

가연성물질의 폭발한계에 관한 연구

—알코올화합물의 폭발특성치 및 폭발한계의 온도의존성 예측—

A Study on Explosive Limits of Flammable Materials

—Prediction of Explosive Properties and Temperature Dependence of Explosive Limits for n-Alcohols—

하 동 명*

Dong-Myeong Ha

(1998년 10월 28일 접수, 1999년 1월 5일 채택)

ABSTRACT

By using literature data, the empirical equations have been derived which describe the interrelationships of explosion and other related properties of n-alcohols. The properties which have been correlated data are : lower and upper explosive limits, heats of combustion, carbon numbers. Also, the new equation for predicting the temperature dependence of lower explosive limits(LEL) of n-alcohols on the basis of explosive limits, heats of combustion, flame propagation theory and mathematical method is proposed.

The values calculated by the proposed equations were a good agreement with literature data within a few percent. From a given explosive properties, by using the proposed equations, it is possible to predict the other properties.

It is hoped eventually that this method will permit the estimation of the explosive properties of alcohol with improved accuracy and the broader application for other compounds.

1. 서 론

대부분의 화학공업산업에서는 많은 가연성물질을 사용하고 있으며, 이들 가연성물질은 취급, 수송 및 저장에 있어서 부주의로 인한 화재와

폭발이 야기될 수 있다. 화재, 폭발에 관련되는 특성치로는 인화점, 최소발화온도, 연소점, 폭발(연소)한계, 최소발화에너지, 증기밀도, 액체와 기체의 비중, 끓는점, 녹는점, 점성, 연소열, 전기전도도 등이 있다. 이들 가운데 폭발한계는 화

* 세명대학교 산업안전공학과

재, 폭발을 예방하기 위한 가장 기초적인 자료인데도 불구하고 실험자료의 부족과 부정확성 때문에 그다지 연구가 되지 않고 있는 실정이다. 그러나 가연성물질의 안전한 취급을 위해서는 가장 기초적인 위험 특성 자료인 폭발한계(화재안전자료)에 대한 지식을 필요로 한다.

물질이 연소하는데는 가연성물질, 산소공급원, 발화원(점화에너지) 등의 3요소가 필요하다. 발화원이 존재할 때 가연성가스와 공기가 혼합하여 일정 농도 범위내에서만 연소가 이루어지는데 이 혼합범위를 폭발(연소)한계(explosive(flammable) limits) 또는 연소범위이라고 한다¹⁾.

폭발한계의 연구로는 Zabetakis 등²⁾의 증기중에서 파라핀족탄화수소의 연소한계에 관한 연구, Spakowski³⁾의 폭발상한계에 의한 폭발하한계의 관계를 이용한 화염전파와 압력에 관한 연구, 北川徹三⁴⁾의 폭발한계 추산의 연구, Affens 등⁵⁾의 공기중에서 탄화수소 용액의 연소특성치의 연구, Lovachev 등⁶⁾의 연소한계에 대한 화염전파 방향에 관한 연구, High 등⁷⁾에 의한 그룹기여법(group contribution method)를 이용한 폭발상한계 추산 등을 들 수 있다. 또한 Ha⁸⁾에 의한 연구로는 폭발상한계와 하한계의 상관관계에 의한 파라핀족탄화수소화합물의 폭발상한계 추산에 관한 연구 등이 있다.

폭발한계의 대한 대부분의 연구는 순수물질 가운데에서도 탄화수소에 국한된 연구가 많이 이루어지고 있다. 산업현장에서 취급하는 유기용제는 그 종류가 다양하며, 혼합물의 경우는 더욱 다양하여 특성치의 상관관계 연구는 너무 방대하다고 할 수 있다. 본 연구에서는 이렇게 많은 물질이라하여 이에 대한 연구를 방치할 수 없으므로 우선 파라핀족탄화수소화합물 다음으로 산업현장 및 화학공정에서 많이 취급하고 있는 알코올류에 대해 폭발특성치들 간의 상관관계와 폭발한계의 온도의존성에 대해 기초적인 연구를 하고자 한다.

