



## 연소열을 이용한 가연성 혼합물의 폭발한계 예측

†하 동 명

세명대학교 보건안전공학과  
(2006년 2월 2일 접수, 2006년 3월 13일 채택)

### Prediction of Explosion Limit of Flammable Mixture by Using the Heat of Combustion

†Dong-Myeong Ha

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University, Jecheon 390-711, Korea  
(Received 2 February 2006, Accepted 13 March 2006)

#### 요 약

폭발한계는 가연성물질의 화재 및 폭발 위험성을 결정하기 위해 사용되는 중요한 연소 특성치 가운데 하나이다. 폭발한계는 상대 연소에 따라 가연성물질을 구분하는데 사용된다. 이런 구분은 가연성물질의 안전한 취급, 처리, 수송을 위해서 중요하다. 본 연구에서는 가연성혼합물의 구성하는 각 순수성분의 연소열과 기상 조성을 이용하여 폭발한계를 예측하였다. 제시된 방법론에 의한 계산값은 적은 오차범위에서 문헌값과 일치하였다. 따라서 제시된 결과로부터 가연성혼합물의 폭발특성치 예측 방법과 다른 가연성혼합물의 폭발한계 예측에 폭넓게 적용되기를 기대한다.

**Abstract** – Explosion limit is one of the major physical properties used to determine the fire and explosion hazards of the flammable substances. Explosion limits are used to classify flammable materials according to their relative flammability. Such a classification is important for the safe handling, storage, transportation of flammable substances. In this study, the lower explosion limits(LEL) of the flammable mixtures predicted with the appropriate use of the vapor composition and the heat of combustion of the individual components which constitute mixture. The values calculated by the proposed equations were a good agreement with literature data within a few percent. From a given results, It is to be hoped that this methodology will contribute to the estimation of the explosive properties of flammable mixtures with improved accuracy and the broader application for other flammable substances.

**Key words** : Explosion limit, Flammable mixtures, Heat of combustion, Fire and explosion hazards

#### I. 서 론

공정상에서 취급하는 가연성물질을 충전하거나 제거에 있어 밸브의 조작 실수, 배관접합부파손 등으로 인해 가연성물질이 누출되는 경우 주위에 공기와 혼합하여 혼합기체를 형성하게 된다. 이 혼합기체에 착화원이 존재할 때 화재 및 폭발이 발생할 수 있으며, 또한 BLEVE, UVCE 등에 의해 유해물질이 유출되어 인명 손실이 발생할 수도 있다. 따라서 산업현장에서 화재 및 폭발의 위험을 최소화하기 위해서는 공정의 최적화 조작이 이루어져야 하며, 이를 위해 우선 작업 조건하

에서 취급물질의 연소 특성치 파악이 필요하다. 공정 안전에 필요한 대표적인 화재 및 폭발 특성치는 폭발한계, 인화점, 자연발화점, 최소발화에너지, 연소열 등을 들 수 있다[1].

가연성의 가스나 증기는 공기 또는 산소 중에서 어느 한정된 범위의 농도가 되었을 때에만 연소가 일어난다. 즉 공기나 산소 중 가연성가스나 증기의 혼합비율이 너무 낮으면 폭발을 일으키지 않으며, 또한 너무 높아도 폭발을 일으키지 않는다. 이 농도의 범위를 폭발범위라 하고, 그 한계를 폭발한계라고 한다. 폭발한계는 폭발하한계(LEL, Lower Explosion Limit)와 폭발상한계(UEL, Upper Explosion Limit) 나누어진다. 일반적으로 폭발범위는 가연성의 가스나 증기가 공기와 혼

†주저자: hadm@semyung.ac.kr(www.chollian.net/~hadm)

합했을 경우보다 산소와 혼합했을 때 넓고 위험성도 크다. 또 폭발범위는 가연성의 가스, 증기, 분진의 종류에 따라 다르며, 온도와 압력 등 여러 변수에 의해서도 영향을 받는다[2].

