

## 포트란-CFX 연동해석 기법을 이용한 비정상 DC 전기삼투 유동 가시화

허영근\* · 정종현\*\* · 서용권†

### Visualization of Unsteady DC Electro-osmotic flow by using Methods of Coupling Fortran and CFX Codes

Young Gun Heo, Jong Hyeon Jeong, and Yong Kweon Suh

**Abstract.** In this study, we present methods of coupling a commercial code, ANSYS CFX, and the user Fortran codes for solving an unsteady electro-osmotic flow around a pair of electrodes, receiving DC, attached to the top and the bottom walls of a two-dimensional cavity. We developed a module of Fortran programs for solving the ion-transport equations as well as the Poisson equations for the potential to be used in coupling with the CFX. We present how the developed codes are applied to solving the transient DC electro-osmotic flow problem within a simple cavity. We also address various problems encountered during the development process and explain why such problems are raised.

**Key Words:** DC electro-osmotic flow(DC전기삼투유동), cavity(캐버티), ion transport equation(이온 수송 방정식), ANSYS CFX

#### 1. 서 론

최근 여러 가지 물리적 및 공학적 현상을 컴퓨터를 이용한 수치해석방법으로 보다 쉽게 이러한 현상들을 분석하고 관련 문제들을 해결할 수 있게 하는 상용화된 수치해석 프로그램들이 다양하게 개발되고 있다. 또한, Fortran등을 이용한 직접적인 코딩으로는 해석하기 힘든 복잡한 3차원 형상에서의 유동이라든지 다중물리(multi-physics) 관련 유동문제의 해석을 위하여 CFD 상용코드는 많은 발전을 이루어 왔다.

그러나 기존의 범용 코드만으로는 다중물리현상이 많이 관여하는 마이크로 스케일 유동이나 나노 스케일 유동문제를 해석하기 힘든 경우들이 점차 많이 나타나고 있다. 본 연구실에서는 현재 그 범용성이 뛰어난 것으로 평가받고 있는 상용코드 ANSYS CFX (release 12.1)<sup>(1)</sup>을 사용하여 위와 같은 분야에서의 대표적인 문

제인 전기삼투유동 문제의 해결을 시도하여 보았다.

본 연구에서는 Suh의 그룹<sup>(2-4)</sup>이 취급한 마이크로 스케일 캐버티(cavity) 내의 비정상 DC 전기삼투 유동(electro-osmotic flow) 문제를 대상으로 한다. 해석 문제는 전해질이 존재하는 직육면체 캐버티 내에 서로 마주보는 두 전극 사이에서 직류 전기장이 갑자기 인가되는 경우 공간 내에 비정상적으로 생성되는 DC 전기삼투 유동(electro-osmotic flow)의 문제이다. 아직까지 이러한 전기삼투유동의 문제를 CFX 코드를 사용하여 성공적으로 해석한 연구결과는 보고되지 않았으며 본 연구에서는 상용코드 CFX에 연동하여 이온 수송의 문제를 효과적으로 풀기 위한 포트란 모듈 코드를 개발하는 것이 목적이며 개발과정에서 발생된 여러 가지 문제점과 그 해결 방법들을 제시하고자 한다.

#### 2. 해석 대상 문제 및 수식화

Fig. 1과 같이 가로, 세로가 각각 L, H인 직사각형 공간 내에 1가의 양이온과 1가의 음이온으로 구성된 전해질 용액(예로서, 소금물)을 고려한다. 상부의 전면에 걸친 양극에는 양의 전위  $\phi_0$ 가, 하부 가운데 부분에 존재

†동아대학교 기계공학과  
E-mail : yksuh@dau.ac.kr

\*DNDE

\*\*동아대학교 대학원 기계공학과

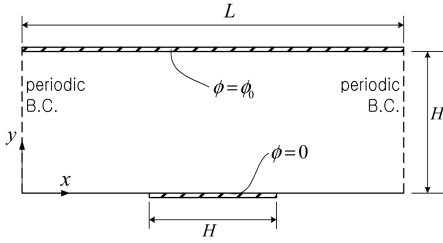


Fig. 1. Sketch of a simple DC electro-osmotic flow model, coordinates and boundary conditions.