그동안 문헌에 발표된 여러 이론과 문헌자료(실험자료)를 고찰하여 수학적 및 통계적 방법에 의해 알코올류의 화재, 폭발의 특성을 파악할 수 있는 새로운 이론을 제시한다. 여기서 제시한 방법론(methodology)을 이용하여 실험에서

찾고자하는 다른 알코올류의 폭발특성자료에 도움을 주고, 알코올의 산화, 발화, 연소의 공정에 기초적인 자료로 사용되도록 한다. 또한 이 방법론에 의해 그 동안 실험자료가 제시되어 있지 않는 다른 작용기에 해당되는 물질의 화재, 폭발특성치를 예측하는 방법으로 사용할 수 있도록 하는데 목적이 있다.

2. 폭발한계에 관련된 특성

폭발한계는 초기온도, 초기압력, 연소열, 분자량, 불활성가스, 산소농도, 최소발화에너지의 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, 298K에서 가연성물질의 부피퍼센트(volume percent)와 부피비(volume fraction)로서 제시되고 있다. 지금까지 파라핀족화합물에 대한 폭발특성치 간의 연구들을 살펴보면 Jones⁹⁾는 화학양론값(C_{st})을 이용하여 폭발하한계와 폭발상한계를 예측하는 식을 제시하였고, Zabetakis 등²⁾은 연소한계의 온도의존성에 관한 연구를 하였으며, Butler 등¹⁰⁾에 의해서는 인화점, 증기압, 분자량, 연소한계의 관계를 연구하였다. Affens 등⁵⁾에 의해서는 Zabetakis 식을 변형하여 폭발한계의 온도의존성을 고찰하였다. 최근에는 Hustad 등¹¹⁾에 의한 메탄, 부탄, 수소, 일산화탄소의 순수기체 및 혼합기체에 대한 폭발한계의 온도의존성의 연구와 Vanderstraeten 등¹²⁾에 의한 메탄과 공기 혼합물에서 폭발상한계의 온도 및 압력의존성에 대한 연구 등을 들 수 있다. 본 연구에서는 그동안의 연구들을 근거로 지금까지 나온 n-알코올의 실험자료들을 이용하여 폭발한계와 여러 특성의 상관관계를 규명하여 이에 관련된 식을 제시하고, 폭발한계의 온도의존성을 고찰하여 새로운 예측식을 제시하고자 한다.

3. 폭발특성치 간의 상관관계를 찾기 위한 최적화 방법

폭발특성치들의 실험자료 분석을 통하여 특성치 간의 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(multiple regression analysis)을 이용하였다^{13,14)}. 다중회귀분석이란 독립변수와 종속변수 간의 관련성을 수학적 모형(모델)을 이용하여 측정된 변수들의 자료로부터 추정하고 분석하는 통계적인 방법으로 추정된 모델을 사용하여 필요한 예측을 하거나 관심있는 통계적 추정과 검정을 실시한다. 이 방법에 대해서는 이미 여러 문헌을 통하여 소개하였으므로 여기서는 간략히 나타내기로 한다.

제시한 모델을 다항식의 일반적인 형태로 표시하면 다음과 같은데,

$$Y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + \dots + px^p + \dots \quad (1)$$

여기서 각 매개변수 a, b, c, d, e, ...을 추산하기 위한 방법으로 최소화(minimization) 방법을 이용하였다. 이 방법은 sum of square of deviation(S.S.D.)을 구하기 위해 각 매개변수를 편미분하여 이를 영(zero)으로 두어서 얻어지는 정규식(normal equation)의 해를 구하면 된다.

알코올 화합물에서 연소열과 탄소수, 탄소수와 폭발한계, 탄소수와 폭발상한계 그리고 폭발한계와 폭발상한계 등의 관계를 예측하기 위해 제시한 여러가지 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^{8,14)}.

$$A.A.P.E. = \frac{\sum \left| \frac{X_{est.} - X_{exp.}}{X_{exp.}} \right|}{N} \times 100 \quad (2)$$

$$A.A.D. = \frac{\sum |X_{est.} - X_{exp.}|}{N} \quad (3)$$

여기서 $X_{est.}$ 는 추산식에 의해 추산된 특성치이고, $X_{exp.}$ 는 문헌값이며, N은 자료(data)수이다.

최근에는 제시된 추산 모델의 타당성을 검증하기 위해 SPSS의 통계프로그램¹⁵⁾을 이용하여 쉽게 검증할 수 있으므로 본 연구에서도 이를 사용하였다.

