



## 가연성 이성분계 용액인 2-Propanol+Propionic acid 와 n-Hexanol+Formic acid 용액의 밀폐식 인화점의 실험적 결정

하동명\* · †이성진

\*세명대학교 보건안전공학과, 세명대학교 임상병리학과  
(2015년 3월 19일 접수, 2015년 6월 4일 수정, 2015년 6월 5일 채택)

### Experimental Determination of Closed Cup Flash Point of Binary Flammable Solutions, 2-Propanol+Propionic acid and n-Hexanol+Formic Acid Solutions

Dong-Myeong Ha\* · †Sungjin Lee

*\*Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University, Jecheon  
390-711, Korea*

*Dept. of Clinical Laboratory Science, Semyung University, Jecheon 390-711, Korea*

*(Received March 19, 2015; Revised June 4, 2015; Accepted June 5, 2015)*

#### 요약

인화점은 액체 용액의 가장 중요한 인화성 지표 중 하나이다. 인화점은, 가연성 증기의 공기 속 농도가 점화가 발생하기에 충분할 때의 온도 중 가장 낮은 온도이다. 본 연구에서는 가연성 이성분계 액체 용액인, 2-propanol+propionic acid 와 n-hexanol+formic acid 계의 인화점을 Seta flash 밀폐식 장치를 사용하여 측정하였다. 특히 n-hexanol+formic acid 계는 최소 인화점 현상을 보였다. 측정값은 라울의 법칙을 활용한 방법과 최적화 기법에 의한 계산값과 비교되었다. 그 결과 최적화 기법에 의한 계산값이 라울의 법칙에 의한 계산값 보다 측정값을 잘 묘사하였다.

**Abstract** - The flash point is one of the most important indicators of the flammability of liquid solutions. The flash point is the lowest temperature at which there is enough concentration of flammable vapor to form an ignitable mixture with air. In this study the flash points of binary flammable solutions, 2-propanol+propionic acid and n-hexanol+formic acid systems, were measured using Seta flash closed cup tester. Particularly n-hexanol+formic acid system exhibited minimum flash point behavior. The measured values were compared with the calculated values using Raoult's law and optimization method. The calculated data by optimization method described the measured values more effectively than those calculated by Raoult's law.

**Key words** : flash point, Seta flash closed cup, 2-propanol+propionic acid, n-hexanol+formic acid, wilson, UNIQUAC

†Corresponding author:pappi68@hanmail.net  
Copyright © 2015 by The Korean Institute of Gas

## I. 서론

인화점은 가연성 액체의 안전성을 결정하는 중요한 성질 중 하나이다[1]. 화학공정에서 취급하는 물질에는 가연성 액체가 많이 포함되어 있다. 이와 같은 가연성 액체를 안전하게 취급하기 위해서는 순수 성분 및 혼합물의 인화점 정보가 반드시 필요하다.

2008년에 국제연합(UN, United Nations)은 위험물의 국제분류기준(GHS, Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals)을 모든 나라가 도입할 것을 권고하였다[2]. 우리나라는 같은 해에 순수 물질에 대하여 GHS를 도입하였으며, 관련 법안을 그것에 부합되게 수정하고 있는 중이다. GHS에서 가연성 액체 혼합물의 인화점은 인화성 액체의 분류에 중요한 기준이 된다. 그러나 액체 혼합물의 인화점 실험 데이터 랑은 절대적으로 부족한 편이다.

인화점은 가연성 액체에 불꽃이 가해졌을 때 점화가 발생하는 가장 낮은 온도로 정의된다[3]. 인화점을 상부 인화점과 하부 인화점으로 분류할 수 있다. 인화점 관련 연구 논문에서 언급되는 인화점은 대부분 하부 인화점을 의미한다[4]. 이에 따라 본 논문에서는 하부 인화점을 인화점으로 언급할 것이다.

인화점은 밀폐식 혹은 개방식 장치를 사용하여 측정할 수 있다. 가연성 액체 혼합물인 경우, 일반적으로 개방식 장치에 의해 측정된 인화점이 밀폐식 장치에 의한 인화점 보다 높은 값을 가진다. 이는 두 장치의 특성에 기인한다. 개방식 장치에서는 가연성 액체 혼합물에 불꽃을 가하기 전, 이미 주변 대기로 혼합물 속의 저비점 성분이 방출된다. 반면 밀폐식 장치는 불꽃이 가해지기 전까지 가연성 액체 혼합물과 주변 대기가 차단되어 있으므로, 저비점 성분의 방출을 최대한 차단할 수 있다[5,6].

