

탄화수소 및 할로겐화탄화수소의 최소산소농도(MOC)의 예측 Prediction of Minimum Oxygen Concentration(MOC) of Hydrocarbons and Halogenated Hydrocarbons

하동명[†] · 정기신*

Dong-Myeong Ha[†] · Kee-Sin Jeong*

세명대학교 안전공학과, *서울대학교 대학원 응용화학과
(2005. 2. 14. 접수/2005. 4. 26. 채택)

요 약

최소산소농도의 정확한 지식은 산업화재를 적절하게 예방하고, 제어하는데 중요하다. 본 연구에서는 Response Surface Methodology(RSM) 방법과 문헌자료를 사용하여 최소산소농도(MOC)를 예측하는 식을 제시하였다. 탄화수소에 대한 예측 식에 의해 계산된 최소산소농도와 문헌값의 A.A.P.E.(average absolute percent error)는 3.48%, A.A.D.(average absolute deviation)는 0.57 vol% 그리고 상관계수는 0.919이다. 탄화수소와 할로겐화탄화수소를 포함한 경우 예측값과 문헌값의 A.A.P.E.는 5.06%, A.A.D.는 0.59 vol%, 상관계수는 0.938이다. 제시한 예측식에 의한 계산값은 문헌값과 일치하였다. 따라서 본 연구에서 제시된 식이 다른 가연성물질의 최소산소농도 연구에도 이용되기를 기대한다.

ABSTRACT

An accurate knowledge of the minimum oxygen concentration(MOC) is important in developing appropriate prevention and control measures in industrial fire protection. In this study, by using the literature data and RSM(response surface methodology), the new equations for predicting the MOC are proposed. The A.A.P.E.(average absolute percent error) and the A.A.D.(average absolute deviation) of the reported and the calculated MOC for hydrocarbons were 3.48% and 0.37 vol%, respectively and the correlation coefficient was 0.919. The A.A.P.E and the A.A.D of the reported and the calculated MOC for halogenated hydrocarbons and hydrocarbons were 5.06% and 0.59 vol%, and the correlation coefficient was 0.938. The values calculated by the proposed equations were in good agreement with the literature data. Therefore, it is expected that this proposed equations will support the use of the research for other flammable substances.

Keywords : Minimum oxygen concentration(MOC), Industrial fire, Prevention, RSM(response surface methodology), Flammable substances

1. 서 론

가연성물질들은 산업현장에서 연료, 용제, 원료, 중간제품, 완제품으로서 널리 사용될 뿐만 아니라, 가정에서도 연료로 사용되고 있다. 가연성물질들을 수송, 저장, 처리할 때 안전한 취급 조건은 공정안전과 손실 예방을 위해서 연구자들에게 큰 관심사이다.

대부분 화학 공정에서는 가연성가스 혹은 증기의 존재를 피하기가 불가능하다. 산업 현장에서 화재 및 폭

발 사고의 예방을 위해서는 취급 물질들의 위험성을 인식하는 것이 무엇보다 중요하다. 중대 사고는 공정에서 취급하는 가연성물질의 위험 특성에 대한 불충분한 지식에서 발생하는 경우가 많다. 따라서 산업현장에서 사고를 예방하기 위해서는 물질의 인화점, 발화점, 폭발한계, 최소산소농도, 최소발화에너지 등의 연소 특성의 이해가 최우선으로 이루어 져야 한다. 폭발 범위 안에서 공정을 운전하는 조건에서 사고를 본질적으로 예방하기 위해서는 여러 연소 특성치 가운데 최소산소농도(MOC, minimum oxygen concentration)는 결정적으로 중요하다.¹⁾ MOC는 다른 표현으로 최소산소

[†]E-mail: hadm@semyung.ac.kr(www.chollian.net/~hadm)

농도(LOC), 혹은 최대안전산소농도(MSOC)라고도 한다.