가연성물질의 폭발 특성치 예측은 다양한 변수에 의해 영향을 받기 때문에, 즉 실험 조건에 따라 다른 결과가 나오므로 완전한 이론은 있을 수 없다. 따라서 이론을 근거로 실험 자료를 이용하여 경험적 변수를 보강한 후 어느 정도 예측이 가능한 경험식(Empirical Equation)을 사용하고 있다. 실제와 가까운 경험식을 사용하는 것은 실험에 소요되는 시간, 노력 및 경비를 줄일 수 있으며, 또한 중요한 것은 상황에 따라 제한된 실험을 할 수밖에 없는 경우 실험에서 얻어진 측정 결과의 신뢰성 고찰을 뒷받침해 주는 것이다.

그 동안 순수성분 및 혼합성분의 이용한 폭발한계의 이론적 및 실험적 연구는 최근에도 활발히 진행되고 있으나, 실험의 어려움과 자료의 정확성 관계로 아직 많은 연구를 필요로 하고 있다. 최근 Liekhus 등은 Le Chatelier 법칙을 수정하여 혼합물의 폭발한계를 연구하였으며[3], Ha는 액상 조성을 이용한 2성분계 폭발한계를 연구한 바가 있다[4].

본 연구에서는 가연성혼합기체의 폭발한계에 대해 혼합물질을 구성하는 각 순수물질의 연소열과 혼합가스를 구성하는 각 조성을 이용하여 폭발한계를 예측할 수 있는 식을 제시하고자 한다. 본 연구를 통해 혼합가스를 취급하는 산화, 발화, 연소의 공정에 기초적인 자료로 사용되도록 하고, 실험에서 얻고자 하는 다른 혼합가스의 폭발한계 연구에 도움을 주고자 하는데 목적이 있다.

## II. 혼합물의 MSDS 및 혼합물의 폭발한계

### 2.1. 혼합물의 MSDS

화학 산업 현장에서는 순수물질로 사용되는 경우보다 혼합물질을 사용하는 경우가 대부분이다. MSDS (Material Safety Data Sheet) 제도는 화학물질을 안전하게 취급함으로써 사고를 예방하는데 목적이 있다[5]. 이러한 목적을 달성하기 위해서 혼합물의 MSDS 자체의 위험성 실험을 거쳐 평가하고, 이를 바탕으로 작성하는 것이 원칙이다. 그러나 현실적으로 취급하는 물질의 유해성, 안전성 등의 제약 때문에 종합적 실험을 거쳐 정확하게 평가된 경우는 세계적으로도 그리 많지 않으며, 우리나라도 이와 같은 실정이다. 따라서 수많은 혼합용제를 사용하고 있는 화학 산업 현장에서는 이들 각각의 인화성 혼합용제의 위험성을 판정하여 사고를 예

방하기는 쉬운 일이 아니다.

따라서 실험에서 얻기 어려운 혼합물의 연소 특성 자료에 대해 성분 혼합물을 구성하는 각 순수물질의 자료를 이용하여 혼합물의 화재 및 폭발 위험성을 예측 평가하는 것은 MSDS를 작성하는 것도 하나의 방법이다. 혼합물의 MSDS 작성방법으로는 혼합물 자체의 유해성 평가자료를 이용하는 방법, 성분물질 자료를 이용하여 혼합물의 특성을 작성하는 방법, 그리고 혼합물자체의 유해성 평가 자료와 각 성분물질 자료를 혼용하여 작성하는 방법 등이 있다. 또한 혼합물질로 된 제품의 구성성분이 같을 때, 각 성분의 함량 변화가 10% 이내일 때, 그리고 비슷한 유해성을 가질 때는 유사한 혼합물을 하나의 MSDS로 작성하는 방법이 있다.

### 2.2. 혼합물의 폭발한계 예측

방화 및 방폭의 관점에서부터 가연성물질의 저장 및 취급 공정에서 다성분(Multicomponent) 혼합물의 연소 특성에 관한 관심은 더욱 필요로 하고 있다. 여러 폭발 특성치 가운데 폭발한계의 연구는 재해 예방을 위해 무엇보다도 중요한데도 불구하고, 실험의 여러 제약성 및 여러 변수의 영향으로 정확 결과를 얻기가 어려우며, 특히 순수물질에 비해 혼합물질의 연구는 더욱 그러하다.

최근 실험에서조차 얻기 어려운 가연성 순수물질 및 혼합물의 폭발 특성 자료는 이론을 근거로 모델 계산(Model Calculation)을 통해 얻고 있으며, 여기서 얻어진 자료를 이용하여 화재 및 폭발 예방에 적용하고 있다.

