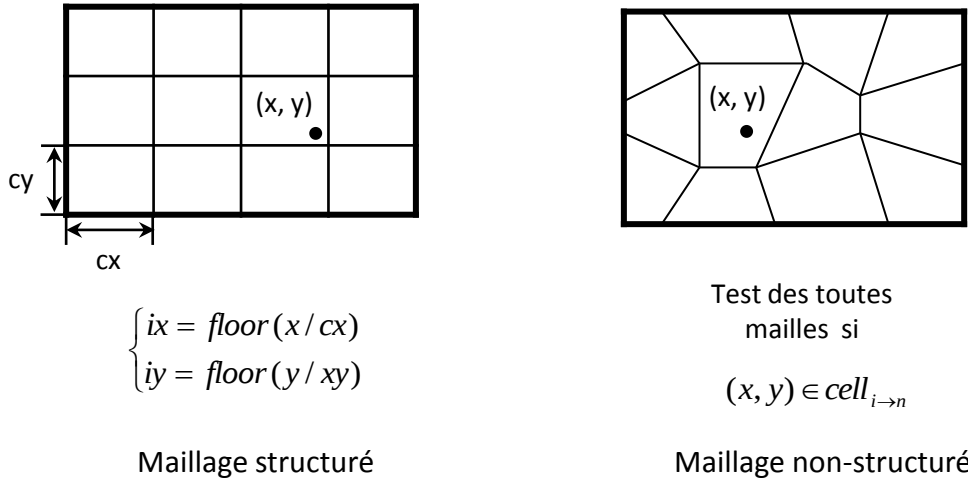


FIGURE 5.4 – Comparaison entre maillage structuré et maillage non-structuré pour la localisation des particules dans le maillage.

Calcul de l'intersection trajectoire/paroi

Contrairement au code TPMC 3D où le suivi de la trajectoire d'une particule est effectué de façon séquentielle (on suit une particule de l'entrée jusqu'à sa sortie, l'une après l'autre), le code DSMC utilise une méthode vectorielle pour suivre simultanément toutes les particules existantes. Cela permet d'accélérer le calcul considérablement puisque l'on a constaté un gain en temps de restitution de l'ordre de 10^2 . Cependant, il faut souligner que la mise en œuvre du calcul vectoriel bénéficie de l'existence de fonctions fournies dans le logiciel Matlab, support des développements effectués. Utiliser cette stratégie peut donc créer des difficultés en cas de besoin de reprogrammer le code dans un autre environnement (langage de programmation compilé) soit dans le but d'accélérer le calcul soit pour gagner en indépendance vis-à-vis d'un logiciel commercial.

Schéma de collision (MFS)

Le schéma de collision MFS (Majorant Frequency Scheme) a été utilisé compte tenu de ses avantages par rapport au schéma NTC (cf. [6] et également les succinctes explications précédentes).

Le modèle de collision VHS a été choisi pour calculer les vitesses des particules après les collisions intermoléculaires car l'écoulement considéré se trouve dans une plage de température classique, entre 20°C et 120°C , pour laquelle le modèle VHS semble suffisant à la modélisation des forces intermoléculaires.

Dans la version actuelle de DSMC 2D, la procédure de collisions n'est pas parallélisée à la fois faute de temps et de moyens techniques (de façon très prosaïque, un nombre suffisant de licences de calcul parallèle doit pouvoir être disponible), bien que le schéma MFS soit parfaitement parallélisable. Par conséquent, le calcul des collisions est l'étape la plus consommatrice de temps de CPU dans les simulations effectuées et représente environ 70% du temps de calcul à chaque itération.

5.3 Simulation à débit nul

La simulation se réalise dans un premier temps à débit nul et avec une température homogène sur toutes les surfaces. En imposant la pression d'aspiration P_{inlet} et la température d'entrée, le nombre de molécules qui entrent par la frontière d'entrée par unité de surface et par unité de temps peut être calculé à partir de l'équation (3.3), soit :

$$\dot{N}_{inlet}^{in} = \frac{P_{inlet} c'_m}{2k_B T_{inlet} \sqrt{p_i}} \quad (5.6)$$

En notant S_{inlet} la section d'entrée et F_N le nombre de molécules réelles que représente une particule de simulation, le nombre de particules de simulation qui entrent dans le domaine de calcul par l'entrée pendant un pas de temps Δt est donc tel que :

$$N_{inlet}^{in} = \frac{P_{inlet} c'_m F_N}{2k_B T_{inlet} \sqrt{p_i}} S_{inlet} \Delta t \quad (5.7)$$

A la sortie, le nombre N_{outlet}^{in} de particules qui entrent est imposé à la même valeur que le nombre N_{outlet}^{out} de particules qui sortent à chaque itération afin d'assurer un débit nul².

Dans une simulation à débit nul, aucune des conditions limites imposées ne nécessite d'être actualisée. Durant les itérations du calcul, les nombres de particules qui sortent de la surface d'entrée et de sortie d'un rotor ne restent pas constants mais suivent une loi gaussienne comme illustré sur la figure 5.5. La figure 5.6 illustre l'évolution des quantités

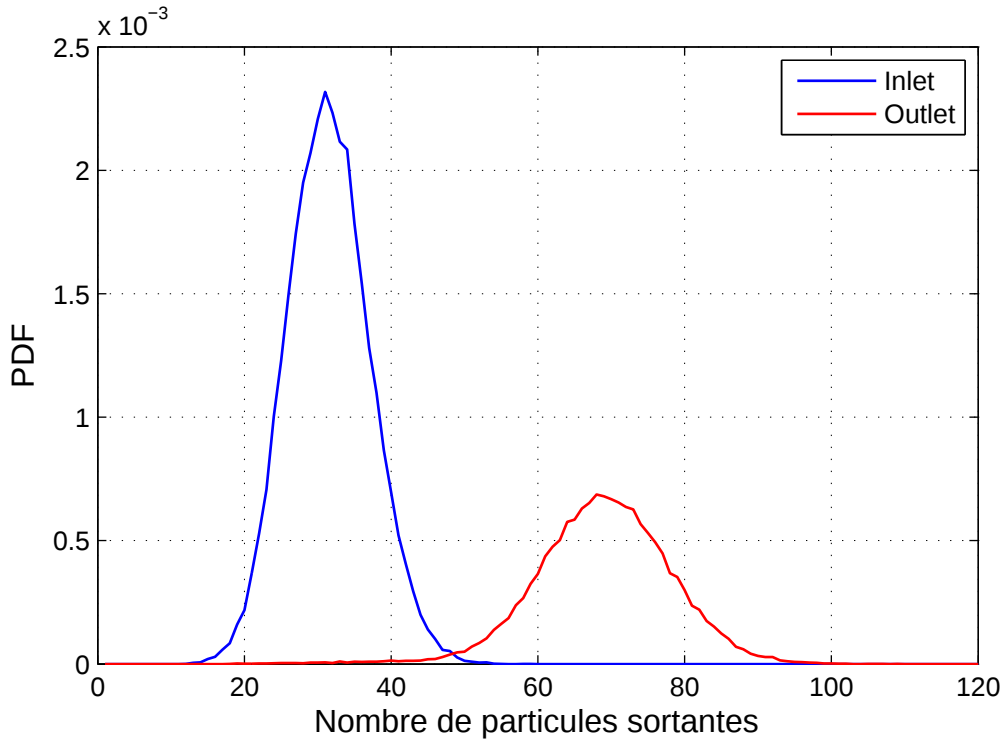


FIGURE 5.5 – Nombre de particules sortant d'un étage rotor par l'entrée et la sortie pendant une simulation DSMC

N_{inlet}^{out} et N_{outlet}^{out} en fonction du nombre d'itérations de la simulation. Pour éviter une

2. En réalité, la valeur N_{outlet}^{in} de l'itération n est égale à la valeur N_{outlet}^{out} de l'itération $n - 1$ mais ce décalage d'une itération ne génère pas de problème en ce qui concerne la convergence statistique du débit

dispersion trop importantes des quantités N_{inlet}^{out} et N_{outlet}^{out} qui nuirait à la lisibilité de la visualisation, les valeurs tracées sont en fait moyennées de façon glissante sur 100 itérations. Dans la figure 5.6, on peut observer que l'équilibre est atteint au bout d'environ 10^3 itérations.

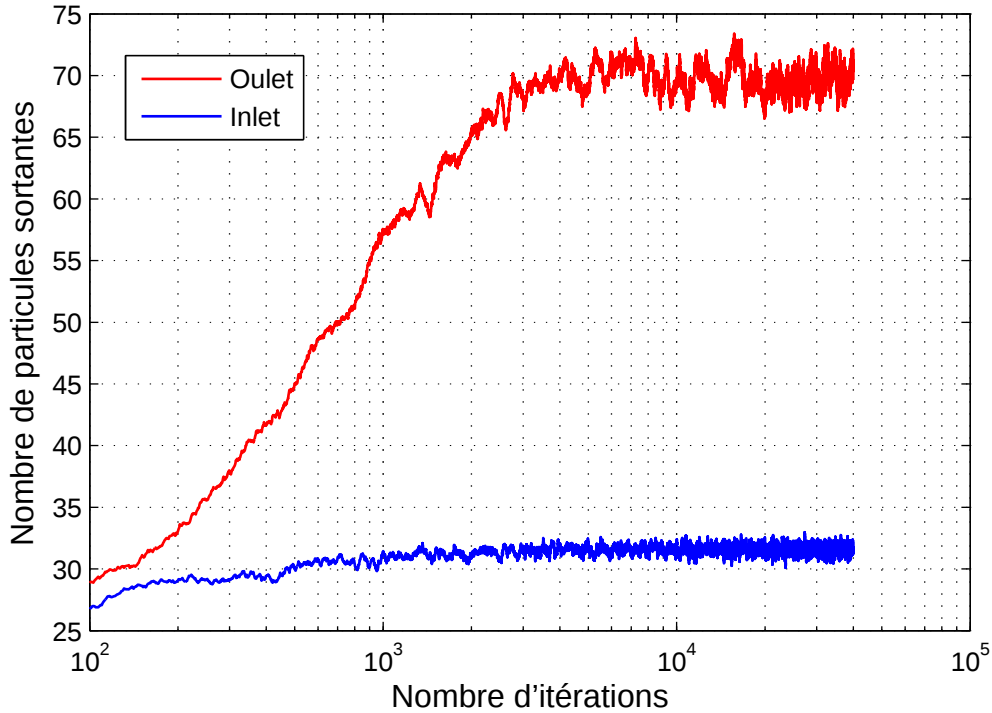


FIGURE 5.6 – Évolution du nombre de particules sortant d'un étage rotor par l'entrée et la sortie pendant une simulation DSMC (les quantités tracées correspondent à une moyenne glissante sur 100 itérations)

La figure 5.7 illustre l'évolution du taux de compression calculé en formant le rapport entre le nombre de particules qui quittent le domaine de calcul par la sortie (moyenné sur 100 itérations) et le nombre de particules qui quittent le domaine par l'entrée (quantité également moyennée sur 100 itérations). Le taux de compression converge à une valeur moyenne égale à 2.2 environ.

