

# 양론계수를 이용한 가연성가스와 증기의 폭굉한계 예측 Prediction of the Detonation Limit of the Flammable Gases and Vapors Using the Stoichiometric Coefficient

하 동 명

Dong-Myeong Ha

세명대학교 보건안전공학과  
(2008. 3. 21. 접수/2008. 9. 11. 채택)

## 요 약

폭굉한계는 가연성물질의 화재 및 폭발 위험성을 결정하기 위해 사용되는 중요한 연소 특성치 가운데 하나이다. 본 연구에서는 가연성혼합물의 구성하는 각 순수성분의 연소열과 기상 조성을 이용하여 폭발한계를 예측하였다. 제시된 방법론에 의한 계산값은 적은 오차범위에서 문헌값과 일치하였다. 따라서 본 연구에서 제시한 방법론이 다른 가연성물질의 폭굉한계 예측에 폭넓게 적용되기를 기대한다.

## ABSTRACT

Detonation limit is one of the major physical properties used to determine the fire and explosion hazards of the flammable substances. In this study, the lower detonation limits (LDL) and the upper detonation limits (UDL) of the flammable substances predicted with the appropriate use of the heat of combustion and the stoichiometric coefficient. The values calculated by the proposed equations were in 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 detonation limits of for other flammable substances.

**Keywords :** Lower detonation limit, Upper detonation limit, Stoichiometric coefficient, Fire and explosion hazards

## 1. 서 론

일반적으로 탄화수소를 비롯해 가연성물질은 쉽게 연소하거나 혼합성 폭발가스를 형성한다. 특히 가스는 공정에서 가연성물질을 취급에 있어 밸브의 조작실수, 배관접합부파손 등으로 인해 누출된 물질이 주위에 공기와 혼합하여 착화원에 의해 화재 및 폭발이 발생할 수도 있으며, 또한 유해물질 상태로 유출되어 인명에 피해를 주는 경우도 있다.

산업현장에서 화재 및 폭발의 위험을 최소화하기 위해서는 공정의 안전과 최적화 조작이 이루어져야 하는데, 이를 위해 우선 작업 조건하에서 취급물질의 연소 특성치 파악이 필요하다.<sup>1)</sup>

가연성가스나 미세한 방울이 폭발범위 안에서 공기

와 함께 혼합될 때 연소나 폭발을 하게 된다. 폭발범위 안에서도 일정한 범위에서는 폭굉으로 전이된다. 탄화수소의 폭굉에 관한 자료는 가치 있는 안전 정보로 제공하며, 특히 증기운 폭발인 경우 폭굉에 대한 지식은 더욱 필요하다.

기상에서의 폭발은 가연성 가스와 불연성 가스의 일정 혼합 조성 범위에서만 일어난다. 가연성 가스가 낮거나 높아도 폭발은 일어나지 않는다. 이 한계를 폭발한계라고 하고, 폭발하는 최저 하한치를 폭발하한계(LEL: Lower Explosion Limit) 그리고 최고 상한치를 폭발상한계(UEL: Upper Explosion Limit)라 말한다.<sup>1)</sup>

기화한 연료와 공기와의 혼합물에 열을 가했을 때 연소에 의해 압력파를 만들고 과격한 연소를 폭발이라 한다. 이 경우 화재 전파속도는 음속보다 빠르다. 보통 연소와 폭발과의 구별은 명확하지 않은 경우도 있다. 이 한계 중 폭굉을 일으키는 조성 범위를 폭굉한계라고 하

<sup>1)</sup> E-mail: hadm@semyung.ac.kr(www.chollian.net/~hadm)

며, 폭굉한계 역시 폭굉하한계(LDL : Lower Detonation Limits)와 폭굉상한계(UDL : Upper Detonation Limits)로 나눌 수 있다.<sup>2)</sup>

