

연소 특성치를 이용한 고분자재료의 연소열 예측 Prediction of Heat of Combustion of Polymer Materials Using Combustion Characteristics

하동명[†] · 이수경*

Dong-Myeong Ha[†] · Su-Kyung Lee*

세명대학교 안전공학과, *서울산업대학교 안전공학과
(2005. 8. 8. 접수/2005. 9. 8. 채택)

요 약

고분자물질의 연소열은 고분자를 취급하는 공정에서 잠재적인 화재 위험성을 예측하기 위해 다른 화재 매개변수와 함께 사용될 수 있는 중요한 화재 특성치이다. 본 연구의 목적은 건축내장재 등으로 다양하게 사용되고 있는 고분자물질의 연소열을 예측하고자 한다. 다중회귀분석과 문헌자료를 사용하여 고분자물질의 연소열을 예측할 수 있는 식을 제시하였다. 산소소비열량과 완전연소 시 화학양론계수에 의한 연소열의 예측값과 문헌값의 평균절대퍼센트오차(A.A.P.E.)는 4.46, 평균절대편차(A.A.D.)는 1.09 그리고 상관계수는 0.972이다. 제시한 예측식에 의한 계산값은 문헌값과 일치하였다. 따라서 본 연구에서 제시된 식이 다른 고분자 내장재의 연구에도 이용되기를 기대한다.

ABSTRACT

The heat of combustion of polymer materials is an important fire characteristics, which can be used with other fire parameter to predict the potential fire hazard in the polymer handling process. The aim of this study is to predict the heat of combustion for polymers which used in the building interior materials. By using the literature data and multiple regression, the new equation for predicting the heat of combustion of polymers is proposed. The A.A.P.E.(average absolute percent error) and the A.A.D.(average absolute deviation) of the reported and the calculated heat of combustion by means of the oxygen consumption calorimeter and the stoichiometric coefficient were 4.46 and 1.09, and the correlation coefficient was 0.972. The values calculated by the proposed equations were in good agreement with the literature data. Therefore, it is expected that this proposed equations will support the use of the research for other polymer materials.

Keywords : Heat of combustion, Polymer materials, Stoichiometric coefficient, Multiple regression analysis

1. 서 론

일반적으로 화재 시나리오에 관련되는 매개변수(parameter)는 수 없이 많지만 대표적으로 연소열을 비롯하여 화재지연특성, 열방출량, 연소생성물의 특성, 플래시오버(flashover), 화염전파속도(flame spread rate)등을 들 수 있다. 그러나 화재시나리오에서 출화기에 관련된 매개변수들은 방화설비의 특성, 점화원, 연료의 특성 및 조건, 환기조건, 입주자의 특성 및 위치, 구조물과 기타 장비의 조건 등을 들 수 있다¹⁾.

방화공학에서 열화학적 매개변수인 연소열, 열방출량, 질량손실량, 연소에 필요한 산소량등은 다른 특성치에 비해 매우 중요하다. 이 가운데 고분자물질의 연소열은 잠재적인 화재 위험성평가를 위해 다른 화재매개변수와 함께 사용해야 할 중요한 화재 특성치이다²⁾.

화재는 여러 가지 특성들이 복합적으로 작용하는 복잡한 현상이다. 그럼에도 불구하고 화재의 위험성을 평가하는 전통적인 화재 시험에서 총괄적인 화재위험성을 평가하기보다는 화염전파특성, 발화성, 소화의 용이성, 내화성, 연기의 특성, 독성 등의 개별적 측정에 많은 연구가 이루어지고 있다. 이렇게 단순히 개별적인 화재 특성만을 파악하다 보면 한 가지 시험에서 측정

[†]E-mail: hadm@semyung.ac.kr(www.chollian.net/~hadm)

한 특성이 다른 시험에서는 정반대의 부정적인 작용을 하는 모순이 발생하기도 한다. 이런 모순들을 최소화하기 위해서는 여러 특성치를 함께 고려한 화재위험성 평가가 이루어져야 한다.