하는 음극에는 0의 전위가  $t=0$ 의 순간에 인가된다. 그러면, 공간 내에는 비정상 전기 삼투유동이 발생한다.

밀도가  $\rho$ 인 이러한 비압축성 유체의 전기삼투 유동을 지배하는 방정식을 속도벡터  $\mathbf{u}$ , 압력  $p$ 를 사용하여 나타내면 아래와 같다.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho_e \nabla \phi \quad (2)$$

여기서, 식 (2)의 우변 마지막 항

$$S_{\text{mom}} = -\rho_e \nabla \phi \quad (3)$$

이 운동량 소스에 해당한다. 이 식에서 전하밀도  $\rho_e$ 는 Faraday 상수  $F(=96485 \text{ [C/mol]})$ 를 사용하여

$$\rho_e = F(C^+ - C^-) \quad (4)$$

으로 표현할 수 있고, 전위  $\phi$ 를 위한 지배방정식은 아래와 같다.

$$\nabla^2 \phi + \frac{1}{\epsilon} \rho_e = 0 \quad (5)$$

여기서  $\epsilon$ 은 전해질의 유전율(electric permittivity)이다. 양이온의 농도  $C^+$ 와 음이온의 농도  $C^-$ 의 지배 방정식은 Nernst-Planck 방정식

$$\rho \left[ \frac{\partial C^\pm}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C^\pm) \right] = \nabla \cdot (\rho D_0 \nabla C^\pm) \pm \nabla \cdot \left( \frac{\rho D_0}{\zeta_T} C^\pm \nabla \phi \right) \quad (6)$$

이다<sup>(5-7)</sup>. 여기서,  $D_0$ 는 각 이온 농도의 확산계수로서 서로 같은 것으로 가정한다. 그리고 기체상수  $R(=8.3145 \text{ [J/K mol]})$ , 온도  $T$ 에 대해 열적 포텐셜(thermal potential)  $\zeta_T$ 는 아래와 같이 정의된다.

$$\zeta_T = \frac{RT}{F} \quad (7)$$

속도와 전기 포텐셜의 경계조건은 다음과 같다.

$$\mathbf{u} = 0 \text{ on all surrounding walls} \quad (8a)$$

$$\phi = 0 \text{ on the bottom electrode at } y=0 \quad (8b)$$

$$\phi = \phi_0 \text{ at } y=H \quad (8c)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \text{ on all the other walls} \quad (8d)$$

이온 농도의 경계조건은 모든 벽면에서 이온 농도 플럭스가 0인 조건 즉

$$\frac{\partial C^\pm}{\partial n} = \mp \frac{C^\pm}{\zeta_T} \frac{\partial \phi}{\partial n} \text{ on surrounding walls} \quad (9)$$

의 조건을 사용한다. 여기서,  $n$ 은 벽에 수직인 방향의 좌표이다. 이 경계조건을 적용하기 위하여 전위의 구배가 필요한데 CFX에서는 이를 직접 구할 수 없으며 별도의 포트란 코드를 만들어 CFX와 연동하여 계산하는 과정이 필요하다.

일단 전위  $\phi$ 를 위한 방정식 (5)를 CFX로 풀기 위해서 CFX가 제공하는 수송 방정식의 표준형

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot [(\rho \alpha_\phi) \nabla \phi] + S_\phi \quad (10)$$

을 이용하는 방법을 적용하였다. 여기서, 확산계수  $\alpha_\phi$ 를 충분히 크게 잡고, 소스 항  $S_\phi$ 를

$$S_\phi = K_{S\phi} \rho_e \quad (11)$$

$$K_{S\phi} = \frac{\rho \alpha_\phi}{\epsilon} \quad (12)$$

으로 취하면 식 (10)은 근사적으로 식 (5)와 같게 된다. 여기서, 가상의 확산계수  $\alpha_\phi$ 를 얼마나 크게 잡아야 하는지는 주어진 문제를 CFX를 사용하여 비정상(transient) 문제 형태로 해석 하였을 때  $\phi$ 의 결과 값이 시간  $t$ 와 더불어 변화하는 빠르기와 관련 있다.