가연성 액체 혼합물의 안전한 취급을 위해 가장 효과적이고 신뢰성 있는 인화점을 얻는 방법을 실험을 통해 인화점을 확보하는 것이다. 그러나 이 방법은 시간이 많이 걸리고, 비용이 많이 발생하며, 독성이 있는 액체인 경우 인화점을 측정하는 데 위험이 따르는 단점이 있다. 따라서 신속하고 안전하게 인화점 정보를 얻기 위해 많은 연구자들은 노력해 왔으며, 그들은 인화점 실험의 대체 방법인 예측 모델 방법을 개발해 왔다.

Wickey 등[7]은 석유 혼합물의 인화점을 계산할 수 있는 경험식을 제시하였다. 그들의 경험식은 이상 용액의 인화점 계산에는 적당하나, 비이상 용액의 인화점인 경우에는 적용할 수 없는 단점이 있었다.

Catoire 등[8]은 혼화성(miscible) 액체 혼합물의

인화점을 계산할 수 있는 경험식을 제안하였다. 이 경험식은 끓는점, 탄소원자수와 표준증발엔탈피의 함수로 인화점을 표현한 것이었다.

Affens 등[9]은 휘발유와 경유 등과 같은 혼합물의 인화점을 계산하는 모델을 개발하였다. 그들은 라울의 법칙, 돌턴의 법칙과 르샤틀리에의 법칙[10]을 활용하여 예측 모델을 개발했으며, 그 모델은 탄화수소 혼합물의 인화점 계산에는 효과적이었다. 그러나 비이상 용액에 적용하는 것은 한계가 있었다.

Ha 등[11]은 이성분계 수용액의 인화점을 예측하는 모델을 제안하였다. 그들은 활동도계수 식, Clausius-Clapeyron 식[12]과 Watson 식[12]을 결합시킨 예측 모델을 제안했으며, 그 모델은 이성분계 수용액의 인화점을 효과적으로 계산할 수 있었다.

Liaw 등[13]은 비이상 용액인 가연성 이성분계 혼합물의 인화점을 계산하는 모델을 제시하였다. 그들은 액상의 비이상성을 예측 모델에 반영하기 위하여 활동도계수 식을 이용하였으며, 활동도계수 식의 이성분계 파라미터는 기-액 상평형 데이터로부터 구하였다. 이 예측 모델의 단점은, 기존의 기-액 상평형 데이터가 없는 가연성 이성분계 혼합물인 경우 인화점을 계산하는 것이 불가능하다는 점이다.

순수 물질의 인화점 측정 데이터는 "MSDS (Material Safety Data Sheets)"와 "Merck index" 등과 같은 문헌을 통해 대부분 얻을 수 있다. 그러나 앞서 언급했듯이 가연성 액체 혼합물의 인화점 측정 데이터는 매우 부족하다. 화학 공장에서 취급하는 가연성 물질은 혼합물 형태로 있는 것이 대부분이므로, 혼합물의 인화점을 확보하는 것은 안전 측면에서 매우 중요한 일이다.

이에 따라 본 연구에서는 가연성 이성분계 혼합물인 2-propanol+propionic acid 계와 n-hexanol+formic acid 계를 선택하여, Seta flash 밀폐식 장치를 이용하여 인화점을 측정하였다. 또한 라울의 법칙을 활용한 방법과 최적화 기법을 통해 인화점을 계산하였으며, 그 결과들을 측정된 인화점과 비교하였다. 이를 통해 확보된 인화점 정보가 공정 안전에 활용되기를 기대한다.

## II. 인화점 예측

### 2.1. 라울의 법칙을 활용한 인화점 예측

기-액 상평형 상태인 가연성 이성분계 혼합물은 르샤틀리에의 법칙[10]에 따라 다음의 관계식을 만족한다[13].

$$\sum_{i=1}^2 \frac{y_i}{LFL_i} = 1 \quad (1)$$

여기서  $y_i$ 는 성분  $i$ 의 기상 몰분율을 의미하며,  $LFL_i$ (lower flammability limit)는 성분  $i$ 의 하부인화한계를 의미한다.