최근 고분자물질은 건축물 내장재, 전기, 수송(항공, 자동차 등)뿐만 아니라 우리 주위에서도 다양하게 사용되고 있다. 따라서 이들 물질이 화재로 전이되는 경우 예방하기 위해 이들 물질에 대한 정량적 위험성평가의 필요성이 대두되고 있다. 정확한 화재위험성평가를 위해서는 여러 연소 특성들 가운데 연소열의 연구는 중요하다.

고분자물질은 다양한 성분으로 구성되어 있으므로, 연소특성을 정확히 파악하기는 쉽지 않다. 따라서 고분자를 구성하는 단량체(monomer)를 이용하여 연소 특성을 연구하고 있다. Walters 등³⁾은 고분자의 연소열 측정 연구를 하였으며, Hshieh 등⁴⁾은 순수고분자의 연소열 예측 방법을 제시하였다, 최근 Ha 등⁵⁾은 원자 기여법(atomic contribution method)을 이용한 탄화수소와 할로겐화탄화수소의 연소열 예측 방법을 연구한 바 있다.

본 연구에서는 화재위험성 평가에 중요한 매개변수로 사용되고 있는 고분자물질의 연소열에 대해 화학양론계수와 산소소비열량 등을 이용하여 연소열을 예측할 수 있는 경험식을 제시하고자 한다. 또한 제시된 추산식을 이용하여 다른 고분자 물질의 연소 특성을 찾는 데 도움을 주고자 한다.

2. 고분자 물질에 관련된 연소 특성치

연소열은 반응성 화학물질의 안전한 취급을 위해 중요한 파라미터이다. 연소열은 가연성물질이 발화하거나 연소할 때 취급물질의 화재 및 폭발의 잠재적 위험성을 평가하는데 사용되기 때문이다. 가연성물질의 연소열은 물질이 산소와의 반응에서 표준 산화 생성물로 전환할 때 포함되는 열이다.

그동안 문헌들에 연구된 고분자물질에 관련된 화재 특성치들로는 연소열, 열방출량, 질량손실율, 연소에 필요한 산소량, 연소속도, 기화열, 분해온도, 비열, 최소 발화온도, 발화시간, LOI(limiting oxygen index), 최소 폭발농도, 최소발화에너지, 발화민감도, 폭발가속도, 화염온도, 화염높이 등을 들 수 있다^{6,7)}.

특히 화재위험성 평가에 중요한 인자인 연소열 가운데 순수물질에 대한 자료는 Handbook 등에 많이 제시되고 있다^{8,9)}.

앞서 설명한 특성치들은 경우에 따라 상관관계가 있

음을 여러 문헌을 통해서 알 수 있다. 특성치 들 가운데 연소열을 완전연소 시 산소소비의 상관관계로 다음 같이 나타내고 있다.

$$\Delta h_c = E \left[\frac{n_{O_2} M_{O_2}}{n_p M_p} \right] = E r_o \quad (1)$$

여기서 Δh_c 는 완전연소시 순 연소열, E 는 연소열 등을 이용한 평균 에너지 값, n_p 는 고분자 물질의 몰 수, n_{O_2} 는 균형방정식에서의 산소 몰수, M_{O_2} 는 32 g/mole, M_p 는 고분자물질의 분자량, r_o 는 연료와 산소의 량론비이다.

또한 다른 표현으로 연소열을 산소의 질량 유속과 산소소비 단위 당 열량 등의 함수로 나타내고 있다.

$$\Delta h_c = \frac{Q_{O_2}}{V_{comb}} \quad (2)$$

여기서 $Q_{O_2} = H_{O_2} \times (m_{O_2}^e - m_{O_2}^s)$ 이며, $m_{O_2}^e$ 는 들어가는 산소의 질량 유속이고, $m_{O_2}^s$ 는 배출되는 산소의 질량 유속이며, H_{O_2} 는 산소소비 단위 질량당 생성 열량이다.

