

가연성 3성분계에 대한 인화점 예측

Prediction of Flash Points for the Flammable Ternary System

하 동 명*·김 문 갑**

Dong-Myeong Ha · Moon-Gab Kim

(1996년 12월 12일 접수, 1997년 9월 5일 채택)

ABSTRACT

Flash points are used to classify flammable liquids according to their relative flammability. Such a classification is important for the safe handling of flammable liquids which constitute the solvent mixtures.

MRSM(modified response surface methodology)-1 and MRSM-2 models are suggested for the prediction of the flash points in the flammable ternary system.

By means of this methodology, it is possible to predict the flash points of the flammable mixtures system using computer graphics in the triangular coordinate for the ternary system.

The proposed methodology(MRSM) has been tested and compared successfully with previously reported flash points in journal for the ternary system.

1. 서 론

화학공정설계에 있어 온도, 압력 및 농도에 대한 운전 범위와 반응물, 중간생성물, 생성물 및 부산물에 대한 물성-물리적 및 화학적 특성, 안전성(폭발성, 산화성, 급수성, 인화성, 발화성, 부식성), 독성, 환경 등-을 파악해야만 한다.

대부분의 화학공정산업에서는 가연성물질을 취급하는데 이들 가연성물질은 취급, 수송 및 저장

에 있어서 화재와 폭발이 뒤따를 수 있다. 그러므로 가연성물질의 안전한 취급을 위해서는 이들 물질의 가장 기초적인 위험 특성 자료인 인화점(flash point)과 폭발한계(explosive limits)에 대한 지식이 필요하다.

최근 물질보건안전자료(MSDSs)에서 화재, 폭발시 대처 방법(fire fighting measures)에 관한 항목으로 하여 인화점, 폭발한계 및 자연발화점에 관한 내용을 수록하고 있다. 그러므로 순수가연성

* 세명대학교 산업안전공학과

** 상주산업대학교 화학공학과

액체의 인화점에 관한 실험 자료 및 연구는 물질보건안전자료 및 여러 문헌에서 얻을 수 있으나 가연성 액체 혼합물에 대한 인화점의 연구는 그리 많지 않은 실정이다.

현재까지 발표된 가연성물질에 대한 인화점 연구로는 Butler 등¹⁾에 의한 석유화학 관련 제품의 끓는점과 인화점의 관계를 연구한 중간 증류물질의 인화점 예측, Prugh²⁾의 원자조성 및 끓는점과 인화점의 관계를 연구한 인화점 온도의 추산, Johnston³⁾의 알코올과 물의 유기수용액에서의 인화점 추산, Thome⁴⁾에 의한 난연성 액체의 첨가에 따른 가연성 혼합물의 인화점 연구, Gmehling 등⁵⁾에 의한 UNIFAC법을 이용한 인화점 추산, Nakano⁶⁾의 혼합물의 인화점 추산을 연구한 유화된 연료의 인화점 추산, 그리고 Hasegawa 등⁷⁾의 상부인화점의 측정 방법 등을 들 수 있다.

본 연구에서는 혼합용액의 특성인 끓는점 및 공비점(azeotropic point)을 추산하는 식인 RSM(response surface methodology) 모델⁸⁾, MRSM(modified RSM)-1 모델^{9,10)}, 그리고 MRSM-2 모델^{10,11)}을 이용하여 가연성 3성분계 혼합물에 대한 인화점 추산이 가능한지를 기존의 추산식과 비교 검토해 보고, 또한 이 방법론에 의해 제시된 혼합물의 인화점 추산식을 이용하여 computer plotting에 의한 가연성 혼합물의 인화점 분포를 시각적으로 나타낼 수 있는지에 대하여 살펴보고자 한다.

2. 인화점이론 및 3성분계 선정

화재, 폭발 위험성을 나타내는 기준이 되는 인화점은 공기중에 액체를 가열할 때 액체 표면에 증기가 발생하여 그 증기가 착화원에 접근할 경우 인화되는 액체의 최저온도를 말한다.

순수가연성분의 인화점은 증기압이 연소하한계에서 부분압과 같을 때 온도로서 추산하는데 Fig. 1에 나타내었다.