한편, 두 개의 농도장  $C^\pm$ 의 방정식 (6)은 CFX 제공

수송 방정식의 표준형 (10)와 유사하다. 우선, 각각의 지배 방정식으로 식 (10) ( $\phi$ 을  $C^\pm$ 로 교체한 형태)을 사용하되 확산계수는

$$\alpha_c = D_0 \quad (13)$$

으로 설정한다. 여기서, 문제는 식 (6)의 우변 마지막 항인 소스 항

$$S_\pm = \pm \nabla \cdot (K_{SC} C^\pm \nabla \phi) \quad (14)$$

$$K_{SC} = \frac{\rho D_0}{\zeta_T} \quad (15)$$

의 설정에 있다. CFX에서 별도의 사용자 제작 포트란 루틴을 통해 소스를 식 (14)와 같이 처리하는 것은 매우 비효율적이다. 그 이유는 변수  $\phi$ 의 구배를 두 단계에 걸쳐 계산하기 때문이다.

우선, 식 (14)의 괄호 내 벡터  $K_{SC} C^\pm \nabla \phi$ 의 세 가지 성분을 저장하기 위한 사용자 변수를 세 개 생성해야 하며 포트란 루틴을 통해 출력되는 값은 한 개의 변수만이 가능하므로 이들 프로그램은 불필요하게 세 번씩 중복 수행을 하여야 한다. 또한 각각의 구배 값에 대하여 다시 구배를 구해야 하므로 최종적으로 9개의 성분을 구하기 위한 9번 계산을 중복 수행해야 한다. 이는 최종 소스  $S_\pm$ 값을 구하기 위하여 9배나 증가된 메모리를 필요로 하게 되어 계산시간 또한 크게 증가하게 된다. 이와 같이, 식 (14)를 원래의 형태대로 구하는 일은 비효율적이다. 그 근본적 이유는 CFX에서 포트란 루틴을 통한 계산 과정에서 출력 변수로는 오직 하나만을 허용하는 데 있다.

이를 개선하기 위한 한 방법은 식 (14)를 아래와 같이 변형하는 것이다.

$$S_\pm = \pm K_{SC} \left[ (\nabla C^\pm) \cdot (\nabla \phi) - \frac{\rho_e C^\pm}{\varepsilon} \right] \quad (16)$$

여기서 우변 괄호 내 마지막 항은 식 (5)를 적용한 결과이다. 이렇게 하면 벽면 경계조건으로는 하나의 포트란 루틴만이 필요하기 때문에 결과적으로 계산시간이 많이 단축된다. 단, 소스의 모양이 보존형이 아니기 때문에 단점이 될 수 있다고 막연히 생각할 수 있다. 그러나 여차피 CFX에서 소스의 처리는 근본적으로 보존형과 비보존형에서 차이를 두지 않기 때문에

주어진 연건으로서는 이것이 단점이라 말할 수 없다.

지금까지 설명한 바를 요약하면, 운동량 방정식의 소스 (3)과 이온 농도장 방정식의 소스 (16)을 구하기 위해서는 변수  $\phi$ 와  $C^\pm$ 의 구배가 필요하며 이를 위해서는 별도의 포트란 루틴의 도움이 필요하다.

### 3. 수치 해석 방법

수치해석의 수행을 위해 아래와 같은 구체적인 조건들을 가정한다.

$$T = 293 \text{ [K]}$$

$$D_0 = 10^{-10} \text{ [m}^2/\text{s]}$$

$$e = 6.93 \times 10^{-10} \text{ [C/Vm]}$$

$$C_0 = 0.1 \text{ [mM]} = 0.1 \text{ [mol/m}^3\text{]}$$

$$\phi_0 = 0.2 \text{ [V]}$$

$$H = 0.5 \text{ [\mu m]}$$

$$\rho = 1000 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

$$\mu = 0.001 \text{ [kg/ms]}$$

주어진 유동 문제에 대해 Fig. 2와 같이 모델링하였다. (아래쪽 벽의 가운데에 음극이 놓여 있으며 위쪽 벽 전면은 양극이다.) 그리고 경계조건들은 식 (8a)-(8d) 및 (9)에서 제시한 바와 같다.