Lorsque la simulation atteint sa convergence, on peut amorcer la collecte des informations qui permettent de calculer les grandeurs physiques macroscopiques, soit la vitesse moyenne, la pression et la température. A partir des trois composantes de la vitesse d'un nombre important de particule, les grandeurs physiques macroscopiques associées à chaque cellule sont calculées par les relations suivantes :

$$\begin{cases} U &= (\sum_1^{n_c} u_x)/n, \\ V &= (\sum_1^{n_c} u_y)/n, \\ W &= (\sum_1^{n_c} u_z)/n, \\ T &= \frac{m(\sum_1^{n_c} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2))}{3nk_B} - U^2 - V^2 - W^2, \\ P &= \frac{Tk_B F_N n_c}{n_{iteration} V_C}. \end{cases} \quad (5.8)$$

où $n_{iteration}$ est le nombre d'itérations durant lequel la collecte des informations se réalise et n_c est le nombre de particules qui sont passées dans la cellule considérée.

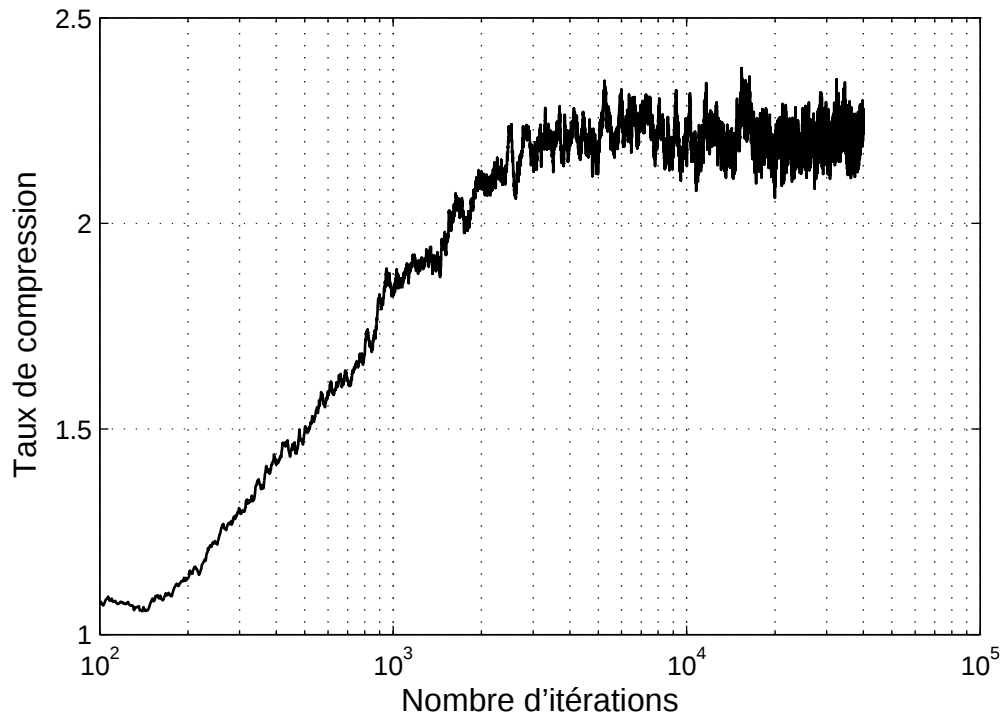


FIGURE 5.7 – Évolution du taux de compression d'un étage rotor pendant une simulation DSMC

La figure 5.8 présente le champ de pression d'une simulation convergée. On peut observer sur cette figure une zone de surpression au niveau de l'intrados de la pale en limite gauche du domaine de calcul et une zone de sous-pression au niveau de l'extrados de la pale en limite droite du domaine de calcul.

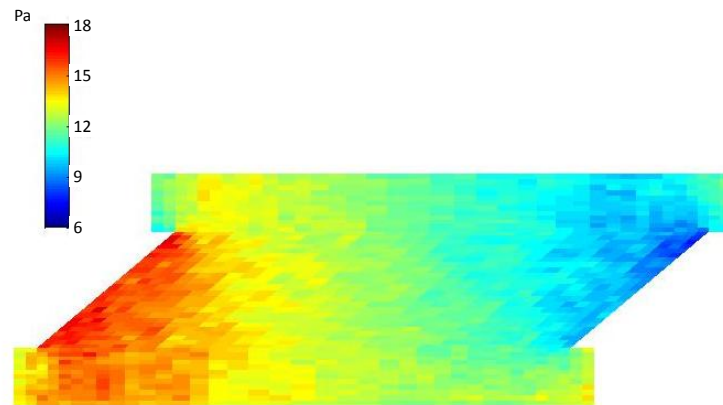


FIGURE 5.8 – Champ de pression obtenu par la simulation DSMC pour un étage rotor

Le champ de vitesse verticale est tracé sur la figure 5.9 et permet de visualiser la façon dont le gaz circule dans un étage rotor avec une zone de pompage où la vitesse est négative et une zone de fuite où la vitesse est positive. Il est intéressant de noter que ce champ de vitesse verticale obtenu grâce à DSMC 2D avec un nombre de Knudsen égal à 1 reste globalement similaire à celui d'un calcul CFD, sur la même géométrie, avec un nombre de Knudsen égal à 0.001, qui est présenté sur la figure 5.10. Si l'accord qualitatif entre les

deux résultats est à souligner, des différences quantitatives existent bien sûr : le taux de compression du calcul CFD est notamment égal à 1.2 environ, ce qui est presque deux fois moins que la valeur fournie par le calcul DSMC 2D pour un nombre de Knudsen mille fois plus élevé environ.

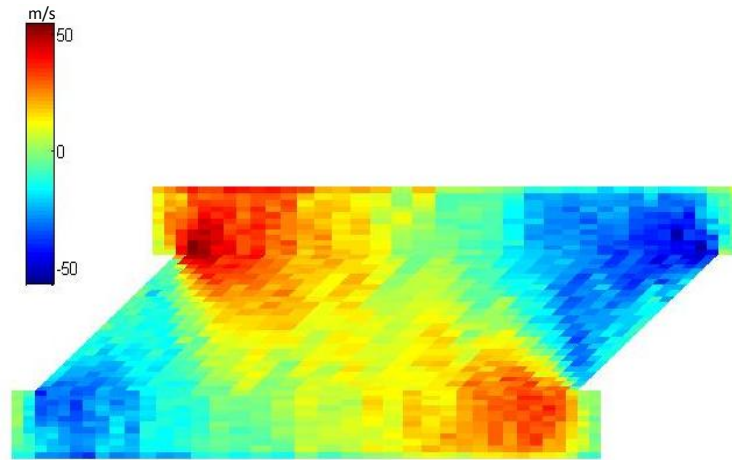


FIGURE 5.9 – Champ de vitesse verticale obtenu par la simulation DSMC pour un étage rotor

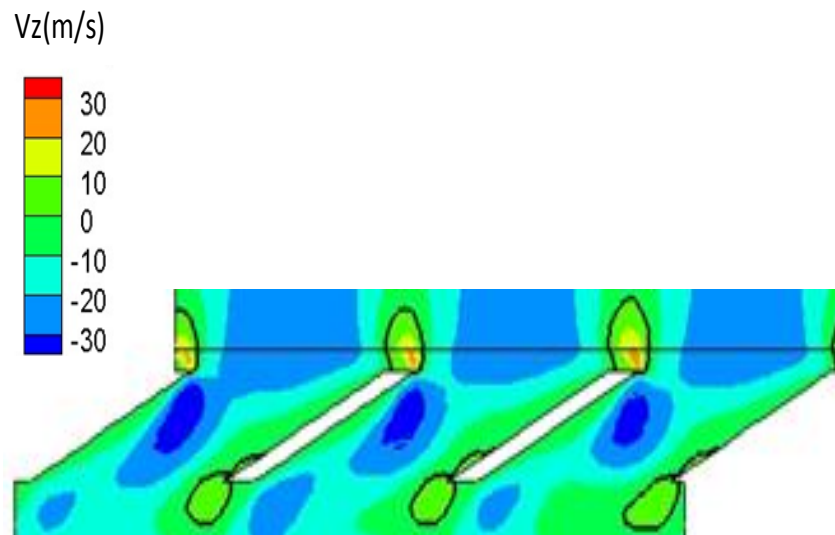


FIGURE 5.10 – Champ de vitesse verticale obtenu par le calcul CFD avec $Kn = 0.001$

Les figures 5.11 et 5.12 comparent les taux de compression à débit nul obtenus par des simulations DSMC 2D à ceux mesurés par Sawada durant ses expériences. Les caractéristiques géométriques de ces deux rotors sont précisées dans le tableau 5.1. Dans les deux cas, la modélisation 2D est effectuée sur une coupe radiale à mi-envergure, sur une pale qui est située entre 72 mm (pied de pale) et 90 mm (tête de pale). Le rotor tourne à une vitesse à 18000 tr/min , soit un facteur de similitude C' égal à 0.37 pour le modèle 2D avec de l'air comme gaz pompé. Les deux géométries de rotor sont également calculées à l'aide du code TPMC 3D.