그동안 가연성 가스 및 증기의 폭발한계에 관한 실험적 및 이론적 연구는 꾸준히 진행되고 있으나, 폭굉한계의 관한 연구는 거의 없는 실정이다. 그러나 일부 연구로는 화학양론계수를 폭굉한계 예측 연구가 있고,<sup>3)</sup> 또한 연소열을 이용한 폭굉한계 예측 연구가 있다.<sup>4)</sup> 또한 최근에는 탄화수소와 공기의 혼합물의 폭발 위험성 연구에서 폭굉연구를 나타낸 문헌도 있다.<sup>5)</sup>

본 연구에서는 폭굉한계에 관한 기존의 문헌들을 검토하여 폭굉한계를 예측할 수 있는 방법론을 제시하고자 한다. 여기서 제시한 방법론을 이용하여 실험에서 찾고자하는 다른 가연성 가스나 증기의 폭굉한계에 도움을 주고, 실험이 어려운 가연성가스나 증기의 폭굉한계를 예측하는 방법으로 이용하는데 목적이 있다.

## 2. 폭굉현상

연소파에 의해 발생된 압력은 화염이 얼마만큼 빨리 진행하느냐 혹은 밀폐계에 의해 지배받는 경우 압력이 증기운으로부터 어떻게 팽창하느냐에 따라 의존한다. 가스폭발의 결과는 손상이 전혀 없는 것으로부터 완전히 파괴되는 범위를 갖고 있다. 따라서 가스폭발로 인해 발생된 압력은 개인이나 물건에 손상을 줄 수 있다.<sup>6)</sup> 상변화에 의한 대규모 폭발이 일어나는 것은 대량의 액체가 순간적으로 증발하는 증기폭발이다. 예를 들면 보일러폭발 및 제철소등에서 발생하는 수증기폭발이 있고, 최근에 와서는 BLEVE(Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion)이 큰 문제가 되고 있다.

가스나 증기운이 점화될 때 화염은 가스운 혹은 증기운의 가연 부분을 통하여 2개의 다른 형태로 전파할 수 있다. 이 형태 중 하나는 폭연(Deflagration)이 되고, 다른 하나는 폭굉(Detonation)이 된다.

폭연은 연소 및 분해반응이, 열전도 및 라디칼(Radical)의 이동에 의해 전파해 가는 현상이고, 화염전파속도는 음속이하로 연소속도 및 분해속도는 수 10<sup>1</sup>~수 10 m/s대 이다. 반면 폭굉은 음속을 기준으로 할 때 음속 이상 연소파를 말하는데, 폭발 반응면과 충격파면이 거의 하나가 되어서 전파하는 현상이다. 즉 충격파의 에너지가 폭발반응을 야기시켜, 그 충격파는 폭발반응열로부터 에너지를 얻어, 감쇠하지 않고 유지하는 현상이다. 그러므로 폭굉속도는 폭연속도보다 매우 크고, 가스의 폭굉속도는 2000~3000 m/s이고, 액체 및 고체의 폭굉속도는 3000~8000 m/s 정도이다. 따라서 폭굉

은 폭연보다 압력이 크고, 파괴력이 매우 크다.

## 3. 연소열 및 화학양론과 폭굉한계의 관계

일반적으로 폭굉한계는 폭발한계 범위안에서 존재한다고 판단되므로, 본 연구에서는 폭굉한계의 예측 방법론을 찾기 위해 우선 폭발한계에 관련되는 인자를 검토하고자 한다. 지금까지 여러 연구들을 검토한 결과 폭발한계는 연소열과 화학양론 계수와 상관관계가 있음을 알 수 있다.

연소열은 일반적으로 총연소열(Gross Heat of Combustion)과 순연소열(Net Heat of Combustion)로 나뉠 수 있다. 총연소열과 순연소열의 차이는 물의 응축열이다. 화재 및 폭발 안전의 관점에서는 순 연소열이 총 연소열 보다 중요하다. 이는 화재에서 형성된 물이 수증기 상태이기 때문이다. 일반적으로 연소열은 문헌<sup>7,8)</sup>에서 얻을 수 있으나, 이들 문헌에서도 연소열 값을 얻지 못할 경우 추산식을 이용하여 얻을 수 있다. 모든 유기화합물에 널리 적용될 수 있는 추산식으로 Cardozo 방식<sup>9)</sup>이 있다.