건물 화재 예방을 위해 내장재로 사용되고 있는 고분자 물질에 대한 MOC의 연구는 많이 진행되고 있고, 또한 분진이 생성되는 공정에 있어서 안전을 확보하기 위해 MOC 연구가 최근 활발히 진행되고 있다.²⁾ 그러나 가연성 가스나 증기에 대한 MOC 연구는 대부분 탄화수소에 국한된 연구가 이루어져 왔으며, 자료 역시 매우 적은 편이다. 그러나 MOC의 자료는 여러 문헌들에서 일부 제시되고 있지만, 문헌들 가운데 NFPA 69³⁾에 많은 물질에 대한 자료가 제시되고 있다.

최근에 기존의 예측 방법을 고찰하기 위해 여러 문헌들을 살펴본 결과, Kuchta 등⁴⁾은 유기 용매로 널리 사용되고 있는 탄화수소와 할로겐화탄화수소에 대한 MOC 실험적 연구를 하였으며, Ha⁵⁾는 탄화수소의 MOC 예측을 연구한 바 있다. 또한 Shu 등⁶⁾은 온도, 압력, 산소농도 변화를 이용한 o-Xylene의 MOC를 연구하였고, Britton⁷⁾은 완전연소시 양론적 산소몰수와 연소열을 이용하여 MOC 예측할 수 있는 식을 제시하였다.

그 동안 대부분 가연성물질의 MOC는 가연성물질의 완전연소시 양론적 산소몰수와 폭발한계의 관계를 이용하여 예측하였다. 본 연구에서는 제시된 MOC 자료³⁾를 이용하여 탄화수소 및 할로겐화탄화수소의 MOC를 예측할 수 있는 새로운 추산식을 제시하고, 제시된 추산식을 이용하여 실험에서 찾고자 하는 자료에 도움을 주고자 한다. 또한 실험에서 얻기 어려운 자료에 대해 본 연구에서 제시한 식을 이용하므로써 가연성 가스나 증기를 취급하는 공정에 안전을 확보하는데 목적이 있다.

2. 최소산소농도 정의 및 예측 경험식

2.1 최소산소농도(MOC)

가연성 혼합기체에서 산소농도를 충분히 감소시킨다면, 화염은 전파되지 않는다. 가연성 기체는 적당한 공기 범위 안에서 연소한다. 따라서 가연성 기체와 공기가 혼합된 혼합기체에서 산소농도를 충분히 감소시키면 화염은 전파될 수 없다.

폭발하한계는 공기나 산소 중의 연료량을 기준으로 한다. 그러나 폭발에 있어서 산소 농도는 중요한 요소가 된다. 화염이 전파되기 위해서는 최소한의 산소 농도가 요구된다. 즉, 가연성혼합물의 산소 농도가 감소하면 화염이 전파되지 않는다. 따라서 폭발의 예방은 가연물의 농도가 얼마이든지 간에 산소량의 적절한 조절로 가능하다. 따라서 방폭을 위해서는 최소산소농도는 아주 유용한 자료가 된다.⁸⁾

MOC는 공기와 연료의 혼합물에서 산소 농도 %의

단위를 가진다. 실험 자료가 충분하지 못할 경우 MOC 값은 가연물과 산소의 완전연소반응식에서 산소의 양론계수와 폭발하한계의 곱을 이용하여 예측한다. 이 방법은 많은 탄화수소에 적용된다. 이 개념은 불활성 공정의 기초가 된다. 불활성이란 가연성혼합가스에 불활성가스를 주입하여 산소의 농도를 연소를 위한 최소산소농도이하로 낮게 하는 공정이다. 불활성가스로 질소, 이산화산소, 때로는 수증기가 사용된다. 대부분의 가연성 혼합가스의 MOC는 10% 정도이다.

2.2 MOC 예측에 관련된 경험식

공정상에서 가연성 가스나 증기를 포함하는 용기에 서, 발화위험은 질소, 이산화탄소, 아르곤 혹은 헬륨 같은 불활성 가스를 첨가함에 의해 MOC 이하의 산소농도를 줄임으로서 최소화 할 수 있다. 질소는 가장 일반적인 불활성 가스로 사용되고 있다. 산소농도를 안전한 농도로 낮추기 위하여 불활성가스를 용기에 처음 주입하면 공정은 불활성화가 된다.