Les deux graphiques 5.11 et 5.12 montrent que :

	nb pales	hauteur(mm)	épaisseur(mm)	angle	S
rotor 1	24	8	3.2	20°	0.51
rotor 2	36	8	3.1	30°	0.50

TABLE 5.1 – Dimensions géométriques des deux rotors dont la performance de pompage est mesurée par Sawada[52]

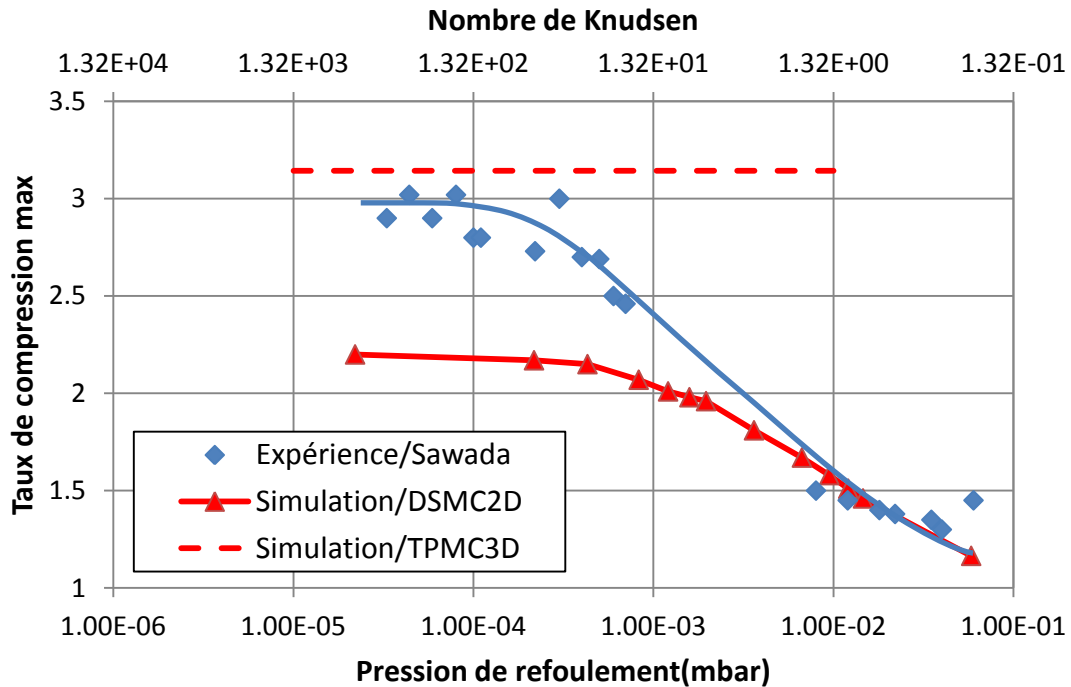


FIGURE 5.11 – Comparaison entre les résultats expérimentaux de Sawada et ceux de DSMC 2D et de TPMC 3D pour le rotor 1

- le code DSMC 2D permet de détecter la baisse de taux de compression due à l'augmentation de la pression de refoulement, ce qui n'est pas le cas du code TPMC 3D. Le code DSMC 2D prédit d'une façon très correcte la zone où le taux de compression commence à baisser, soit lorsque le nombre de Knudsen atteint environ 10^2 , tant pour le rotor 1 que pour le rotor 2. En revanche, la limitation 2D de ce code ne permet pas d'obtenir une comparaison quantitativement satisfaisante avec l'expérience. La valeur plateau prédite à faible pression de refoulement (régime moléculaire libre) est ainsi de 2.2 alors que la valeur expérimentale se situe environ à 3. Pour le rotor 2 l'écart est un peu plus faible mais reste significatif : DSMC 2D prédit une valeur plateau égale à 2 environ alors que la valeur plateau expérimentale se situe à 2.4 environ.
- Dans le même temps, le code TPMC 3D ne fournit par construction que la valeur plateau et ne donne donc aucune information sur la chute du taux de compression lorsque la pression de refoulement augmente. On peut d'ailleurs noter que la comparaison de cette valeur plateau fournie par TPMC 3D avec les mesures expérimentales est très correcte pour le rotor 1 et excellente pour le rotor 2.

On peut donc considérer cette comparaison comme très encourageante puisqu'elle nous laisse penser que l'écart qui subsiste entre le calcul DSMC et l'expérience est uniquement

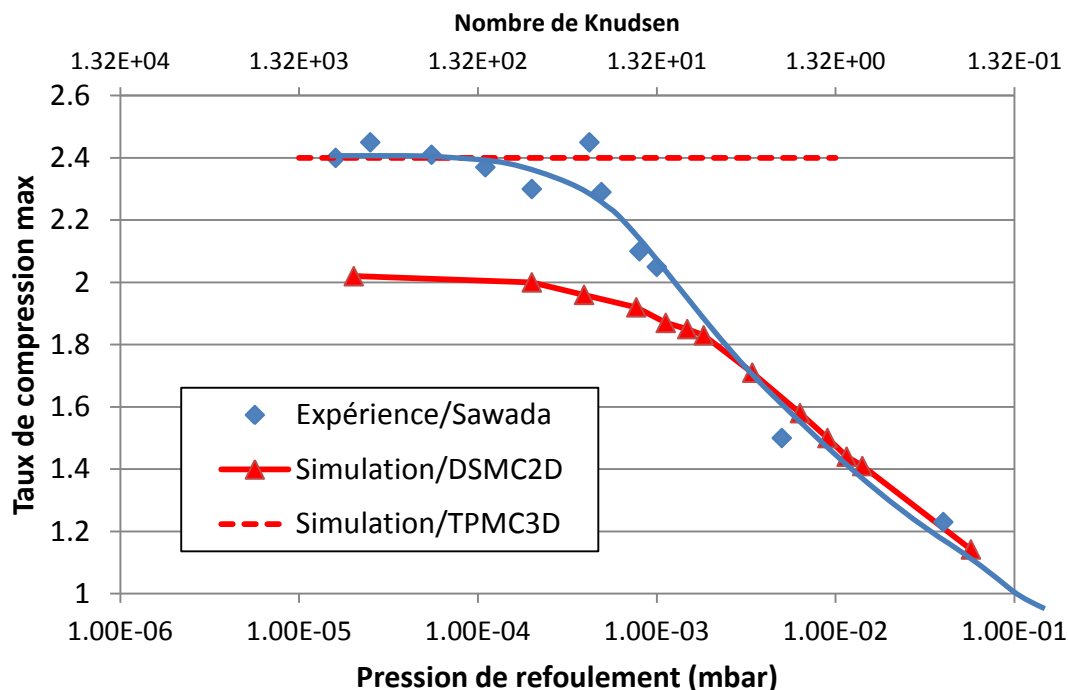


FIGURE 5.12 – Comparaison entre les résultats expérimentaux de Sawada et ceux de DSMC 2D et de TPMC 3D pour le rotor 2

lié au caractère simplement bidimensionnel de la simulation. Ainsi, on peut espérer qu'un code DSMC3D, qui combinera le potentiel prédictif de TPMC 3D et DSMC 2D, sera capable de prédire entièrement une courbe de pompage du régime moléculaire libre au régime de transition.

5.4 Simulation à débit non nul

Par rapport au cas d'un calcul à débit nul où toutes les conditions limites imposées au début de la simulation restent valables jusqu'à la convergence statistique du calcul, la simulation du cas à débit non nul implique nécessairement une mise à jour des grandeurs macroscopiques au cours de la simulation. L'une des difficultés à résoudre est que le calcul des grandeurs macroscopiques ne peut être amorcé que lorsque la simulation atteint un niveau de convergence tel que les grandeurs physiques calculées par les relations (5.8) ne dépendent pas (significativement) de la taille d'échantillon utilisé. Par conséquent, la mise en oeuvre de simulations à débit non nul suppose de trouver une stratégie d'échantillonnage et de mise à jour qui permette de résoudre ce problème.

Dans le code DSMC 2D développé dans la dernière partie de ces travaux de thèse, nous ne sommes malheureusement pas parvenus à implémenter un schéma qui permette de réaliser de façon satisfaisante une simulation à débit non nul. Nous souhaitons néanmoins conclure cette dernière section en présentant brièvement les pistes que nous avons explorées afin notamment que les futurs développeurs de DSMC 2D et surtout DSMC 3D puissent s'en inspirer.

Dans le cas où le débit n'est pas nul, on note $\dot{m}$ ce débit d'entrée (et de sortie). La vitesse

d'entrée du flux de particules peut être calculée à partir de ce débit massique $\dot{m}$, soit :

$$V_{inlet} = \frac{T_{inlet}}{P_{inlet} S_{inlet}} \frac{\dot{m} k_B}{m} \quad (5.9)$$

où m est la masse moléculaire.

En connaissant V_{inlet} , le nombre de particules qui entrent dans le domaine de calcul par l'entrée peut être calculé à partir de l'équation (3.3), soit :

$$N_{inlet}^{in} = \frac{P_{inlet} F_N c'_m}{2k_B T_{inlet} \sqrt{p_i}} \left[e^{-s^2} + \sqrt{\pi} s (1 + erf(s)) \right] \Delta t S_{inlet} \quad (5.10)$$

où la quantité s est calculée par $s = \frac{V_{inlet}}{c'_m}$.

Selon le même principe que celui appliqué en entrée, le nombre de particules qui entrent dans le domaine de calcul par la sortie est :

$$N_{outlet}^{in} = \frac{P_{outlet} F_N c'_m}{2k_B T_{outlet} \sqrt{\pi}} \left[e^{-s^2} + \sqrt{\pi} s (1 + erf(s)) \right] \Delta t S_{outlet} \quad (5.11)$$

où s est calculée par $s = \frac{V_{outlet}}{c'_m}$.

Mais, contrairement à ce qui se passe au niveau de l'entrée, les valeurs N_{outlet}^{in} , T_{outlet} et V_{outlet} sont inconnues de sorte que l'équation (5.11) ne permet pas d'imposer directement la condition de sortie. Il serait donc nécessaire de mettre à jour ces quantités à partir de grandeurs échantillonnées.

Piste 1

Par simplicité, on suppose que $T_{outlet} = T_{pale}$ et la vraie valeur de T_{outlet} ne sera mise à jour que lorsque N_{outlet}^{in} et V_{outlet} auront atteint la convergence.