$\Delta t$ 는 [ $\mu\text{s}$ ]로 설정하였으며 Fig. 2의 z축 방향으로는 대칭조건을 주어 기본적으로 2차원 문제를 가정하였

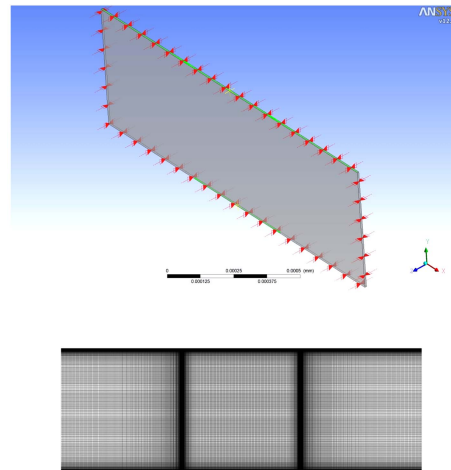


Fig. 2. Modeling and construction of non-uniform grids for CFX simulation.

다. 식 (3)에서 제시한 운동량 소스의 계산에 필요한 구배  $\nabla\phi$ 는 계산과정에서 포트란 코드를 통하여 획득할 수 있도록 CFX와 포트란 루틴을 연동하였다. 또한 이온 수송방정식의 처리를 위하여 CFX에서 제공하는 수송방정식의 표준형을 사용하였으며 여기에 참여하는 소스 항의 처리를 위해 식 (16)의 형태를 적용하였다. 역시  $\nabla c^+$  와  $\nabla\phi$ 의 값은 포트란 루틴을 이용하여 구하였다. 벽면에서의 플럭스는 식 (9)를 적용하여 구한다.

격자계는 비정렬 사각형 격자계를 사용하였다. 전극 주변에서의 이온농도의 구배가 크게 일어나는 사실과 벽면의 플럭스를 0으로 하기 위하여 벽면에 식 (9)를 적용할 때 벽면의 수직인 방향으로의 격자 간격이 매우 중요함을 고려하여 전극 주변으로 많은 격자를 부여하였다(Fig. 2). 그리하여 격자수는 312664이며 노드 수는 471663이다. 또한 깊이 방향(z축 방향)으로는 2개의 격자를 가지므로 결과적으로는 x-y 평면상에서는 156332개의 격자로 해석을 수행하였다. 또한 각 소스 항 및 플럭스를 계산하는 과정에서 필요한 변수의 구배를 얻기 위하여 포트란 코드를 적용하였는데 이에 소요되는 메모리 용량이 극히 증대되어 최소화된 3개의 포트란 루틴만을 사용하도록 고안하였다. 또한, 계산 과정에서 추가로 구할 필요가 있는 변수 값들은 가능하면 CFX 내부에 있는 수식의 표현으로 구하도록 하였다.

#### 4. 수치해석 결과 및 고찰

앞서 설명한 방법으로 CFX와 포트란 루틴을 연계하여 마이크로 사이즈 캐버티 내의 비정상 전기삼투 유동 문제를 해석하고 그 결과를 Suh의 논문<sup>(2)</sup>에서 제시한 결과와 비교하여 본 연구의 타당성을 확인하였다. Fig. 3은 0.175 ms일때의 전위의 분포로서, 전극 주변에서의 전위구배가 심한 모습을 확인할 수 있으며, 윗 쪽의 양극에서 아랫 쪽의 음극으로 서서히 감소해 가는 전위의 분포를 잘 묘사하고 있음을 확인할 수 있다. (전극 주변의 전기삼투 유동의 원리에 대한 실험결과와 관련 기본 지식은 참고문헌<sup>(5)-(7)</sup>을 통해 확인할 수 있다.)

