



알킬케톤류의 폭발 특성치 간의 상관관계 및 폭발한계의 온도의존성 예측

†하 동 명

세명대학교 보건안전공학과
(2006년 4월 11일 접수, 2006년 5월 20일 채택)

Prediction of Temperature Dependence of Explosion Limits and Interrelationship of Explosion Characteristics for Akylketones

†Dong-Myeong Ha

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University, Jecheon 390-711, Korea
(Received 11 April 2006, Accepted 20 May 2006)

요 약

화학공정에서 안전하고 최적화된 조작과 내재되어 있는 화재 및 폭발 위험성 평가를 위해서는 연소특성치를 알아야 한다. 폭발한계, 연소열, 화염온도, 폭발한계의 온도의존성은 가연성물질의 화재 및 폭발위험성을 결정하는데 중요한 연소특성치이다. 본 연구의 목적은 알킬케톤에 대한 연소특성치들의 상관관계와 폭발한계의 온도의존성 고찰에 있다. 문헌자료를 이용하여 알킬케톤의 폭발특성치간의 상관관계를 묘사하는 경험식을 제시하였다. 또한 폭발한계의 온도의존성을 예측위해 통계적 및 수학적 방법을 사용하여 새로운 식을 제시하였다. 제시된 예측식에 의한 예측값은 문헌값과 적은 오차범위에서 일치하였다. 제시된 방법론을 사용하여 다른 가연성 물질의 폭발한계 예측이 가능해졌다.

Abstract - In order to evaluate the fire and explosion involved and to ensure the safe and optimized operation of chemical processes, it is necessary to know combustion characteristics. The explosion limit, the heat of combustion, flame temperature and temperature dependence of the lower explosive limit are the major combustion characteristics used to determine the fire and explosion hazards of the flammable substances. The aim of this study is to investigate interrelationship of explosion characteristics and the temperature dependence of the lower explosion limit at elevated temperature for akylketones. By using the reference data, the empirical equations which describe the interrelationships of explosion properties of akylketones have been derived. Also, the new equations using the mathematical and statistical methods for predicting the temperature dependence of lower explosion limits of akylketones on the basis of the literature data are proposed. The values calculated by the proposed equations agreed with literature data within a few percent. From the given results, using the proposed methodology, it is possible to predict the explosion limits of the other flammable substances.

Key words : Akylketones, Combustion characteristics, Temperature dependence of the lower explosion limit, Empirical equations

I. 서 론

연소특성은 인화성용제들의 취급, 저장, 수송할 때 포함되어 있는 잠재 위험성을 평가할 때 고려된다. 여러 연소특성 가운데 폭발한계(explosion limits)는 가연

성물질(가스 및 증기)을 다루는 공정 설계 시 고려해야 할 중요한 변수로써, 발화원이 존재할 때 가연성가스와 공기가 혼합하여 일정 농도범위 내에서만 연소가 이루어지는 혼합범위를 말한다[1].

산업현장의 건조기(ovens)와 같은 장치에서 공정을 마치고 가연성가스나 증기를 배출할 경우 폭발한계 농도 이하로 희석하여 배출시킨다. 이때 안전 조작용

†주저자:hadm@semyung.ac.kr(www.chollian.net/~hadm)

위해 폭발한계의 온도의존성에 대한 정보가 필요하다. 또한 위험물을 충전하거나 제거할 때 발생할 수 있는 위험은 불활성가스가 없는 저장조에서 가연성혼합기체의 증기상에서 폭굉 및 과압(over pressure)이 발생할 수 있고, 저장조의 밸브 등으로부터 가연성 증기 및 기체방출의 경우 개방계 폭굉 및 Jet-fire가 발생할 수 있으며, 저장조에 가연성 물질의 충전 혹은 제거 시 호스 혹은 파이프 파열로 인한 가연성 액체의 증발 및 방출의 경우 Pool-fire 및 가연성 증기운이 발생할 수 있다. 대부분 저장조에 가연성물질의 충전 혹은 제거는 대기압에서 행하여지고 있으나, 수송, 저장 때로는 조작할 때 대기압이 아닌 다른 조건에서 행하는 경우 폭발한계의 변화를 초래할 수 있으므로 이에 대한 자료 역시 필요하다.