De la même façon que dans l'équation (5.11), le nombre de particules qui quittent le domaine par la sortie doit respecter l'équation suivante :

$$N_{outlet}^{out} = \frac{P_{outlet} F_N c'_m}{2k_B T_{outlet} \sqrt{\pi}} \left[e^{-s^2} + \sqrt{\pi} s (1 + erf(s)) \right] \Delta t S_{outlet} \quad (5.12)$$

La conservation de débit massique fournit par ailleurs :

$$\frac{P_{inlet} S_{inlet} V_{inlet}}{T_{inlet}} = \frac{P_{outlet} S_{outlet} V_{outlet}}{T_{outlet}} \quad (5.13)$$

La combinaison de l'équation (5.13) et de l'équation (5.12) permet donc d'obtenir P_{outlet} et V_{outlet} .

Cependant, le schéma de calcul que nous venons de décrire ne fonctionne que théoriquement. En pratique, des instabilités importantes des quantités P_{outlet} et V_{outlet} empêchent le calcul de converger.

Piste 2

Afin de résoudre le problème rencontré avec l'option 1 décrite ci-dessus, nous avons envisagé une approche alternative dans laquelle une première simulation est réalisée avec un débit nul. En partant alors du résultat de celle-ci, on augmente le nombre de particule à injecter de :

$$N_{inlet}^{in} = \frac{P_{inlet} F_N c'_m}{2k_B T_{inlet} \sqrt{\pi}} \left[e^{-s^2} + \sqrt{\pi} s (1 + \operatorname{erf}(s)) - 1 \right] \Delta t S_{inlet} \quad (5.14)$$

À la place de la condition de sortie $N_{outlet}^{in} = N_{outlet}^{in}$ utilisée dans le cas du débit nul, il faut garder dans le cas du débit non-nul une différence qui est égale à :

$$N_{outlet}^{out} - N_{outlet}^{in} = \frac{P_{outlet}^* F_N c'_m}{2k_B T_{outlet} \sqrt{\pi}} \left[\sqrt{\pi} s (2 + \operatorname{erf}(s) - \operatorname{erf}(-s)) \right] \Delta t S_{outlet} \quad (5.15)$$

Ce schéma est plus stable que celui présenté dans la piste 1, mais la mise à jour de P_{outlet}^* s'avère tout de même problématique. Dans le cas où s est faible (gaz léger), la différence $N_{outlet}^{out} - N_{outlet}^{in}$ devient petite et peut même disparaître dans le bruit statistique de la simulation DSMC. Pour remédier à ce problème, il serait nécessaire de diminuer la valeur de F_N mais cela peut alors entraîner un surcoût (très) important du temps de calcul.

Conclusion & Perspectives

Le présent travail de thèse avait, dès son démarrage et en ligne avec son contexte de financement CIFRE, un objectif très opérationnel visant à doter l'entreprise aVP d'outils innovants pour le dimensionnement par voie numérique de futures pompes à vides turbomoléculaires ou hybrides. L'ambition stratégique n'est pas de substituer une approche purement numérique à une démarche éprouvée qui fait largement appel à l'expérience, dans les deux sens du terme : savoir-faire accumulé et moyens de mesure sur prototypes. Il s'agit de compléter cette démarche par des outils de simulation fiables et efficaces qui offrent aux concepteurs de pompes la possibilité d'évaluer de façon souple et rapide (donc économique en moyens humains et matériels) de nouveaux concepts avant de les évaluer sur banc d'essai.

L'analyse de l'état de l'art dans le contexte général de la simulation des écoulements raréfiés couplée aux travaux déjà réalisés préalablement à cette thèse dans le cadre d'un diplôme de recherche technologique nous a conduits à définir deux objectifs bien précis pour les présents travaux de thèse :

- développer, valider et exploiter un code TPMC 3D, bien adapté au régime moléculaire libre, pour analyser les pompes turbomoléculaires hybrides ATHM conçues par aVP,
- mener une étude exploratoire sur le potentiel d'une approche DSMC (en 2D) pour le calcul des performances de pompes TMPs sur une gamme de régimes de fonctionnement incluant le régime de transition.

Nous nous proposons de récapituler maintenant les principales avancées réalisées pour ces deux objectifs - le premier ayant constitué un axe prioritaire de travail tout au long de la thèse, le second ayant été abordé dans la dernière partie des travaux - puis d'indiquer des pistes de travail précises qu'il nous semblerait intéressant d'explorer pour poursuivre la démarche entreprise de dimensionnement optimal de pompes à vide par voie numérique.

Dans le cadre du développement d'un code TMPC 3D, des ingrédients originaux ont été proposés pour permettre au code de traiter efficacement une géométrie complexe de pompe hybride multi-étagée. Ainsi, une stratégie adaptative de calcul des trajectoires des particules a été développée en s'appuyant sur le rayon de courbure à l'injection et au cours de la trajectoire. Une approche hybride a été mise en place pour accélérer le calcul de l'intersection entre les trajectoires de particules et les surfaces tournantes en distinguant les descriptions analytiques ou discrètes des différentes pales utilisées. Des stratégies spécifiques ont également été proposées et mises en place pour gérer le passage des particules entre étages ou contrôler la convergence de la procédure de calcul. L'ensemble de ces développements ont été validés et évalués afin de démontrer qu'ils permettent bien de calculer avec efficacité et robustesse les performances de pompes ATHM avec prise en charge de toutes les formes de pale existantes chez aVP. Ces validations ont pu bénéficier,

de façon déterminante, de données expérimentales disponibles chez aVP pour des pompes existantes.

Afin de démontrer l'intérêt du code 3D développé par rapport aux outils numériques actuellement mis en oeuvre chez aVP, nous avons mené une étude comparative entre TPMC 3D et les codes "maison" 2D, 2.5D et 2.5D corrigé. Nous avons ainsi pu mettre en évidence, de façon convaincante, la valeur ajoutée de TPMC 3D pour le dimensionnement de futures pompes à grand diamètre attendues par les clients des fabricants de pompes à vide.

Nous avons également montré comment l'outil TPMC 3D permet de mieux comprendre le fonctionnement d'une pompe TMP. L'analyse de la distribution de la position et de la vitesse des particules sur la surface d'entrée et de sortie d'une pompe qui comporte plusieurs étages rotor/stator indique que toutes les particules traversant un rotor ne sont pas accélérées de la même façon, et que le redressement de l'écoulement par les étages stator est très partiel. Par conséquent, une approche monolithique qui calcule tous les étages simultanément est nécessaire afin d'éviter d'avancer de fausses hypothèses en considérant que la distribution de la position et la vitesse des particules est de type maxwellienne sur les surfaces entre les étages. Les effets de la vitesse de rotation et du jeu radial ont également été explorés.

Même si nous n'avons volontairement pas évoqué cet aspect dans le mémoire afin de nous concentrer sur les enjeux de modélisation, de simulation et d'analyse physique, nous souhaitons souligner qu'un effort conséquent a également porté sur l'automatisation de la procédure de lancement du calcul et l'ajout d'une interface graphique. Ces dernières actions ont permis de créer un outil de dimensionnement pour les pompes TMPs et TMP hybrides qui est désormais utilisé au sein d'aVP par des non-spécialistes (de l'approche TPMC 3D) pour calculer et optimiser la performance de pompes en phase de développement.

La mise en place de l'approche DSMC (en 2D) a également été menée à son terme dans le cadre de la thèse. Une première série de simulations DSMC en 2D permet de mettre en évidence l'intérêt de celles-ci par rapport aux calculs TPMC dans la mesure où les calculs DSMC permettent bien de reproduire la chute du taux de compression due aux collisions intermoléculaires. Les simulations DSMC ne fonctionnent cependant pour le moment qu'avec une condition aux limites à débit nul. L'implémentation d'une condition à débit non-nul nécessite une stratégie qui permette de mettre à jour les grandeurs physiques macroscopiques sans créer d'instabilités trop importantes qui empêchent le calcul de converger ; des propositions précises ont été faites en ce sens.

Les efforts à mener à court / moyen terme doivent porter selon nous sur les points suivants, destinés à rendre le code TPMC 3D (encore) plus efficace et à préparer le terrain à un outil DSMC 3D combinant les développements effectués pour TPMC 3D et DSMC 2D.

L'utilisation d'un schéma hybride pour traiter différemment des surfaces discrétisées et analytiques permet d'accélérer le calcul de l'intersection entre une trajectoire et un ensemble de surfaces de nature différente ; le revers de la médaille est que cette stratégie différenciée empêche d'utiliser une méthode de vectorisation pour accélérer le calcul. La vectorisation consiste à calculer simultanément des intersections entre plusieurs centaines de milliers de trajectoires de particules et l'ensemble des surfaces du domaine, qui doivent alors être toutes discrétisées. Dans le cas du code DSMC 2D, un gain d'un facteur 10^2 a été constaté sur la vitesse de calcul en vectorisant le calcul de l'intersection par rapport à la stratégie hybride non-vectorisée. Dans le cas 3D, il sera sans doute difficile d'espérer un tel gain pour au moins deux raisons. D'une part, le nombre de mailles surfaciques va

considérablement augmenter si l'on discrétise l'ensemble des surfaces actuellement décrites de façon analytique. D'autre part, le nombre de segments pour discrétiser une trajectoire peut varier de façon importante d'une trajectoire à l'autre ; cela peut rendre problématique le stockage des trajectoires discrètes et par conséquent la vectorisation du calcul de l'intersection. La piste de la vectorisation pour le code TPMC 3D reste néanmoins intéressante à explorer car elle peut jouer un rôle crucial pour le développement du code DSMC 3D.

Le couplage du code TPMC 3D avec un outil d'optimisation comme Dakota a d'ores et déjà été réalisé en s'appuyant sur un projet de fin d'études[51] . Les résultats obtenus montrent qu'il est difficile de mettre en place une optimisation directe compte tenu des temps de calcul actuels (6 minutes pour un étage rotor, et de 2 à 4 heures pour une pompe hybride complète de 10 à 12 étages plus un Holweck). La prochaine étape consiste donc à faire appel à des modèles substituts (sans doute de type krigeage) pour rendre l'optimisation réalisable dans un temps raisonnable, en s'appuyant sur un nombre limité de calculs de designs.

Les résultats des simulations TPMC 3D et DSMC 2D sont très encourageants quant à la perspective de calculer la performance d'une TMP pour une large gamme de régimes avec un code DSMC 3D. Avant d'y parvenir, de nombreuses difficultés restent cependant à résoudre, notamment l'implémentation d'une condition limite à débit non nul. Par ailleurs, la gestion d'un maillage à la fois surfacique et volumique pourrait être délicate dans le développement d'un code DSMC 3D, avec le schéma de collision MFS actuellement utilisé dans le code DSMC 2D. La proposition d'un schéma « Gridless DSMC » [47] semble donc très intéressante puisqu'elle évite l'emploi d'un maillage volumique pour réaliser les collisions intermoléculaires ; cette stratégie semble très bien adaptée aux applications qui impliquent des géométries très complexes donc en particulier aux pompes TMPs.