또한  $LFL_i$ 는 다음과 같다.

$$LFL_i = \frac{P_{i,fp}^{sat}}{P} \quad (2)$$

여기서  $P_{i,fp}^{sat}$ 는 성분  $i$ 의 인화점에서의 포화증기압이며,  $P$ 는 전체압력이다.

본 연구에서는 인화점을 대기압 조건에서 측정하므로 기상을 이상기체로 가정할 수 있다. 또한 실험에서 사용된 시료는 비압축성 유체이다. 이에 따라 기-액 상평형 상태에서  $i$ 성분은 다음의 관계식을 만족한다.

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (3)$$

여기서  $x_i$ 는 성분  $i$ 의 액상 몰분율이며,  $\gamma_i$ 는 성분  $i$ 의 액상 활동도계수이며,  $P_i^{sat}$ 는 성분  $i$ 의 포화증기압이다.

Liaw 등은 식 (2)와 식 (3)을 식 (1)에 대입하고 정리하여 다음과 같은 관계식을 제안하였다[14].

$$\frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P_{1,fp}^{sat}} + \frac{x_2 \gamma_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (4)$$

이성분계 혼합물의 액상을 이상용액으로 가정하면, 성분  $i$ 의 액상 활동도계수( $\gamma_i$ )는 1이 된다. 이 경우 식 (4)는 라울의 법칙이 적용되어 다음과 같이 정리된다.

$$\frac{x_1 P_1^{sat}}{P_{1,fp}^{sat}} + \frac{x_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (5)$$

식 (5)에 제시된  $P_{i,fp}^{sat}$ 과  $P_i^{sat}$ 는 다음의 Antoine 식[12]에 의해 계산할 수 있다.

$$\log P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad (6)$$

**Table 1.** The Antoine coefficients of each component

Components	A	B	C
2-Propanol	8.8763	2010.33	252.636
n-Hexanol	7.9058	1819.57	205.00
Formic acid	6.9446	1295.26	218.00
Propionic Acid	7.9906	1929.30	236.43

여기서  $A_i$ ,  $B_i$  및  $C_i$ 는 성분  $i$ 의 Antoine 상수이며,  $T$ 의 단위는 섭씨온도(°C)이다. 본 연구에서 사용한 시료의 Antoine 상수는 문헌[15]에서 확보하였고, Table 1에 제시한다.

식 (5)을 만족하는 온도를 가연성 이성분계 혼합물의 인화점으로 결정하였다. 그러나 이와 같은 계산 방법은 이성분계 액체 혼합물이 이상 용액에 가까울 때 적용할 수 있다.

## 2.2. 최적화 기법에 의한 인화점 예측

식 (4)에서 제시된 활동도계수를 계산하기 위해 다음의 Wilson 식[16]과 UNIQUAC 식[17]을 사용하였다.

Wilson 식 :

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 &= -\ln(x_1 + A_{12}x_2) + x_2 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{A_{21}x_1 + x_2} \right) \\ \ln \gamma_2 &= -\ln(x_2 + A_{21}x_1) + x_1 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{A_{21}x_1 + x_2} \right) \end{aligned} \quad (7)$$

여기서  $\Lambda$ 는 다음과 같다.

$$\Lambda_{ij} = \frac{v_j}{v_i} e^{-\frac{\lambda_{ij} - \lambda_i}{RT}} \quad (8)$$

UNIQUAC 식 :

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i &= \ln \frac{\Phi_i^*}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i^*} + l_i - \frac{\Phi_i^*}{x_i} \sum_{j=1}^m x_j l_j \\ &\quad - q'_i \ln \left( \sum_{j=1}^m \theta'_j \tau_{ji} \right) + q'_i - q'_i \sum_{j=1}^m \frac{\theta'_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^m \theta'_k \tau_{kj}} \end{aligned} \quad (9)$$

여기서

가연성 이성분계 용액인 2-Propanol+Propionic acid 와 n-Hexanol+Formic acid 용액의 밀폐식 인화점의 실험적 결정

$$\tau_{ji} = \frac{g_{ji} - g_{ij}}{RT} \quad (10)$$

$$l_j = \frac{z}{2}(r_j - q_j) - (r_j - 1), Z=10 \quad (11)$$

Wilson 식과 UNIQUAC 식의 이성분계 파라미터 ( $A_{12}$ ,  $A_{21}$ )는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Wilson} : A_{12} &= \lambda_{12} - \lambda_{11}, A_{21} = \lambda_{21} - \lambda_{22} \\ \text{UNIQUAC} : A_{12} &= g_{12} - g_{11}, A_{21} = g_{21} - g_{22} \end{aligned}$$

한편 최적화 기법에 의해 이성분계 가연성 혼합물의 인화점을 계산하기 위해 다음의 목적함수( $F$ )를 설정하였다.

$$F = \sum_{j=1}^N |T_j^{\text{exp}} - T_j^{\text{cal}}| \quad (12)$$

여기서  $N$ 은 측정된 인화점의 총 개수이며,  $T_j^{\text{exp}}$ 는 측정된 인화점이며,  $T_j^{\text{cal}}$ 는 계산된 인화점이다.