순수성분의 인화점은 증기압과 연소하한계의 관계로서 추산이 가능하다. 혼합물의 경우에는 이상용액이라고 가정하면 Raoult의 법칙을 이용하여 인화점을 예측할 수 있으나, 비이상성 용액에 대해서는 활동도계수(activity coefficient)를 추산한 후 이를 이용하여 인화점 예측이 가능하다.

본 연구에서는 지금까지 발표된 3성분계 혼합물

에 대한 인화점의 자료가 많지 않는데 최근에 나와 있는 3성분계 자료인 ethanol-toluene-ethylacetate 계¹²⁾를 이용하여 Raoult의 법칙에 의한 인화점 추산, UNIFAC에 의한 인화점 추산, RSM 모델 및 MRSM 모델에 의한 인화점 추산값을 문헌값과 비교하고자 한다.

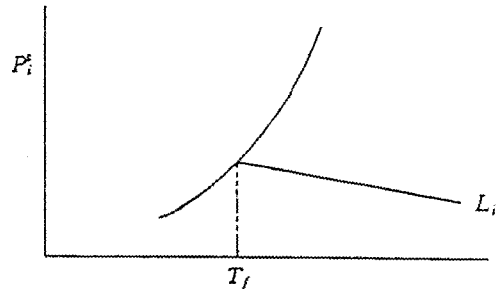


Fig. 1 Flash temperature T_f for a pure substance by means of vapor pressure and lower flammable limit

3. 기존의 추산식

지금까지 제시된 가연성 액체 혼합물의 인화점 추산식을 살펴보면, Johnston³⁾은 이상용액의 개념인 Raoult의 법칙을 이용하여 유기수용액(물과 에탄올)에 대한 인화점을 추산하는 식을 제시하였는데 여기서는 폭발하한계와 부분압의 관계에 의해 인화점을 추산하였다. 이 관계식은 다음과 같다.

$$\frac{P_i}{L_i} = 1 \dots\dots\dots (1)$$

$$P_i = x_i P_i^s \dots\dots\dots (2)$$

여기서 P_i 는 평형상태에서 증기와 공기혼합물에서 i 성분의 부분압, L_i 는 폭발하한계이고, P_i^s 는 i 성분의 포화증기압이다.

Thome⁴⁾은 가연성물질에 난연성물질을 혼합하여 인화점 추산을 시도하였는데, 여기서는 인화점을 추산하기 위해 이상용액이라는 가정하에서 추산한 것이 아니고 이들 혼합물이 비이상성용액의 개념을 도입하여 활동도 계수를 추산하는 식인 van Laar식과 Clausius-Clapeyron식을 이용하여 인화점을 추산하였다.

$$\frac{1}{T_m} = 2.303 \frac{R}{\Delta H} \log \alpha_i + \frac{1}{T_f} \dots\dots\dots (3)$$

$$\alpha_i = \frac{\gamma_a P_a^o + kLP_T}{(\gamma_a/\gamma_i)P_a^o + kP_i} \dots\dots\dots (4)$$

여기서 T_m 은 혼합물의 인화점, T_i 는 순수물질의 인화점, γ 는 활동도계수, ΔH 는 증발잠열, P^o 는 순수증기압이고, P_T 는 전기압이다.

Gmehling 등⁵⁾은 가연성 3성분계 혼합물의 인화점 추산을 위하여 비이상성용액의 개념을 이용하였다. 인화점 추산에 필요한 활동도계수, γ 를 계산하기 위해 그룹기여법(group contribution method)인 UNIFAC법을 도입하여 실험값없이 인화점을 추산하는 식을 제시하였는데 인화점 추산에 필요한 증기압식은 Antoine식을 사용하였다.

$$\frac{P_i^s}{L_i} = 1 \dots\dots\dots (5)$$

$$\sum \frac{P_i}{L_i} = 1 \dots\dots\dots (6)$$

$$P_i = \gamma_i x_i P_i^s \dots\dots\dots (7)$$

$$\log P_i^s = A_i - \frac{B_i}{(t+C_i)} \dots\dots\dots (8)$$

여기서 γ_i 는 활동도계수이고, A_i , B_i 및 C_i 는 상수이다.

