

4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점 예측 및 표현

Prediction and Representation of Boiling Points for Combustible Solution of Quaternary Systems

김 문 갑* · 하 동 명** · 이 영 세*

M.G. Kim · D.M. Ha · Y.S. Lee

(1998년 7월 16일 접수, 1998년 10월 10일 채택)

ABSTRACT

MRSM(modified response surface methodology)-2 model is presented for the prediction of boiling points in combustible solution of quaternary systems. This model requires only normal boiling points of pure substances and group-group parameters which are based on the group-group concepts without the use of experimental data under consideration.

By means of this methodology, it is possible to predict the boiling points of the combustible mixture of quaternary systems by plotting of isothermal lines using computer graphics.

The proposed methodology has been tested and compared successfully with reported boiling points in journals for the combustible solution of quaternary systems. It is hoped eventually that this methodology will permit prediction of the flash point and flammability limit for the combustible mixture of multicomponent systems.

1. 서 론

화학공정은 대부분 다성분계를 이루고 있으며 이들 공정은 많은 양의 유기용제를 취급하고 있다. 위험물 구분에서 유기용제는 인화성 액체에 해당되는 물질로써 이들 물질은 생산, 처리,

수송, 저장할 때 취급 부주의 등으로 화재, 폭발 및 유해 물질의 누출이 발생할 수 있다. 따라서 인화성 혼합물질의 안전한 취급 및 위험성을 파악하기 위해서는 이들 물질의 화재, 폭발 특성 뿐만 아니라 물리적 및 화학적 성질을 파악해야 한다. 이 가운데 물리적 성질인 끓는점은 중요한

* 국립상주대학교 화학공학과

** 세명대학교 산업안전공학과

특성치 가운데 하나이다¹⁾.

화학물질은 순수물질(단일물질)로 사용되는 경우보다는 몇 가지 순수물질이 섞인 혼합물질로 사용되는 경우가 대부분이다. MSDS(Material Safety Data Sheets) 제도²⁾가 의도하는 것은 화학물질을 안전하게 취급함으로써 사고를 예방하는 것이다. 이러한 목적을 달성하기 위해서 물질안전보건자료(MSDS)는 혼합물 자체의 위험성 시험(실험)을 거쳐 평가되고 이를 바탕으로 작성하는 것이 원칙이다. 그러나 현실적으로 유해 위험성, 안정성 등의 제약 때문에 장기적이고 종합적 시험을 거쳐 정확하게 평가 된 경우는 전세계적으로도 그리 많지 않으며, 특히 우리 나라에서는 이에 대한 연구가 전무한 상태이다. 따라서 수많은 혼합 용제를 사용하고 있는 대부분의 화학산업 현장에서 각각의 인화성 혼합용제의 위험특성을 파악하기란 그만큼 어려움이 있다.

그동안 2성분계 및 3성분계 가연성 혼합용액의 끓는점^{3,4)} 및 인화점⁵⁾에 대한 연구는 어느 정도 이루어져 왔으나 특히 4성분계 이상의 혼합용제는 거의 연구되지 않고 있는 실정이다. 본 연구에서는 4성분계 가연성 혼합용제에 대해 4성분계를 구성하는 성분들의 혼합특성치와 순수성분의 특성치 만으로써 실험에 의존하지 않고 혼합용액의 특성인 끓는점을 추산하는 모델을 이용하여 4성분계 혼합용액의 끓는점을 예측하고자 한다. 또한 예측한 모델을 이용하여 컴퓨터 그래픽에 의해 4성분계 등온선(isothermal lines)을 정사면체에 입체적으로 도시하여 혼합물의 특성에 대해 이해하기 어려운 문제들을 시각적으로 표현함으로써 그들의 현상을 규명하고, 이 방법론을 이용하여 4성분계 가연성혼합용액의 인화점 및 폭발한계 등의 연구에 응용하는데 그 목적이 있다.