우선 식 (4)에 제시된  $P_{i,fp}^{\text{sat}}$  과  $P_i^{\text{sat}}$ 는 식 (6)에 의해 계산하였고, 그 값을 식 (4)에 대입하였다. Wilson식과 UNIQUAC 식의 이성분계 파라미터인  $A_{12}$ 와  $A_{21}$ 의 초기 값은 임의로 결정하여 식 (4)를 만족하는 온도를 계산하였다. 그 값(계산된 인화점)과 측정된 인화점을 식 (12)에 대입하여 목적함수 초기 값을 결정하였다.

SIMPLEX 방법[18]에 의해서 이성분계 파라미터의 초기 값에 일정한 값을 더하거나 감하여 식 (4)를 만족하는 인화점을 계산하였다. 그때마다 식 (12)의 목적함수( $F$ )를 계산하였고, 그 값과 앞서 계산된 목적함수 값을 비교하였다.

목적함수 값이 최소가 될 때까지 위의 과정을 수회 반복하였으며, 목적함수가 최소가 되었을 때 식 (4)에서 계산된 온도를 인화점으로 결정하였다. 또한 그때의 이성분계 파라미터를 최적화된 이성분계 파라미터로 결정하였다.

### III. 인화점 측정

2-Propanol은 Kanto 회사(일본) 제품이며 순도는 99.0%이고, propionic acid는 Acros 회사(미국) 제품이며 순도는 99.0%이다. n-Hexanol은 Junsei 회사(일본) 제품이며 순도는 98.5%이고, formic acid는 Acros 회사(미국) 제품이며 순도는 99.0%이다. 이 모든 시약들은 별도의 정제 과정을 거치지 않고 그

대로 실험에 사용하였다.

Seta-flash 밀폐식 장치(Koehler 회사, 미국)가 사용되었으며, 이 장치는 시료컵(용량 2ml), 시간 조절기, 화염 조절기, 시험염 공급부, 온도계 그리고 온도 조절기 등으로 구성되어 있다. 장치의 기본 구조도는 앞서 발표한 논문[19]에 제시되어 있다.

실험 시스템으로 2-propanol+propionic acid 계와 n-hexanol+formic acid 계를 선정하였으며, 시약들을 각각 다른 물분율로 혼합하여 ASTM D3278 [19,20]의 규정에 따라 인화점을 측정하였다.

## IV. 결과 및 고찰

### 4.1. 인화점 측정 결과

Seta flash 밀폐식 장치에 의해 측정된 2-propanol+propionic acid 와 n-hexanol+formic acid 계의 인화점을 Table 2~3 와 Fig. 1~2 에 각각 제시하였다.

성분  $i$ 의 액상 물분율은  $x_i$ 로 표현했으며, Fig. 1~2에서는 액체 혼합물의 인화점을 성분 2(propionic acid와 formic acid)의 액상 물분율의 함수로 나타내었다.

2-propanol+propionic acid 계는 propionic acid의 물분율이 증가하면 혼합물의 인화점이 증가하는 경향을 보였다.

반면에 n-hexanol+formic acid 계는 최소 인화점 현상(minimum flash point behavior)을 보였다. 특히 formic acid의 물분율, 0.9 근처에서 그 현상이 명확하게 나타났다. 최소 인화점 현상은, 액체 혼합물의 인화점이 혼합물을 구성하는 순수 성분들의 개별 인화점 보다 낮은 값을 가지는 현상을 의미한다.

가연성 액체의 인화점이 낮을수록 화재와 폭발의 위험성은 증가한다. n-Hexanol+formic acid 계를 취급하는 경우, 두 성분 중 낮은 인화점을 가지는 formic acid의 인화점(48°C)을 공정의 안전 기준으로 삼는 것 보다 본 연구에서 제시한 인화점을 기준으로 할 것을 권고한다.