폭발한계의 연구로는 Zabetakis 등[2]의 증기 중에서 파라핀족탄화수소의 폭발한계에 관한 실험적 연구, 北川徹三[3]은 여러 유기화합물에 대한 폭발상한계 예측에 관한 연구, Affens 등[4]의 공기중에서 노말 탄화수소의 화재 및 폭발 특성치의 연구, Lovachev 등[5]의 연소한계에 대한 화염전파 방향에 관한 연구, High 등[6]에 의한 그룹기여법(Group Contribution Method)를 이용한 폭발상한계 추산에 관한 연구를 들 수 있으며, 최근에 Kondo 등[7]은 F-Number를 이용한 폭발한계 예측 연구를 행하였다. 또한 폭발한계의 온도의존성 연구로 Hustad 등[8]과 Karim 등[9]이 저온가스의 폭발한계의 온도의존성에 관한 실험적 연구를 한 바 있으며, Ha[10,11]는 파라핀족 탄화수소의 폭발한계의 온도의존성 예측식을 제시하였고, 알코올화합물의 화재 및 폭발 특성치에 관한 연구를 통해 알코올화합물의 온도의존성에 관한 연구를 발표하였다. 지금까지 연소특성에 관한 연구는 완전한 이론과 경험식이 있을 수가 없다. 그 이유는 제시된 자료들이 실험 장치나 조건에 따라 다르기 때문이다. 따라서 기존의 이론과 연구를 바탕으로 문헌값에 가까운 예측 방법의 개발이 필요하다.

본 연구에서는 그 동안 제시된 폭발한계 문헌과 열역학적이론, 통계학적방법을 사용하여 알킬케톤류에 대한 폭발특성치 간의 상관관계 및 화염온도 예측에 의한 폭발한계의 온도의존성을 연구하고자 한다. 여기서 제시한 방법론을 이용하여 실험에서 찾고자하는 다른 케톤류의 폭발특성자료에 도움을 주고, 케톤류의 산화, 발화, 연소의 공정에 기초적인 자료로 사용되도록 한다. 또한 제시한 방법론에 의해 그 동안 실험 자료가 제시되어 있지 않은 다른 작용기에 해당되는 물질의 폭발특성치를 예측하는 방법으로 사용할 수 있도록 하는데 목적이 있다.

II. 폭발한계에 관련된 특성

폭발한계는 초기온도, 초기압력, 연소열, 분자량, 불활성가스, 산소농도, 최소발화에너지를 측정방법, 용기의 크기 등과 상관관계가 있음을 여러 문헌들을 통해서 알 수 있으나, 이런 연구가 파라핀족탄화수소화합물에 국한되었으므로 보다 체계적이고 일반화되지 못하고 있다.

폭발한계는 폭발상한계와 하한계로 나누어지며, 폭발한계의 자료로는 1기압, 298 K에서 가연성물질의 부피퍼센트(volume percent)와 부피비(volume fraction)로서 제시되고 있다. 지금까지 파라핀족탄화수소화합물에 대한 폭발특성치 간의 연구들을 살펴보면 Jones[12]는 화학양론값(C_{st})을 이용하여 폭발하한계와 폭발상한계를 예측하는 식을 제시하였고, Zabetakis 등[2]은 연소한계의 온도의존성에 관한 연구를 하였으며, Butler 등[13]에 의해서는 인화점, 증기압, 분자량, 연소한계의 관계를 연구하였다. Affens 등[4]에 의해서는 Zabetakis 식을 변형하여 폭발한계의 온도의존성을 고찰하였다. 최근에는 Hustad 등[8]에 의한 메탄, 부탄, 수소, 일산화탄소의 순수기체 및 혼합기체에 대한 폭발한계의 온도의존성의 연구와 Vanderstraeten 등[14]에 의한 메탄과 공기 혼합물에서 폭발상한계의 온도 및 압력의존성에 대한 연구를 들 수 있다. Britton[15]은 폭발특성치를 정리하여 고찰한 바 있다. 본 연구에서는 그 동안의 연구들을 근거로 지금까지 나온 케톤류의 자료들을 이용하여 폭발한계와 여러 특성의 상관관계를 규명하여 이에 관련된 식을 제시하고, 폭발한계의 온도의존성을 고찰하여 새로운 예측식을 제시하고자 한다.

III. 화재 및 폭발 특성치 간의 상관관계를 찾기 위한 수학적 및 통계적 방법

폭발특성치들의 실험자료 분석을 통하여 특성치 간의 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(multiple regression analysis)을 이용하였다[16,17].