Hshieh 등⁴⁾은 순수 유기 고분자물질의 연소열에 대하여 고분자물질을 구성하는 단량체의 각 원소들을 이용하여 예측식을 제시하였다.

$$\begin{aligned} H_{cn}(\text{kJ/mole}) = & 416.20(C) + 82.05(H) \\ & - 105.678 \times (O) + 20.12(N) \\ & + 421.72(S) - 23.66(Cl) - 45.02(F) \end{aligned} \quad (3)$$

최근 Ha 등⁵⁾는 통계적 및 수학적 방법에 의해 원자 기여법(atomic contribution method)을 이용하여 유기할로겐화물질의 연소열을 예측할 수 있는 새로운 추산식을 제시하였다.

$$\begin{aligned} H_{cn}(\text{kJ/mole}) = & 427.2364 \times (C) + 89.4466 \times (H) \\ & - 195.8868 \times (O) - 181.5104 \times (F) \\ & - 40.8723 \times (Cl) + 6.2078 \times (Br) \end{aligned} \quad (4)$$

또한 본 연구에서 고분자물질의 연소열 예측에 사용하기 위해 고분자 단량체(monomer)의 완전연소 시 필요한 화학양론계수는 Hshieh 식¹⁰⁾을 사용하여 산소 몰수를 계산하였다.

$$\begin{aligned} C_m H_n N_p O_q X_r X'_s Si_u + [m+t+u+(n/4) \\ - (s/4) - (q/2)] O_2 \rightarrow mCO_2 + [(n-s)/2] H_2O(l) \\ + uSiO_2 + (r/2) X_2 + sHX' + tSO_2 + (p/2) N_2 \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 X 는 Br 혹은 I이고, X' 은 F 혹은 Cl이다.

그러나 이들 문헌에서도 연소열 값을 얻지 못할 경

우 다른 예측식을 이용하여 얻을 수 있다. 모든 유기 화합물에 널리 적용될 수 있는 추산 식으로 Cardozo 방식¹¹⁾을 사용할 수 있다. 이를 간략히 소개하면 다음과 같다.

$$N = N_c + \sum_i \Delta N_i \quad (6)$$

여기서 N_c 는 화합물의 총 탄소수이고, $\sum \Delta N_i$ 는 화합물 구조에 따른 보정 값이다. 따라서 식 (6)에 의해 N 값이 계산되면 식 (7)에 대입하여 연소열을 예측하게 된다.

$$\Delta H_c(g) = -198.42 - 615.14N \quad (7)$$

여기서 $\Delta H_c(g)$ 는 대상물질이 기체상태로 연소될 때의 연소열이다.

3. 고분자물질의 연소열 예측 모델

3.1 다중회귀 분석

자연현상은 여러 가지 변수(독립변수)가 변화하므로 응답(종속변수, response)에 미치는 영향도 여러 가지 상태로 나타난다. 이러한 변수와 응답의 관계를 규명하기 위해서 학문이 발달해 왔다.

이러한 관계를 보다 정량적으로 표시하기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법을 다중회귀(multiple regression)라 하며, 이 방법론은 그 동안 최적조건(optimum condition)을 구하는 방식 또는 최적화(optimization)에 널리 이용되어 왔다. 변수들에 의한 화재 위험성 평가를 위한 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(multiple regression analysis)을 이용하였다^{12,13)}.

제시한 모델을 다항식의 일반적인 형태로 표시하면 다음과 같다.

$$Y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + \dots + px^p + \dots \quad (8)$$

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

3.2 연소열 예측 모델

본 연구에서는 고분자물질의 연소열을 연소 특성들

을 이용하여 예측하고자 한다. 문헌과 자료들을 고찰한 결과, 고분자물질의 연소열은 산소소비열량과 완전 연소 시 화학양론 식에 의한 산소 몰수와 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 따라서 산소소비열량과 화학양론계수에 의한 예측이 가능할 것으로 사료되어, 다음과 같은 예측 모델들을 이용하여 최적화 된 추산 모델을 찾고자 한다.

본 연구에서 사용된 예측 모델들은 다음과 같다.

$$Y = a + bX_1 \quad (9)$$

$$Y = a + bX_1 + cX_1^2 \quad (10)$$

$$Y = a + bX_2 \quad (11)$$

$$Y = a + bX_2 + cX_2^2 \quad (12)$$

$$Y = a + bX_1 + cX_2 \quad (13)$$

$$Y = a + bX_1 + cX_2 + dX_1X_2 \quad (14)$$

여기서 Y 는 연소열, X_1 은 산소소비열량, X_2 는 완전연소 시 필요한 산소 몰수이다.

제시된 추산 모델들 가운데 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석을 이용하였다.