가연성 액체혼합기체의 폭발한계를 예측은 최근 Le Chatelier 법칙을 변형한 식이 제시되고 있으나[4], 일반적으로 Le Chatelier 법칙을 적용한다[6]. 이 법칙을 적용하기 위해서는 혼합액체의 기상 조성을 알아야 혼합물의 폭발한계를 예측할 수 있다. 따라서 기상 조성을 알기 위해서 기액평형(Vapor-Liquid Equilibrium)[7] 상태에서 용액열역학 개념인 Dalton과 Raoult의 법칙 그리고 활동도 계수(Activity Coefficients) 모델[8]을 이용하여 기상 조성을 계산한 후 이 조성을 Le Chatelier 법칙을 적용하여 폭발한계를 계산할 수 있다. 그러나 이와 같은 방법에 의한 폭발한계 예측은 계산 상 복잡성을 지니고 있으므로, 혼합용액의 액상 조성을 사용하여 예측할 수 있는 방법이 제시되고 있다. 이를 간략히 소개하면 다음과 같다.

혼합용액의 액상 조성을 사용하기 위해서는 우선 Le Chatelier 식을 이용해야 하는데, 식은 다음과 같다[4].

$$LEL_M = \sum \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{LEL_i}} \quad (1)$$

여기서  $LEL_M$ 는 혼합물의 폭발한계,  $LEL_i$ 는  $i$  성분의 폭발한계, 그리고  $y_i$ 는  $i$  성분의 기상조성이다.

혼합용액의 조성을 이용하여 폭발한계를 예측하기 위해 식 (1)은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{1}{LEL_M} = \sum_{i=0}^n \frac{y_i}{LEL_i} \quad (2)$$

식 (2)에 Dalton과 Raoult의 법칙을 적용하여 기상의 조성을 나타내기 위하여 각 법칙을 부분압으로 정리하면 이상용액인 경우 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$LEL_M = \frac{\sum x_i p_i^s}{\sum \frac{x_i p_i^s}{LEL_i}} \quad (3)$$

여기서  $x_i$ 는  $i$  성분의 액상 조성,  $p_i^s$ 는  $i$  성분의 포화 증기압이다.

비이상용액(Non-ideal Solution)인 경우는 활동도계수를 사용하여 하며, 활동도계수( $\gamma_i$ )를 사용하는 경우 식 (3)은 다음과 같이 수정된다.

$$LEL_M = \frac{\sum \gamma_i x_i p_i^s}{\sum \frac{\gamma_i x_i p_i^s}{LEL_i}} \quad (4)$$

이 식에서 활동도계수는 van Laar, Wilson, NRTL, ASGO, UNIQUAC 그리고 UNIFAC 등에 의해서 계산할 수 있다[9].

최근에 Liekhus 등은 VOC(Volatile Organic Compound)를 포함하는 가스혼합물의 연소 특성 연구에서 Le Chatelier 식을 보정한 식을 제시하였는데, 이 관계식을 간략히 보면 다음과 같다[3].

가연성혼합가스의 연소한계는 다음 식으로 계산한다.

$$LEL_M = \frac{1}{\sum f_i GCF_i} \quad (5)$$

여기서  $f_i$ 는 혼합가스에서 가스  $i$  성분의 몰분율 혹은 부피분율이고,  $GCF_i$ 는 성분  $i$ 의 그룹기여인자(Group Contribution Factor)이다. 그룹기여인자는 다음 식으로 계산할 수 있다.

$$GCF_i = \sum n_j GF_j \quad (6)$$

여기서  $n_j$ 는  $i$  성분의 그룹형태  $j$ 의 수이고,  $GF_j$ 는 그룹형태  $j$ 의 그룹인자(Group Factor)이다.

### III. 연소열 계산 및 예측

반응성 화학물질의 안전한 취급에 필요한 파라미터로 연소열 역시 중요하다. 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.

연소열은 총연소열(Gross Heat of Combustion)과 순연소열(Net Heat of Combustion)로 나타낼 수 있다. 총연소열과 순연소열의 차이는 물의 응축열이다. 화재 및 폭발 안전의 관점에서는 순연소열이 총연소열보다 중요하다. 이는 화재에서 형성된 물이 수증기 상태이기 때문이다. 일반적으로 연소열의 자료는 문헌에서 얻을 수 있다[10,11].