Nakano⁶⁾는 에멀존화된 연료의 인화점 추산을 연구하였는데, 앞에서 제시한 Gmehling식과 큰 차이가 없으며 이 추산방법 역시 활동도계수를 UNIFAC법을 이용하여 추산한 후 증기압을 계산하여 인화점을 추산하였다.

$$P_E = P_S = \alpha_S \cdot P_P \dots\dots\dots (9)$$

$$P_E(T_E) = P_S(T_E) = P_F = P_P(T_P) \dots\dots\dots (10)$$

$$\alpha = \gamma \cdot X \dots\dots\dots (11)$$

$$(P_E = \gamma \cdot X \cdot P_P, P_i = \gamma_i x_i P_i^s)$$

$$P_E(T_E) = \alpha_{o/o}(T_E) \cdot P_P(T_E) = \alpha_{o/o}(T_E) \cdot \exp 10[A - B/(T_E + C)] \dots\dots (12)$$

$$\alpha_{o/o}(T_E) \cdot \exp 10[A - B/(T_E + C)] = \exp 10[A - B/(T_P + C)] \dots\dots\dots (13)$$

$$T_E = 1/[1/(T_P + C) + (\log \alpha_{o/o}(T_E))/B] - C \dots\dots\dots (14)$$

여기서 P_E 는 순수 증기압, P_P 는 포화증기압, γ 는 활동도계수, X 는 조성, A , B , C 는 상수, T_P 는 연료의 인화점 그리고 T_E 는 폭발하한계에 해당하는 증기의 인화점이다.

4. RSM모델과 MRSM모델에 의한 인화점 추산

가연성 액체혼합물의 인화점을 예측할 수 있는 기존의 추산식으로는 이상용액 개념을 도입하여 Raoult의 법칙을 이용한 추산 방법과 비이상용액으로 간주하여 활동도계수를 UNIFAC법에 의해 추산하는 인화점 추산 방법 등이 있다.

본 연구에서는 제시한 혼합용액의 특성인 끓는점 및 공비점을 추산하는 식인 RSM 모델⁸⁾, MRSM-1 모델^{9,10)}, 그리고 MRSM-2 모델^{10,11)}을 이용하여 가연성 액체 혼합물의 인화점을 추산할 수 있는지를 시도하고 기존의 추산 방법과 비교 검토하고자 한다. 특히 MRSM-1 모델과 MRSM-2 모델은 혼합용액의 특성을 실험값없이 추산하는 방식으로 제시된 방법이다.

가연성 액체 혼합물의 인화점을 추산하는 RSM 모델, MRSM-1 모델 그리고 MRSM-2 모델은 다음과 같다.

· RSM model :

$$\text{Model 1 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 \dots (15)$$

$$\text{Model 2 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 \dots\dots\dots (16)$$

$$\text{Model 3 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 + gx_1^2x_2 \dots\dots\dots (17)$$

$$\text{Model 4 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 + gx_1^2x_2 + hx_1x_2^2 \dots\dots\dots (18)$$

$$\text{Model 5 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 + gx_1^2x_2 + hx_1x_2^2 + kx_1^2x_2^2 \dots\dots\dots (19)$$

$$\text{Model 6 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 + gx_1^2x_2 + hx_1x_2^2 + kx_1^2x_2^2 + lx_1^3 \dots\dots (20)$$

$$\text{Model 7 : } T_{fm} = a + bx_1 + cx_2 + dx_1^2 + ex_2^2 + fx_1x_2 + gx_1^2x_2 + hx_1x_2^2 + kx_1^2x_2^2 + lx_1^3 + mx_2^3 \dots\dots\dots (21)$$

· MRSM-1 model :

$$T_{fm} = T_{f1}x_1 + T_{f2}x_2 + T_{f3}x_3 + A_{12}x_1x_2 + A_{13}x_1x_3 + A_{23}x_2x_3 + B_{12}x_1x_2(x_1 - x_2) + B_{13}x_1x_3(x_1 - x_3) + B_{23}x_2x_3(x_2 - x_3) \dots\dots\dots (22)$$