3.3 문헌값과 예측값의 비교 방법

제시한 모델들 가운데 추산식에 의해 추산된 추산값과 실험값의 차이 정도를 알고, 가장 정확한 추산식을 찾기 위해 통계학에서 많이 이용하는 A.A.P.E.(average absolute percent error)와 A.A.D.(average absolute deviation)를 사용하였으며 구하는 식은 다음과 같다¹³⁻¹⁵⁾.

$$A.A.P.E. = \frac{\sum \left| \frac{H_{est.} - H_{exp.}}{H_{exp.}} \right|}{n} \times 100 \quad (15)$$

$$A.A.D. = \frac{\sum |H_{est.} - H_{exp.}|}{n} \quad (16)$$

여기서 $H_{est.}$ 는 추산식에 의해 예측된 연소열, $H_{exp.}$ 는 문헌값, n 은 자료(data)수이다.

또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표준편차, 표본 결정계수 그리고 상관계수를 사용하였다.

$$S = \sqrt{\frac{\sum (Y_i - y_i)^2}{n - 1}} \quad (17)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (18)$$

$$r = \pm \sqrt{\frac{SSR}{SST}} \quad (19)$$

여기서 S는 결정값의 표준오차, r^2 는 표본 결정계수, r은 상관계수, SSR은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression), SST는 총 제곱합(total sum of squares)이다.

4. 결과 및 고찰

본 연구에서 고분자물질의 연소열을 예측하기 위해 문헌³⁾에 제시된 자료를 이용하였다. 그리고 연소열과

산소소비열량 그리고 화학양론식에 의한 산소몰수의 관계를 살펴보았다. 고분자물질의 연소열은 산소몰수 그리고 산소소비열량의 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 연소열 예측식을 얻기 위해 문헌에 제시된 연소열, 산소소비열량 이외에 완전연소 시 고분자 단량체의 산소몰수, 그리고 단량체의 화학양론 부피비와 질량비를 Table 1에 나타내었다.

본 연구에서는 고분자물질의 연소열 예측을 위해 앞서 제시된 여러 모델들을 수학적 및 통계적인 방법으로 분석한 결과 다음과 같은 최적화된 예측 모델을 얻었다.