4. 특성치 간의 상관관계

4.1 연소열과 탄소수

알코올의 연소 특성치를 파악하기 위해 우선 탄소수 증가에 의한 연소열의 관계를 살펴보면 다음과 같은 관계식을 얻을 수 있다.

$$\Delta H_c = 5.640 + 145.32n \quad (4)$$

식(4)에 의해 추산된 연소열 값과 문헌값¹⁶⁾을 비교하여 Table 1에 나타내었으며, 추산식에 의해 추산된 연소열(ΔH_c)과 문헌값은 거의 일치함을 보여주고 있다. 이를 근거로 여러가지 특성치 상관관계를 살펴볼 수 있는 기초적인 자료로 이용한다. 또한 SPSS에 의해 통계분석 결과 추산모델의 유용성을 찾을 수 있었으며, Fig. 1에 그 결과를 보여 주고 있다. ANOVA(analysis of variables) 분석 결과 F 값이 아주 크게 보여주고 있으므로 제시된 추산 모델은 그만큼 유용하다 할 수 있겠다.

Table 1 Comparison between reported and predicted values of heat of combustion with carbon numbers for n-alcohols

Compounds	Reported data	Predicted data
CH ₃ OH	152.53	150.96
C ₂ H ₅ OH	295.17	296.28
n-C ₃ H ₇ OH	440.68	441.60
n-C ₄ H ₉ OH	587.00	586.93
n-C ₅ H ₁₁ OH	731.48	732.25
n-C ₆ H ₁₃ OH	878.73	877.57
A.A.P.E.		0.3180
A.A.D.		0.9348

4.2 폭발한계와 탄소수

지금까지 파라핀족탄화수소에 대한 연구 결과에서 폭발한계가 탄소수와 상관관계가 있음을 여러 문헌들에서 알 수 있으므로 이를 근거로 알코올류 역시 폭발한계와 탄소수가 상관관계가 있는나를 살펴보고자 한다. 먼저 문헌자료¹⁷⁾를 통하여 폭발한계와 탄소수의 상관관계를 분석한 결과 두 개의 추산 관계식을 제시할 수 있으며 하나는 식(5)와 같이 항이 2개인 추산식과 다른 하나는 항이 세 개인 식(3)과 같다.

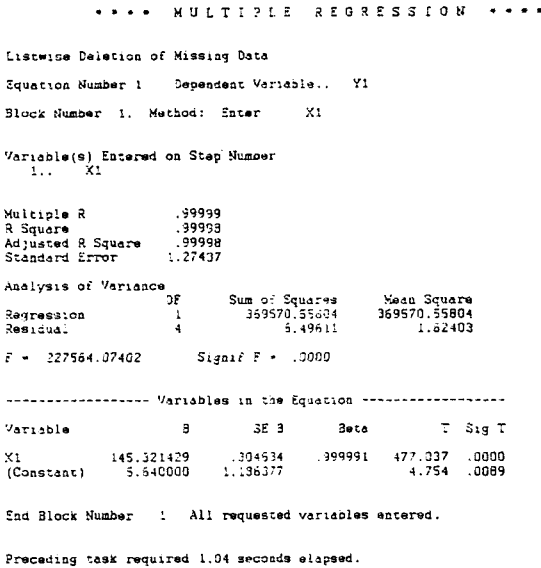


Fig. 1 ANOVA test of relationship between the heat of combustion and carbon numbers for n-alcohols

$$\frac{1}{L} = 0.01019 + 0.14785n \dots\dots\dots (5)$$

$$\frac{1}{L} = -0.06708 + 0.20581n - 0.00828n^2 \dots\dots (6)$$

Table 2 Prediction of lower explosive limits with carbon numbers for n-alcohols

Compounds	LE _{Exp}	Eqn. (5)	Eqn. (6)
CH ₃ OH	6.7	6.33	7.67
C ₂ H ₅ OH	3.5	3.33	3.21
n-C ₃ H ₇ OH	2.1	2.20	2.10
n-C ₄ H ₉ OH	1.7	1.66	1.60
n-C ₅ H ₁₁ OH	1.2	1.33	1.32
n-C ₆ H ₁₃ OH	1.2	1.11	1.15
A.A.P.E.	--	5.6233	6.9983
A.A.D.	--	0.1317	0.2533