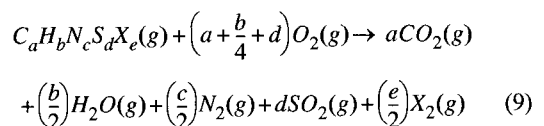
그러나 이들 문헌에서도 연소열 값을 얻지 못할 경우 추산식을 이용하여 얻을 수 있다. Cardozo는 모든 유기화합물에 널리 적용될 수 있는 예측식을 제시하였다[12].

$$N = N_c + \sum_i \Delta N_i \quad (7)$$

여기서  $N_c$ 는 화합물의 총 탄소수이고,  $\sum_i \Delta N_i$ 는 화합물 구조에 따른 보정값이다. 따라서 식 (8)에 의해  $N$  값이 계산되면 식 (7)에 대입하여 연소열을 예측하게 된다.

$$\Delta H_c(g) = -198.42 - 615.14N \quad (8)$$

또한 최근에는 Hanley에 의해 여러 유기화합물의 연소열을 예측할 수 있는 식이 제시되었다[13]. 이 식은 예측하고자 하는 물질의 표준생성열을 알아야만 하고, 산소를 포함하는 물질에 대해 예측할 수 없는 단점은 있지만, 폭 넓게 사용할 수 있는 장점이 있다.



$$\Delta H_c = a H_{f, CO_2} + \left(\frac{b}{2}\right) H_{f, H_2O} + d H_{f, SO_2} - H_{f, C_a H_b N_c S_d X_e} \quad (10)$$

여기서  $C$ 는 탄소,  $H$ 는 수소,  $N$ 은 질소,  $S$ 는 황 그리고  $X$ 는 할로겐이다. 따라서 식 (10)을 이용하여 연소열을 예측할 경우 예측하고자 하는 물질,  $CO_2$ ,  $H_2O$  그리고  $SO_2$  등의 표준생성엔탈피 자료를 이용하면 연소열을 예측할 수 있다.

#### IV. 연소열을 이용한 혼합기체의 연소한계 예측 이론

일반적으로 가연성혼합기체의 폭발한계는 Le Chatelier 법칙에 의해 계산할 수 있으며, 폭발한계 예측식은 다음과 같다[4].

$$LEL_M = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{LEL_i}} \quad (1)$$

식 (1)을 근거로 기상의 조성과 연소열을 이용하여 가연성 혼합기체의 폭발한계 예측 식을 제시하고자 한다.

연소열에 의한 혼합기체의 폭발한계를 예측하기 위해서는 Burgess-Wheeler 법칙의 도입이 필요하다. 일반적으로 화염에는 그 이하의 온도는 없다고 하는 최저 온도가 있고, 그 값은 탄화수소화합물 등에서 약 1200°C 가 된다. 이와 같은 단일화염온도(Adiabatic Flame Temperature)의 한계가 생기는 이유는 탄화수소의 폭발한계와 연소열에 관계를 이용한 Burgess-Wheeler법칙으로 설명이 가능하다. Burgess-Wheeler법칙은 폭발한계 [vol%]과 연소열[kcal/mol]의 곱은 1050으로 일정하다는 관계를 설명한 것으로서 폭발한계를 % 값으로 나타내지 않으면 다음과 같은 관계식으로 나타낼 수 있다.

$$(LEL)(\Delta H_c) = 10.5 \quad (11)$$

그러나 최근 Hanley는 폭굉범위(Detonation Limit)를 연구하기 위해 폭발한계와 연소열의 관계를 다음과 같이 제시하였다.

$$(LEL)(\Delta H_c) = 11.2 \quad (12)$$

본 연구에서는 혼합기체의 폭발한계를 보다 정량적으로 평가하기 위해서 최근 문헌에 제시된 폭발한계와 연소열의 자료를 이용하여 회귀분석(Regression Analysis)한 결과 다음과 같은 관계식을 얻었다.