그 동안 연소열을 이용하여 폭발 특성치가 활발히 진행되고 있다. 그 가운데 연소열에 의한 폭발한계 예측, 폭발하한계의 온도 의존성 예측 등이 연구되고 있다. 최근에는 연소열에 의한 폭발하한계의 관계를 고찰한 문헌도 제시되고 있는데 이 가운데 Suzuki<sup>10)</sup>는 유기화합물에 대해 다음과 같은 관계식을 제시하였다.

$$LFL(vol\%) = 1.80 - 3.42 \left( \frac{1}{\Delta H_c} \right) + 0.569 \Delta H_c + 0.0538 \Delta H_c^2 H \quad (1)$$

$$UFL(vol\%) = 23.3 + 6.30 \Delta H_c + 0.567 \Delta H_c^2 \quad (2)$$

Hshieh<sup>11)</sup>는 유기실리콘화합물에 대해 연소열에 의한 폭발하한계 추산식을 다음과 같이 제시한 바 있다.<sup>7)</sup>

$$LFL(vol\%) = -0.3822 + 11456.2246(-\Delta H_c)^{-0.7972} \quad (3)$$

$$UFL(vol\%) = 6.71 + 13514(-\Delta H_c)^{-0.81} \quad (4)$$

또한 지금까지 발표된 화학양론 계수를 이용한 폭발한계 추산식들을 살펴보면, Jones<sup>12)</sup>는 탄화수소화합물에 대해 연료몰수와 완전연소에 필요한 공기몰수를 이용하여 화학양론적계수(C<sub>st</sub>)를 계산한 후 이를 이용하여 폭발하한계와 상한계를 추산하는 식을 제시하였다.

$$LEL = 0.55 C_{st} \quad (5)$$

$$UEL = 3.50C_{st} \tag{6}$$

여기서  $C_{st}$ 는 다음과 같이 계산된다.

$$C_{st} = \frac{\text{연료몰수}}{\text{연료몰수} + \text{공기몰수}} \times 100 \tag{7}$$

그러나 최근의 문헌<sup>13)</sup>을 보면, 탄화수소에 대해 폭발 하한계 예측에 필요한 보정계수 0.55 대신에 0.5를 많이 사용하고 있다.

$$LEL = 0.5C_{st} \tag{8}$$

Hilado<sup>14)</sup>는 폭발하한계 예측에 필요한 보정계수에 대해 C, H, O를 포함하는 물질에 대해서는 0.537, Amine류는 0.692, chloride류는 0.609, dichloride류는 0.716, bromide류는 1.147 그리고 황을 포함하는 화합물은 0.577을 제시하였다.

그러나 폭굉하한계에 대한 실험 자료와 연구 문헌은 그리 많지 않은 편이다. 그 가운데 Nettleton<sup>3)</sup>은 몇 가지 가연성가스에 대해 밀폐식과 개방식에 의한 폭굉하한계의 실험값을 제시하였으며, 또한 완전 연소시 산소의 양론 계수를 이용한 폭굉하한계의 예측식을 제시하였다.

$$\log \Phi_l = 1.08 \log \Phi_{st} - 0.84 \tag{9}$$

$$\log \Phi_u = 1.06 \log \Phi_{st} - 0.64 \tag{10}$$

여기서  $\Phi_l$ 은 폭굉하한계이고,  $\Phi_u$ 는 폭굉상한계이다.

최근에 Hanley<sup>4)</sup>는 연소열과 폭굉하한계의 관계를 다음과 같이 제시하였다.

$$LDL = 12.9 \Delta H_c^{-1} \tag{11}$$

$$UDL = 39 \Delta H_c^{-1} \tag{12}$$

여기서 LDL은 폭굉하한계, UDL은 폭굉상한계,  $\Delta H_c$ 는 연소열(kca/mol)이다.

### 4. 폭굉하한계 예측 모델

#### 4.1 다중회귀분석

자연현상은 여러 가지 변수(독립변수)가 변화하므로 응답(종속변수, Response 혹은 Solution Variable)에 미치는 영향도 여러 가지 상태로 나타난다. 이러한 변수와 응답의 관계를 구명하기 위해서 학문이 발달해 왔다.