$$Y = 0.9826 + 0.9530X_1 + 0.0162X_2 \quad (20)$$

Table 1. Reported and predicted heat of combustion of polymers substances

No.	Compounds	Repeat unit composition	Q_c	Δh_c	Oxygen consumption (kJ/g)	O_2 moles	Vol %	Wt %	Pred. Δh_c
1	Poly(oxyethylene)(POM)	CH ₂ O	17.39	15.93	13.97	1	17.36	17.74	14.31
2	Polytetrafluoroethylene(PTFE)	C ₂ F ₄	6.68	6.68	8.38	1	17.36	41.82	8.98
3	Polyvinylalcohol(PVOH)	C ₂ H ₄ O	23.31	21.31	23.82	2.5	7.75	11.23	23.72
4	Poly ethylene(PE)	C ₂ H ₄	47.74	44.60	44.91	3	6.54	6.29	43.83
5	Poly(dimethylsiloxane)(PDMS)	C ₂ H ₆ OSi	19.53	17.75	16.99	4	4.99	11.74	17.24
6	Poly propylene(PP)	C ₃ H ₆	45.80	42.66	44.91	4.5	4.46	6.29	43.86
7	Poly(methylmethacrylate)(PMMA)	C ₅ H ₈ O ₂	26.75	24.99	25.15	6	3.38	10.70	25.05
8	Polymethylmethacrylate(PMMA)	C ₅ H ₈ O ₂	26.86	25.10	25.15	6	3.38	10.70	25.05
9	Poly 1,4-phenylenesulfide(PPS)	C ₆ H ₄ S	29.62	28.81	27.17	8	2.56	8.84	27.01
10	Poly (phenylenesulfide)(PPS)	C ₆ H ₄ S	28.39	27.58	27.17	8	2.56	8.84	27.01
11	Poly(2,6-dimethyl-1,4-phenyleneoxid)(PPO)	C ₈ H ₈ O	34.21	32.75	33.19	9.5	2.16	8.32	32.77
12	Poly styrene(PS)	C ₈ H ₈	43.65	41.96	40.31	10	2.01	6.96	39.56
13	Poly ethylenetere phthalate(PET)	C ₁₀ H ₈ O ₂	24.13	23.22	21.83	10	2.01	12.13	21.95
14	Epoxy Novolac, Catalytic cure(phenoxy-N)	C ₁₀ H ₁₁ O	31.37	29.73	34.93	12.25	1.69	7.94	34.47
15	Poly(1,4-phenyleneether sulfone)(PES)	C ₁₂ H ₈ O ₃ S	25.42	24.66	22.59	13.5	1.53	10.99	22.73
16	Poly(1,4-butanediolterephthalate)(PBT)	C ₁₂ H ₁₂ O ₄	27.91	26.71	24.77	13	1.59	10.84	24.80
17	Poly(hexamethyleneadiapamide)(nalon66)	C ₁₂ H ₂₂ O ₂ N ₂	30.90	28.76	30.61	16.5	1.26	8.96	30.42
18	Poly(etherketone)(PEK)	C ₁₃ H ₈ O ₂	31.07	30.17	29.94	14	1.48	9.14	29.74
19	Polybenjoyl-1,4-phenylene	C ₁₃ H ₈ O	38.35	37.37	33.77	14.5	1.43	8.19	33.40
20	Poly(p-phenylenebenzobisoxazole)(PBO)	C ₁₄ H ₆ O ₂ N ₂	29.18	28.62	25.98	14.5	1.43	10.39	25.98
21	Poly(m-phenylene isophthalamide)	C ₁₄ H ₁₀ O ₂ N ₂	26.45	25.53	27.30	15.5	1.34	9.94	27.25
22	Aramid-arylester copolymer	C ₁₄ H ₁₀ O ₂ N ₂	25.27	24.35	27.30	15.5	1.34	9.94	27.25
23	Poly(p-phenylene terephthalamide)	C ₁₄ H ₁₀ O ₂ N ₂	26.92	26.00	27.30	15.5	1.34	9.94	27.25
24	Polyamideimide(PARE)	C ₁₅ H ₈ O ₃ N ₂	24.97	24.31	24.61	15.5	1.34	10.91	24.69
25	Poly(acrylonitrilebutadiene-styrene)(ABS)	C ₁₅ H ₁₇ N	39.84	38.07	38.24	19.25	1.08	7.30	37.74
26	Bisphenol-E cyanate ester	C ₁₆ H ₁₂ O ₂ N ₂	29.38	28.38	28.58	18	1.15	9.54	28.51
27	Polycarbonate of bisphenol-A(PC)	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	31.53	30.32	29.71	18	1.15	9.21	29.59