또한 음이온의 농도 분포(Fig. 4)를 보면, 음이온은 양극에 끌려가므로 양극주변에서의 음이온 농도가 높고 상대적으로 음극에서는 낮은 것을 확인할 수 있다. 반대로 양이온의 경우에는(Fig. 5) 음극으로 모이면서 음극 주변에서 농도가 상당히 높은 것을 확인할 수 있다. 이

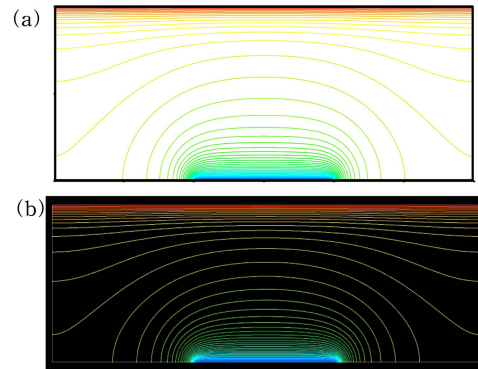


Fig. 3. Potential distributions at 0.175 ms obtained by (a) Suh<sup>(2)</sup> and (b) CFX.

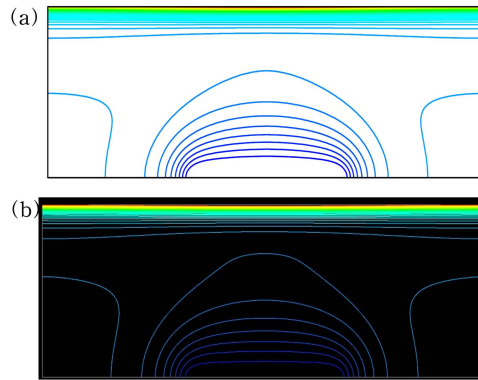


Fig. 4. Anion-concentration distributions at 0.175 ms obtained by (a) Suh<sup>(2)</sup> and (b) CFX.

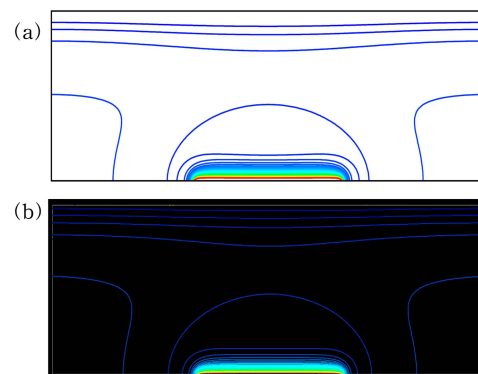


Fig. 5. Cation-concentration distributions at 0.175 ms obtained by (a) Suh<sup>(2)</sup> and (b) CFX.

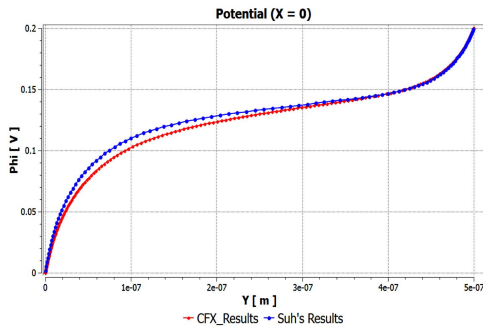


Fig. 6. Potential distributions at  $x=0$  and 0.175 ms obtained by Suh<sup>(2)</sup> and CFX.

온도의 이동으로 인하여 전하밀도의 차이가 생기고 전위 구배와 함께 캐비티 내부에 유체유동을 생성시킨다.

Fig. 6은 채널 중심축  $x=0$ 를 지나는  $y$ 축 방향으로의 전위분포를 그린 것으로서 Suh<sup>(2)</sup>의 결과와 비교한 것이다. 두 결과는 서로 매우 근접하며, 이로부터 해석 결과의 타당성을 확인할 수 있다.