### 4.2. 인화점 계산 결과와 측정값과의 비교

라울의 법칙을 활용하여 계산한 인화점과 최적화 기법에 의해 계산한 인화점을 Table 2~3 와 Fig. 1~2 에 각각 나타내었다.

또한 최적화 기법에 의해 인화점을 계산하는 과정에서 최적화된 이성분계 파라미터를 다음의 Table 4 에 제시한다.

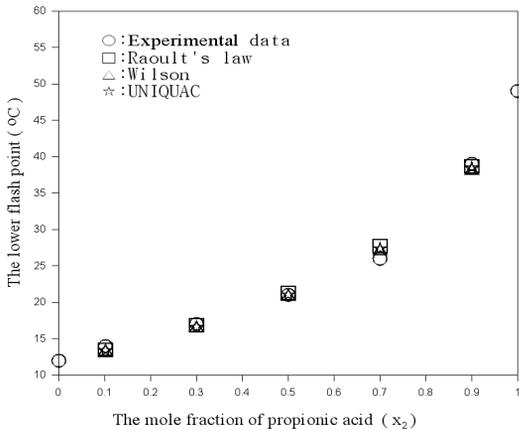
Table 2~3 에서 제시된 AAE(average absolute error)[19]는 인화점 측정값과 계산값 간의 차이를 나타내는 척도이며 다음의 식으로 나타낼 수 있다.

**Table 2.** The experimental and the calculated flash points for 2-propanol(1)-propionic acid(2) system

Mole Fractions		Flash points (°C)			
x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	Exp.	Raoult's law	Wilson	UNI QUAC
1.000	0.000	12.0	-	-	-
0.899	0.101	14.0	13.45	13.42	13.40
0.700	0.300	17.0	16.84	16.69	16.62
0.500	0.500	21.0	21.31	21.00	21.00
0.300	0.700	26.0	27.72	27.29	27.41
0.100	0.900	39.0	38.71	38.33	38.49
0.000	1.000	49.0	-	-	-
AAE		-	0.61	0.57	0.58

**Table 3.** The experimental and the calculated flash points for n-hexanol(1)-formic acid(2) system

Mole Fractions		Flash points (°C)			
x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	Exp.	Raoult's law	Wilson	UNI QUAC
1.000	0.000	61.5	-	-	-
0.868	0.132	58.5	59.85	59.29	59.48
0.624	0.376	55.0	56.62	54.76	55.01
0.420	0.580	51.0	53.80	51.01	50.98
0.236	0.764	48.0	51.24	48.30	48.00
0.075	0.925	46.0	49.02	47.10	47.01
0.000	1.000	48.0	-	-	-
AAE		-	2.41	0.40	0.49

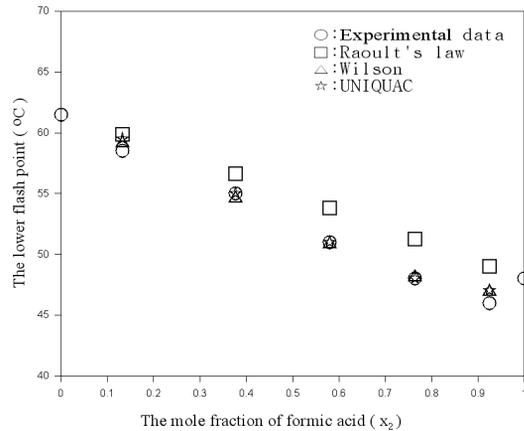


**Fig. 1.** The comparison of the calculated flash points with the measured flash points 2-propanol(*x*<sub>1</sub>)-propionic acid(*x*<sub>2</sub>) system.

$$AAE = \sum_{j=1}^N \frac{|T_j^{exp} - T_j^{cal}|}{N} \quad (13)$$

여기서 *N*은 측정된 인화점의 총 개수이며, *T<sub>j</sub><sup>exp</sup>*는 측정된 인화점이고, *T<sub>j</sub><sup>cal</sup>*는 계산된 인화점이다.

Table 2 에 제시된 2-propanol+propionic acid 계의 경우, 라울의 법칙을 활용한 계산값과 측정값 간의 AAE는 0.61 °C 이었고, Wilson 식과 UNIQUAC



**Fig. 2.** The comparison of the calculated flash points with the measured flash points n-hexanol(*x*<sub>1</sub>)-formic acid(*x*<sub>2</sub>) system.