$$(LEL)(\Delta H_c) = 10.9 \quad (13)$$

혼합기체의 폭발한계를 예측하기 위해 식 (1)에 식 (12)와 식 (13)을 대입하면 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$LEL_M = \frac{11.2}{\sum_{j=1}^n \frac{p_j \Delta H_c^j}{\sum_{i=1}^n p_i}} \quad (14)$$

$$LEL_M = \frac{10.9}{\sum_{j=1}^n \frac{p_j \Delta H_c^j}{\sum_{i=1}^n p_i}} \quad (15)$$

여기서  $\sum_{i=1}^n p_i$ 는 부분압의 합으로 전압으로 표현되며,

기상에서 부분압은 조성과 비례하므로  $p_j = y_i$ 로 나타낼 수 있다.

따라서 식 (14)와 (15)를 전개하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} LEL_M &= \frac{11.2}{\frac{p_1 \Delta H_{C1}}{P_t} + \frac{p_2 \Delta H_{C2}}{P_t} + \frac{p_3 \Delta H_{C3}}{P_t} + \dots} \\ &= \frac{11.2}{\frac{y_1 \Delta H_{C1}}{P_t} + \frac{y_2 \Delta H_{C2}}{P_t} + \frac{y_3 \Delta H_{C3}}{P_t} + \dots} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} LEL_M &= \frac{10.9}{\frac{p_1 \Delta H_{C1}}{P_t} + \frac{p_2 \Delta H_{C2}}{P_t} + \frac{p_3 \Delta H_{C3}}{P_t} + \dots} \\ &= \frac{10.9}{\frac{y_1 \Delta H_{C1}}{P_t} + \frac{y_2 \Delta H_{C2}}{P_t} + \frac{y_3 \Delta H_{C3}}{P_t} + \dots} \end{aligned} \quad (17)$$

여기서  $\Delta H_{C1}, \Delta H_{C2}, \Delta H_{C3}$  등은 순수물질의 연소열이며,  $y_i$ 는 혼합물을 구성하는  $i$  성분의 기체조성이다.

기존에 사용하여 온 Le Chatelier 법칙은 순수물질의 폭발한계를 이용한 반면, 식 (16)과 식 (17)은 순수물질의 연소열과 조성을 이용하여 폭발한계를 예측할 수 있는 새로운 방법이다. 특히 순수물질의 폭발한계보다 연소열이 여러 문헌에 많이 제시되어 있으므로 사용의 폭이 넓다고 할 수 있겠다.

#### V. 결과 및 고찰

추산값과 문헌값의 차이의 정도를 알기 위해 역시

A.A.D.(average absolute deviation)을 사용하였다[14,15].

$$A.A.D. = \sum \frac{|L_{est.} - L_{exp.}|}{N} \quad (18)$$

여기서  $L_{est.}$ 는 추산식에 의해 추산된 폭발한계 값이고,  $L_{exp.}$ 는 문헌에 의한 폭발한계 값이며, 그리고  $N$ 은 자료수이다.

2성분계 혼합물인 methane+n-pentane 계[16]에 대해 예측식을 이용하여 계산한 값과 문헌값을 비교하여 Table 1에, ethanol+benzene 계[16]에 대해서는 Table 2

에 그리고 ethanol+diethylether 계[16]에 대해서는 Table 3에 나타내었다. 또한 3성분계인 benzene+toluene+o-xylene 계[17]와 MEK+toluene+o-xylene 계[17]에 대해서는 Table 4와 5에 각각 나타내었다.

2성분계들에 대해 Le Chatelier 식과 연소열을 이용한 예측식에 의한 예측값을 문헌값과 비교한 결과, Le Chatelier 식에 의한 예측값이 연소열을 이용한 예측값보다 문헌값과 일치하였다. 그러나 3성분계의 경우는 Le Chatelier 식보다 본 연구에서 제시한 새로운 예측식에 의한 예측 결과가 문헌값과 일치하였다. 따라서

**Table 1.** Comparison of experimental and estimated lower explosion limits by using several correlations for methane( $X_1$ )+n-pentane( $X_2$ ) system.