· MRSM-2 model :

$$T_{fm} = T_{f1}x_1 + T_{f2}x_2 + T_{f3}x_3 + A_{12}x_1x_2 + A_{13}x_1x_3 + A_{23}x_2x_3 + B_{12}x_1x_2(x_1 - x_2) + B_{13}x_1x_3(x_1 - x_3) + B_{23}x_2x_3(x_2 - x_3) + C_{12}x_1x_2(x_1 - x_2)^2 + C_{13}x_1x_3(x_1 - x_3)^2 + C_{23}x_2x_3(x_2 - x_3)^2 \dots\dots\dots (23)$$

여기서 T_{fm} 은 가연성 액체 혼합물의 인화점이고,

Table 1 Comparison between reported and estimated flash points for ethanol-toluene-ethylacetate system by RSM and MRSM models

Parameters	RSM models			Parameters	MRSM models	
	Model 3	Model 4	Model 5		MRSM-1	MRSM-2
a	-3.663	-3.822	-4.032	T _{f1}	11.992	12
b	-16.434	-7.583	-51.114	T _{f2}	3.998	4
c	30.869	-26.716	32.086	T _{f3}	-4.002	-4
d	31.282	22.681	67.026	A ₁₂	-13.826	-36
e	38.516	34.520	-24.052	A ₁₃	47.921	-24
f	141.882	46.396	315.352	A ₂₃	-93.979	16
g	-179.028	-105.830	-420.594	B ₁₂	-70.557	24
h		135.377	-843.102	B ₁₃	-164.846	0
k			1107.035	B ₂₃	401.377	96
				C ₁₂		-114
				C ₁₃		-128
				C ₂₃		128
A. A. P. E.	19.152	17.774	7.364	A. A. P. E.	2.428	38.576
A. A. D.	0.541	0.486	0.201	A. A. D.	0.064	1.101

Table 2 Summary of AAD of estimating flash points by RSM and MRSM models for ethanol-toluene-ethylacetate system

Cases	AAD	RSM Models						MRSM-1 Model	MRSM-2 Model
		1	2	3	4	5	6		
Case I *	A. A. D.	1.253	1.147	0.698	0.583	0.213	51.978	0.067	2.159
Case II **	A. A. D.	1.048	1.108	0.541	0.486	0.201	39.025	0.064	1.101

* Case I : Wu & Finkelman의 자료¹²⁾

** Case II : 순수성분의 인화점은 "The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data"에서 인용¹³⁾

T_{f1}, T_{f2}, 및 T_{f3}는 각 순수물질의 인화점이다.

본 연구에서는 ethanol-toluene-ethylacetate계를 이용하여 Raoult의 법칙에 의한 인화점 추산, UNIFAC에 의한 인화점 추산 및 MRSM 모델에 의한 인화점 추산값을 문헌값과 비교하였다.

Table 1에서는 RSM 모델, MRSM-1 모델 그리고 MRSM-2모델에 의한 인화점 추산식의 매개변수(parameter)와 이들 추산식에 의한 추산값과 문헌값을 비교하여 나타내었는데, 추산값과 문헌값의 차이의 정도를 알기위해 통계학에서 많이 사용하는 A. A. P. E. (average absolute percent error)와 A. A. D. (average absolute deviation)을 사용하였다^{9,10)}.

$$A. A. P. E. = \sum \frac{|(T_{est.} - T_{exp.}) / T_{exp.}|}{N} \times 100 \dots \dots \dots (24)$$

$$A. A. D. = \sum \frac{|T_{est.} - T_{exp.}|}{N} \dots \dots \dots (25)$$

여기서 T_{est.}는 추산식에 의해 추산된 인화점이고, T_{exp.}는 문헌값에 의한 인화점이며, 그리고 N은 자료수이다.