2. 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점 추산을 위한 MRSM-2 모델

2.1 모델설정의 배경

2성분계 혼합용액의 열역학적 특성값만을 이용하여 4성분계의 조성변화에 따른 온도를 추

산하기 위해서는 2성분계 혼합용액의 온도-조성간의 관계를 정확하게 표현할 수 있는 관계식의 모색이 필요하다.

다성분계로 확장됨에 따라 늘어나는 변수들 사이에 상호 연관성을 고려하여 2성분계 혼합용액의 온도와 조성관계식을 순수성분이 나타내는 영향과 두 순수성분의 상호작용에 따른 영향으로 나누어 다음과 같이 나타내었다.

$T_{mix} = x_1T_1 + x_2T_2 + T_{corr}$ (1)
 여기서 T_1 과 T_2 는 순수성분의 표준 끓는점이며, $x_1T_1 + x_2T_2$ 항은 각 순수성분의 독자적 영향에 따른 항이며, T_{corr} 는 열역학적으로 두 순수성분이 혼합됨으로서 이상저동으로부터 벗어나는 정도를 보정(correction)해 주는 항이다. 이 보정항은 이상용액일 경우는 0(zero)이 되나, 용액이 이상성을 벗어나는 경우에는 T_{corr} 항을 필요로 한다. T_{corr} 항은 수학적방법, 통계학적방법 및 용액론을 근거로 하여 다음과 같이 6개의 식을 설정하였다.

$$T_{corr} = Ax_1x_2 \text{ (2)}$$

$$T_{corr} = Ax_1x_2 + Bx_1x_2(x_1 - x_2) \text{ (3)}$$

$$T_{corr} = Ax_1x_2 + Bx_1x_2 + Cx_1x_2 \text{ (4)}$$

$$T_{corr} = Ax_1x_2 + Bx_1x_2(x_1 - x_2) + Cx_1x_2(x_1 - x_2)^2 \text{ (5)}$$

$$T_{corr} = Ax_1x_2 + Bx_1x_2(x_1 - x_2) + Cx_1^2x_2^2 \text{ (6)}$$

$$T_{corr} = Ax_1x_2 + Bx_1x_2(x_1 - x_2) + Cx_1x_2(x_1 - x_2)^2 + Dx_1x_2(x_1 - x_2)^3 \text{ (7)}$$

최적화된 모델을 구하기 위해 통계 및 분석 프로그램으로 많이 사용되고 있는 SPSS/PC⁶⁾을 이용하였으며, 모델 판별에 있어서는 설정된 6개의 식에 대해 다중회기(multiple regression)방법에 따라서 통계학적 분석을 실시하였다. 최적 모델을 선택하는 기준은 결정계수(r^2 , coefficient of determination)를 가장 크게 하는 모델이나 평균자승오차(mean square error)를 가장 작게 하는 모델을 최적 모델을 선택하는 기준으로 하였다. 이와 같은 이론을 근거로 식(5)를 최적 모델로 선정하여 MRSM-2(modified RSM-2) 모델이라 명명하고, 이 모델을 이용하여 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점을 예측하고자 한다.

2.2 MRSM-2(Modified RSM-2) 모델

MRSM-2 모델은 식(1)과 식(5)로부터 2성분 계인 경우는 다음과 같이 표현된다.

$$T_{mix} = x_1 T_1 + x_2 T_2 + A_{12} x_1 x_2 + B_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + C_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 \dots \dots \dots (8)$$

여기서 A_{12} , B_{12} 및 C_{12} 는 2성분 상호작용 파라미터(interaction parameter, 이하에서는 파라미터로 표기함)이다. 이를 일반화한 N성분에 대하여 MRSM-2 모델은 다음과 같다.

$$T_{mix} = \sum_{i \neq j}^n T_i x_i + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} A_{ij} x_i x_j + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} B_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} C_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 \dots \dots \dots (9)$$

이를 4성분계에 적용하면 식(10)과 같이 표현된다.