일반적으로 안전을 목적인 경우 MOC의 80% 혹은 산소농도 8%를 추천하고 있다.

$$MOC \times 0.8 = RMOC \quad (1)$$

여기서 RMOC(recommended MOC)는 공정 안전을 위해 추천하는 MOC이다.

NFPA 69³⁾에서는 산소농도를 연속적으로 모니터 하는 곳에서 MOC가 5% 보다 작지 않는 한 최소 2% 낮은 농도에서 유지 되도록 하고, 연속적인 모니터가 아닌 경우는 MOC의 6% 이하에서 설계해야 한다. 단, MOC가 5% 이하이면 MOC의 40%인 2%이하에서 설계되어야 한다. 그 동안 MOC가 공정안전 측면에서 중요한데도 불구하고 다른 연소 특성에 비해 자료가 거의 없는 실정이다.

탄화수소에 대해서는 일반적으로 가연물과 산소의 완전연소반응식에서 산소의 양론계수(stoichiometric coefficient of oxygen)와 폭발하한계(LEL, lower explosive limit)의 곱으로 예측되는데, 예측식은 다음과 같다.

$$MOC = (LEC)(O_2 \text{ moles}) \quad (2)$$

여기서 LEL은 폭발하한계이고, O₂ moles는 완전연소시의 산소몰수이다.

탄화수소 가운데 지방족탄화수소(aliphatic hydrocarbon)의 MOC는 10-12 vol%이므로 식 (2)에 의해 MOC 예측이 어느 정도 가능하다고 볼 수 있다. 그러나 탄화수소 가운데 방향족탄화수소(aromatic hydrocarbon)의 MOC는 11.4 vol%~8.5 vol%를 나타내고 있고, 할로겐

화탄화수소인 경우 Methylchloride는 19%이며, 다른 할로겐화탄화수소는 13 vol~14 vol%를 나타내고 있다. 따라서 식 (2)를 이용하여 모든 가연성물질의 MOC를 예측하기는 어렵다.

최근 MOC 연구로 폭발하한계가 연소열과 상관관계가 있으므로 이를 이용하여 다음과 같은 식을 제시하고 있다.⁷⁾

$$MOC = \text{Constant}/(\Delta H_c/O_2 \text{ moles}) \quad (3)$$

MOC 역시 LEL과 마찬가지로 여러 인자에 의해 즉, 온도, 압력, 농도 등에 의해 영향을 받고 있는데, 온도가 증가하면 MOC의 범위는 넓어진다. 또한 압력이 증가하면 MOC 역시 범위는 넓어진다. 이에 대해 Zabetakis⁹⁾는 압력 0.1 MPa에서 13.8 MPa 범위에 있는 여러 탄화수소에 대한 MOC의 압력의존식을 다음과 같이 제시하였다.

$$MOC_p \approx MOC - 15(\log P + 1) \quad (4)$$

여기서 P는 절대압력으로 단위는 MPa이고, MOC는 0.101 MPa일 때의 값이다.

그리고 메탄에 대해서는 다음과 같은 식을 제시하였다.¹⁰⁾

$$MOC_p = 13.98 - 1.68 \log P \quad 1 \leq P \leq 204 \text{ atm} \quad (5)$$

3. MOC 예측 모델

3.1 다중회귀 분석

자연현상은 여러 가지 변수(독립변수)가 변화하므로 응답(종속변수, response 혹은 solution variable)에 미치는 영향도 여러 가지 상태로 나타난다. 이러한 변수와 응답의 관계를 구명하기 위해서 학문이 발달해 왔다.