또한 Table 2에서는 RSM 모델과 MRSM 모델에 의해 추산된 추산값과 문헌값의 차이의 정도인 A. A. D.를 비교하여 나타내었다. 이 표에서 Case I과 Case II로 구분하였는데 Case I은 Wu 등의 자료를 이용하여 추산한 결과이고, Case II는 Wu 등¹²⁾의 자료중 혼합조성의 자료를 이용하고 순수성분의 인화점은 Sigma-Aldrich 자료¹³⁾를 이용하여 추산하였다. 이렇게 구분하여 추산을 시도한 이유는 순수성분 인화점 자료의 신뢰성 때문인데 순수성분의 인화점은 여러 문헌을 통해서 발표되고 있으므로 신뢰도가 높다고 생각되는 자료를 이용하는 것이 바람직하므로 가장 널리 사용되는 Sigma-Aldrich 자료를 사용하였다.

그 결과 Case I과 Case II의 A. A. D. 값의 비교에서 알 수 있듯이 순수물질의 인화점은 신뢰도

가 높은 자료를 이용하므로 혼합물질의 인화점 추산에 보다 정확성을 기할 수 있다고 본다.

RSM 모델, MRSM-1모델과 MRSM-2모델을 이용하여 ethanol-toluene-ethylacetate계의 인화점을 추산한 결과, MRSM-1모델에 의해 추산된 추산값이 RSM모델, MRSM-2모델보다 문헌값과의 비교해서 차이가 적으므로 본 연구에서는 MRSM-1모델에 의해 인화점 추산을 시도하였다.

MRSM-1모델의 인화점 추산식은 다음과 같다.

$$T_{fm} = 11.992x_1 + 3.998x_2 - 4.002x_3 - 13.826x_1x_2 + 47.921x_1x_3 - 93.979x_2x_3 - 70.557x_1x_2(x_1 - x_2) - 164.846x_1x_3(x_1 - x_3) + 401.377x_2x_3(x_2 - x_3) \dots \dots \dots (26)$$

Table 3에 문헌값과 이상용액의 개념을 도입한 Raoult법칙에 의한 추산값, 비이상성용액의 개념을 도입한 UNIFAC법을 이용한 추산값 그리고 본 연구에서 제시한 MRSM-1모델에 의한 추산값을 비교하여 나타내었다.

Table 3 Comparison of experimental and estimated flash points by using several correlations for ethand(1)-toluene(2)-ethylacetate(3) system

mole fraction			flash point(°C)			
x ₁	x ₂	x ₃	exptl	Raoult	UNIFAC	MRSM-1
1.000	0.000	0.000	12.00	-	-	-
0.000	1.000	0.000	4.00	-	-	-
0.000	0.000	1.000	-4.00	-	-	-
0.328	0.328	0.344	-3.33	1.58	-1.80	-3.24
0.568	0.284	0.148	-1.67	4.81	-0.17	-1.56
0.564	0.141	0.295	-3.33	0.94	-1.77	-3.21
0.494	0.247	0.259	-2.78	2.40	-1.29	-3.08
0.887	0.055	0.058	2.22	7.08	4.06	2.22
0.176	0.088	0.736	-5.56	-3.07	-4.56	-5.56
0.856	0.114	0.030	1.67	9.29	3.63	1.67
Average absolute deviation (A. A. D.)			-	3.68	1.09	0.06

Table 3에서 추산식에 의한 추산값과 문헌값을 비교한 결과 이상용액의 개념으로 Raoult의 법칙을 이용한 인화점 추산은 A. A. D.가 3.68로서 문헌값과 큰 차이가 있음을 알 수 있고, 문헌값없이 추산할 수 있는 UNIFAC법은 Raoult의 법칙보다는 많이 개선되었으나 실험값과는 약간의 차이를 보이고 있다.

따라서 본 연구에서 제시한 MRSM-1 모델에 의

한 인화점 추산값을 문헌값과 비교한 결과 A. A. D.가 0.06으로서 이 방법론에 의해 혼합용액의 특성치인 공비점 및 끓는점 이외에 인화점의 추산도 가능함을 제시하였다.