$$T_{mix} = x_1 T_1 + x_2 T_2 + x_3 T_3 + x_4 T_4 + A_{12} x_1 x_2 + A_{13} x_1 x_3 + A_{14} x_1 x_4 + A_{23} x_2 x_3 + A_{24} x_2 x_4 + A_{34} x_3 x_4 + B_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + B_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + B_{14} x_1 x_4 (x_1 - x_4) + B_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + B_{24} x_2 x_4 (x_2 - x_4) + B_{34} x_3 x_4 (x_3 - x_4) + C_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + C_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 + C_{14} x_1 x_4 (x_1 - x_4)^2 + C_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + C_{24} x_2 x_4 (x_2 - x_4)^2 + C_{34} x_3 x_4 (x_3 - x_4)^2 \dots \dots \dots (10)$$

식(8)과 식(10)에서 A_{ij} , B_{ij} 및 C_{ij} 는 4성분계 파라미터가 아닌 4성분계를 구성하는 각 2성분계 사이의 상호작용 파라미터(group-group interaction parameters, 이하에서는 group-group 파라미터로 표기함)로서, 실험값 없이 group-group 파라미터와 순수성분의 표준끓는점만을 이용하여 4성분계 혼합용액의 조성변화에 따른 끓는점을 추산하였다.

3. Group-Group 및 4성분계 가연성 혼합용액 선정

2성분계 가연성 혼합용액은 무수히 많으며 이를 일일이 실험에 의한 온도와 조성관계의 추산은 번거로움이 따르며, 기액평형식에 의해서도 그 식을 이루는 열역학적 특성인자들 중에서 활동도 계수는 실험값 없이도 추산이 가능하나 그 나머지 기액평형식의 인자들은 각각의 성분 및 2성분 혼합물에 대해 추정에 필요로 하는 특성값이 있어야 온도와 조성 관계를 표현할 수 있게 된다⁷⁾. 따라서 본 연구는 수많은 유기화합물

들 중에서 같은 작용기를 포함하는 화합물들을 하나의 "group"으로 분류하여(예: paraffin, aromatic, halogen ...group), 이들 각 group 사이의 특성을 고려한 group-group 파라미터값만을 이용하여 4성분계 가연성 혼합용액의 온도와 조성간의 관계를 추산하고자 한다.

MRSM-2 모델에 의해 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점을 추산하고, 이 끓는점들을 computer graphics에 의해 시각적으로 표현하고자 한다. 제시한 방법에 의해 기액평형 관계의 표현가능성 및 정확성을 검토하기 위해 선정한 4성분계는 정압(760mmHg)하에서 얻어진 기액평형 실험자료로서 다음과 같다.

- 계 1: Methyl ethyl ketone(MEK)(1)-Benzene(2)-Cyclohexane(3)-2-Propanol(4)⁸⁾
- 계 2: Acetone(1)-Chloroform(2)-Methanol(3)-Ethanol(4)⁸⁾

선정한 2종류의 4성분계 혼합물을 구성하는 각 순수성분의 특성에 따라 나눈 group들을 조합하여 9종류의 group-group계로 분류하였으며, 이를 Table 1에 나타내었다.

Table 1 Number of data points and data sets for the selected binary group-group systems

Group-Group systems	No. of data sets	No. of points	Group-Group systems	No. of data sets	No. of points
Aromatic-Ketone	6	122	Alcohol-Paraffin	9	164
Ketone-Paraffin	6	82	Ketone-Halogen	11	199
Alcohol-Ketone	11	182	Alcohol-Halogen	9	165
Aromatic-Paraffin	11	259	Alcohol-Alcohol	33	511
Alcohol-Aromatic	8	207			

4. MRSM-2 모델의 파라미터 추산

4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점을 추산하기 위한 group-group 파라미터 모델과 그들 사이의 관계식은 다음과 같다.

$$T_{mix} = \sum_{i \neq j}^n T_i x_i + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} A_{ij} x_i x_j + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} B_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i \neq j}^{n-1, n} C_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 \dots \dots \dots (9)$$

여기서 A_{ij} , B_{ij} 및 C_{ij} 상호작용 파라미터로써 식(12), (13) 및 (14)와 같고 이 식들을 계산하기

위한 계산식은 식(15)에서 (17)과 같다. 식(15)에서 (17)의 δ_T 는 순수성분의 끓는점을 이용한 값으로 식(18)과 같다.