염화탄화수소 화합물에서 연소열과 탄소수, 탄소수와 폭발하한계, 폭발상한계와 연소열, 완전연소시 화학양론계수와 폭발하한계 등의 관계를 예측하기 위해 제시한 여러 가지 모델들 가운데 최적화된 모델을 선정하여야 한다. 최적화된 모델을 선정하기 위해서 통계학에서 많이 이용하는 A.A.P.E.(average absolute percent error)와 A.A.D.(average absolute deviation)를 사용하였으며 다음과 같다[10,18].

$$A.A.P.E. = \frac{\sum \left| \frac{X_{est.} - X_{exp.}}{X_{exp.}} \right|}{N} \times 100 \quad (1)$$

$$A.A.D. = \frac{\sum |X_{est.} - X_{exp.}|}{N} \quad (2)$$

여기서 $X_{est.}$ 는 추산식에 의해 추산된 특성값이고, $X_{exp.}$ 는 문헌값이며, N 은 자료(data)수이다.

또한 통계 분석을 위해 결정 값의 표준편차와 표준 결정계수(coefficient of determination)를 사용하였다.

$$S = \sqrt{\frac{\sum (Y_i - y_i)^2}{n - 1}} \quad (3)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (4)$$

$$r = \pm \sqrt{\frac{SSR}{SST}} \quad (5)$$

여기서 S 는 결정값의 표준오차, Y_i 는 문헌값, y_i 는 추산값이다. r^2 은 표본 결정계수, r 은 상관계수, SSR 은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression), SST 는 SSR 과 잔차에 의한 제곱합(sum of squares due to residual error)의 합이다.

IV. 화재 및 폭발 특성치 간의 상관관계

4.1. 탄소수와 연소열의 관계

탄소수 변화에 따른 노말알킬케톤류의 연소특성에 대한 규칙성을 살펴보고자 한다. 일반적으로 이들 관계를 살펴보기 위해서는 수학적 방법을 적용한다. 탄소수 변화에 따른 노말알킬케톤류의 연소열 관계를 graphical method로 살펴보면 선형(linear) 형태임을 알 수 있다. 선형관계의 모델을 설정하여 최소자승법(least square method)에 의해 모델의 상수를 data로부터 계산한다[3]. 계산을 통해 다음과 같은 최적화된 관계식을 얻었다.

$$\Delta H_c = 245.72 + 148.28n \quad (6)$$

여기서 ΔH_c 는 연소열이고, n 은 탄소수이다.

식 (6)에 의해 추산된 연소열 값과 문헌값[19]을 비교하여 Table 1에 나타내었다. 추산식에 의해 추산된 연소열(ΔH_c)과 문헌값은 거의 일치함을 보여주고 있다. 이를 근거로 여러가지 폭발특성치 간의 상관관계를 살펴볼 수 있는 기초적인 자료로 이용한다.

Table 1. Comparison between reported and predicted values of heat of combustion with carbon number for ketones.

Compounds	Molecular formula	Reported data [kcal/mol]	Predicted data [kcal/mol]
Acetone	C ₃ H ₆ O	395.5	394.0
2-Butanone	C ₄ H ₈ O	542.1	542.3
2-Pentanone	C ₅ H ₁₀ O	688.2	690.6
2-Hexanone	C ₆ H ₁₂ O	834.1	838.8
2-Heptanone	C ₇ H ₁₄ O	991.9	987.1
A.A.P.E.	-	-	0.4114
A.A.D	-	-	2.9120

여기서 2-헵타논(C₇H₁₄O)은 연소열에 대한 값이 제시되어 있지 않아 Cardozo[20]가 제시한 방법을 이용하여 예측된 값으로, 예측방법을 간략히 소개하면 다음과 같다.

$$N = N_c + \sum_i \Delta N_i \quad (7)$$

여기서 N_c 는 화합물의 총 탄소수이고, $\sum_i \Delta N_i$ 는 화합물 구조에 따른 보정값이다. 따라서 식 (4)의 N 값을 계산되면 다음 식에 대입하여 연소열을 예측하게 된다.

$$\Delta H_c = -198.42 - 615.14N \quad (8)$$

식 (7)과 (8)를 이용하여 예측된 2-헵타논의 연소열 값은 991.9 kcal/mol로서 이를 본 연구에 이용하고자 한다.

