



연소열과 화학양론계수를 이용한 에테르류의 폭발한계의 예측

[†]하동명

세명대학교 보건안전공학과

(2011년 5월 11일 접수, 2011년 8월 24일 수정, 2011년 8월 26일 채택)

Prediction of Explosion Limits of Ethers by Using Heats of Combustion and Stoichiometric Coefficients

[†]Dong-Myeong Ha

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

(Received May 11, 2011; Revised August 24, 2011; Accepted August 26, 2011)

요약

폭발한계는 가연성물질의 화재 및 폭발위험성을 결정하는데 주요한 특성치 가운데 하나이다. 본 연구에서, 에테르류의 폭발한계와 상한계에 대해 연소열과 화학양론계수를 이용하여 예측하였다. 제시된 예측식에 의한 예측값은 문헌값과 적은 오차범위에서 일치하였다. 제시된 방법론을 사용하여 다른 에테르류의 폭발한계 예측이 가능해졌다.

Abstract - Explosion limit is one of the major combustion properties used to determine the fire and explosion hazards of the flammable substances. In this study, the lower explosion limit(LEL) and upper explosion limit(UEL) of ethers were predicted by using the heat of combustion and stoichiometric coefficients. The values calculated by the proposed equations agreed with literature data within a few percent. From the given results, using the proposed methodology, it is possible to predict the explosion limits of the other flammable ethers.

Key words : explosion limit, heat of combustion, estimation, ethers, combustion properties

I. 서 론

공장에서 가연성물질을 취급함에 있어 밸브의 조작실수, 배관접합부파손 등으로 인해 주위의 공기와 혼합되면 화재 및 폭발이 발생할 수도 있으며, 또한 유해물질이 유출되는 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[1].

[†]주저자: hadm@semyung.ac.kr

방화 및 방폭에 관련되는 특성치로 MSDS의 폭발화재시대처방법(Fire-fighting Measures)에서는 폭발한계(Explosive Limit), 인화점(Flash Point), 최소발화온도(AIT: Auto-ignition Temperature)가 제시되고 있다[2]. 이들 자료는 산업 현장에서 폭발 및 화재를 예방을 위해 반드시 알아야 할 중요한 자료인데도 불구하고 이론적 접근의 어려움과 실험의 여러 제약성 때문에 한정된 연구가 이루어지고 있다.

연소특성치 가운데 폭발한계는 매우 중요하다. 폭발한계란 폭발이 일어나기 위하여 필요한 농도, 압력 등의 한계를 말한다. 공기 중에서 가연성기체가 연소하기에 필요한 농도의 하한값을 폭발한계, 상한값을 폭발상한계라 하고, 보통 1기압 상온에서의

연소열과 화학양론계수를 이용한 에테르류의 폭발한계의 예측

측정치를 나타낸다. 하한계와 상한계의 사이를 폭발 범위 또는 연소범위라고 한다. 폭발한계는 초기온도, 초기압력, 불활성가스, 산소농도, 연소열, 분자량, 용기의 크기, 점화원의 종류, 화염전파 방향, 혼합물의 물리적 상태 등에 강하게 의존하고 있다[3].

산업안전 및 순설예방의 중요성을 인식하면, 완전하지 않은 예측식을 사용하기보다는 실험에 의해 확인하는 것이 바람직하나, 부득이 하게 실험하기 어려운 가연성물질인 경우 예측식을 사용하여 안전을 확보할 수밖에 없다. 따라서 경우에 따라서 이론을 이용한 예측식으로 가연성물질의 위험성 예측은 타당성이 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 준다.

본 연구에서는 대상물질들이 에테르류인 경우 보면 문헌에 약 600여 종의 물질에 대해 물리적 특성들이 제시되어 있고 있는데[4], 이는 600여종의 에테르류들이 공정에서 사용되고 있다고 본다. 그러나 이를 에테르류의 폭발한계 특성치는 물리적 특성치에 비해 약 3% 정도로 제시되어 있다. 따라서 다른 에테르류의 폭발한계 연구가 필요하다.

본 연구에서는 산업 현장에서 용제, 냉매 및 여러분야에 사용되고 있는 중간물질인 에테르류에 대해 연소열 및 화학양론계수에 의한 폭발한계의 상관관계를 규명하여, 연소열 및 화학양론계수에 의한 폭발한계와 상한계를 예측할 수 있는 경험식(Empirical Equation)을 제시하고자 한다. 여기서 제시한 방법론을 이용하여 실험에서 찾고자 하는 다른 에테르류의 폭발한계 예측에 도움을 주고, 에테르류의 산화, 발화, 연소의 공정에 기초적인 자료로 사용되도록 하는데 목적이 있다.

II. 에테르류의 폭발 특성

에테르는 묽은 산, 묽은 염기와 반응하지 않으며, 일반적인 산화제나 환원제와도 반응하지 않는다. 또한 금속나트륨과 반응하지 않아 알코올과 구별되는 성질의 하나이다. 또한 일반적대부분의 유기화합물이 에테르에 녹기 때문에 유기 반응을 수행하는 우수한 용매로 사용되고 있다.