이러한 관계를 보다 정량적으로 표시하기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법을 다중회귀(multiple regression)이라 하며, 이 방법론은 그 동안 최적조건(optimum condition)을 구하는 방식 또는 최적화(optimization)에 널리 이용되어 왔다. 변수들에 의한 화재 위험성 평가를 위한 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(multiple regression analysis)을 이용하였다.¹¹⁻¹³⁾

제시한 모델을 다항식의 일반적인 형태로 표시하면 다음과 같다.

$$Y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + \dots + px^p + \dots \quad (6)$$

여기서 각 매개변수 a, b, c, d, e, ...을 추산하기 위해

최소화(minimization) 방법을 이용하였다. 이 방법은 S.S.D.(sum of square of deviation)을 구하기 위해 각 매개변수를 편미분하여 이를 영(zero)으로 두어서 얻어지는 정규식(normal equation)의 해를 구하면 된다.

3.2 MOC 예측 모델

가연성물질에 대해 폭발하한계와 화학양론식에 의한 산소몰수를 이용하여 최소산소농도를 예측하고자한다. 가연성물질의 최소산소농도에 대해 폭발하한계와 화학양론식에 의한 산소 몰수 문헌 자료를 분석 고찰한 결과 서로 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 따라서 폭발하한계와 화학양론식에 의한 산소 몰수에 의한 MOC 예측이 가능할 것으로 사료되어 다음과 같은 관계식들을 이용하여 최적화 된 추산 모델을 제시하고자 한다.

본 연구에서 제시된 모델들은 다음과 같다.

$$Y = aX_1X_2 \quad (7)$$

$$Y = a + bX_1X_2 \quad (8)$$

$$Y = a + bX_1 + cX_2 + DX_1X_2 \quad (9)$$

$$Y = a + bX_1 + cX_2 + DX_1X_2 + eX_1^2 + fX_2^2 \quad (10)$$

$$Y = a + b\left(\frac{1}{X_1}\right) + cX_2 + DX_1X_2 + eX_1^2 + fX_2^2 \quad (11)$$

$$Y = a + bX_1 + c\left(\frac{1}{X_1}\right) + DX_1X_2 + eX_1^2 + fX_2^2 \quad (12)$$

여기서 Y는 MOC이고, X₁는 LEL이며, X₂는 완전연소에서 화학양론식에 의한 산소 몰수이다.

폭발하한계와 산소몰수에 의한 MOC 분석을 통하여 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(multiple regression analysis)을 이용하였다.^{20,21)}

3.3 문헌값과 예측값의 비교 방법

제시한 모델들 가운데 추산식에 의해 추산된 추산값과 실험값의 차이 정도를 알고 가장 정확한 추산식을 찾기 위해 통계학에서 많이 이용하는 A.A.P.E.(average absolute percent error)와 A.A.D.(average absolute deviation)를 사용하였으며 구하는 식은 다음과 같다.^{14,15)}

$$A.A.P.E. = \frac{\sum \left| \frac{MOC_{\text{est.}} - MOC_{\text{exp.}}}{MOC_{\text{exp.}}} \right|}{n} \times 100 \quad (13)$$

$$A.A.D. = \frac{\sum |MOC_{\text{est.}} - MOC_{\text{exp.}}|}{n} \quad (14)$$

여기서 MOC_{est} 는 추산식에 의해 예측된 특성치, MOC_{exp} 는 실험값, n 은 자료(data)수이다.

또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표준편차, 표본 결정계수 그리고 상관계수를 사용하였다.

$$S = \sqrt{\frac{\sum(Y_i - y_i)^2}{n-1}} \quad (15)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (16)$$

$$r = \sqrt{\frac{SSR}{SST}} \quad (17)$$

여기서 S 는 결정값의 표준오차, r^2 는 표본 결정계수, r

은 상관계수, SSR 은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression), SST 는 총 제곱합(total sum of squares)이다.

4. 결과 및 고찰

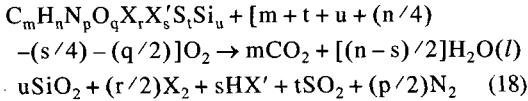
그 동안 실험 자료가 충분하지 못할 경우 MOC 값은 가연물과 산소의 완전연소반응식에서 산소의 양론계수와 폭발하한계의 곱을 이용하여 예측한다.