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \Psi_T^A(T_i + T_j) \dots\dots\dots (12)$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2} \Psi_T^B(T_i + T_j) \dots\dots\dots (13)$$

$$C_{ij} = \frac{1}{2} \Psi_T^C(T_i + T_j) \dots\dots\dots (14)$$

$$\Psi_T^A = A + B/\delta_T + C(\ln \delta_T) + D \delta_T + E \delta_T^2 + F \delta_T^3 \dots\dots\dots (15)$$

$$\Psi_T^B = A' + B'/\delta_T + C'(\ln \delta_T) + D' \delta_T + E' \delta_T^2 + F' \delta_T^3 \dots\dots\dots (16)$$

$$\Psi_T^C = A'' + B''/\delta_T + C''(\ln \delta_T) + D'' \delta_T + E'' \delta_T^2 + F'' \delta_T^3 \dots\dots\dots (17)$$

$$\delta_T = \left| \frac{T_i - T_j}{T_i + T_j} \right| \dots\dots\dots (18)$$

윗 식에서의 group-group 파라미터는 다중회귀법에 의해 액상 및 기상에서 각각 구한다. 위의 방법에 따라 선정한 9종류의 group-group 중에서 halogen-ketone과 alcohol-alcohol group에 대해 Table 2와 3에 나타내었으며, 이들을 제외한 나머지 group-group 파라미터는 이전에 발

표된 논문⁴⁾에서 인용하였다. 액상의 경우 A, B, C, D, E 및 F는 식(15)~(17)의 group-group 파라미터를 뜻하며, A_{ij} , B_{ij} , 및 C_{ij} 의 파라미터와 관계지어 Ψ_T^A , Ψ_T^B , 및 Ψ_T^C 을 계산한다. 기상의 경우에도 액상의 경우와 같은 방법으로 구한다. MRSM-2 모델에 의해 4성분계 가연성 혼합용액의 온도를 추산하기 위한 계산절차는 다음과 같다.

1단계: 추산하고자 하는 계의 각 순수 성분들의 특성에 따라 group-group계로 분류한다.

2단계: 각 순수성분의 표준끓는점과 group-group 파라미터를 이용하여 식(18)과 식(15)~(17)로부터 Ψ_T^A , Ψ_T^B , 및 Ψ_T^C 을 각각 계산한다.

3단계: 각 순수성분의 표준끓는점과 2단계에서 계산된 Ψ_T^A , Ψ_T^B 및 Ψ_T^C 을 이용하여 식(12)~(14)로부터 2성분 파라미터(binary parameters) A_{ij} , B_{ij} 및 C_{ij} 를 각각 계산한다.

4단계: 마지막으로 각 A_{ij} , B_{ij} 및 C_{ij} 를 식(9)에 대입하면 추산하고자 하는 4성분계의 온도-조성 관계를 나타내는 식이 된다.

이와 같은 계산 과정을 액상과 기상에 대해 각각 적용하여 조성이 변화함에 따른 4성분계 가연성혼합용액의 끓는점을 예측한다.

Table 2 The group-group parameters of halogen-ketone group for calculating binary interaction parameters

	Liquid phase			Vapor phase			
	A ₁₂	B ₁₂	C ₁₂	A ₁₂	B ₁₂	C ₁₂	
halogen-ketone							
A	12.071031	-5.499679	0.428664	A	6.495113	10.783989	13.215653
B	0.013928	-0.005730	0.000820	B	0.008133	0.011560	0.014483
C	2.639090	-1.179152	0.104509	C	1.440270	2.334757	2.866520
D	-144.078503	70.731634	-4.319987	D	-73.101582	-132.659591	-162.132391
E	1355.052796	-744.179941	49.488268	E	673.914717	1313.113840	1579.419857
F	-5456.236232	3357.317245	-386.415282	F	-2519.462934	-5253.201568	-6207.572493