Les perspectives évoquées jusqu'à présent s'inscrivent dans la continuité directe des travaux de thèse et représentent un volume significatif de travail prévisionnel - le développement du code DSMC 3D reste à lui seul une tâche d'envergure, même en s'appuyant sur les outils TPMC 3D et DSMC 2D. Nous évoquons pour conclure une ouverture possible consistant à appliquer des méthodes cinétiques de type BGK au calcul de pompes TMPs. Comme évoqué dans le mémoire, nous avons pour notre part renoncé à explorer cette piste faute de disposer d'une base logicielle suffisante. Il nous semble qu'un outil CFD "Open-Source" tel que le code *SU²* récemment mis à disposition de la communauté scientifique par une équipe de Stanford (voir <http://su2.stanford.edu/index.html>) pourrait constituer un support de développement très utile dans la mesure notamment où il inclut des fonctionnalités de repère tournant indispensables à la gestion des étages rotor.

Bibliographie

- [1] Amit Agrawal and S. V. Prabhu. Survey on measurement of tangential momentum accommodation coefficient. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 26(4) :634, 2008.
- [2] A. Amoli, R. Ebrahimi, and S.M. Hosseinalipour. Some features of molecular flow in a rotor stator row with real topology. *Vacuum*, 72(4) :427–438, 2004.
- [3] A Amoli and S M Hosseinalipour. A continuum model for pumping performance of turbomolecular pumps in all flow regimes. *Vacuum*, 75 :361–366, 2004.
- [4] EB Arkilic. *Measurement of the mass flow and tangential momentum accommodation coefficient in silicon micromachined channels*. PhD thesis, M.I.T. and Cambridge, 1997.
- [5] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, and M. Krook. Model for collision processes in gases, I Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.*, 94 :511–524, 1954.
- [6] G A Bird. “ Sophisticated DSMC ”. *Course Notes*, pages 1–49, 2007.
- [7] G A Bird. Effect of inlet guide vanes and sharp blades on the performance of a turbomolecular pump. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 29(1) :011016–1–6, 2011.
- [8] G.A. Bird. Monte Carlo simulation of gas flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 10 :11–31, 1978.
- [9] G.A. Bird. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford University Press, 1994.
- [10] O Boulon and R Mathes. Flow modelling of a Holweck pump stage in the viscous regime. *Vacuum*, 60 :73–83, 2001.
- [11] Yu-Wen Chang and Rong-Yuan Jou. Direct simulation of pumping characteristics in a fully 3D model of a single-stage turbomolecular pump. *Applied Surface Science*, 169-170(1-2) :772–776, January 2001.
- [12] Yu-wen Chang, Rong-yuan Jou, Hong-ping Cheng, and Fong-zhi Chen. Pumping performance analyses of a turbo booster pump by direct simulation Monte Carlo method. *Vacuum*, 60 :291–298, 2001.
- [13] S. Chen and G. Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flow. *Annu Rev Fluid Mech*, 30 :329–364, 1998.
- [14] H Cheng, R Jou, F Chen, Y Chang, and Matsumi Iwane. Flow investigation of Siegbahn vacuum pump by CFD methodology. *Vacuum*, 53 :227–231, 1999.
- [15] Z. Y. Chu, J. G. and Hua. The statistical theory of turbomolecular pumps. *Journal of Vacuum Science and Technology*, 20(4) :1101–1104, 1982.
- [16] Stéphane Colin and Lucien Baldas. Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux. *C.R. Physique*, 5 :521–530, 2004.

- [17] D.H. Davis. Monte Carlo calculation of molecular flow rates through a cylindrical elbow and pipes of other shapes. *J. Appl. Phys.*, 31 :1169–1176, 1960.
- [18] Pierre Degond, Shi Jin, and Luc Mieussens. A smooth transition model between kinetic and hydrodynamic equations. *Journal of Computational Physics*, 209 :665–694, 2005.
- [19] R.G. Deissler. An analysis of second order slip flow and temperature jump boundary conditions for rarefied gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 7 :681–694, 1964.
- [20] Ben Evans, Ken Morgan, and Oubay Hassan. A discontinuous finite element solution of the Boltzmann kinetic equation in collisionless and BGK forms for macroscopic gas flows. *Applied Mathematical Modelling*, 2010.
- [21] R.D.M. Garcia and C.E. Siewert. Viscous-slip, thermal-slip, and temperature-jump coefficients based on the linearized Boltzmann equation (and five kinetic models) with the Cercignani–Lampis boundary condition. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 29(3) :181–191, May 2010.
- [22] S Giors, E Colombo, F Inzoli, F Subba, and R Zanino. Computational fluid dynamic model of a tapered Holweck vacuum pump operating in the viscous and transition regimes . I . *Vacuum*, pages 1584–1591, 2006.
- [23] S Giors, F Subba, R Zanino, and I Introduction. Navier – Stokes modeling of a Gaede pump stage in the viscous and transitional flow regimes using slip-flow boundary conditions. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 23(2) :336–346, 2005.
- [24] T. Gökçen and R.W. MacCormack. Nonequilibrium effects for hypersonic transitional flows using continuum approach. In *AIAA Paper 0461-1989*, 1989.
- [25] Christopher J. Greenshields and Jason M. Reese. Rarefied hypersonic flow simulations using the Navier–Stokes equations with non-equilibrium boundary conditions. *Progress in Aerospace Sciences*, 52 :80–87, July 2012.
- [26] N.G. Hadjiconstantinou. Comment on Cercignani’s second order slip coefficient. *Phys. Fluids*, 15 :2352–2354, 2003.
- [27] Joong-Sik Heo and Young-Kyu Hwang. DSMC calculations of blade rows of a turbomolecular pump in the molecular and transition flow regions. *Vacuum*, 56(2) :133–142, February 2000.
- [28] Tu Ji-Yuan and Yang Nai-hang. On the calculation of the overall transmission probability of a variable blade length multiplestage turbomolecular pump. *Vacuum*, 38(1) :13–14, 1988.
- [29] R. K. Joshi. *Thermal accommodation and adsorption coefficients of gases*. Taylor & Francis, Inc., New York, 1989.
- [30] S. Katsimichas. General geometry calculations of one-stage molecular flow transmission probabilities for turbomolecular pumps. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 13(6) :2954, November 1995.
- [31] Khaleel Khasawneh and Chunpei Cai. HIGH ORDER SLIP BOUNDARY SOLUTIONS FOR GASEOUS FLOW IN A UNIFORM RECTANGULAR. *Journal of Fluids and Thermal Sciences*, 1(1) :71–83, 2012.
- [32] A Knuth and E Warburg. Pogg. Ann. *Pogg. Ann.*, page 156 :177, 1875.
- [33] V I Kolobov, R R Arslanbekov, V V Aristov, A A Frolova, and S A Zabelok. Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement. *Journal of Computational Physics*, 223 :589–608, 2007.
- [34] C. H. Kruger. *The axial-flow compressor in the free-molecule range*. PhD thesis, M. I. T., 1960.

- [35] Myoung-Keun Kwon and Young-Kyu Hwang. A study on the pumping performance of the disk-type drag pumps for spiral channel in rarefied gas flow. *Vacuum*, 76(1) :63–71, October 2004.
- [36] J.M. Lafferty. *Fondations of vacuum science and technology*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998.
- [37] D A Lockerby and J. M. Reese. High-resolution Burnett simulations of micro Couette flow and heat transfer. *Journal of Computational Physics*, 188(2) :333–347, 2003.
- [38] D.A. Lockerby, J.M. Reese, D.R. Emerson, and R.W. Barber. Velocity boundary condition at solid walls in rarefied gas calculations. *Phys. Rev. E*, 70(017303), 2004.
- [39] J. R. Torczynski M. Trott, D. J. Rader, J. N. Castañeda and M. A. Gallis. Measurement of gas-surface accommodation. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, 2008.
- [40] Jun Matsui, Kenji Sirai, Junichi Kurokawa, and Takaya Kitahora. J.MATSUI et al-Multi-Etages.pdf. *Int. Conference on Fluid Engineering*, 1997.
- [41] J.C. Maxwell. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Philos Trans R Soc*, 170 :231–256, 1879.
- [42] L Mieussens. Discrete Velocity Model and Implicit Scheme for the BGK Equation of Rarefied Gas Dynamics. *Math. Models and Meth. in Appl. Sci.*, 8(10) :1121–1149, 2000.
- [43] L Mieussens. Discrete-Velocity Models and Numerical Schemes for the Boltzmann-BGK Equation in Plane and Axisymmetric Geometries. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :429–466, August 2000.
- [44] R.S. Myong. Gaseous slip models based on the Langmuir adsorption isotherm. *Phys. Fluids*, 16 :104–117, 2004.
- [45] T.P. Le Nam, Craig White, Jason M. Reese, and Rho S. Myong. Langmuir–Maxwell and Langmuir–Smoluchowski boundary conditions for thermal gas flow simulations in hypersonic aerodynamics. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(19-20) :5032–5043, September 2012.
- [46] Philipp Neumann. Lattice Boltzmann Simulations in the Slip and Transition Flow Regime with the Peano Framework. *Open Journal of Fluid Dynamics*, 02(03) :101–110, 2012.
- [47] S Olson and a Christlieb. Gridless DSMC. *Journal of Computational Physics*, 227(17) :8035–8064, September 2008.
- [48] E.S. Oran, C.K. Oh, and B.Z. Cybyk. Direct Simulation Monte Carlo : Recent Advances and Applications. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 30 :403–441, 1998.
- [49] Jeerasak Pitakarnnop. *Analyse expérimentale et simulation numérique d’écoulements raréfiés de gaz simples et de mélanges gazeux dans les microcanaux*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2009.
- [50] P.S. Prasanth and J.K. Kakkassery. Direct simulation Monte Carlo (DSMC) : A numerical method for transition-regime flows – A review. *J. Indian Institute of Science*, 86(June) :169–192, 2006.
- [51] Ivan Redor. Rapport de stage, optimisation d’une pompe turbomoléculaire à basse pression (<1mbar). Technical report, Grenoble-INP, E3, Annecy, 2013.
- [52] T. Sawada, M. Suzuki, and O. Taniguchi. The Axial Flow Molecular Pump (On a Rotor with a Single Blade Row), 1st report. *The Institute of Physical and Chemical Research*, 62(2) :49–64, 1968.