일반적으로 탄화수소화합물들의 완전연소식에 의한 산소양론계수는 쉽게 계산할 수 있으나, 할로겐화 탄화수소화합물은 그렇지 못하다. 본 연구에서는 문헌에

Table 1. Reported and predicted MOC of hydrocarbons

No.	Compounds	Molecular formula	M.w.	Explosion limits [vol%]		O ₂ moles	Reported MOC	(LEL)×(O ₂ moles)	Predicted MOC
				LEL	UEL				
1	Methane	CH ₄	16	5.0	15.0	2	12	10	12.04
2	Ethane	C ₂ H ₆	30	3.0	12.5	3.5	11	10.5	10.77
3	Propane	C ₃ H ₈	44	2.1	9.5	5	11.5	10.5	11.59
4	n-Butane	C ₄ H ₁₀	58	1.9	8.5	6.5	12	12.35	12.36
5	iso-Butane	C ₄ H ₁₀	58	1.8	8.4	6.5	12	11.7	12.09
6	n-Pentane	C ₅ H ₁₂	72	1.5	7.8	8	12	12	11.95
7	iso-Pentane	C ₅ H ₁₂	72	1.4	7.6	8	12	12	11.56
8	n-Hexane	C ₆ H ₁₄	86	1.1	7.5	9.5	12	10.45	10.64
9	n-Heptane	C ₇ H ₁₆	100	1.05	6.7	11	11.5	11.55	10.80
10	Ethylene	C ₂ H ₄	28	2.7	36.0	3	10	8.1	9.82
11	Propylene	C ₃ H ₆	42	2.0	11.1	4.5	11.5	9	11.19
12	1-Butene	C ₄ H ₈	56	1.6	10.0	6	11.5	9.6	11.49
13	iso-Butylene	C ₄ H ₈	56	1.8	9.6	6	12	10.8	11.80
14	Butadiene	C ₄ H ₆	54	2.0	12.0	5.5	10.5	11	11.83
15	3-Methyl-1-butene	C ₅ H ₁₀	70	1.5	9.1	7.5	11.5	11.25	11.73
16	Benzene	C ₆ H ₆	78	1.2	7.8	7.5	11.4	9	10.88
17	Toluene	C ₇ H ₈	92	1.1	7.1	9	9.5	9.9	10.57
18	Styrene	C ₈ H ₈	104	0.9	6.8	10	9.0	9	9.65
19	Ethylbenzene	C ₈ H ₁₀	106	0.8	6.7	10.5	9.0	8.4	9.08
20	Vinyltoluene	C ₉ H ₁₀	118	0.8	11.0	11.5	9.0	9.2	9.13
21	di-Vinylbenzene	C ₁₀ H ₁₀	130	0.7	6.2	12.5	8.5	8.75	8.52
22	di-Ethylbenzene	C ₁₀ H ₁₄	134	0.7	6.0	13.5	8.5	9.45	8.83
23	Cyclopropane	C ₃ H ₆	42	2.4	10.4	4.5	11.5	10.8	11.46
	A.A.D.							0.85	0.37

제시되어 있지 않은 할로겐화탄화수소의 완전연소에 의한 양론식은 Hshieh¹⁶⁾ 식을 사용하여 산소 몰수를 얻었다.



여기서 X는 할로겐화합물이다.

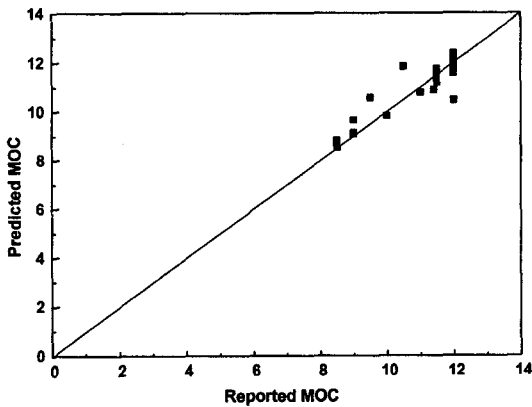


Fig. 1. between the reported and predicted MOC of hydrocarbons.

본 연구에서는 탄화수소 그리고 할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 물질의 MOC 예측을 위해 앞서 제시된 여러 모델들을 수학적 및 통계적인 방법으로 다음과 같은 최적화된 예측 모델을 다음과 같이 얻었다.