4.2. 폭발한계와 연소열

일반적으로 화염에는 그 이하의 온도는 없다고 하는 최저온도가 있고, 그 값은 탄화수소화합물 등에서 약 1200°C가 된다. 이와 같은 단열화염온도(adiabatic flame temperature)의 한계가 생기는 것은 탄화수소의 폭발한계와 연소열에 관계를 이용한 Burgess-Wheeler 법칙으로 설명이 가능하다. 이 법칙은 즉 두 값(폭발한계와 연소열)의 곱은 일정하고 폭발한계의 단위를 Vol%, 연소열의 단위를 kcal/mol로 표시하면, 그 값은 약 1050이 된다고 고려하면 쉽게 이해할 수 있다.

이 법칙은 폭발한계에 있어서 발생하는 열량은 연료의 종류에 관계없이 동일하다. 따라서 그것에 관계되는 화염온도는 일정하고 동시에 최저가 되기 때문이다. Burgess-Wheeler법칙에 의하면 연소열과 폭발한계

Table 2. Prediction of upper explosive limits with lower explosive limits for ketones.

Compounds	Molecular formula	$LEL_{exp.}$	$UEL_{exp.}$	$UEL_{pred.}$
Acetone	C ₃ H ₆ O	2	13.0	12.88
2-Butanone	C ₄ H ₈ O	1.8	10.1	10.33
2-Pentanone	C ₅ H ₁₀ O	1.5	8.2	8.11
2-Hexanone	C ₆ H ₁₂ O	1.2	8.0	7.80
2-Heptanone	C ₇ H ₁₄ O	1.11	7.9	8.08
A.A.P.E.	-	-	-	1.83
A.A.D	-	-	-	0.17

의 관계는 다음과 같다.

본 연구에서도 알킬케톤류의 연소특성의 규칙성을 살펴보기 위해 폭발하한계와 연소열의 관계를 식 (6)와 같이 나타낼 수 있었다.

$$(\Delta H_c) \times (LEL) = 1039 \quad (9)$$

이 식에 의한 연소열의 추산값은 문헌값과 비교한 결과 평균 3.38%의 차이로서 서로 상관관계가 있음을 알 수 있다.

4.3. 폭발하한계와 상한계의 관계

폭발한계의 연구에서 파라핀족탄화수소는 상한계와 하한계가 상관관계가 있음을 여러 문헌들에 그 결과가 발표되었다. 따라서 본 연구에서도 케톤류 역시 하한계 (LEL)와 상한계 (UEL)가 상관관계를 고찰하였다. 여러 예측 모델을 검토한 결과 다음과 같은 예측식을 제시한다.

$$UEL = 25.705 - 27.686LEL + 10.636LEL^2 \quad (10)$$

식 (10)에 의한 추산 결과를 문헌값[21]과 비교하여 Table 2에 나타내었다. 결정계수가 0.992로서 추산값과 문헌값이 일치함을 보여주고 있다.

V. 화염온도 및 폭발하한계의 온도의존성 예측

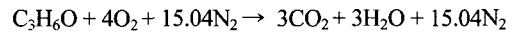
5.1. 화염온도 예측

그 동안 파라핀족탄화수소에 대한 폭발한계의 온도의존성에 대한 연구는 많이 이루어져 왔으나 다른 화합물에 대한 연구는 그다지 많지 않은 편이다. 따라서 다른 화합물에 대한 실험자료의 타당성 고찰에 있어 파라핀족탄화수소에 적용하는 경험식을 그대로 사용하고

있는 것이 최근까지의 연구이다.

본 연구에서는 알킬케톤류의 폭발하한계의 온도의존성을 고찰하기 위해 우선 지금까지 발표된 여러 이론 및 실험 자료를 이용하여 화염온도를 예측하고자 한다. 화염온도의 예측은 다음 식으로 예측할 수 있다. 알킬케톤류의 하나인 아세톤의 화염온도를 예측하면 다음과 같다.

아세톤의 공기와 연소반응식은 다음과 같다.