Fig. 7은 캐비티 내부에 형성되는 점기삼투 유동의 유선(streamline)이다. 본 CFX 결과와 Suh<sup>(2)</sup>의 결과를 비교해 보았을 때 정성적으로 두 결과는 유사하나 하부 전극 근처에서 CFX결과는 작은 와들을 보여주고 있다. 이는 어디까지나 CFX를 사용한 해석에서 격자계가 전극주변(특히 전극의 끝단 근처)에서 충분히 조밀하지 못하여서 생긴 문제로 생각된다. 해의 정밀도에 미치는 또 하나의 원인에 대해서는 이하에서 추가로 언급할 것이다.

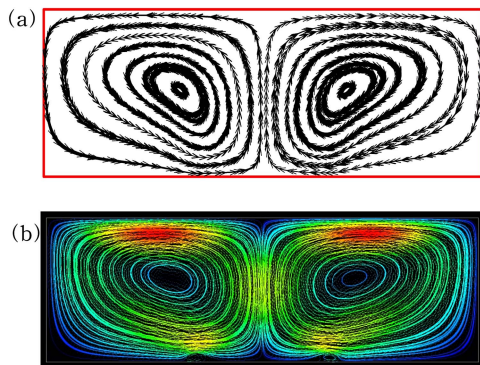


Fig. 7. Streamlines of the electro-osmotic flow at 0.175 ms obtained by (a) Suh[2] and (b) CFX.

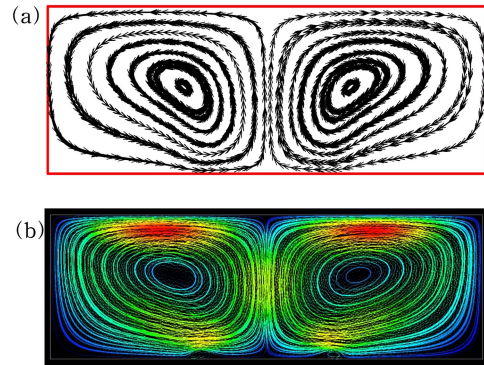


Fig. 7. Streamlines of the electro-osmotic flow at 0.175 ms obtained by (a) Suh[2] and (b) CFX.

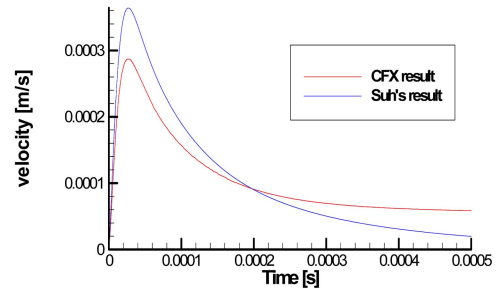


Fig. 8. Spatially averaged velocity-magnitude in the cavity obtained by Suh<sup>(2)</sup> and CFX.

Fig. 8은 캐비티 내부의 공간평균 유속을 시간변화에 따른 그래프로 나타내어 Suh<sup>(2)</sup>의 결과와 비교한 것이다. 유속이 최초에 급격히 증가하다가 어느 시점에서 감소함으로써 최대의 피크가 존재하는 현상을 잘 묘사하고 있다. 그러나, 특히 시간의 증가와 더불어 유동이 감쇠해 나가는 비율에 있어서는 본 연구의 결과가 Suh<sup>(2)</sup>의 결과보다 낮게 예측되고 있다.

Fig. 7과 8에서 CFX의 해석 결과가 Suh<sup>(2)</sup>의 수치해석 결과와 다소 차이가 나는 이유에 대해서 추가적으로 설명하고자 한다. 우선, 이온 농도의 플럭스 조건인 식 (9)의 적용에 있어서 벽면에 수직인 방향의 전위차를 계산할 때 벽면 및 전극 근처의 격자가 충분히 조밀하지 못하여 계산된 플럭스의 정확성이 떨어지는 문제가 가장 유력시되고 있다. 그리고, 이처럼 정밀도가 떨어지는 플럭스로써는 벽면에서 플럭스가 0이 되어야 하는 조건을 만족시키지 못하고 결과적으로 이온들

이 벽면을 통하여 들어오거나 나가는 비물리적인 상황들이 발생하게 된다. 이러한 이유로 인하여 캐버티 내의 평균 이온의 농도 또한 변화하게 되고 이는 전하밀도 값을 변화시켜 속도장에도 영향을 주게 된다.