Table 1. Continued

No.	Compounds	Repeat unit composition	Q _c	Δh _c	Oxygen consumption (kJ/g)	O ₂ moles	Vol %	Wt %	Pred. Δh _c
28	Polycarbonate of bisphenol-A(PC)	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	31.06	29.85	29.71	18	1.15	9.21	29.59
29	Hexafluorobisphenol-A cyanate ester	C ₁₇ H ₈ O ₂ N ₂ F ₆	18.71	18.25	19.55	16.5	1.27	14.39	19.88
30	Bisphenol-A cyanate ester	C ₁₇ H ₁₄ O ₂ N ₂	29.92	28.81	29.40	19.5	1.07	9.29	29.31
31	Bisphenol-A epoxy, catalyticcure(phenoxy-A)	C ₂₁ H ₂₄ O	32.50	30.94	30.79	26.5	0.79	7.34	30.76
32	Poly(etheretherketone)(PEEK)	C ₁₉ H ₁₂ O ₃	31.07	30.16	29.84	20.5	1.01	9.17	29.75
33	Poly(etheretherketone)(PEEK)	C ₁₉ H ₁₂ O ₃	31.48	30.57	29.84	20.5	1.01	9.17	29.75
34	Tetramethylbisphenol FCyanate ester	C ₁₉ H ₁₈ O ₂ N ₂	31.23	29.94	30.82	22.5	0.92	8.90	30.71
35	Poly(etherketoneketone)(PEKK)	C ₂₀ H ₁₂ O ₃	31.15	30.27	30.04	21.5	0.97	9.11	29.96
36	Polybenzimidazole(PBI)	C ₂₀ H ₁₂ N ₄	31.65	30.79	31.30	23	0.90	8.78	31.19
37	Polyimide(PI)	C ₂₂ H ₁₀ O ₃ N ₂	26.03	25.45	24.14	22	0.95	11.10	24.35
38	Novolac cyanate ester	C ₂₃ H ₁₅ O ₃ N ₃	28.61	27.77	28.00	25.25	0.82	9.78	28.08
39	Novolac cyanate ester	C ₂₃ H ₁₅ O ₃ N ₃	30.65	29.81	28.00	25.25	0.82	9.78	28.08
40	Bisphenol-m cyanate ester	C ₂₆ H ₂₄ O ₂ N ₂	34.39	33.06	32.82	31	0.67	8.41	32.76
41	Poly sulfome of bisphenol-A(PSF)	C ₂₇ H ₂₂ O ₄ S	30.28	29.19	28.93	31.5	0.66	9.16	29.06
42	Poly sulfome of bisphenol-A(PSF)	C ₂₇ H ₂₂ O ₄ S	30.63	29.54	28.93	31.5	0.66	9.16	29.06
43	Polybenzoxazine of bisphenol-A/aniline(b-A benzoxazine)	C ₃₁ H ₃₀ O ₂ N ₂	34.89	33.46	34.03	37.5	0.56	8.13	34.02
44	Arylether of hexafluoro bisphenol-A and triphenylphosphine oxide	C ₃₃ H ₂₁ O ₃ F ₆ P	26.50	25.74	25.26	36.5	0.57	10.72	25.64
45	Poly etherimide(PEI)	C ₃₇ H ₂₄ O ₆ N ₂	29.59	28.70	28.32	40	0.52	9.61	28.62
46	Poly etherimide(PEI)	C ₃₇ H ₂₄ O ₆ N ₂	29.06	28.17	28.32	40	0.52	9.61	28.62
47	Polyester of hydroxybenzoic and hydroxynaphthoic acids	C ₃₉ H ₂₂ O ₁₀	26.54	25.80	25.47	39.5	0.53	10.58	25.90
48	Polyethylenephthylate(PEN)	C ₁₄ H ₁₀ O ₄	25.92	25.01	25.09	14.5	1.43	10.71	25.13
49	Dicyclopentadienyl bisphenol	C ₁₇ H ₁₇ NO	33.64	32.14	35.44	20.75	1.00	8.00	35.09
	A.A.P.E	-	-	-	-	-	-	-	4.46
	A.A.D.	-	-	-	-	-	-	-	1.09

여기서 Y는 연소열, X₁은 산소소비열량, X₂는 완전연소시 필요한 산소 몰수이다.

Table 1에 예측식에 의한 결과도 함께 나타내었으며, Fig. 1에서는 문헌값과 예측값의 차이 정도를 쉽게 알 수 있도록 나타내었다.

고분자 49개 물질에 대해 식 (20)를 이용하여 연소열을 예측한 결과 A.A.P.E는 4.46, A.A.D.는 1.09, 표준편차는 1.55, 결정계수는 0.945 그리고 상관계수는 0.972로서 문헌값과 예측값은 일치하였다.

49개의 물질을 예측한 결과 H, N, O의 원소를 포함하지 않은 2번째 물질인 Polytetrafluoroethylene(PTFE)은 문헌값과 예측값이 차이를 보이고 있다. 그러나 PTFE를 제외할 경우에는 A.A.P.E는 3.75로서 문헌값

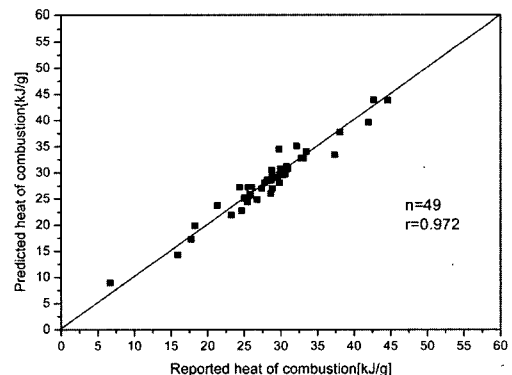


Fig. 1. Comparison between the reported and predicted heat of combustion of 49 polymers.