이러한 관계를 보다 정량적으로 표시하기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법을 다중회귀(Multiple Regression)이라 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.<sup>15,16)</sup>

제시한 모델을 다항식의 일반적인 형태로 표시하면 다음과 같다.

$$Y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + \dots + px^p + \dots \tag{13}$$

여기서 각 매개변수 a,b,c,d,e, ...을 추산하기 위해 최소화 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.

#### 4.1 폭굉하한계 및 상한계 예측모델

가연성물질의 연소열과 폭굉하한계의 문헌 자료를 분석 고찰한 결과 연소열과 폭굉하한계가 서로 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 따라서 연소열에 의한 폭굉하한계 및 상한계의 예측이 가능할 것으로 사료되어 다음과 같은 관계식들을 이용하여 최적화 된 추산 모델을 제시하고자 한다. 본 연구에서 제시된 모델들은 다음과 같다.

$$LDL(\text{or } UDL) = a + b \frac{1}{\Delta H_c} \tag{14}$$

$$LDL(\text{or } UDL) = a + b \frac{1}{\Delta H_c} + c \frac{1}{\Delta H_c^2} \tag{15}$$

$$LDL(\text{or } UDL) = a + b \frac{1}{\Delta H_c} + c \Delta H_c \tag{16}$$

$$LDL(\text{or } UDL) = a + b \frac{1}{\Delta H_c} + c \Delta H_c + d \Delta H_c^2 \tag{17}$$

$$LDL(\text{or } UDL) = a + bCst \tag{18}$$

$$LDL(\text{or } UDL) = a + bCst + c Cst^2 \tag{19}$$

#### 4.2 문헌값과 예측값의 비교 방법

제시한 모델들 가운데 추산식에 의한 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 같다<sup>17)</sup>.

$$A.A.P.E. = \frac{\sum \left| \frac{DL_{est.} - DL_{exp.}}{DL_{exp.}} \right|}{n} \times 100 \tag{20}$$

$$A.A.D. = \frac{\sum |DL_{est.} - DL_{exp.}|}{n} \times 100 \quad (21)$$

여기서  $DL_{est.}$ 는 추산식에 의해 폭발한계,  $DL_{exp.}$ 는 문헌값,  $n$ 은 자료(Data)수 이다.

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

$$S = \sqrt{\frac{\sum (Y_i - y_i)^2}{n-1}} \quad (22)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (23)$$

$$r = \pm \sqrt{\frac{SSR}{SST}} \quad (24)$$

여기서  $S$ 는 결정값의 표준오차,  $r^2$ 는 표본 결정계수,  $r$ 은 상관계수,  $SSR$ 은 회귀에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Regression),  $SST$ 는 총 제곱합(Total Sum of Squares)이다.

### 5. 예측식에 의한 결과 및 고찰

본 연구에서는 폭발한계를 예측하기 하기 위해 여러 문헌을 검토한 결과 폭발한계의 자료는 두개의 문헌<sup>18,19)</sup>에서 찾았으며, 찾은 물질에 대한 폭발한계 자료뿐만 아니라, 폭발한계 예측에 필요한 연소열, 화학양론계수

를 나타내었다. 또한 폭발한계와 폭발한계의 관계를 살펴보기 위해 폭발한계의 자료도 함께 제시하였으며, 그 외 인화점도 제시하여 Table 1에 나타내었다.

일반적으로 산업현장에서 취급하는 가연성가스나 증기의 위험 정도는 다음과 같은 식을 사용하여 위험도를 나타내고 있는데, 관계식은 다음과 같다.

$$FH = \frac{UEL - LEL}{LEL} \quad (25)$$

여기서  $FH$ (Flammability Hazard)는 가연성가스의 폭발한계를 이용한 위험도이다. 일반적으로  $FH$  값이 크면 혼합기체의 위험성이 크다고 할 수 있다.