- [53] T. Sawada, M. Suzuki, and O. Taniguchi. The Axial Flow Molecular Pump (2nd Report, The Performance of a Combination of Blade Rows). *JSME International Journal*, 14(67) :48–57, 1971.
- [54] T J Scanlon, E Roohi, C White, M Darbandi, and J M Reese. An open source , parallel DSMC code for rarefied gas flows in arbitrary geometries. *Computers and Fluids*, 39(10) :2078–2089, 2010.
- [55] G Scherer. On the numerical modelling of the transitional flow in rarefied gases. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 103 :165–173, 1999.
- [56] Nathaniel Selden, Natalia Gimelshein, Sergey Gimelshein, and Andrew Ketsdever. Analysis of accommodation coefficients of noble gases on aluminum surface with an experimental/computational method. *Physics of Fluids*, 21(7) :073101, 2009.
- [57] N Sengil and Firat O Edis. Fast cell determination of the DSMC molecules in multi-stage turbo molecular pump design. *Computers and Fluids*, 45(1) :202–206, 2011.
- [58] F. Sharipov and D. Kalempa. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. *Phys. Fluids*, 15(1800), 2003.
- [59] Felix Sharipov. Numerical modeling of the Holweck pump. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, pages 1331–1339, 2005.
- [60] Felix Sharipov. Numerical simulation of turbomolecular pump over a wide range of gas rarefaction. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 28(6) :1312–1315, 2010.
- [61] S. Shen, G. Chen, R.M. Crone, and M. Anaya-Dufresne. A kinetic theory based first order slip boundary condition for gas flow. *Phys. Fluids*, 19(086101), 2007.
- [62] Colin Stephane, Pierre Lalonde, and Caen Robet. Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannels. *Heat Transfert Engineering*, 25(3) :23–30, 2004.
- [63] Robert E. Stickney. Momentum Transfer between Gas Molecules and Metallic Surfaces in Free Molecule Flow. *Physics of Fluids*, 5(12) :1617, 1962.
- [64] Quanhua Sun, Iain D Boyd, and Graham V Candler. A hybrid continuum / particle approach for modeling subsonic , rarefied gas flows. *Journal of Computational Physics*, 194 :256–277, 2004.
- [65] V.a. Titarev. Conservative numerical methods for model kinetic equations. *Computers & Fluids*, 36(9) :1446–1459, November 2007.
- [66] R Versluis, R Dorsman, L Thielen, and M E Roos. Numerical investigation of turbomolecular pumps using the direct simulation Monte Carlo method with moving surfaces. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 27(3)(January) :543–547, 2009.
- [67] M. von Smoluchowski. Über wärmeleitung in verdünnten gase. *Annalen der Physik und Chemie*, 64 :101–130, 1898.
- [68] Sheng Wang, Hisashi Ninokata, Elia Merzari, Kangbin Lei, Xilian Luo, Luyi Lu, and Kiwamu Kase. Numerical study of a single blade row in turbomolecular pump. *Vacuum*, 83(8) :1106–1117, 2009.
- [69] Ye Wang. Memoire de DRT, contribution à la simulation de l’écoulement dans une pompe turbomoléculaire à basse pression (<1mbar). Technical report, Grenoble-INP, Annecy, 2010.
- [70] Iman Zahmatkesh, Mohammad M. Alishahi, and Homayoun Emdad. New velocity-slip and temperature-jump boundary conditions for Navier–Stokes computation of gas mixture flows in microgeometries. *Mechanics Research Communications*, 38(6) :417–424, September 2011.

Annexe : Assemblage des taux de transmission

Méthode de Kruger

Étant donnée les taux de transmission de deux étages voisins I et II comme :

$$\begin{aligned} M_{12}^I &= P_1, M_{21}^I = Q_1 \\ M_{12}^{II} &= P_2, M_{21}^{II} = Q_2 \end{aligned}$$

les taux de transmission de leur assemblage peuvent être calculé en comptant le nombre de particules traversant les deux étages (voir la figure) :

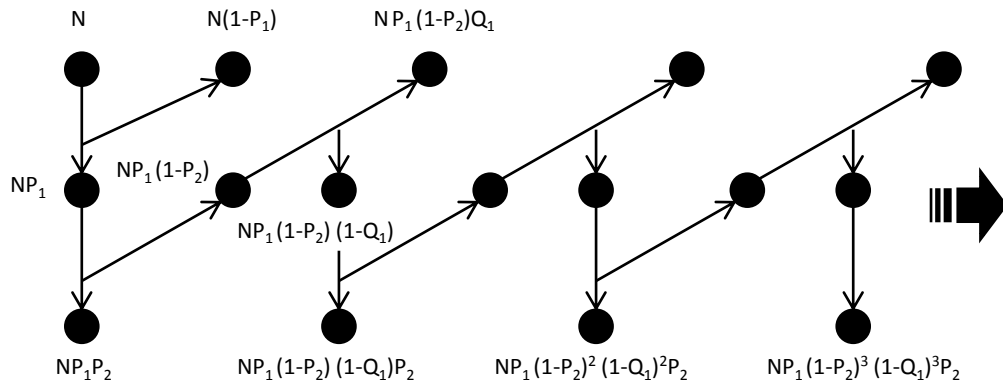


FIGURE 5.13 – Nombre de particules traversant deux étages assemblés

Si on lance N particules depuis l'entrée de l'étage I , le nombre de particules qui arrivent à la sortie de l'étage II égale :

$$\begin{aligned} N_{sortie}^{II} &= NP_1P_2 + NP_1P_2(1 - P_2)(1 - Q_1) + NP_1P_2((1 - P_2)(1 - Q_1))^2 + \dots \\ &= NP_1P_2 \sum_{n=0}^{\infty} ((1 - P_2)(1 - Q_1))^{n-1} \\ &= \frac{NP_1P_2}{1 - (1 - P_2)(1 - Q_1)} \end{aligned} \tag{5.16}$$

En connaissant N_{sortie}^{II} , le taux de transmission se calcule comme :

$$M_{12}^{global} = \frac{N_{sortie}^{II}}{N} = \frac{P_1 P_2}{1 - (1 - P_2)(1 - Q_1)} \quad (5.17)$$

Soit,

$$\begin{aligned} \frac{1}{M_{12}^{global}} &= \frac{1}{P_1} + \frac{1}{P_2} \frac{Q_1}{P_1} - \frac{Q_1}{P_1} \\ &= \frac{1}{M_{12}^I} + \frac{1}{K^I M_{12}^{II}} - \frac{1}{K_{max}^I} \end{aligned} \quad (5.18)$$

avec $K_{max}^I = P_1/Q_1$.

De la même façon, si on compte le nombre de particules qui remonte à l'entrée de l'étage I en lançant des particules depuis la sortie de l'étage II , on peut obtenir le taux de transmission M_{21}^{global} :

$$\frac{1}{M_{21}^{global}} = \frac{1}{M_{21}^{II}} + \frac{K^{II}}{M_{21}^I} - K_{max}^{II} \quad (5.19)$$

avec $K_{max}^{II} = P_2/Q_2$.

Méthode de Tu et Yang

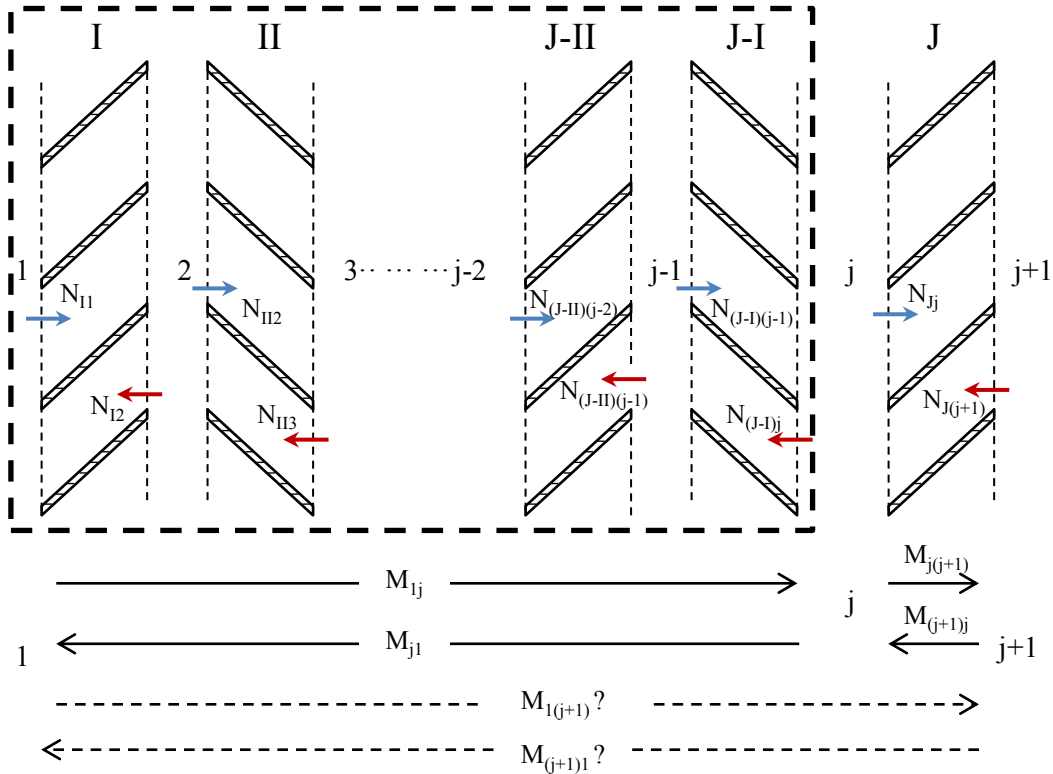


FIGURE 5.14 – Assemblage des taux de transmission pour une pompe multi-étagée

L'objectif de l'assemblage est de calculer les taux de transmission assemblé $M_{1(j+1)}$ et $M_{(j+1)j}$ à partir des taux de transmission connus comme M_{1j} , M_{j1} , $M_{j(j+1)}$ et $M_{(j+1)j}$. La

signification des symboles est la suivante : l'étage J se trouve entre deux surfaces fictives j et $j + 1$ qui permettent de délimiter les étages, l'étage J est alimenté par deux flux de molécules N_{Jj} et $N_{J(j+1)}$ à travers de la surface j et $j + 1$, A_J est sa surface effective de pompage, $A_{\epsilon J}$ est la surface de blocage, M_{1j} est le taux de transmission de la surface 1 à la surface j (du même, M_{j1} est celui de j à 1, $M_{j(j+1)}$ est celui de j à $j + 1$, $M_{(j+1)j}$ est celui de $j + 1$ à j , etc.), W est le taux de molécule pompée par rapport aux molécules qui entrent dans la pompe depuis son entrée.