먼저 탄화수소의 MOC 예측식은 다음과 같고,

$$MOC = 29.580 - 12.124(LEL) + 3.379(O_2 \text{ moles}) + 1.498(LEL)(O_2 \text{ moles}) + 1.377(LEL)^2 + 0.101(O_2 \text{ moles})^2 \quad (19)$$

또한 할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 물질의 MOC 예측식은 다음과 같다.

$$MOC = 11.590 - 9.040\left(\frac{1}{LEL}\right) + 1.164(O_2 \text{ moles}) - 8.750 \times 10^{-2}(LEL)(O_2 \text{ moles}) - 4.861 \times 10^{-2}(LEL)^2 - 2.759 \times 10^{-2}(O_2 \text{ moles})^2 \quad (20)$$

Table 1에서는 탄화수소에 대해 본 연구에서 제시한 예측식에 의한 예측값과 기준에 제시한 예측식에 의한 예측값을 각각 문헌값과 비교하여 나타내었다. 문헌값과 예측값의 비교 결과를 보다 쉽게 볼 수 있도록 Fig. 1에 나타내었다. 또한 할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 물질에 대해서 Table 2에 나타내었으며, 문헌값과 예측값의 비교를 Fig. 2에 나타내었다.

Table 2. Reported and predicted MOC hydrocarbons and halogenated hydrocarbons

No.	Compounds	Molecular formula	M.w.	Explosion limits [Vol%]		O ₂ moles	Reported MOC	(LEL)× (O ₂ moles)	Predicted MOC
				LEL	UEL				
1	Methane	CH ₄	16	5.0	15.0	2	12	10	12.34
2	Ethane	C ₂ H ₆	30	3.0	12.5	3.5	11	10.5	11.83
3	Propane	C ₃ H ₈	44	2.1	9.5	5	11.5	10.5	11.71
4	n-Butane	C ₄ H ₁₀	58	1.9	8.5	6.5	12	12.35	12.33
5	iso-Butane	C ₄ H ₁₀	58	1.8	8.4	6.5	12	11.7	12.10
6	n-Pentane	C ₅ H ₁₂	72	1.5	7.8	8	12	12	12.17
7	iso-Pentane	C ₅ H ₁₂	72	1.4	7.6	8	12	12	11.79
8	n-Hexane	C ₆ H ₁₄	86	1.1	7.5	9.5	12	10.45	11.08
9	n-Heptane	C ₇ H ₁₆	100	1.05	6.7	11	11.5	11.55	11.49
10	Ethylene	C ₂ H ₄	28	2.7	36.0	3	10	8.1	11.13
11	Propylene	C ₃ H ₆	42	2.0	11.1	4.5	11.5	9	11.16
12	1-Butene	C ₄ H ₈	56	1.6	10.0	6	11.5	9.6	11.22
13	iso-Butylene	C ₄ H ₈	56	1.8	9.6	6	12	10.8	11.77
14	Butadiene	C ₄ H ₆	54	2.0	12.0	5.5	10.5	11	11.87
15	3-Methyl-1-butene	C ₅ H ₁₀	70	1.5	9.1	7.5	11.5	11.25	11.87