Table 3 The group-group parameters of alcohol-alcohol group for calculating binary interaction parameters

	Liquid phase			Vapor phase			
	A ₁₂	B ₁₂	C ₁₂	A ₁₂	B ₁₂	C ₁₂	
alcohol-alcohol							
A	2.833250	-0.384209	2.800421	A	2.379932	-2.142285	6.318080
B	0.003444	-0.000419	0.003832	B	0.002922	-0.002664	0.008029
C	0.631872	-0.084486	0.645888	C	0.532040	-0.480712	1.426677
D	-31.995876	4.489583	-27.744554	D	-26.935515	22.700643	-66.007300
E	262.811568	-41.506592	222.345179	E	282.148962	-159.777158	489.546706
F	-1069.661648	353.691809	-989.046821	F	-1120.643314	540.135732	-1095.150988

5. 결과 및 고찰

본 연구에서 선정된 2개의 4성분계 가연성 혼합용액((MEK-benzene-cyclohexane-2-propanol계와 acetone-chloroform-methanol-ethanol계)에 대하여 각 순수성분의 표준끓는점과 group-group 파라미터값만을 이용하여 기액평형 실험값에 의존하지 않고 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점을 추산하였다. 제시된 방법론에 의해 추산된 4성분계 혼합용액의 끓는점과 실험값을 비교하여 그 결과를 고찰하였다.

또한 computer graphics에 의해 입체적으로 등온선을 도시함으로써 4성분계 혼합용액의 경우 기액평형 실험값 만으로 파악하기 어려운 상표면의 현상을 보다 쉽게 이해할 수 있도록 plotting하여 나타내었다.

5.1 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점에 대한 추산값과 실험값의 비교

순수성분의 표준끓는점과 group-group 파라미터값에 의한 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점 추산에 있어서 제시된 방법론의 적용가능성 및 추산값과 실험값의 차이정도를 알기 위해서 A.A.D.(absolute average deviation)을 사용하였다.^{3,4,5)}

$$A.A.D. = \sum_{i=1}^n \frac{|T_{exp.} - T_{est.}|}{N}$$

여기서 $T_{exp.}$ 는 실험값의 끓는점이며, $T_{est.}$ 는 추산된 끓는점이고, N는 자료수이다.

선정된 2개의 4성분계에 대하여 끓는점과 상호작용 파라미터값에 의한 추산값과 실험값을 비교하여 Table 4에 나타내었다.

MEK-benzene-cyclohexane-2-propanol계 경우 추산값과 실험값이 평균 0.5~0.6°C차로 일치함을 보여주고 있다. Acetone-chloroform-methanol-ethanol계는 추산값과 문헌값의 차이가 평균 약 2°C로써 앞의 계보다 약간의 차이를 보이고 있는데 이는 실험자료의 오차와 혼합용액이 갖는 특이한 성질 때문인 것으로 사료된다.

2개의 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점 추산을 통하여 가연성 혼합용액의 끓는점을 어느 정도 예측할 수 있게됨에 따라 앞으로 다른 혼

합용액의 끓는점들을 예측하고, 또한 실험에서 얻고자하는 실험자료에 많은 도움을 줄 수 있다고 본다.

Table 4 Comparison between reported and predicted values of boiling temperature for quaternary systems