Mole fraction		LEL (vol%)			
$X_1$	$X_2$	Exp.	Le Chatelier	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 11.2	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 10.9
1.00	0.00	5.40	-	-	-
0.75	0.25	3.15	3.19	3.30	3.21
0.50	0.50	2.23	2.26	2.30	2.24
0.25	0.75	1.75	1.75	1.77	1.72
0.00	1.00	1.43	-	-	-
A.A.D.		-	0.023	0.076	0.033

**Table 2.** Comparison of experimental and estimated lower explosion limits by using several correlations for ethanol( $X_1$ )+benzene( $X_2$ ) system.

Mole fraction		LEL (vol%)			
$X_1$	$X_2$	Exp.	Le Chatelier	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 11.2	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 10.9
1.00	0.000	3.85	-	-	-
0.836	0.164	3.30	3.06	2.89	2.82
0.775	0.225	2.99	2.84	2.75	2.68
0.629	0.371	2.30	2.44	2.37	2.30
0.361	0.639	1.72	1.94	1.88	1.83
0.000	0.001	1.53	-	-	-
A.A.D.		-	0.185	0.172	0.212

**Table 3.** Comparison of experimental and estimated lower explosion limits by using several correlations for ethanol( $X_1$ )+diethylether( $X_2$ ) system.

Mole fraction		LEL (vol%)			
$X_1$	$X_2$	Exp.	Le Chatelier	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 11.2	(LEL)( $\Delta H_C$ ) = 10.9
1.00	0.00	3.69	-	-	-
0.75	0.25	2.96	2.95	2.95	2.87
0.50	0.50	2.48	2.45	2.46	2.40
0.40	0.60	2.30	2.30	2.31	2.25
0.25	0.75	2.10	2.10	2.11	2.06
0.00	1.00	1.84	-	-	-
A.A.D.		-	0.013	0.017	0.086

**Table 4.** Comparison of experimental and estimated lower explosion limits by using several correlations for benzene( $X_1$ ) + toluene( $X_2$ ) + o-xylene( $X_3$ ) system.

Mole fraction			LEL (vol%)			
$X_1$	$X_2$	$X_3$	Exp.	Le Chatelier	(LEL)( $\Delta H_c$ ) = 11.2	(LEL)( $\Delta H_c$ ) = 10.9
1.00	0.00	0.00	-	-	-	-
0.00	1.00	0.00	-	-	-	-
0.00	0.00	1.00	-	-	-	-
0.60	0.20	0.20	1.39	1.44	1.33	1.29
0.40	0.40	0.20	1.14	1.32	1.28	1.25
0.40	0.20	0.40	1.67	1.31	1.24	1.21
0.20	0.60	0.20	1.17	1.23	1.24	1.21
0.20	0.40	0.40	0.95	1.22	1.20	1.17
0.20	0.20	0.60	0.83	1.21	1.17	1.14
A.A.D.			-	0.185	0.157	0.138

**Table 5.** Comparison of experimental and estimated lower explosion limits by using several correlations for MEK( $X_1$ ) + toluene( $X_2$ ) + o-xylene( $X_3$ ) system.

Mole fraction			LEL (vol%)			
$X_1$	$X_2$	$X_3$	Exp.	Le Chatelier	(LEL)( $\Delta H_c$ ) = 11.2	(LEL)( $\Delta H_c$ ) = 10.9
1.00	0.00	0.00	-	-	-	-
0.00	1.00	0.00	-	-	-	-
0.00	0.00	1.00	-	-	-	-
0.60	0.20	0.20	1.42	1.59	1.57	1.51
0.40	0.40	0.20	1.24	1.41	1.42	1.38
0.40	0.20	0.40	1.01	1.39	1.36	1.33
0.20	0.60	0.20	1.18	1.26	1.30	1.27
0.20	0.40	0.40	1.03	1.25	1.26	1.23
0.20	0.20	0.60	0.83	1.24	1.22	1.19
A.A.D.				0.238	0.243	0.200

연소열에 의한 혼합물의 폭발한계 예측의 가능성을 제시하고 있다.

폭발한계 자료가 없는 경우 연소열을 이용하여 폭발한계 예측이 가능해 졌으며, Modified Burgess-Wheeler 법칙에 대한 많은 연구가 이루어진다면, 본 연구에서 제시한 방법론에 의해 가연성 혼합물의 폭발한계 예측 방법은 더욱 일반화될 수 있다고 본다.