Table 2에서 볼 수 있듯이 이들 추산식에 의한 계산 결과 항 2개인 식(5)에서 A.A.P.E.와 A.A.D. 값이 식(6)보다 작게 나타내었으므로 식(5)를 이용하여 탄소수에 의한 폭발하한계를 예측할 수 있는 추산 모델로 제시한다. 이 추산 모델 역시 ANOVA 분석 결과 F 값이 아주 크게 보여주고 있으므로 제시된 추산 모델의 유용

성을 잘 보여 주고 있다. 또한 폭발상한계와 탄소수의 상관관계에 대해 살펴보면, 탄소수에 의한 폭발상한계를 추산할 수 있는 추산식은 폭발하한계와 탄소수의 관계와 마찬가지로 다음과 같이 식(7)과 (8)로 나타낼 수 있다.

$$\frac{1}{U} = 0.02207 + 0.01479n \dots\dots\dots (7)$$

$$\frac{1}{U} = -0.00526 + 0.03529n - 0.00293n^2 \dots\dots (8)$$

Table 3에서 알 수 있듯이 두 개의 추산 모델 가운데 최적화된 모델은 항이 세 개인 식(8)로써, 폭발하한계와 탄소수와의 관계에서 얻은 최적화 모델에 비해 항이 하나 더 많은데도 불구하고 문헌값과 추산값이 폭발하한계와 탄소수의 관계식보다 오차가 있음을 알 수 있다. 이는 메탄올의 폭발상한계값이 다른 알코올류에 비해 월등히 큰 특별한 성질을 지니고 있는 것으로 사료된다.

Table 3 Prediction of upper explosive limits with carbon numbers for n-alcohols

Compounds	UEL _{Exp}	Eqn. (7)	Eqn. (8)
CH ₃ OH	36	27.06	36.90
C ₂ H ₅ OH	19	19.36	18.66
n-C ₃ H ₇ OH	13.5	15.05	13.48
n-C ₄ H ₉ OH	11.3	12.31	11.24
n-C ₅ H ₁₁ OH	10	10.41	10.20
n-C ₆ H ₁₃ OH	10	9.02	9.90
A.A.P.E.	--	10.17	1.33
A.A.D.	--	2.21	0.27

또한 식(4)와 식(5)의 상관관계에 이용하여 폭발하한계와 연소열의 관계를 식(9)와 같이 나타낼 수 있고, 이 식에 의한 연소열의 추산값은 문헌값과 비교한 결과 평균 6.25%의 차이를 나타내었다.

$$\Delta H_n = 982.22 \left(\frac{1}{L} \right) - 4.3756 \dots\dots\dots (9)$$

4.3 폭발하한계와 상한계의 관계

탄소수와 폭발하한계의 관계를 나타내는 최적화된 식(5)와 탄소수와 폭발상한계의 관계를 나타내는 최적화된 식(8)로부터 폭발하한계와

상한계의 관계를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{1}{U} = 0.0077 + 0.2414\left(\frac{1}{L}\right) - 0.1340\left(\frac{1}{L}\right)^2 \quad (10)$$

식(10)에 의한 추산 결과를 문헌값과 비교하여 Table 4에 나타내었다. 메탄올을 제외하고는 추산값과 문헌값이 거의 일치함을 보여주고 있다.

Table 4 Prediction of upper explosive limits with lower explosive limits for n-alcohols

Compounds	LEL _{exp.}	UEL _{exp.}	UEL _{pred.}
CH ₃ OH	6.7	36	39.45
C ₂ H ₅ OH	3.5	19	19.70
n-C ₃ H ₇ OH	2.1	13.5	13.01
n-C ₄ H ₉ OH	1.7	11.3	11.38
n-C ₅ H ₁₁ OH	1.2	10	9.96
n-C ₆ H ₁₃ OH	1.2	10	9.96
A.A.P.E.	-	-	3.0617
A.A.D.	-	-	0.80

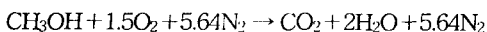
5. 화염온도 및 폭발한계의 온도의존성 예측

5.1 화염온도 예측

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

본 연구에서는 지금까지 나와 있는 연구를 근거로 알코올화합물의 폭발한계의 온도의존성을 고찰하기 위해 먼저 알코올의 화염온도를 예측하고자 한다. 화염온도의 예측은 다음과 같은 계산 방법으로 예측할 수 있다. 한 예로서 메탄올의 화염온도를 예측하기 위한 계산 절차는 다음과 같다.