식을 활용한 최적화 기법에 의한 계산값과 측정값 간의 AAE는 각각 0.57 °C와 0.58 °C 이었다.

최적화 기법에 의한 계산값이 라울의 법칙을 활용한 계산값 보다 측정값에 다소 근접하였으나, 두 계산 방법 모두 실험값을 잘 모사하였다. 라울의 법칙은 혼합물의 액상이 이상 용액인 경우에 적용할 수 있는 법칙이다. 따라서 2-propanol+propionic acid 계의 액상은 이상 용액에 가까운 성질을 가지고 있음을 알 수 있다.

**Table 4.** The optimized binary parameters of Wilson and UNIQUAC equations for 2-propanol+propionic acid and n-hexanol+formic acid system

System	Wilson		UNIQUAC	
	A <sub>12</sub>	A <sub>21</sub>	A <sub>12</sub>	A <sub>21</sub>
2-Propanol+propionic acid	-224.75	317.64	416.46	-298.01
n-Hexanol+n-butyric acid	2564.29	214.49	-296.88	884.38

Table 3 에 제시된 n-hexanol+formic acid 계의 경우, 라울의 법칙에 의한 계산값과 측정값 간의 AAE는 2.41 °C 이었고, Wilson 식과 UNIQUAC 식을 활용한 최적화 기법에 의한 계산값과 측정값 간의 AAE는 각각 0.49 °C 와 0.40 °C 이었다.

AAE에서 알 수 있듯이, 라울의 법칙을 활용한 계산값은 최적화 기법에 의한 계산값 보다 측정값에서 다소 벗어났다. 더욱이 formic acid의 물분율, 0.9 근처에서 발생한 최소 인화점 현상을 전혀 설명할 수 없었다. 이는 액상의 비이상성이 큰 혼합물인 경우 식 (4)의 활동도 계수 값이 "1"에서 다소 벗어나기 때문에, 이를 "1"로 가정한 라울의 법칙을 활용한 계산 방법은 적용할 수 없음을 의미한다.

반면에 최적화 기법에 의한 계산값은 실험값에 매우 근접하였다. 또한 Fig. 2에서 알 수 있듯이 최소 인화점 현상을 매우 잘 설명하였다. 이는 n-hexanol+formic acid 계의 액상을 모사할 때 Wilson과 UNIQUAC 식과 같은 활동도 계수 식을 활용해야 함을 말해 준다.

본 논문의 최적화 기법은, 이상 용액에 가까운 성질을 가진 이성분계 액체 혼합물과 비이상성이 큰 이성분계 액체 혼합물의 인화점을 비교적 정확하게 계산할 수 있다. 특히 기-액 상평형(VLE) 혹은 액-액 상평형(LLE) 데이터로부터 유도된 이성분계 파라미터가 없는 경우에도, 최적화 기법은 이성분계 혼합물의 인화점을 계산할 수 있다는 장점이 있다.

본 연구에서 최적화 기법을 통해 확보한 이성분계 파라미터는, 인화점 측정값이 없는 특정 물분율 영역의 인화점을 내삽 혹은 외삽을 통해 계산할 수 있으므로, 2-propanol+propionic acid 와 n-hexanol+formic acid 계를 취급하는 분야에서 활용되기를 기대한다.

## V. 결론

Seta flash 밀폐식 장치를 사용하여 이성분계 혼합물인 2-propanol+propionic acid 계와 n-hexanol+formic acid 계의 인화점을 측정하였다. 특히 n-hexanol+formic acid 계는 최소 인화점 현상을 보였다. 산업 현장에서 이 혼합물을 안전하게 취급하기 위해서는 본 연구의 인화점 측정값을 활용하길 권고한다.

라울의 법칙을 이용한 방법과 최적화 기법에 의해 인화점을 계산하였으며, 그 결과들을 측정값과 비교하였다. 라울의 법칙을 활용한 계산값은 2-propanol+propionic acid 계의 측정값에 비교적 근접하였으나, n-hexanol+formic acid 계의 측정값에는 크게 벗어났다. 최적화 기법에 의한 계산값은 두 시스템의 측정값 모두에 매우 근접하였으며, 라울의 법칙을 활용한 계산값 보다도 측정값을 잘 모사하였다. 이는 실험 시스템의 액상이 비이상 용액에 가깝기 때문에 활동도 계수를 "1"로 가정할 수 없기 때문이다. 즉 "1"로 가정한 라울의 법칙 보다는 그것을 활동도 계수 식으로 계산하여 인화점을 예측한 최적화 기법이 측정값에 보다 가까울 수 있다.