Systems	MEK(1)-Benzene(2) -Cyclohexane(3)-2-PrOH*(4)		Acetone(1)-Chloroform(2) -Methanol(3)-Ethanol(4)		
	Ph. †	Liquid	Vapor	Liquid	Vapor
T ₁		79.60000	79.60000	56.05000	56.05000
T ₂		80.10000	80.10000	61.15000	61.15000
T ₃		80.70000	80.70000	64.55000	64.55000
T ₄		82.30000	82.30000	78.25000	78.25000
A ₁₂	Para. ‡	-6.22092	-6.26170	1.75831	6.06274
A ₁₃		-34.75680	-33.97491	-14.06321	-10.0378
A ₁₄		-13.76569	-12.81080	-23.62502	-4.73573
A ₂₃		-11.88810	-11.81619	-34.59285	-35.15767
A ₂₄		-36.25312	-32.80147	-37.01608	-23.23008
A ₃₄		-47.01050	-47.97014	-3.388743	3.30144
B ₁₂		0.62000	0.38936	-1.158817	-7.58540
B ₁₃		1.00001	-3.44904	1.055150	-5.37188
B ₁₄		-0.13324	-5.01942	15.02561	-7.80274
B ₂₃		-0.98114	-1.49021	5.44466	-19.92912
B ₂₄		-5.66065	-16.81429	20.89404	-20.98638
B ₃₄		8.14471	3.85594	0.46698	-0.14751
C ₁₂		-1.68209	-0.25156	-1.30685	-3.62566
C ₁₃		-16.45257	25.05212	-1.89877	3.73435
C ₁₄		-2.09361	3.38805	-9.72968	-1.94701
C ₂₃		-1.67211	2.52452	-46.09418	23.36165
C ₂₄		-34.41504	15.47444	-34.39211	-0.51561
C ₃₄		-75.05334	47.44879	-3.05898	1.65888
A.A.D		0.5002	0.6700	2.2960	1.7962

*: 2-propanol. †: phases, ‡: parameters

제시된 방법론을 이용하여 가연성 혼합용액의 끓는점 뿐만 아니라 화재·폭발특성치인 인화점 및 폭발한계의 연구에 응용되기를 기대한다.

5.2 Computer graphics에 의한 4성분계 가연성 혼합용액의 특성 표현

MRSM-2 모델을 이용하여 4성분계 상표면의 등온선을 도시함으로써 실험값 만으로는 이해하기 어려운 문제들을 시각적으로 해석할 수 있으며, 또한 상표면의 조성변화에 따른 혼합용액의

끓는점 분포를 관찰할 수 있다.

3성분계의 경우는 평면상에 등온선을 표시하여 액상 및 기상의 조성이 변화함에 따른 온도 표면의 현상을 표현하였으나³⁾ 4성분계는 3차원 공간에 입체적으로 묘사되어야 하며, 각 조성의 합이 $1 (\sum_{i=1}^4 = 1)$ 이라는 조건을 만족하도록 정사면체에 등온선을 도시하였다. 정사면체의 4개의 각 면은 4성분계를 구성하는 4종류의 3성분계 등온선을 표시하였고, x_1, x_2 및 x_3 로 이루어지는 3성분계 면에 평행으로 x_4 의 조성이 0.2, 0.4, 0.6, 및 0.8인 단면상에 4성분계 등온선을 도시하였다. 따라서 정사면체 각 모서리는 4성분계를 구성하는 6종류의 2성분계의 온도 조성간의 관계를 뜻하며, 4개의 각 면은 3성분계 등온선을 표시하고, 각 단면은 4성분계 가연성 혼합용액의 등온선을 나타낸다.

2개의 4성분계 가연성 혼합용액 가운데 MEK-benzene-cyclohexane-2-propanol계의 등온선을 Fig. 1에 나타내었다. 제시된 방법에 의해 추산된 온도를 정사면체에 표현하였을 때 모든 면에서 각 온도를 나타내는 등온선은 실험값과 거의 일치함을 보여주고 있다.

따라서 지금까지는 가연성 혼합용제의 2 및 3성분계 혼합용액에 국한되어 특성치연구가 이루어졌으나, 본 연구에서 제시한 방법론에 의해 4성분계 이상의 혼합용제 특성 파악 연구에 기초적인 자료로 제공하였다. 또한 이 방법론을 사용하여 가연성 혼합기체의 연소범위의 폭발영역 등의 연구에 응용되기를 기대한다.