메탄올의 경우 공기와 연소반응식은 다음과 같다.



	Moles	C _v	nC _v
CO ₂	1	54.3	54.3
H ₂ O	2	41.2	82.4
N ₂	5.64	32.7	184.4
			ΣnC _v = 321.1

$$T_f = \frac{\Delta H_c}{\Sigma nC_p} + 298 = \frac{638200}{321.1} + 298 = 2286K \quad (11)$$

여기서 T_f는 화염온도, ΔH_c는 알코올류의 순 연소열(J/mol) 그리고 C_p는 열용량(J/mol K)이다. 이와 같은 계산 방법에 의해 메탄올 뿐만 아니라 핵산올까지 화염온도를 계산하였고, 이 화염온도를 이용하여 폭발한계에서의 화염온도를 추산하고자 한다.

폭발한계에서의 화염온도 예측식은 Buckmaster 등¹⁸⁾이 제시한 식을 이용하였으며 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 폭발한계에서의 양론계수, C_{st,wt}는 알코올 증기와 공기의 혼합물에서 양론중량백분율 그리고 T_{lim}는 폭발한계에서의 화염온도이다.

식(12)에서 T_∞는 식(11)에 의해 계산된 화염온도와 각각의 알코올 증기와 공기의 혼합물에서 양론중량백분율을 계산값을 이용하여 계산한다. 폭발한계에서의 화염온도를 계산하기 위한 특성값들을 Table 5에 나타내었으며, 노말알코올에서 폭발한계에서의 예측된 화염온도는 평균 1078°C(1351K)가 됨을 알 수 있다. Rashbash¹⁹⁾는 폭발한계에서의 메탄올에 대한 화염온도 측정 결과 1200°C로 나타내고 있는데, 본 연구에서 예측한 화염온도는 1116°C로 약 7%의 차이를 보이고 있다. 반면에 파라핀족화합물의 폭발한계에서의 화염온도 실험값과 예측식에 의한 예측온도는 약 20%의 차이를 보이고 있음을 문헌에서 알 수 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 알코올의 폭발한계에서의 화염온도 예측은 오차가 더 적은 것으로 나타나고 있다.

Table 5 Prediction of flame temperatures for lower explosive limits of n-alcohols

Compounds	LEL (vol%)	C _{st,vol%}	C _{st,w1%}	T _∞	Y _∞	T _{flame(K)}	T _{lim(K)}
CH ₃ OH	6.7	12.28	0.133	0.0190	0.073	2286	1389
C ₂ H ₅ OH	3.5	6.54	0.099	0.0144	0.053	2352	1398
n-C ₃ H ₇ OH	2.1	4.46	0.087	0.0124	0.041	2391	1285
n-C ₄ H ₉ OH	1.7	3.38	0.083	0.0114	0.042	2414	1366
n-C ₅ H ₁₁ OH	1.2	2.72	0.078	0.0109	0.034	2422	1223
n-C ₆ H ₁₃ OH	1.2	2.28	0.075	0.0101	0.039	2504	1444
-	-	-	-	-	-	Σ T _{lim} /n = 1351K	

5.2 폭발하한계의 온도의존성

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

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

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

이 두 식에 의해 온도의존식은 다음과 같이 표현된다.

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

노말 알코올의 폭발하한계에서의 화염평균온도(t_{lim})는 1078°C이므로 이 온도를 식(16)에 대입하면 다음과 같은 관계식이 된다.

$$L_t = L_{25} [1 - 9.50 \times 10^{-4}(t - 25)] \dots\dots (17)$$

그동안 알코올류에 대한 연구가 없었으므로 알코올에 대한 폭발하한계의 온도의존성을 고찰하기 위해 Zabetakis가 제시한 파라핀족탄화수소에 적용되는 관계식을 이용하여 고찰하였으며, 제시한 관계식은 다음과 같다.

$$L_i(t) = L_i(25) - 0.182(t - 25) / \Delta H_c \dots (18)$$

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

본 연구에서 제시한 추산식과 Zabetakis가 제시한 식에 의한 예측값을 메탄올, 에탄올, 부탄올에 대한 문헌에 제시된 폭발하한계의 온도의존성의 실험값²⁰⁾과 각각 비교하여 Table 6에서 Table 8에 나타내었다. 그리고 3개의 알코올류 가운데 메탄올에 대해 예측값과 실험값의 차이를 쉽게 알 수 있도록 Fig. 2에 나타내었다.