본 연구의 최적화 기법이 다양한 종류의 이성분계 가연성 액체 혼합물의 인화점 계산에 활용되기를 기대한다.

## 감사의 글

본 연구는 2014년도 소방방재청의 연구비 지원으로 수행되었으며, 지원에 감사를 드립니다.

## REFERENCES

- [1] Pan, Y., Cheng, J., Song, X., Li, G., Ding, L., and Jiang, J., "Flash points measurements and prediction for binary miscible mixtures", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, **34**, 56-64, (2015)
- [2] Liaw, H.J., Gerbaud V., and Li, Y.H., "Prediction of Miscible Mixtures Flash-Point from UNIFAC Group Contribution Methods", *Fluid Phase Equilibria*, **300**, 70-82, (2011)
- [3] Kong, D., am Ende, D.J., Brenek, S.J., and Weston, N.P., "Determination of Flash Point in Air and Pure Oxygen Using an Equilibrium Closed Bomb Apparatus", *J. of Hazardous Materials*, **A102**, 155-165, (2003)
- [4] Moghadam, A.Z., Rafiei, A., and Khalili, T.,

- "Assessing Prediction Models on Calculating the Flash Point of Organic Acid, Ketone and Alcohol Mixtures", *Fluid Phase Equilibria*, **316**, 117-121, (2012)
- [5] Phoon, L.Y., Mustaffa, A.A., Hashim, H., and Mat, R., "A Review of Flash Point Prediction Models for Flammable Liquid Mixtures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **53**, 12523-12565, (2014)
- [6] Hshieh, F.Y., "Note : Correlation of Closed-Cup Flash Points with Normal Boiling Points for Silicone and General Organic Compounds", *Fire and Materials*, **21**, 277-282, (1997)
- [7] Whckey, R., and Chittenden, D., "Flash Points of Blend Correlated", *Hydrocarbon Process*, **42(6)**, 157-158, (1963)
- [8] Catoire, L., and Naudet, V.A., "A Unique Equation to Estimate Flash Points of Selected Pure Liquids Application to the Correction of Probably Erroneous Flash Point Values", *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **33(4)**, 1083-1112, (2004)
- [9] Affens, W.A. and McLaren, G.W., "Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in Air", *J. of Chem. & Eng. Data*, **17(4)**, 482-488, (1972)
- [10] Le Chatelier, "Estimation of Firedamp by Flammability limits", *Ann. Minnes*, **19**, 388-392, (1891)
- [11] Ha, D.M. and Lee, S.J., "The Measurement and Prediction of the Flash Points for the Water+2-Propanol System Using Open-Cup Apparatus", *Fire Science and Engineering*, **21(2)**, 48-53, (2007)
- [12] Reid, C.R., Prausnitz, J.M., and Poling, B.E., *The Properties of Gases and Liquids*, 4th Edition., McGraw-Hill, New York, (1998)
- [13] Liaw, H.J., Chen, C.T., Cheng, C.C., and Yang, Y.T., "A Mathematical Model for Predicting the Flash Point of Binary Solution", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, **15**, 429-438, (2002)
- [14] Liaw, H.J., Tang, C.L., and Lai, J.S., "A Model for Predicting the Flash Point of Ternary Flammable Solutions of Liquid", *Combust Flame*, **138**, 308-319, (2004)
- [15] Gmehing, J., Onken, U., and Arlt, W., *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*, **1**, Part1-Part7, DECHEMA, (1980)
- [16] Wilson, G.M., "Vapor Liquid Equilibrium. XI A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing", *J. of the American Chemical Society*, **86**, 127-130, (1994)
- [17] Abrams, D.S., and Prausnitz, J.M., "Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures : New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly of Completely Miscible Systems", *AIChE Journal*, **21**, 116-128, (1975)
- [18] Kuester, J.L., and Mize, J.H., *Optimization Techniques with Fortran*, McGraw-Hill, New York, (1973)
- [19] Ha, D.M., and Lee, S.J., "The Flash Point Measurement for Binary Flammable Mixture", *KIGAS*, **18(5)**, 60-65, (2014)
- [20] American Society for Testing Materials, *Annual Book of ASTM Standards*, Vol. **06.01**, (1999)