Le bilan global du flux de molécules de la pompe assemblée donne :

$$A_I N_{I1} W = A_I N_{I1} M_{1(j+1)} - A_J N_{J(j+1)} M_{(j+1)1} \quad (5.20)$$

En régime établie, le flux net de molécules se conserve dans tous les étages de la pompe, ce qui donne l'équation 5.21 pour l'étage $I - > (J - I)$ et l'équation 5.22 pour l'étage J .

$$A_I N_{I1} W = A_I N_{I1} M_{1j} - A_{J-I} N_{(J-I)j} M_{j1} \quad (5.21)$$

$$A_I N_{I1} W = A_J N_{Jj} M_{j(j+1)} - A_J N_{J(j+1)} M_{(j+1)j} \quad (5.22)$$

Sur la surface fictive j , la conservation du flux de molécules donne l'équation 5.23 :

$$(A_J + A_{\epsilon J}) N_{Jj} = (A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) N_{(J-I)j} + A_I N_{I1} W \quad (5.23)$$

L'équation 5.21 et 5.22 s'écrivent aussi comme :

$$N_{(J-I)j} = \frac{A_I M_{1j}}{A_{J-I} M_{j1}} N_{I1} - \frac{A_I}{A_{J-I} M_{j1}} W N_{I1} \quad (5.24)$$

$$N_{Jj} = \frac{M_{(j+1)j}}{M_{j(j+1)}} N_{J(j+1)} + \frac{A_I}{A_J M_{j(j+1)}} W N_{I1} \quad (5.25)$$

En remplaçant $N_{(J-I)j}$ et N_{Jj} , on peut en déduire une autre équation qui calcule $(N_{J(j+1)})/N_{I1}$:

$$\frac{N_{J(j+1)}}{N_{I1}} = \frac{A_I}{A_J} \left(\frac{A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}}{A_{J-I}} \cdot \frac{A_J}{A_J + A_{\epsilon J}} \cdot \frac{M_{1j} M_{j(j+1)}}{M_{j1} M_{(j+1)j}} - \frac{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) A_J M_{j(j+1)} + (A_J + A_{\epsilon J}) A_{J-I} M_{j1} - A_{J-I} A_J M_{j1} M_{j(j+1)}}{(A_J + A_{\epsilon J}) A_{J-I} M_{j1} M_{(j+1)j}} \cdot W \right) \quad (5.26)$$

L'équation 5.20 peut se transformer en l'équation :

$$\frac{N_{J(j+1)}}{N_{I1}} = \frac{A_I}{A_J} \left(\frac{M_{1(j+1)}}{M_{(j+1)1}} - \frac{1}{M_{(j+1)1}} \cdot W \right) \quad (5.27)$$

En comparant les équations 5.27 et 5.26, on en déduit :

$$M_{1(j+1)} = \frac{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) A_J M_{1j} M_{j(j+1)}}{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) A_J M_{j(j+1)} + (A_J + A_{\epsilon J}) A_{J-I} M_{j1} - A_{J-I} A_J M_{j1} M_{j(j+1)}} \quad (5.28)$$

$$M_{(j+1)1} = \frac{(A_J + A_{\epsilon J}) A_{J-I} M_{j1} M_{(j+1)j}}{(A_{J-I} + A_{\epsilon(J-I)}) A_J M_{j(j+1)} + (A_J + A_{\epsilon J}) A_{J-I} M_{j1} - A_{J-I} A_J M_{j1} M_{j(j+1)}} \quad (5.29)$$

Nomenclature

Acronymes

<i>RCTP</i>	Rayon de Courbe d'une Trajectoire de Particule
ATHM	Adixen Turbomoléculaire Hybride sur Maglev
aVP	adixen Vacuum Products by Pfeiffer Vacuum
BGK	Bhatnager, Gross et Krook
CDF	Cumulative Density Function
CFD	Computational Fluid Dynamics
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
GSS	Generalized Soft Sphere
HS	Hard Sphere
IPL	Inverse Power Law
MD	Molecular Dynamics
MDP	Molecular Drag Pump
MFC	Mass Flow Controller
MFS	Majorant Frequency Scheme
NTC	No Time Counter
PDF	Probability Density Function
sccm	Standard Centimètre Cube per Minute
TC	Time Counter
TMAC	Tangential Moment Accommodation coefficient
TMP	TurboMolecular Pump
TPMC	Test Particle Monte Carlo
VSS	Variable Soft Sphere

Constantes

k_B	Constante de Boltzmann
-------	------------------------

Symboles grecs

α	Angle d'inclinaison d'une pale
β	Rapport entre la distance circonférentielle et la hauteur des pales
δ	Distance moyenne intermoléculaire
Δt	Pas de temps de la méthode DSMC
$\dot{N}_i$	Nombre de particules arrivant à une section par l'unité de surface et par unité de temps
$\dot{N}_{net}$	Nombre de particules net traversant un volume de contrôle de l'entrée à la sortie
ϵ	Précision de discrétisation / Minimum du potentiel du modèle Lennard-Jones
ϵ_{tr}	Erreur de discrétisation d'une trajectoire courbée
η	Facteur correcteur de la vitesse de pompage dans le modèle 2.5D
λ	Libre parcours moyen
μ	Viscosité du gaz
ν	Viscosité cinématique
Ω	Angle solide
ω	Vitesse de rotation(rad/s)
ρ	Masse volumique
σ	Section de collision
σ_d	Diamètre moyen des molécules
σ_T	Section efficace
σ_v	Coefficient d'accommodation du moment tangentiel
τ_0	Période d'oscillation de la molécule adsorbée
ζ	Facteur correcteur du taux de compression dans le modèle 2.5D
A_1	Surface de la section 1
A_2	Surface de la section 2
C	Rapport entre la vitesse de déplacement de la pale en modèle 2D et la vitesse la plus probable des particules
D_v	Débit volumique d'un volume de contrôle
M_{12}	Taux de transmission de l'entrée à la sortie du volume de contrôle
M_{21}	Taux de transmission de la sortie à l'entrée du volume de contrôle
P_{vis}	Pas de vis d'une machine de fraisage
V_C	Volume d'une maille/cellule

Nombres adimensionnels

Ma	Nombre de Mach
Re	Nombre de Reynolds

Kn Nombre de Knudsen

Symboles latins

$\bar{c}$	Vitesse moyenne des molécules
$\bar{t}_{collision}$	Temps de collision moyen local
ΔH_d	Chaleur d'adsorption
$\dot{m}$	Débit massique(kg/s)
$\mathfrak{R}_f$	Référence fixe
$\mathfrak{R}_m$	Référence mobile
$\vec{F}$	Force extérieure
b	Longueur des pales dans un modèle 2D
c	une classe des molécules
c'	Vitesse thermique des molécules ou une classe des molécules autre que c
c'_m	Vitesse la plus probable des molécules
C_1	Coefficient de glissement d'ordre 1
C_2	Coefficient de glissement d'ordre 2
c_P	Chaleur spécifique($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
c_r	Vitesse relative
d_1	Longueur circonférentielle entre les extrémités de deux pales voisines
d_2	Longueur circonférentielle entre les pieds de pale de deux pales voisines
d_{max}	Taille maximale des mailles
f	Fonction de distribution de la vitesse des particules de la classe c
f'	Fonction de distribution de la vitesse des particules de la classe c'
f_0	Fonction de distribution locale
f_r	Fonction de distribution de la position radiale des particules
$f_{v\theta}$	Fonction de distribution de la vitesse ortho-radiale des particules
Fg	Flux de molécules du gaz
fp	Portion de surface bloquée par les pales dans une section de passage
h_r	Hauteur des pales dans la direction radiale
I	Opérateur intégral de collision
K_O	Taux de compression à débit nul
l_c	Longueur caractéristique
m	Masse moléculaire
Mm	Masse molaire(g/mol)
n	Concentration moléculaire

N_C	Nombre de collisions d'une maille/cellule
p	Espérance du nombre aléatoire X
P_{in}	Pression d'aspiration(Pa)
P_{out}	Pression de refoulement(Pa)
q	Quantile
r	Distance entre les deux centres des molécules
R_c	Rayon de courbure
S	Vitesse de pompage(l/s)
s	Distance entre deux pales dans un modèle 2D
S_0	Vitesse de pompage maximale théorique
t_c	Temps de cellule/maille dans le schéma « TC »
T_D	Température du gaz dans le dôme
v_{pale}	Vitesse de déplacement des pales dans un modèle 2D
X	Nombre aléatoire
Z	Variable aléatoire obtenue par normalisation de X
D	Diamètre

Indices

edp	Extrimité de pale
pdp	Pied de pale

Liste des tableaux

1.1	Caractéristiques des différentes formes de pale	12
2.1	Vitesse c'_m des gaz	32
2.2	Valeurs de TMAC relevées dans la littérature	41
3.1	Valeurs typiques du paramètre C dans une pompe turbomoléculaire selon la nature du gaz en écoulement.	51
3.2	Classement des différentes surfaces gérées par le code TPMC 3D.	63
3.3	Etude de sensibilité du calcul de K_0 par TPMC 3D. Sensibilité à la discrétisation des surfaces complexes	67
3.4	Etude de sensibilité du calcul de K_0 par TPMC 3D. Sensibilité au pas de discrétisation de la trajectoire des particules	67
3.5	Valeurs de P et q	79
3.6	Caractéristiques géométriques des trois pales associées aux pompes dont les performances ont été mesurées par Sawada [53].	83
4.1	Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATH2303M	93
4.2	Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATH500M	94
4.3	Résultats des comparaisons simulations TPMC3D / expériences pour la pompe ATP2300M	94
5.1	Dimensions géométriques des deux rotors dont la performance de pompage est mesurée par Sawada[52]	124