Table 6 Comparison of literature and predicted values for temperature dependence of LEL of methanol

Temp.(°C)	LEL _{exp} (vol%)	Zabetakis	Ha
25	6.70	6.70	6.70
100	5.80	6.33	6.22
200	4.81	5.83	5.59
250	4.62	5.58	5.27
300	4.44	5.33	4.95
A.A.D.	-	0.680	0.472

Table 7 Comparison of literature and predicted values for temperature dependence of LEL of ethanol

Temp.(°C)	LEL _{exp} (vol%)	Zabetakis	Ha
25	3.50	3.50	3.50
100	3.01	3.31	3.25
200	2.64	3.05	2.92
250	2.47	2.92	2.75
300	2.29	2.79	2.59
A.A.D.	-	0.332	0.220

Table 8 Comparison of literature and predicted values for temperature dependence of LEL of n-butanol

Temp.(°C)	LEL _{exp} (vol%)	Zabetakis	Ha
25	1.70	1.70	1.70
100	1.56	1.60	1.58
200	1.27	1.47	1.42
225	1.22	1.44	1.38
A.A.D.	-	0.115	0.083

메탄올의 경우 본 연구에서 제시한 추산식(이하 Ha식이라 함.)에 의한 예측값이 실험값과 비교하여 Zabetakis가 제시한 식 보다 0.2vol% 정도 줄어서 실험값과 일치함을 보여 주고 있다.

에탄올의 경우에는 제시한 추산식에 의한 예측값과 Zabetakis가 제시한 식에 의한 추산값이 평균 0.11vol% 정도 차이로 역시 Ha식이 문헌값과 훨씬 일치하고 있다. 부탄올의 경우는 Ha식과 Zabetakis가 제시한 추산식에 의한 추산값이 문헌값과 큰 차이를 보이고 있지 않으나, 본 연구에서 제시한 Ha식이 평균 0.083vol%로 작은 값을 보여 주고 있다. 부탄올의 경우 문헌값과 추산값의 차이가 메탄올이나 에탄올 보다 작게 나타나는 이유는 온도 변화에 따른 폭발한계값의 변화 폭이 작기 때문이다.

인화점 및 폭발한계의 실험값의 타당성을 검증하기 위해 폭발한계의 온도의존성의 관련식이 필요하다. 지금까지는 파라핀족탄화수소화합물들의 폭발특성 적용식인 Zabetakis의 온도의존식을 파라핀족탄화수소 뿐만아니라 다른화합물에도 적용하였다. 따라서 파라핀족탄화수소 이외의 실험자료의 신뢰성을 평가하기에는 바람직하지 못하므로, 본 연구에서 제시한 식을 알코올류에 적용하므로써 실험자료의 신뢰성을 평가하는데 그만큼 가치 있다고 사료된다. 또한 이 연구를 기초로 하여 다른 화합물의 특성연구에도 기대한다.

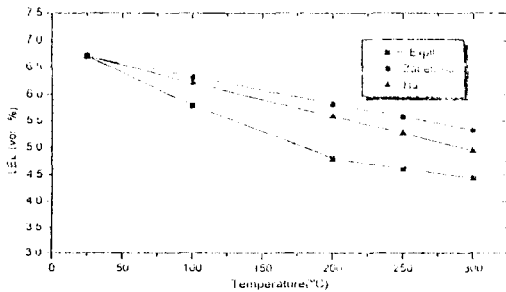


Fig. 2 Literature and predicted LEL with temperature variation for methanol

6. 결 론

알코올류의 폭발특성치들의 상관관계를 고찰하였고, 화염온도 추산에 의한 폭발한계의 온도의존성에 대해 열화학이론과 화염전파이론의 도입과, 수학적 및 통계적 분석을 통하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

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

$$\frac{1}{U} = 0.0077 + 0.2414 \left(\frac{1}{L} \right) - 0.1340 \left(\frac{1}{L} \right)^2$$

- 4) 폭발하한계에서 예측된 평균화염온도는 1078 °C이다.
- 5) 폭발하한계의 온도의존식은 다음과 같다.

$$L_t = L_{25} [1 - 9.50 \times 10^{-4} (t - 25)]$$

이 논문은 1997년 한국학술진흥재단의 공모과제 연구비에 의하여 연구되었음.