본 연구에서는 폭발의 위험 역시 이를 응용하여 다음과 같은 관계식을 제시하고자 한다.

$$DH = \frac{UDL - LDL}{LDL} \quad (26)$$

여기서  $DH$ (Detonation Hazard)는 가연성가스의 폭발한계를 이용한 위험도이다.  $DH$  역시 값이 클수록 혼합기체의 위험성이 크다고 할 수 있다.

가연성물질의 연소열과 폭발하한계와 상한계의 관계를 규명하기 위해 Graphical 방법에 의해 여러 모델을 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 다음과 같은 최적화된 모델을 얻었으며, 모델은 다음과 같다.

**Table 1.** Fire and explosion properties for flammable substances

| No. | Compounds      | Formula                            | Flammable limits (%) |      | Detonation limits (%) |       | Flash points (°C) | Hc (kJ/mol) | O <sub>2</sub> moles | Cst    |
|-----|----------------|------------------------------------|----------------------|------|-----------------------|-------|-------------------|-------------|----------------------|--------|
|     |                |                                    | LEL                  | UEL  | LDL                   | UDL   |                   |             |                      |        |
| 1   | Methane        | CH <sub>4</sub>                    | 5.0                  | 15.0 | 6.30                  | 13.50 | -                 | 802.6       | 2                    | 0.0950 |
| 2   | Ethane         | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>      | 3.0                  | 12.4 | 2.87                  | 12.20 | -135              | 1428.6      | 3.5                  | 0.0566 |
| 3   | n-Propane      | n-C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>    | 2.1                  | 9.5  | 2.57                  | 7.37  | -104              | 2019.2      | 5                    | 0.0403 |
| 4   | n-Butane       | n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>   | 1.8                  | 8.4  | 1.98                  | 6.18  | -60               | 2657.3      | 6.5                  | 0.0313 |
| 5   | n-Octane       | n-C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>   | 0.8                  | 3.2  | 1.45                  | 2.85  | 13                | 5074.2      | 12.5                 | 0.0165 |
| 6   | Ethene         | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>      | 2.7                  | 36.0 | 3.32                  | 14.70 | -121              | 1323.07     | 3                    | 0.0654 |
| 7   | Propene        | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>      | 2.4                  | 11.0 | 3.55                  | 10.40 | -108              | 1925.7      | 4.5                  | 0.0446 |
| 8   | Acetylene      | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>      | 2.5                  | 80.0 | 4.20                  | 50.0  | -                 | 1257.0      | 2.5                  | 0.0775 |
| 9   | Benzene        | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>      | 1.4                  | 8.0  | 1.60                  | 5.55  | -11               | 3174.6      | 7.5                  | 0.0272 |
| 10  | Ethanol        | C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH   | 3.3                  | 19.0 | 5.1                   | 9.8   | 13                | 1235.0      | 3                    | 0.0654 |
| 11  | Hydrogen       | H <sub>2</sub>                     | 4.0                  | 75.0 | 18.3                  | 58.9  | -                 | 241.8       | 0.5                  | 0.2958 |
| 12  | n-Hexane       | n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>   | 1.1                  | 7.5  | 1.60                  | 5.60  | -22               | 1257.0      | 9.5                  | 0.0216 |
| 13  | n-Butanol      | n-C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH | 2.4                  | 8.0  | 2.80                  | 4.50  | 34                | 2450.0      | 5                    | 0.0403 |
| 14  | Ethylene oxide | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O    | 3.0                  | 10.0 | 2.80                  | 4.50  | -29               | 1218.0      | 5                    | 0.0403 |