Table 2. Continued

No.	Compounds	Molecular formula	M.w.	Explosion limits [Vol%]		O ₂ moles	Reported MOC	(LEL)× (O ₂ moles)	Predicted MOC
				LEL	UEL				
16	Benzene	C ₆ H ₆	78	1.2	7.8	7.5	11.4	9	10.52
17	Toluene	C ₇ H ₈	92	1.1	7.1	9	9.5	9.9	10.81
18	Styrene	C ₈ H ₈	104	0.9	6.8	10	9.0	9	9.69
19	Ethylbenzene	C ₈ H ₁₀	106	0.8	6.7	10.5	9.0	8.4	8.77
20	Vinyltoluene	C ₉ H ₁₀	118	0.8	11.0	11.5	9.0	9.2	9.25
21	di-Vinylbenzene	C ₁₀ H ₁₀	130	0.7	6.2	12.5	8.5	8.75	8.17
22	di-Ethylbenzene	C ₁₀ H ₁₄	134	0.7	6.0	13.5	8.5	9.45	8.55
23	Cyclopropane	C ₃ H ₆	42	2.4	10.4	4.5	11.5	10.8	11.84
24	n-Butyl Chloride	C ₄ H ₉ Cl	92.5	1.8	10.1	6.25	14	11.25	11.94
25	Methylene Chloride	CH ₂ Cl ₂	49.5	13	23	1.5	19	19.5	19.09
26	Ethylene di-Chloride	C ₂ H ₄ Cl ₂	99	6.2	16	3	13	12.6	13.62
27	1.1.1-Trichloro Thane	C ₂ H ₃ Cl ₃	133.5	7.5	12.5	2.75	14	20.63	14.31
28	Vinyl chloride	C ₂ H ₃ Cl	62.5	3.6	33.0	2.75	13.4	9.9	11.83
29	Vinylidene chloride	CH ₂ Cl ₂	85	6.5	15.5	2.5	15	16.5	13.57
	A.A.D.							1.12	0.59

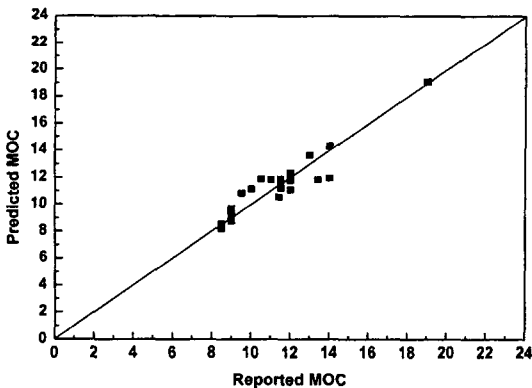


Fig. 2. Comparison between the reported and predicted MOC of hydrocarbons and halogenated hydrocarbons.

탄화수소 23의 자료의 MOC를 이용한 결과 기존의 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.84vol% 였으나, 본 연구에서 제시한 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.37 vol%, 상관관계(coefficient of determination)는 0.919로써 예측값과 문헌값은 일치하고 있다.

할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 가연성물질의 29 자료의 MOC를 이용한 결과 기존의 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 1.42 vol%였으며, 본

연구에서 제시한 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.59 vol%, 상관관계는 0.938로써 이 역시 예측값과 문헌값은 일치하고 있다.

따라서 기존의 추산식을 이용하여 MOC를 정확히 예측할 수 있는 범위는 탄화수소 가운데 일부 가연성 물질에 국한되므로 안전을 확보하기 위해서는 기존의 추산식을 사용하기에는 무리가 있으므로 본 연구에서 제시한 식을 사용하는 것이 바람직하다고 본다.

본 연구에서 제시한 예측식을 이용하여 아직까지 밝혀지지 않은 다른 가연성물질의 MOC예측이 가능하다고 본다. 그러나 정확한 MOC 예측을 위해서는 폭발한계의 정확한 값의 사용이 필요하므로 이에 대한 연구도 필요하다고 사료된다.

5. 결 론

MOC는 그 동안 실험 자료가 충분하지 못할 경우 가연물과 산소의 완전연소반응식에서 산소의 양론계수와 폭발하한계의 값을 이용하여 예측한다. 본 연구에서는 탄화수소 그리고 할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 물질에 대해 MOC와 산소의 양론계수와 폭발하한계의 관계를 규명하고, 여러 모델을 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 MOC를 예측할 수 있는

새로운 추산식을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 탄화수소의 경우 기존의 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.85 vol%였으며, 본 연구에서 제시한 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.37 vol%로써 예측값과 문헌값은 일치하고 있다. MOC 예측식은 다음과 같고,

$$\text{MOC} = 29.580 - 12.124(\text{LEL}) + 3.379(\text{O}_2\text{moles}) + 11.498(\text{O}_2\text{moles})^2 + 1.377(\text{LEL})^2 + 0.101(\text{O}_2\text{moles})^2$$