참 고 문 헌

- 1) 이수경, 하동명, “최신 화공안전공학”, 동화기술, 1997.
- 2) M.G. Zabetakis, G.S. Scott, G.W. Jones, “Limits of Flammability of Paraffin Hydrocarbons in Air”, Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 43, No. 9, pp. 2120 ~ 2124, 1951.
- 3) A.E. Spakowski, “Pressure Limit of Flame Propagation of Pure Hydrocarbon Air Mixtures at Reduced Pressures”, Natl. Advis. Comm. Aeronaut. Res. Mem. E52H15, 1952.
- 4) 北川徹三, “化學安全工學”, 日刊工業新聞社, 1971.
- 5) W.A. Affens, G.W. McLaren, “Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in Air”, J. Chem. Eng. Data, Vol. 17, No. 4, pp. 482 ~ 488, 1972.
- 6) L.A. Lovachev, V.S. Babskin, V.A. Bunev, A.V. V'Yun, V.N. Krivulin, A.N. Baratov, “Flammability Limits: An Invited Review”, Combustion and Flame, Vol. 20, pp. 259 ~ 289, 1973.
- 7) M.S. High, R.P. Danner, “Prediction of Upper Flammability by a Group Contribution Method”, Ind. Eng. Chem. Res., Vol.

- 26, No. 7, pp. 1395~1399, 1987.
- 8) D.M. Ha, "Prediction of Upper Flammability Limit of Paraffinic Hydrocarbons by Numerical Simulation", J. of the Koeran Institute for Industrial Safety(KIIS), Vol. 8, No. 3, pp. 50~55, 1993.
 - 9) G.W. Jones, "Inflammation Limits and Their Practical Application in Hazardous Industrial Operation", Chem. Rev., Vol. 22, No. 1, pp. 1~26, 1938.
 - 10) R.M. Butler, G.M. Cooke, G.G. Lukk, B.G. Jameson, "Prediction of Flash Points of Middle Distillates", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 48, No. 4, pp. 808~812, 1956.
 - 11) J.E. Hustad, O.K. Sonju, "Experimental Studies of Lower Flammability Limits of Gases and Mixtures of Gases at Elevated Temperature", Combustion and Flame, Vol. 71, pp. 283~294, 1988.
 - 12) B. Vanderstraenten, et al., "Experimental Study of the Pressure and Temperature Dependence on the Upper Flammability Limit of Mathane/Air Mixtures", J. of Hazardous Materials, Vol. 56, pp. 237~246, 1997.
 - 13) G.E.P. Box, N.R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc., 1987.
 - 14) M.G. Kim, D.M. Ha, J.C. Park, "Modified Response Surface Methodology(MRSM) for Phase Equilibrium-Application", Korean J. of Chemical Engineering, Vol. 12, No. 1, pp. 39~47, 1995.
 - 15) 정충영, 최이규, "SPSSWIN을 이용한 통계 분석", 무역경영사, 1997.
 - 16) R.H. Perry, D.W. Green, "Perry's Chemical Engineers' Handbook", 7th ed., McGraw-Hill, 1997.
 - 17) R.E. Lenga, K.L. Votoupal, "The Sigma Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Volume I~III", Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc., 1993.
 - 18) J. Buckmaster, D. Mikolatis, "A Flammability-Limit Model Upward Propagation through Lean Mathane/Air in a Standard Flammability Tube", Combustion and Flame, Vol. 45, pp. 109~119, 1982.
 - 19) D.J. Rashbash, Z.W. Rogowski, G.W.V. Stark, "Properties of Fire of Liquids", Fuel, Vol. 31, pp. 94~197, 1956.
 - 20) P.E. Cote, J.L. Linville, "Fire Protection Handbook", NFPA, Quincy, Massachusetts, 1991.