**Table 2.** Comparison between reference and predicted of DL (Detonation Limits) for flammable substances

| No. | Compound       | Formula                            | Flammable limits (%) |      | Detonation limits (%) |       | FH    | DH    | LDL (Pred.) | UDL (Pred.) |
|-----|----------------|------------------------------------|----------------------|------|-----------------------|-------|-------|-------|-------------|-------------|
|     |                |                                    | LEL                  | UEL  | LDL                   | UDL   |       |       |             |             |
| 1   | Methane        | CH <sub>4</sub>                    | 5.0                  | 15.0 | 6.30                  | 13.50 | 2.00  | 1.14  | 5.82        | 15.92       |
| 2   | Ethane         | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>      | 3.0                  | 12.4 | 2.87                  | 12.20 | 3.13  | 3.25  | 3.58        | 9.70        |
| 3   | n-Propane      | n-C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>    | 2.1                  | 9.5  | 2.57                  | 7.37  | 3.52  | 1.87  | 2.65        | 7.26        |
| 4   | n-Butane       | n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>   | 1.8                  | 8.4  | 1.98                  | 6.18  | 3.67  | 2.12  | 2.13        | 5.95        |
| 5   | n-Octane       | n-C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>   | 0.8                  | 3.2  | 1.45                  | 2.85  | 3.00  | 0.97  | 1.29        | 3.89        |
| 6   | Ethene         | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>      | 2.7                  | 36.0 | 3.32                  | 14.70 | 12.33 | 3.43  | 4.09        | 11.07       |
| 7   | Propene        | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>      | 2.4                  | 11.0 | 3.55                  | 10.40 | 3.58  | 1.93  | 2.89        | 7.89        |
| 8   | Acetylene      | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>      | 2.5                  | 80.0 | 4.20                  | 50.0  | 31.00 | 10.90 | 4.80        | -           |
| 9   | Benzene        | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>      | 1.4                  | 8.0  | 1.60                  | 5.55  | 4.71  | 2.47  | 1.90        | 5.37        |
| 10  | Ethanol        | C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH   | 3.3                  | 19.0 | 5.1                   | 9.8   | 4.76  | 0.92  | 4.09        | 11.07       |
| 11  | Hydrogen       | H <sub>2</sub>                     | 4.0                  | 75.0 | 18.3                  | 58.9  | 17.75 | 2.22  | 18.31       | 58.82       |
| 12  | n-Butanol      | n-C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH | 1.1                  | 7.5  | 1.60                  | 5.60  | 5.82  | 2.50  | 1.58        | 4.59        |
| 13  | n-Hexane       | n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>   | 2.4                  | 8.0  | 2.80                  | 4.50  | 2.33  | 0.61  | 2.65        | 7.26        |
| 14  | Ethylene oxide | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O    | 3.0                  | 10.0 | 2.80                  | 4.50  | 2.33  | 0.61  | 2.65        | 7.26        |
| -   | A.A.P.E        | -                                  | -                    | -    | -                     | -     | -     | -     | 11.46       | 21.98       |
| -   | A.A.D.         | -                                  | -                    | -    | -                     | -     | -     | -     | 0.37        | 1.58        |

$$LDL = 0.369 + 55.880C_{st} + 16.131C_{st}^2 \quad (27)$$

$$UDL = 1.697 + 129.234C_{st} + 215.947C_{st}^2 \quad (28)$$

폭굉하한계의 예측식에 의한 예측값과 문헌값은 A.A.P.E가 11.46 Vol%, A.A.D가 0.37 Vol%, 그리고 결정계수는 0.986로서 문헌값과 적은 오차범위에서 일치하고 있다. 폭굉상한계의 예측식에 의한 A.A.P.E가 21.98 Vol%, A.A.D가 1.58 Vol%, 그리고 결정계수는 0.980로서 폭굉하한계 예측에 비해 차이는 있으나, 대체적으로 문헌값과 일치하고 있음을 보여주고 있다. 그러나 n-Hexane과 Ethylene oxide의 예측된 폭굉상한계는 다른 물질의 예측 값과 비교하여 문헌값과 차이를 보이고 있는데, 이는 문헌값의 폭굉한계 범위가 다른 물질에 비해 좁기 때문으로 사료된다. 또한 폭굉상한계의 예측에서 아세틸렌 자료를 제외한 것은, 아세틸렌이 다른 자료들과 완전히 다른 경향성을 보이고 있으므로 이를 제외하여 최적화를 시도하였다.

따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 폭굉한계의 예측이 가능하며, 또한 실험에서조차 찾기 어려운 다른 가연성물질의 폭굉한계 예측이 할 수 있는 방법론으로 이용할 수 있다.

그러나 가연성물질의 폭굉한계를 보다 정확히 예측하기 위해서는 폭굉한계의 많은 실험 자료가 확보된다

면 보다 좋은 결과를 얻을 것으로 본다.