	Moles	C_p	nC_p
CO ₂	3	54.3	162.9
H ₂ O	3	41.2	123.6
N ₂	15.04	32.7	491.8
			$\Sigma nC_p = 778.3$

$$T_f = \frac{\Delta H_c}{\Delta n C_p} + 298 = \frac{1659000}{778.3} + 298 = 2430K \quad (11)$$

여기서 T_f 는 화염온도, ΔH_c 는 아세톤류의 순 연소열(J/mol), C_p 는 열용량(J/mol K)이다.

이와 같은 계산 방법에 의해 아세톤에서 2-헵타논까지의 화염온도를 계산하였고, 이 화염온도를 이용하여 폭발하한계에서의 화염온도를 추산하고자 한다.

폭발하한계에서의 화염온도 예측식은 Buckmaster 등[22]이 제시한 식을 이용하였는데 다음과 같다.

$$\frac{T_\infty}{T_\infty + C_{st, wt\%}} = \frac{298K}{T_f} \quad (12)$$

$$T_{lim} = \left(\frac{T_\infty + Y_\infty}{T_\infty + C_{st, wt\%}} \right) T_f \quad (13)$$

여기서 T_∞ 는 미연소 혼합물의 특성치, Y_∞ 는 폭발하한계에서의 양론계수, $C_{st, wt\%}$ 는 케톤류의 증기와 공기의 혼합물에서 양론중량백분을 그리고 T_{lim} 는 폭발하한계에서의 화염온도이다.

식 (13)에서 T_∞ 는 식 (12)에 의해 계산된 화염온도와 각각의 케톤류 증기와 공기의 혼합물에서 양론중량백분을 계산값을 이용하여 계산한다. 폭발하한계에서의 화염온도를 계산하기 위한 특성값들을 Table 3에 나타내었으며, 케톤류의 폭발하한계에서의 예측된 화염온도는 평균 1109°C(1382 K)로 예측되었다.

SFPE handbook[23]에서 C, H, O로 구성된 물질의 폭발하한계에서의 화염온도는 1600 K(±150 K)로 제시하고 있다. 만일 화염온도를 최소 온도로 한 경우는

Table 3. Prediction of flame temperature for lower explosion limits of n-alkylketones.

Compounds	Molecular formula	LEL (vol%)	$C_{st,vol\%}$	$C_{st,wt\%}$	T_{∞}	Y_{∞}	T_{flame} (K)	T_{lim} (K)
Acetone	C_3H_6O	2.6	5.43	4.99	0.00760	0.0283	2430	1409
2-Butanone	C_4H_8O	1.8	4.01	3.68	0.00560	0.0196	2441	1346
2-Pentanone	$C_5H_{10}O$	1.5	3.18	2.29	0.00441	0.0164	2450	1407
2-Hexanone	$C_6H_{12}O$	1.2	2.63	2.41	0.00363	0.0131	2455	1371
2-Heptanone	$C_7H_{14}O$	1.11	2.25	2.25	0.00307	0.0111	2484	1378
-	-	-	-	-	-	-	$\Sigma T_{lim}/n=1382$	

1173°C(1450 K)가 되는 이 온도는 본 연구에서 예측한 알킬케톤류의 화염온도는 1109°C로서 문헌에 제시된 화염온도와 64°C 차이로 약 5.8% 차이를 보이므로 거의 일치하고 있다. 반면에 파라핀족화합물의 폭발한계에서의 화염온도 실험값과 예측식에 의한 예측온도는 약 20%의 차이를 보이고 있음을 문헌에서 알 수 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 케톤류의 폭발한계에서의 화염온도 예측은 오차가 더 적은 것으로 사료된다.

5.2. 폭발한계의 온도의존성

일반적으로 폭발한계의 온도의존성을 살펴보면 계의 온도가 증가할 경우 폭발한계는 작아지고, 폭발상한계는 커져서 폭발범위가 넓어진다. 이는 온도가 증가함에 따라 분자간의 운동이 활발하여 폭발이 용이하기 때문이다.