이러한 문제를 해결하기 위하여 격자수를 증가시켜 추가적인 해석을 시도하였으나 이 경우 격자수의 증가에 따라 포트란 코드에서 필요로 하는 메모리의 사용이 급격하게 증가하게 되고 계산시간 또한 많이 늘어나는 문제점을 확인하였다. 따라서 현재 격자의 수보다 더 많은 격자 수를 사용하여 본 연구의 문제를 해결할 수 있는 최적화된 격자의 조밀도를 찾는 추가적인 연구가 필요하다.

추가적으로, 주어진 상용코드에서 제공하는 수송 방정식의 소스함은 기본적으로 양해법으로 처리해야만 하기 때문에 그 소스의 영향이 큰 경우에는 수렴이 매우 느린 문제점이 있다. 따라서 이러한 기본적인 문제점을 해결할 수 있는 방법이 없는지 모색해 보는 것도 하나의 중요한 이슈라 생각된다.

## 5. 결론

본 연구에서는 캐버티 내의 단순한 DC 전기삼투 유동의 수치해석을 위하여 상용코드인 CFX에 포트란 코드를 연동하는 방법을 시도하고 특정 파라미터에서 해를 구하고 그 방법의 타당성을 확인해 보았다. 그 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

(1) 상용 코드인 CFX를 이용하여 DC 전기삼투 유동 문제를 해석할 때 전위 및 이온농도의 구배를 직접 구할 수는 없으므로 포트란 코드를 추가적으로 활용하여 이러한 값들을 구하는 방법을 개발하였다.

(2) CFX와 포트란 코드를 연동하여 계산을 수행한 결과 이온농도의 분포 및 전위분포에 대한 결과는 문헌에서 발표된 결과와 정성적으로 일치한다.

(3) 하지만 격자계의 조밀성 문제로 벽면에서 플릭스가 0이 되어야 하는 조건을 충분히 만족하지 못하고 캐버티 내 평균 이온농도가 시간과 더불어 변함을 확

인하였다. 이 문제를 해결하기 위하여 격자계의 조밀도를 높이는 추가적인 연구가 필요함을 확인하였다.

## 후 기

본 연구는 2009년도 교육과학기술부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받은 ‘다중현상 CFD연구센터(ERC)’(과제 관리번호 2009-0083510)의 산학과제 프로그램으로 (주)디엔디이의 지원에 의해 수행되었음.

## 참고문헌

- 1) ANSYS CFX, Release 12.1 “ANSYS CFX- Solver Theory Guide”
- 2) Y. K. Suh and S. Kang, 2010, “Numerical study on transient induced-charge electro-osmotic flow in a cavity”, *Colloids Surfaces A*, Vol. 376, pp. 111-121.
- 3) Y. K. Suh and S. Kang, 2010, “Simple, coupled algorithms for solving creeping flows and their application to electro-osmotic flows”, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 66, pp. 1248-1273.
- 4) S. Alapati, D. V. Fernandes and Y. K. Suh, 2011, “Enhancement of mixing within a micro cavity by use of transient induced-charge electro-osmotic flow around micro electrodes”, *J. Mech. Sci. Tech.*, Vol. 25, pp. 1495-1499.
- 5) N. G. Green, A. Ramos, A. Gonzalez, H. Morgan and A. Castellanos, 2002, “Fluid flow induced by nonuniform ac electric fields in electrolytes on microelectrodes. III. Obercation of streamlines and numerical simulation.”, *Phys. Rev. E*, Vol. 66, 026305.
- 6) Y. K. Suh and S. Kang, 2008, “Asymptotic analysis of ion transport in a nonlinear regime around polarized electrodes under ac”, *Phys. Rev. E*, Vol. 77, 031504.
- 7) Y. K. Suh and S. Kang, 2009, “Numerical prediction of ac electro-osmotic flows around polarized electrodes”, *Phys. Rev. E*, Vol. 79, 046309.