## 6. 결 론

가연성가스 및 증기에 대해 화학양론계수와 폭굉한계 그리고 연소열과 폭굉한계의 관계를 규명하고, 화학양론계수에 의한 폭굉하한계와 상한계를 예측할 수 있는 새로운 추산식을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 화학양론계수에 의한 폭굉하한계와 상한계의 예측식은 다음과 같다.

$$LDL = 0.369 + 55.880C_{st} + 16.131C_{st}^2$$

$$UDL = 1.697 + 129.234C_{st} + 215.947C_{st}^2$$

2) 폭굉하한계 경우 예측값과 문헌값의 A.A.D는 0.37 Vol%, 그리고 결정계수는 0.986로서 적은 오차범위에서 일치하였으며, 폭굉상한계 경우는 폭굉하한계의 오차 범위보다는 크지만 A.A.D는 1.56 Vol%, 결정계수는 0.980로서 예측값은 문헌값과 일치하였다.

3) 제시한 폭굉한계의 예측식을 사용하여 공정상에서 안전성 확보가 가능하며, 실험에서 찾기 어려운 다른 가연성가스나 증기의 폭굉한계의 예측이 가능하다.

### 참고문헌

1. D.A. Crowl. and J.F Louver, "Chemical Process Safety Fundamentals with Applications", Prentice-Hall(1990).
2. P.E. Cote. and J.L. Liniville, "Fire Protection Handbook", 18th ed, NFPA, Quincy, Massachusetts(2002).
3. M.A. Nettleton, "Gaseous Detonation: their Nature, Effects, and Control", Chapman and Hall, New York(1987)
4. B. Hanley, "A Model for the Calculation and the Verification of Closed Cup Flash Points for Multi-component Mixtures", Process Safety Progress, Vol. 17, No.2, pp.86-97(1998).
5. Y. Lizhong *et al.* "Analysis of Fire and Explosion Hazards of Some Hydrocarbon-air mixtures", J. of Hazardous materials, Vol.A84, pp. 123-131(2001).
6. B.Lewis and G. von Elbe, "Combustion, Flame and Explosion of Gases", 3rd ed., Academic Press (1987).
7. R.H. Perry and G.W. Green., "Perry's Chemical Engineers' Handbook", 7th ed., McGraw-Hill, New York(1997).
8. D.R. Lide, "Handbook of Chemistry and Physics", 76th Edition, CRC Press, Boca Raton(1995).
9. R.D. Cardozo, "Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", AIChE Journal, Vol.32, No.5, pp.844-847(1986).
10. T. Suzuki, "Empirical Relationship Between Lower Flammability Limits and Standard Enthalpies of combustion of Organic Compounds", Fire and Materials, Vol.18, pp.333-336(1994).
11. F.Y. Hshieh, "Predicting Heats of Combustion and Lower Flammability Limits of Organosilicon Compounds", Fire and Materials, Vol. 23, pp.79-89 (1999).
12. G.W. Jones, "Inflammation Limits and Their Practical Application in Hazardous Industrial Operation", Chem. Rev., Vol.22, No.1, pp.1-26(1938).
13. J.C. Jones, "Reid Vapour Pressure as a Route to Calculating the Flash Points of Petroleum Fractions", J. of Fire Sciences, Vol.16, No.3, pp.222-227(1998).
14. C.J. Hialado, "A Method for Estimating Limits of Flammability", Vol.6, pp.130-139(1975).
15. D.G. Kleinbaum, L.L Kupper and K.E. Muller, "Applied Regression Analysis and Other Multi-variable Methods", 2nd ed., PWS-KENT Publishing Company, Boston(1988).
16. D.M. Ha, "Prediction of Explosion Limits Using Normal Boiling Points and Flash Points of Alcohols Based on a Solution Theory", T. of Korean Institute of Fire Sci. & Eng., Vol.19, No.4, pp.26-31(2005).
17. 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).
18. F.P. Lees, "Loss Prevention in the Process Industries Vol.1", 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann(1996).
19. V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers(2003).