폭발한계에서의 온도의존성을 고찰하기 위해서는 연소열, 폭발한계, 비열 그리고 폭발한계에서의 화염온도를 이용하여 표현될 수 있다.

$$\frac{L_{25}}{100} \cdot \Delta H_c = C_p(t_{lim} - 25) \tag{14}$$

$$\frac{L_t}{100} \cdot \Delta H_c = C_p(t_{lim} - t) \tag{15}$$

이 두 식에 의해 온도의존성 식은 다음과 같이 표현된다.

$$L_t = L_{25} \left[1 - \frac{t - 25}{t_{lim} - 25} \right] \tag{16}$$

노말 알코올의 폭발한계에서의 화염평균온도(t_{lim})는 1109°C이므로 이 온도를 식 (16)에 대입하면 다음과 같은 관계식이 된다.

$$L_t = L_{25} [1 - 9.22 \times 10^{-4} (t - 25)] \tag{17}$$

그동안 케톤류에 대한 연구가 없었으므로 케톤류에 대한 폭발한계의 온도의존성을 고찰하기 위해 Zabetakis가 제시한 파라핀족탄화수소에 적용되는 관계식을 이용하여 고찰하였으며, 제시한 관계식은 다음과 같다.

$$L_i(t) = L_i(25) - 0.182(t - 25) / \Delta H_c \tag{18}$$

이 식은 1기압, 25°C에서 제시한 폭발한계와 대상물질의 연소열(kJ)를 알면 가연성 물질의 온도의존성을 살펴볼 수 있다.

본 연구에서 제시한 추산식과 Zabetakis가 제시한 식에 의한 예측값과 아세톤과 MEK에 대한 문헌에 제시된 폭발한계 온도의존성의 실험값[24]을 비교하여 Table 4와 Table 5에 나타내었다.

아세톤의 경우 본 연구에서 제시한 추산식에 의한 예측값이 실험값과 비교하여 Zabetakis가 제시한 식 보다

Table 4. Comparison of literature and predicted values for temperature dependence of LEL of acetone.

Temp. (°C)	LEL _{exp.} (vol%)	Zabetakis	This work
25	2.6	2.6	2.6
100	2.4	2.46	2.42
200	2.0	2.27	2.18
A.A.D.	-	0.110	0.067

Table 5. Comparison of literature and predicted values for temperature dependence of LEL of MEK.

Temp. (°C)	LEL _{exp.} (vol%)	Zabetakis	This work
25	1.80	1.80	1.80
100	1.70	1.70	1.68
200	1.33	1.57	1.51
A.A.D.	-	0.080	0.067

0.043 vol% 정도 줄어서 실험값과 일치함을 보여 주고 있다. MEK의 경우 예측값이 실험값과 비교하여 Zabetakis가 제시한 식 보다 0.013 vol% 정도 줄어서 실험값과 일치함을 보여 주고 있다. 따라서 아세톤과 MEK의 폭발하한계의 온도의존성에 대해 본 연구에서 제시한 추산식에 의한 추산값이 문헌값과 비교한 결과, Zabetakis가 제시한 식보다 작은 차이를 보이고 있다.

지금까지는 순수물질의 폭발하한계의 온도의존성 및 혼합용제의 인화점을 예측할 경우 일반적으로 Zabetakis 식을 적용해 왔다. 그러나 본 연구에서 제시한 방법론에 의해 폭발하한계의 온도의존성 결과를 보면, Zabetakis 식은 파라핀족탄화수소에 적용하는 식으로써 다른 화합물 및 혼합물에 적용하기는 약간의 무리가 있다고 본다. 따라서 파라핀족탄화수소 이외의 실험 자료의 신뢰성을 평가하기에는 바람직하지 못하므로, 본 연구에서 제시한 식을 알킬케톤류에 적용하므로써 실험 자료의 신뢰성을 평가하는데 그 만큼 가치 있다고 사료되며, 본 연구를 다른 화합물의 폭발 특성 연구에도 이용되기를 기대한다.

VI. 결 론

알킬케톤류의 폭발특성치들 간의 상관관계를 고찰하였고, 알킬케톤류에 대해 열화학이론과 화염전파이론 근거로 폭발하한계에서의 화염온도를 예측하여 폭발하한계의 온도의존식을 제시한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 연소열과 탄소수의 관계는 잘 일치하였다.
- 2) 연소열과 폭발하한계는 상관관계를 보여주고 있다.
- 3) 폭발하한계에 의한 폭발상한계를 예측하는 식은 다음과 같다.

$$UEL = 25.705 - 27.686LEL + 10.636LEL^2$$

- 4) 폭발하한계에서 예측된 단일화염온도는 1109°C이다.