5. Computer Plotting의 결과 및 고찰

가연성 액체 혼합물의 인화점을 추산식인 RSM 모델과 MRSM 모델을 이용하여 조성 변화에 따른 인화점 등온선을 computer graphics에 의해 도시하였고, 여기에 사용된 알고리즘은 Newton-Raphson법으로 다음과 같다⁸⁻¹⁰.

$$x_{n+1} = x_n - FT(x_i) / FT'(x_i) \dots \dots \dots (27)$$

$$FT(x_i) = \sum T_i x_i + \sum \sum A_{ij} x_i x_j + \sum \sum B_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) - T = 0 \dots \dots \dots (28)$$

여기서 FT(x_i)는 3성분계 MRSM-1모델에서 표현하고자 하는 임의의 온도 T와의 차이이며, FT'(x_i)는 FT(x_i)를 조성에 대하여 편미분했을 때의 값이다. FT(x_i)를 표현하는 식은 $\sum x_i = 1$ 을 이용하여 $x_i = 1 - x_j - x_k$ (i, j 및 k는 1, 2 및 3)로 놓고 MRSM-1 모델에 대입하여 두 성분(x_j, x_k)만으론 된 식과 3성분(x_i, x_j 및 x_k)의 모든 성분을 고려한 식을 생각할 수 있다. 위 두 가지 방법은 동일하며, 본 연구에서는 RSM 모델의 경우는 전자를, MRSM 모델의 경우는 후자의 방법으로 계산하였다.

계산과정을 간단히 소개하면 다음과 같다. 식(28)을 만족시키는 조성과 온도의 계산은 임의의 한 조성을 일정한 간격(여기서는 0.01)으로 변환시키면서 식(27)을 Newton-Raphson법에 의해 FT(x_i)의 절대값이 설정한 허용오차(여기서는 0.00001) 범위 내에 있을때 조성이 온도 T를 만족하는 조성이 된다. 위와같은 방법을 3성분계를 구성하는 각 조성에 대해 모두 적용하여, 등온선의 형태에 따라 임의의 조성에서 발산이나 진동에 의한 계산상의 문제점을 보완하였다.

가연성 3성분계 액체 혼합물의 조성과 온도범위 내에서 계산된 온도와 조성값을 이용하여 plotter (Roland Dxy-1350)를 사용하여 인화점의 등온선을 도시하였는데, Fig. 2에서는 MRSM-2 모델을 이용한 등온선을, 그리고 Fig. 3에서는 MRSM-1 모델에 의한 등온선을 나타내었다.

Fig. 2와 Fig. 3의 등온선 분포를 살펴보면,

Fig. 3에서의 인화점 분포가 Fig. 2에서의 인화점 분포보다 문헌값과 거의 일치하고 있는데 이는 앞에서도 설명을 하였지만 MRSM-1모델에 의한 추산값이 MRSM-2 모델에 의한 추산값보다 A. A. D. 가 작은 결과로 사려된다.

따라서 RSM 모델, MRSM-1 모델 및 MRSM-2 모델에 의해 혼합용액의 특성치 추산 뿐만 아니라 가연성 액체 혼합물의 인화점 추산도 가능함을 제시하였다. 또한 Fig. 2와 Fig. 3에서 볼 수 있듯이 computer plotting에 의한 인화점 등온선

분포 역시 문헌값과 거의 일치함을 알 수 있으므로 다른 혼합 조성에서도 쉽게 인화점을 예측할 수 있다. 앞으로 MRSM 모델과 RSM 모델을 이용하여 혼합물의 특성인 끓는점 및 공비점의 추산 뿐만 아니라 가연성 혼합물의 화재, 폭발 특성인 인화점, 폭발한계(explosive limits) 및 자연발화점(AIT) 등의 연구에 이용되기를 기대한다.