6. 결 론

실험자료없이 순수성분의 특성값과 group-group 파라미터만을 이용하여 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점을 추산하는 MRSM-2모델을 제시하였다. 제시된 MRSM-2모델에 의해 추산된 혼합용액의 끓는점과 실험값을 비교 검토하였다. 또한 제시한 MRSM-2모델을 이용하여 computer graphics에 의해 4성분계 가연성 혼합용액의 끓는점의 등온선을 도시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 선정된 2개의 4성분계 가연성 혼합용액 가운데 MEK-benzene-cyclohexane-2-propanol계의 추산값과 실험값의 차이는 평균 약 0.5°C였으며, acetone-chloroform-methanol-ethanol계는 약 2.0°C의 차이를 나타내었다.
- 2) Computer graphics에 의해 추산된값을 정사면체에 표현했을 때 모든 면에서 각 온도를 나타내는 등온선이 실험값과 거의 일치하고 있다.
- 3) 제시된 방법론은 4성분계 가연성 혼합용액의 특성을 파악하는데 기초적인 자료를 제공하였으며, 화재·폭발특성인 연소범위의 폭발영역과 인화점 등의 연구에 이용되기를 기대한다.

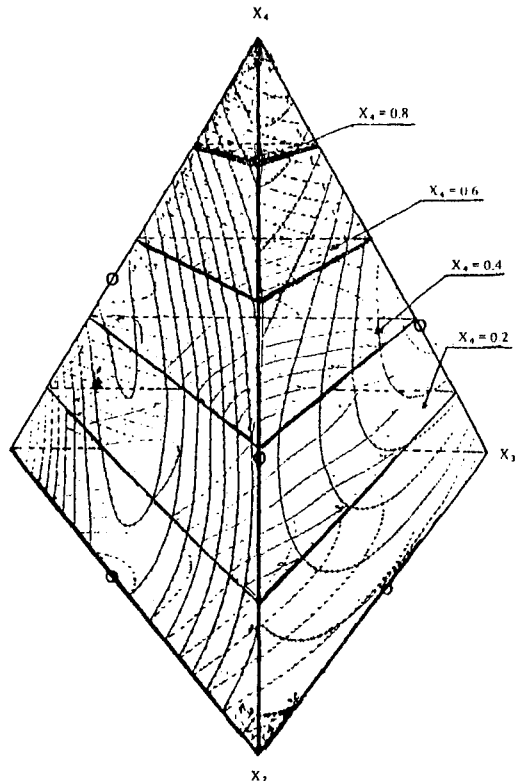


Fig. 1 Isothermal lines of quaternary system; MEK(1)-benzene(2)-cyclohexane(3)-2-propanol(4).

참 고 문 헌

- 1) 이수경, 하동명, 최신 화공안전공학, 동화기술, 1997.
 - 2) E. Meyer, Chemistry of Hazardous Materials, 2nd ed., Prentice-Hall, 1990.
 - 3) D.M. Ha and J.C. Park, "The Representation of Ternary systems by the Estimation of Group-Group and Interaction Parameters for MRSM-1 Model", HWAHAK KONGHAK, Vol. 29, No. 3, pp. 284~299, 1991.
 - 4) M.G. Kim, D.M. Ha and J.C. Park, "Modified Response Surface Methodology(MRSM) for Phase Equilibrium-Application", Korean J. of Chem. Eng. Vol. 12, No. 1, pp. 39~47, 1995.
 - 5) D.M. Ha and M.G. Kim, "Prediction of Flash Points for the Flammable Ternary System", Journal of the Korean Inst. for Industrial Safety, Vol. 12, No. 3, pp. 76~82, 1997.
 - 6) 정충영, 최이규, SPSSWIN을 이용한 통계분석, 무역경영사, 1997.
 - 7) R.C Reid, J.M. Prausnitz and B.E. Poling, The Properties of Gases and Liquids, 4th ed., McGraw-Hill, 1987.
 - 8) J. Gmehling, U. Onken and W. Arlt, Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection, Vol. 1, Part 1~Part 7, DECHEMA, 1980.
-