Table des figures

1.1	Exemple d'une TMP et schéma simplifié de la machine.	4
1.2	Principe de pompage d'une TMP	5
1.3	Agencement typique des étages d'une TMP multi-étagée	6
1.4	Concepts des pompes MDPs	7
1.5	Principe de pompage des MDPs	8
1.6	Exemple d'une pompe Holweck et son principe de pompage	8
1.7	Schéma simplifié d'une pompe ATHM	9
1.8	Principales pièces d'une pompe ATHM	10
1.9	Coupe radiale des pales hélicoïdales : relation entre l'angle d'inclinaison α , le diamètre de coupe D et le pas de vis de la machine de fraisage	11
1.10	Schéma du banc d'essai pour la caractérisation des pompes TMP/MDP . .	14
1.11	Exemple de courbes de vitesse de pompage S	15
1.12	Exemple de courbes de taux de compression K_0	16
1.13	Exemple de courbes d'isoflux	16
1.14	Classification des régimes d'écoulements en fonction du nombre de Knudsen et modèle physique associé à chaque régime	18
1.15	Régimes d'écoulement des gaz dans le domaine du vide	19
1.16	Limites des différents régimes d'écoulements et hypothèses associées (voir [9], page 21) avec positionnement des applications aux pompes à vide, des ap- plications en microfluidique et des applications à la rentrée des véhicules spatiaux	20
1.17	Force intermoléculaire classique	22
1.18	Potentiel intermoléculaire des modèles répulsifs	22
1.19	Potentiel intermoléculaire des modèles répulsifs et attractifs	24
1.20	Illustration sur une coupe en 2D de la signification des différentes valeurs du coefficient TMAC	25

2.1	Distribution des vitesses dans un gaz stationnaire et à l'équilibre	31
2.2	Schéma du modèle 2D d'un étage rotor	37
2.3	Principe du pompage d'un rotor dans un modèle 2D	38
2.4	Vue de dessus d'une coupe axiale d'un étage rotor	39
2.5	Isoflux mesurées (en trait continu) et calculées (en pointillés) par CFD avec condition de glissement pour un écoulement d'Argon dans un Holweck 2303.	41
2.6	Calage du coefficient TMAC pour un écoulement d'Hélium dans la géométrie d'Holweck 2303. En trait continu : mesures expérimentales ; en pointillés : simulations Navier-Stokes avec condition de glissement paramétrée par $\sigma = TMAC$	42
2.7	Isoflux du Holweck2303 pour un écoulement d'hélium : simulations (trait continu) vs mesures (pointillés).	43
3.1	Principes de l'approche TPMC : volume de contrôle typique pour un écoulement interne	47
3.2	Modèle 2D de rotor.	50
3.3	Performances d'un modèle 2D de rotor obtenues à l'aide de TPMC (2D) dans le cas où $S = 1$. Les facteurs de transmission, leur rapport et leur différence sont tracés en fonction de l'angle α , chaque courbe correspondant à une valeur donnée de C	50
3.4	Performances d'un modèle 2D de rotor obtenues à l'aide de TPMC (2D) dans le cas où $\alpha = 30^\circ$. Les facteurs de transmission, leur rapport et leur différence sont tracés en fonction du paramètre de similitude S , chaque courbe correspondant à une valeur donnée de C	51
3.5	Calcul d'intersection (inspiré de la technique de « Ray Tracing ») utilisé pour une surface gauche.	52
3.6	Choix du pas de discrétisation de la trajectoire d'une particule	56
3.7	Analyse des trajectoires pour un rotor 3D. Distribution du rayon de courbure initial $RCTP_0$ en fonction de C calculé au rayon moyen ($\approx 0.1 m$).	58
3.8	Analyse des trajectoires pour un rotor 3D fonctionnant à $C = 0.8$. Distribution du rayon de courbure en fonction du rayon de départ	59
3.9	Exemple de discrétisation adaptative d'une trajectoire à courbure variable	61
3.10	Limite de la trajectoire discrète	62
3.11	Situation d'intersections multiples	62
3.12	Exemple de discrétisation de la surface d'une aube	64
3.13	Différentes formes des pales pour les rotors et les stators	65
3.14	Etude de sensibilité aux paramètres de discrétisation. Vue des différents maillages surfaciques pour σ_s variant de $3.18 mm^2$ à $114 mm^2$	66

3.15	Restriction du calcul TPMC au niveau d'un étage à une portion angulaire périodique. Conditions périodiques rotationnelles	68
3.16	Découpage périodique d'un étage : stratégies étudiées.	69
3.17	Jonction entre une pale et le moyeu	70
3.18	Frontière corrigée d'une facette connecté à une surface cylindrique	70
3.19	Frontière corrigée d'une surface cylindrique connectée à une facette	71
3.20	Jonction entre une pale et l'entrée d'un étage	71
3.21	Frontière corrigée d'une surface à z constant	72
3.22	Gestion du passage des particules entre étages voisins. Position du problème.	73
3.23	Temps de séjour moyen pour des molécules adsorbées à 300K avec différentes chaleurs d'adsorption	74
3.24	Approche " θ redistribué"	75
3.25	Position ortho-radiale entre deux étages rotor	76
3.26	Performance d'une pompe à 4 étages en fonction de C^* avec l'approche θ conservé et l'approche θ redistribué	77
3.27	Performance d'une pompe à 4 étages avec des positions ortho-radiales différentes pour les étages rotor. Traitement θ conservé.	78
3.28	Nombre de test nécessaire en fonction de la précision demandée pour une indice de confiance à 95%	80
3.29	Comparaison entre le code TPMC et les calculs d'Amoli pour un assemblage rotor/stator	81
3.30	Comparaison entre le code TPMC et les calculs d'Amoli pour un assemblage rotor/stator/rotor	82
4.1	Schéma du banc d'essai aVP	85
4.2	Banc d'essai des pompes turbo aVP	86
4.3	Dôme standard et dôme adapté au pyromètre	87
4.4	Vue schématique d'un MFC et principe de fonctionnement	88
4.5	Jauge de Baratron et son principe de fonctionnement	88
4.6	Jauge Bayard-Alpert et son principe de fonctionnement	89
4.7	Composition géométrique du domaine de calcul associé à la pompe ATH2303M. En bas à droite : vue d'ensemble de la pompe avec toutes ses pales et l'Holweck complet (périodicités appliquées).	91
4.8	Pompe ATH2303. Comparaison des taux de compression entre simulations TPMC 3D et mesures sur banc d'essai aVP.	92

4.9	Pompe ATH2303. Comparaison des vitesse de pompage entre simulations TPMC 3D et mesures sur banc d'essai aVP.	93
4.10	Influence du coefficient TMAC sur les résultats de simulation de la pompe ATH2303M	95
4.11	Définition des paramètres géométriques du rotor : distance circonférentielle s entre deux pales voisines (au niveau du rayon moyen des pales) et hauteur w des pales dans la direction radiale. Le rapport s/w caractérise l'importance des effets tridimensionnels associés à l'étage.	96
4.12	Comparaisons entre codes 3D, 2D, 2.5D et 2.5Dc pour un étage rotor à pales droites de paramètre β variable.	98
4.13	Assemblage des taux de transmission pour une pompe multi-étagée	100
4.14	Simulation TPMC d'une pompe multi-étagée en approche monobloc ou monolithique.	100
4.15	Comparaison entre approche 3D monolithique et approche itérative 2.5Dc pour l'assemblage des étages d'une pompe à pales droites (gaz pompé : N_2)	102
4.16	Comparaison entre approche 3D monolithique et approche itérative 2.5Dc pour l'assemblage des étages d'une pompe à pales droites (gaz pompé : H_2)	103
4.17	Vue schématique des flux de particules qui alimentent les surfaces d'entrée et de sortie d'un volume de contrôle	104
4.18	Distribution de la position radiale des différents flux de particules	105
4.19	Distribution de la vitesse axiale des différents flux de particules	106
4.20	Distribution de la vitesse ortho-radiale des différents flux de particules . . .	107
4.21	Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction de la vitesse de rotation	107
4.22	Evolution de la vitesse verticale la plus probable des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation	108
4.23	Evolution de la distribution de la vitesse verticale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation	108
4.24	Evolution de la distribution de la vitesse ortho-radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction de la vitesse de rotation	109
4.25	Évolution de la performance d'un étage rotor en fonction du jeu radial . . .	110
4.26	Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction du jeu radial	111
4.27	Evolution de la distribution de la position radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S1}^1 en fonction du nombre d'étages.	111
4.28	Evolution de la distribution de la vitesse ortho-radiale des flux de particules Fg_{S1}^2 et Fg_{S2}^1 en fonction du nombre d'étages	112

5.1	Algorithme de la méthode DSMC	114
5.2	Coupe radiale au rayon quadratique moyen d'un étage rotor pour une simulation DSMC 2D	117
5.3	Maillage et conditions aux limites d'une simulation DSMC d'un étage rotor	118
5.4	Comparaison entre maillage structuré et maillage non-structuré pour la localisation des particules dans le maillage.	119
5.5	Nombre de particules sortant d'un étage rotor par l'entrée et la sortie pendant une simulation DSMC	120
5.6	Évolution du nombre de particules sortant d'un étage rotor par l'entrée et la sortie pendant une simulation DSMC (les quantités tracées correspondent à une moyenne glissante sur 100 itérations)	121
5.7	Évolution du taux de compression d'un étage rotor pendant une simulation DSMC	122
5.8	Champ de pression obtenu par la simulation DSMC pour un étage rotor . .	122
5.9	Champ de vitesse verticale obtenu par la simulation DSMC pour un étage rotor	123
5.10	Champ de vitesse verticale obtenu par le calcul CFD avec $Kn= 0.001$	123
5.11	Comparaison entre les résultats expérimentaux de Sawada et ceux de DSMC 2D et de TPMC 3D pour le rotor 1	124
5.12	Comparaison entre les résultats expérimentaux de Sawada et ceux de DSMC 2D et de TPMC 3D pour le rotor 2	125
5.13	Nombre de particules traversant deux étages assemblés	135
5.14	Assemblage des taux de transmission pour une pompe multi-étagée	136