과 예측값은 더욱 향상된 결과를 보여주고 있다. 또한 A.A.P.E가 10% 안팎인 물질은 Polyvinylalcohol (PVOH), Epoxy Novolac Catalytic cure (phenoxy-N) 그리고 Polybenzoyl-1,4-phenylene 등이며, 49개 물질 가운데 13개 물질은 A.A.P.E가 1% 미만으로 정확하게 일치하였다.

그 동안 순수물질의 연소열은 여러 문헌들에 많이 제시하고 있으나, 고분자물질은 그렇지 못하다. 이는 고분자 재료의 다양성 및 실험 조건의 어려움 때문이다. 따라서 본 연구에서 제시한 예측식을 이용하여 아직까지 밝혀지지 않은 다른 고분자물질의 연소열 예측 및 실험 자료의 신뢰성에 도움을 줄 수 있을 것으로 사료된다.

5. 결 론

본 연구에서는 49개의 고분자물질에 대해 산소소비열량과 화학양론계수의 관계를 규명한 결과 서로 상관관계가 있음을 알게 됨에 따라, 수학적 및 통계적인 방법으로 산소소비열량과 화학양론계수를 이용하여 연소열 예측식을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 고분자물질의 연소열 예측식은 다음과 같다.

$$Y = 0.9826 + 0.9530X_1 + 0.0162X_2$$

여기서 Y는 연소열, X_1 은 산소소비열량, X_2 는 완전연소시 필요한 산소 몰수이다.

2) 최적화된 연소열 예측 모델에 의한 결과로 A.A.P.E는 4.46, A.A.D.는 1.09, 표준편차는 1.55, 결정계수는 0.945 그리고 상관계수는 0.972로서 문헌값과 예측값은 일치하였다.

3) 49개 물질 가운데 13개 물질은 A.A.P.E가 1% 미만으로 정확하게 일치하였다.

참고문헌

1. NFPA, "SFPE Handbook Fire Protection Engineering", National Fire Protection Association, Quincy, Massachusetts(1995).
2. D. Drysdale, "An Introduction to Fire Dynamics", 2nd ed., John Wiley & Sons(1998).
3. R. N. Walter, S. M. Hackett and R. E. Lyon, "Heat of Combustion of High Temperature Polymers", Fire and Material, Vol. 24, pp.245-252(2000).
4. F. Y. Hshieh, D. B. Hirsch and H. D. Beesen, "Predicting Heat of Combustion of Polymers Using an Empirical Approach", Fire and Materials, Vol. 27, pp.9-17(2003).
5. D. M. Ha and S. J. Lee, "Prediction of the Net Heats of Combustion of Organic Compounds based on the Atomic Contribution Method", T. of Korean Institute of Fire Sci. & Eng., Vol. 17, No. 4, pp.7-12(2003).
6. V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers(2003).
7. C. J. Hilado, "Flammability Handbook for Plastics", 3rd ed., Technomic Publishing Company(1982).
8. R. H. Perry and G. W. Green, "Perry's Chemical Engineers' Handbook", 7th edition, McGraw-Hill, New York(1997).
9. D. R. Lide, "Handbook of Chemistry and Physics", 76th Edition, CRC Press, Boca Raton(1995).
10. F. Y. Hshieh, "Predicting Heats of Combustion and Lower Flammability Limits of Organosilicon Compounds", Fire and Materials, Vol. 23, pp.79-89(1999).
11. R. D. Cardozo, "Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", AIChE Journal, Vol. 32, No. 5, pp.844-847(1986).
12. G. E. P. Box and N. R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc.(1987).
13. D. M. Ha, "A Study on the Prediction of Flashover time and Heat Release Rate (HRR) for Building Interior Materials", T. of Korean Institute of Fire Sci. & Eng., Vol. 18, No. 3, pp.30-38(2004).
14. D. G. Kleinbaum, L. L. Kuper and K. E. Muller, "Applied Regression Analysis and Other Multivariable Methods", 2nd ed., PWS-KENT Publishing Co.(1988).
15. D. M. Ha, "Interrelationship of Fire and Explosion Properties for Chlorinated Hydrocarbons", J. of the Korean Institute for Industrial Safety, Vol. 17, No. 4, pp.126-132(2002).