가연성물질의 화재 및 폭발 위험성평가는 이론만으로 완전한 예측을 하기는 불가능하므로, 실험을 병행해야만 보다 정량적 예측이 가능하나, 실험이 불가능할 경우 이론을 근거로 한 경험식에 의해서도 어느 정도 예측이 가능하고 할 수 있다.

최근 여러 문헌들을 종합해 보면 실험의 여러 가지 제약, 즉 시간, 경비, 유해성, 환경문제 등으로 이론적 연구에 많은 비중을 두고 있는 것을 볼 수 있다. 따라서 안전 및 손실예방을 위해 가연성물질의 위험성평가

에 관해 기존의 이론은 물론 새로운 이론 연구를 더욱 발전시켜 나가야 할 것이다.

## VI. 결 론

가연성혼합물 2성분계 3개와 3성분계 2개에 대해 혼합물을 구성하는 각 순수물질의 연소열과 각 조성을 이용하여 폭발한계 예측을 시도한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) Le Chatelier 식과 연소열을 이용한 폭발한계 예측은 비슷한 결과를 얻었다.

2) 연소열을 이용한 가연성 혼합물의 폭발한계 예측은 가능해졌다.

3) 가연성혼합물의 폭발한계를 예측하기 위해 탄화수소의 폭발한계와 연소열의 관계는 다음과 같다.

$$(LEL)(\Delta H_c) = 10.9$$

참고문헌

[1] Kline, A.A. *et al.*, "An Overview of Compiling, Critically Evaluating, and Delivering Reliable Physical Property Data from AIChE DIPPR Project 911 and 912", *Fluid Phase Equilibria*, **150-151**, 421-428, (1998)

[2] Lee, S.K. and D.M. Ha, "Newest Chemical Engineering Safety Engineering", Donghwagisul Press, Seoul, (1997)

[3] Liekhus, K.L. *et al.*, "Flammability Gas Mixture Containing Volatile Organic Compounds and Hydrogen", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, **13**, 377-384, (2000)

[4] Ha, D.M., "A Study on Explosive Limits of Flammable Materials - Explosive Limits of Flammable Binary Liquid Mixture by Liquid Phase Compositions-", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **16**(4), 103-108, (2001)

[5] Meyer, E., "Chemistry of Hazardous Materials", 2nd ed., Prentice-Hall, (1990)

[6] Le Chatelier, H., "Estimation of Fire Damp by Flammability limits", *Ann. Mines*, **19**(8), 388-392, (1891)

[7] Gmehling, J., U. Onken and W. Arlt, "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", Vol. 1, Part 1~Part 7", Deutsche Gesellschaft für Chemisches Apparatewesen (DECHEMA), (1980)

[8] Prausnitz, J.M., R.N. Lichtenthaler and E.D. de Azevedo, "Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria", 2nd ed., Prentice-Hall, (1986)

[9] Smith, J.M. and H.C. Van Ness, "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics", 4th ed., McGraw-Hill, (1987)

[10] Perry, R.H. and G.W. Green, "Perry's Chemical Engineers' Handbook", 7th Edition, McGraw-Hill, New York, (1997)

[11] Lide, D.R., "Handbook of Chemistry and Physics", 76th Edition, CRC Press, Boca Raton, (1995)

[12] Cardozo, R.D., "Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", *AIChE Journal*, **32**(5), 844-847, (1986)

[13] Hanley, B., "A Model for the Calculation and the Verification of Closed Cup Flash Points for Multi-component Mixtures", *Process Safety Progress*, **17**(2), 86-97, (1998)

[14] Ha, D.M., "A Study on Explosive Limits of Flammable Materials - Prediction of Explosive Properties and Temperature Dependence of Explosive Limits for n-Alcohols -", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **14**(1), 93-100 (1999)

[15] Ha, D.M., "Interrelationship of Fire and Explosion Properties for Chlorinated Hydrocarbons", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **17**(4), 126-132, (2002)

[16] 柳生昭三, "蒸氣の爆發限界", 安全工學協會 (1979)

[17] Lim, W.S., Y.S. Mok, J.Y. Choi, D.M. Ha and T.J. Cho, "A Study on the Characteristics of Flammability for Organic Solvent of Three Component System", *J. of the Korean Institute for Industrial Safety*, **14**(3), 120-126, (1999)