- 5) 폭발하한계의 예측된 단일화염온도를 이용한 폭발하한계의 온도의존식은 다음과 같다.

$$L_t = L_{25}[1 - 9.22 \times 10^{-4}(t - 25)]$$

참고문헌

[1] Crowl, D.A. and J.F. Louver, "Chemical Process

Safety Fundamentals with Applications", Prentice-Hall, (1990)

- [2] Zabetakis, M.G., G.S. Scott and G.W. Jones, "Limits of Flammability of Paraffin Hydrocarbons in Air", *Industrial and Engineering Chemistry*, **43**(9), 2120-2124, (1951)
- [3] 北川徹三, "化學安全工學", 日刊工業新聞社, (1971)
- [4] Affens, W.A. and G.W. McLaren, "Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in Air", *J. Chem. Eng. Data*, **17**(4), 482-488, (1972)
- [5] Lovachev, L.A., V.S. Babskin, V.A. Bunev, A.V. V'Yun, V.N. Krivulin and A.N. Baratov, "Flammability Limits : An Invited Review", *Combustion and Flame*, **20**, 259-289, (1973)
- [6] High, M.S. and R.P. Danner, "Prediction of Upper Flammability by a Group Contribution Method", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **26**(7), 1395-1399, (1987)
- [7] Kondo, S., Y. Urano, K. Tokuhashi, A. Takahashi, and K. Tanaka, "Prediction of Flammability Gases by Using F-Number Analysis", *J. of Hazardous Materials*, **A82**, 113-128, (2001)
- [8] Hustad, J.E. and O.K. Sonju, "Experimental Studies of Lower Flammability Limits of Gases and Mixtures of Gases at Elevated Temperature", *Combustion and Flame*, **71**, 283-294, (1988)
- [9] Karim, G.A., I. Wierzba and S. Boon, "The Lean Flammability Limits in Air of Methane, Hydrogen and Carbon Monoxide at Low Temperature", *Cryogenics*, **24**, 305-308, (1984)
- [10] Ha, D.M., "A Study on Explosive Limits of Flammable Materials - Prediction of Explosive Properties and Temperature Dependence of Explosive Limits for n-Alcohols-", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **14**(1), 93-100, (1999)
- [11] Ha, D.M., "Prediction of Temperature Dependence of Lower Explosive Limits for Paraffinic Hydrocarbons", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **15**(3), 71-77, (2000)
- [12] Jones, G.W., "Inflammation Limits and Their Practical Application in Hazardous Industrial Operation", *Chem. Rev.*, **22**(1), 1-26, (1938)
- [13] Butler, R.M., G.M. Cooke, G.G. Lukk and B.G. Jameson, "Prediction of Flash Points of Middle Distillates", *Industrial and Engineering Chemistry*, **48**(4), 808-812, (1956)
- [14] Vanderstraenten, B. et al., "Experimental Study of the Pressure and Temperature Dependence on the Upper Flammability Limit of Methane/Air Mixtures", *J. of Hazardous Materials*, **56**, 237-246, (1997)

- [15] Britton, L.G., "Two Hundred Years of Flammable Limits", *Process Safety Progress*, **21**(1), 1-11, (2002)
- [16] Box, G.E.P. and N.R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc., (1987)
- [17] Kleinbaum, D.G., L.L. Kupper and K.E. Muller, "Applied Regression Analysis and Other Multivariable Methods", 2nd ed., PWS-KENT Publishing Company, Boston, (1988)
- [18] Ha, D.M., "Interrelationship of Fire and Explosion Properties for Chlorinated Hydrocarbons", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **17**(4), 126-132, (2002)
- [19] Perry, R.H. and D.W. Green, "Perry's Chemical Engineers' Handbook", 7th ed., McGraw-Hill, (1997)
- [20] Cardozo, R.D., Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", *AIChE Journal*, **32**(5), 844-847, (1986)
- [21] Lenga, R.E. and K.L. Votoupal, "The Sigma Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Volume I-III", Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc., (1993)
- [22] Buckmaster, J. and D. Mikolatis, "A Flammability-Limit Model Upward Propagation through Lean Methane/Air in a Standard Flammability Tube", *Combustion and Flame*, **45**, 109-119, (1982)
- [23] Beyler, C.L., "The SFPE Handbook of Fire Protection Engineering ; Flammability Limits of Premixed and Diffusion Flames", 3rd ed., SFPE, (2002)
- [24] Cote, P.E. and J.L. Linville, "Fire Protection Handbook", 18th ed., NFPA, Quincy, Massachusetts, (2002)