2) 할로겐화탄화수소와 탄화수소를 포함한 가연성물질의 경우 기존의 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 1.12 vol%였으며, 본 연구에서 제시한 추산식에 의한 추산값과 문헌값의 차이는 0.59 vol%로써 예측값과 문헌값은 일치하고 있다. MOC 예측식은 다음과 같다.

$$\text{MOC} = 11.590 - 9.040\left(\frac{1}{\text{LEL}}\right) + 1.164(\text{O}_2\text{moles})^2 - 8.750 \times 10^{-2}(\text{LEL})(\text{O}_2\text{moles})^2 + 4.861 \times 10^{-2}(\text{LEL})^2 - 2.759 \times 10^{-2}(\text{O}_2\text{moles})^2$$

3) 새로운 추산식에 의한 추산값은 문헌값과 거의 일치하였으므로, 제시한 추산식을 사용하여 공정상에서 안전성 확보와, 다른 가연성물질의 MOC 예측이 가능하다.

참고문헌

1. K. L. Cashdollar, "Overview of Dust Explosibility Characteristics", J. of Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 13, No. 3-5, pp.183-199(2000).
2. R. Siwek, "Determination of Technical Safety Indices and Factors Influencing Hazard Evaluation of Dusts", J. of Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 9, No. 1, pp.21-31(1996).
3. NFPA, "Standard on Explosion Prevention Systems", NFPA 69, National Fire Protection Association, 1997 ed.(1997).
4. J. M. Kuchta *et al.*, "Effect of Pressure and Temperature on Flammability Limits of Chlorinated Hydrocarbons in Oxygen-Nitrogen and Nitrogen Tetroxide-Nitrogen Atmospheres", J. of Chemical and Engineering Data, Vol. 13, No. 3, pp.421-428 (1968).
5. D. M. Ha, "Prediction of MOC(Minimum Oxygen Concentration) of Hydrocarbon and Halogenated Hydrocarbon", Theories and Application of Chem. Eng., Vol. 8, No. 1, pp.377-380(2002).
6. C. M. Shu, P. J. Wen, and R. H. Chang, "Investigation on Flammability Models and Zones for o-Xylene under Various Initial Pressures, Temperatures and Oxygen Concentration", Thermochemica Acta, Vol. 392-393, pp.271-287(2002).
7. L. G. Britton, "Using Heats of Oxidation to Evaluate Flammability Hazard", Process Safety Progress, Vol. 21, No. 1, pp.31-54(2002).
8. S. K. Lee and D. M. Ha, "Newest Chemical Engineering Safety Engineering", Donghwagisul Press, Seoul(1997).
9. M. G. Zabetakis, "Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors", U.S. Bur. Mines Bull. 627(1965).
10. M. G. Zabetakis, "Safety Cryogenic Fluids", Plenum Press, New York(1967).
11. G. E. P. Box and N. R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc.(1987).
12. D. G. Kleinbaum, L. L. Kupper, and K. E. Muller, "Applied Regression Analysis and Other Multivariable Methods", 2nd ed., PWS-KENT Publishing Company, Boston(1988).
13. D. M. Ha, "Prediction of Temperature Dependence of Lower Explosive Limits for Paraffinic Hydrocarbons", J. of the Korean Institute for Industrial Safety, Vol. 15, No. 3, pp.71-77(2000).
14. D. M. Ha and S. J. Lee, "Prediction of the Net of Combustion of Organic Halogenated Compounds based on the Atomic Contribution Method", T. of Korean Institute of Fire Sci & Eng., Vol. 17, No. 4, pp.7-12(2003).
15. D. M. Ha, "A Study on the Prediction of Flashover Time and Heat Release Rate(HRR) for Building Interior Materials", T. of Korean Institute of Fire Sci & Eng., Vol. 18, No. 3, pp.30-38(2004).
16. H. Y. Hshieh, "Predicting Heats of Combustion and Lower Flammability Limits of Organosilicon Compound", Fire and Materials, Vol. 23, pp.79-89(1999).