6. 결 론

혼합용액의 특성인 끓는점 및 공비점(azeotropic point)을 추산하는 MRSM모델과 RSM모델을 이용하여 3성분계 가연성 액체 혼합물에 대한 인화점을 추산하여 기존의 추산식들과 비교 검토하였다. 또한 제시된 추산식을 이용하여 computer plotting의해 가연성 액체 혼합물의 인화점의 등온선을 도시한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

MRSM 모델과 RSM 모델을 이용하여 3성분계 가연성 액체 혼합물에 대한 인화점 추산이 가능함을 알 수 있었다. 가연성 액체 혼합물을 이상용액의 개념을 도입하여 인화점을 추산하는데는 문헌값과 추산값이 큰 차이를 보이고 있으므로 이상용액의 개념에 의한 추산은 무리가 있다. 제시한 추산식을 사용하여 computer graphics에 의해 3성분계 인화점 등온선 분포를 나타낼 수 있으므로 이 분포에 의해 여러 다른 조성에서의 인화점들도 시각적으로 쉽게 예측할 수 있다.

참 고 문 헌

- 1) Butler, R. M., Cooke, G. M., Lukk, G. G. and Jameson B. G., Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 48, No. 4, pp. 808~812, 1956.
- 2) Prugh, R. W., J. of Chemistry Education, Vol. 50, No. 2, pp. A85~A89, 1973.
- 3) Johnston, J. C., Chem. Eng., Vol. 81, No. 25, p. 122, 1974.
- 4) Thorne, P. F., Fire and Materials, Vol. 1, pp. 134~140, 1977.
- 5) Gmehling, J. and Rasmussen, P., I & EC Fundam., Vol. 21, No. 2, pp. 186~188, 1982.

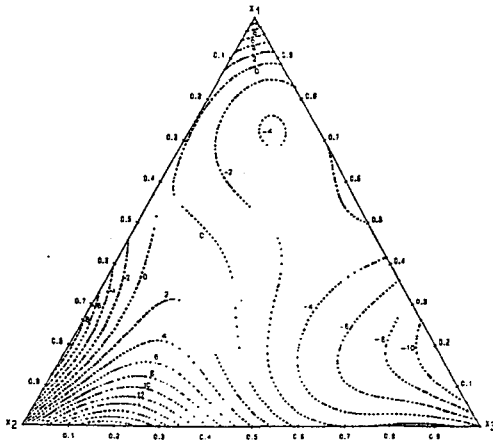


Fig. 2 Isotherms of flash points of ethanol(1)-toluene(2)-ethylacetate(3) system by using MRSM-2 model

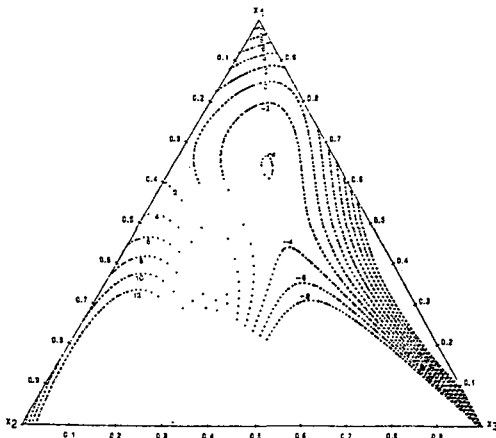


Fig. 3 Isotherms of flash points of ethanol(1)-toluene(2)-ethylacetate(3) system by using MRSM-1 model

- 6) Nakano, Y., J. of Japan Society for Safety Engineering, Vol. 29, No. 2, pp. 77~82, 1990.
- 7) Hasegawa, K. and Kashiki, K., J. of Japan Society for Safety Engineering, Vol. 29, No. 5, pp. 332~340, 1990.
- 8) Park, J.C., Proceedings of PACHEC, Vol. II, pp. 340~347, 1983.
- 9) Ha, D.M. and Park, J.C., HWAHAK KONGHAK, Vol. 29, No. 3, pp. 284~299, 1991.
- 10) Kim, M.G., Ha, D.M. and Park, J.C., Korean J. of Chem. Eng., Vol. 12, No. 1, pp. 39~47, 1995.
- 11) Park, J.C., Ha, D.M. and Kim, M.G., Korean J. of Chem. Eng., Vol. 13, No. 2, pp. 115~122, 1996.
- 12) Wu, D.T. and Finkelman, P., Presented at the 175th National Meeting of the American Chemical Society, Anaheim, CA, March, 1978.
- 13) Lenga R.E. and Votoupal K.L., "The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Vol. I ~Vol. III", Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc., 1993.