탄소수가 작은 에테르는 끓는점이 낮기 때문에 종류에 의해 쉽게 분리할 수 있으며, 화재 및 폭발 위험성을 지니고 있다. 특히 에테르 가운데 널리 사용되고 있는 디에틸에테르(Diethylether)는 공기보다 무겁고 폭발범위가 넓으며, 휘발성이 강하고 인화점

이 낮아 위험성이 크다. 공기와 접촉 시 과산화물이 생성되고, 생성된 과산화물과 에테르가 혼합되었을 때 가열, 충격에 의해 폭발되는 경우도 있다.

III. 에테르의 연소특성 및 폭발한계의 예측식

3.1. 에테르의 연소특성치

Table 1에서는 에테르류의 연소열을 비롯하여 폭발하한계(LEL, Lower Explosion Limit)와 폭발상한계(UEL, Upper Explosion Limit) 그리고 화학양론계수(Cst)를 나타내었다[5,6], 또한 LEL/Cst과 UEL/Cst를 계산하였다.

연소열은 반응성 화학물질의 안전한 취급에 필요한 파라미터이다. 연소열은 일반적으로 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 총연소열 보다 중요하다. 이는 화재에서 형성된 물이 수증기 상태이기 때문이다. 일반적으로 연소열은 “Perry’s Chemical Engineers’ Handbook”[7]과 “Handbook of Chemistry and Physics”[8]에서 얻을 수 있다. 그러나 이를 문헌에서도 연소열 값을 얻지 못할 경우 예측식을 이용하여 얻을 수 있다. 모든 유기화합물에 널리 적용될 수 있는 추산식으로 Cardozo 방식[9]이 있는데, 이를 간략히 소개하면 다음과 같다.

$$N = N_c + \sum_i \Delta N_i \quad (1)$$

여기서 N_c 는 화합물의 총 탄소수이고, $\sum_i \Delta N_i$ 는 화합물 구조에 따른 보정값이다. 따라서 식 (1)에 의해 N 값이 계산되면 식 (2)에 대입하여 연소열을 예측하게 된다.

$$\Delta H_c(g) = -198.42 - 615.14N \quad (2)$$

Table 1에서 2-methoxyethylene ether와 ethylene glycol dimethyl ether의 연소열은 Cardozo 방식을 이용한 예측값이다[9].

Table 1에서 LEL/Cst의 범위는 0.421~0.737, UEL/Cst의 범위는 2.224~10.588이다. 따라서 LEL과 Cst의 상관관계 보다 UEL과 Cst의 상관관계를 예측하기는 어렵다고 본다.

Table 1. Several characteristics of organic ethers

No.	Nomenclatures	Molecular Formular	Heat of Combustion [7,8,9]	LEL (Vol%)	UEL (Vol%)	Cst (Vol%)	LEL/Cst	UEL/Cst
1	Dimethyl ether	C ₂ H ₆ O	1460	3.4	27	6.5	0.523	4.154
2	Ethyl methyl ether	C ₃ H ₈ O	2108	2.0	10.1	4.5	0.444	2.244
3	Divinyl ether	C ₄ H ₆ O	2412	1.7	27	4.0	0.425	6.750
4	Ethyl vinyl ether	C ₄ H ₈ O	2577	1.7	28	3.7	0.459	7.568
5	Diethyl ether	C ₄ H ₁₀ O	2751	1.9	36	3.4	0.559	10.588
6	tert-Dutyl methyl ether	C ₅ H ₁₂ O	3399	1.6	15.1	2.7	0.593	5.593
7	Ethyl propyl ether	C ₅ H ₁₂ O	3410	1.7	9.0	2.7	0.630	3.333
8	Dibutyl ether	(C ₄ H ₉) ₂ O	5387	0.9	8.5	1.7	0.529	5.000
9	Diphenyl ether	C ₁₂ H ₁₀ O	6203	0.7	6.0	1.5	0.467	4.000
10	Propyl ether	(C ₃ H ₇) ₂ O	4069	1.3	7.0	2.3	0.565	3.043
11	iso-Propyl ether	C ₈ H ₁₄ O	4043	1.4	7.0	1.9	0.737	3.684
12	Amyl ether	(C ₅ H ₁₁) ₂ O	6253	0.7	5.5	1.4	0.500	3.929
13	Methyl vinyl ether	C ₃ H ₆ O	1720	2.6	39	5.0	0.520	7.800
14	2-Methoxyethylene ether	C ₆ H ₁₄ O ₃	3768	1.5	17.4	2.6	0.577	6.692
15	Ethylene glycol dimethyl ether	C ₄ H ₁₀ O ₂	2538	1.6	10.4	3.8	0.421	2.737

3.2. 폭발한계의 예측 연구

3.2.1. 연소열에 의한 폭발한계의 예측

일반적으로 화염에는 그 이하의 온도는 없다고 하는 최저온도가 있고, 그 값은 탄화수소화합물 등에서 약 1200°C가 된다. 이와 같은 단열화염온도(Adiabatic Flame Temperature)의 한계가 생기는 것은 탄화수소의 폭발하한계와 연소열의 관계를 이용한 Burgess-Wheeler법칙으로 설명이 가능하다[10]. 이 법칙은 즉 두 값(폭발하한계와 연소열)의 곱은 일정하고 폭발하한계의 단위를 Vol.%, 연소열의 단위를 kJ/mol로 표시하면, 그 값은 약 4390kJ/mol이 된다. 이 법칙은 폭발하한계에 있어서 발생하는 열량은 연료의 종류에 관계없이 동일하다. 따라서 그것에 관계되는 화염온도는 일정하고 동시에 최저가 되기 때문이다. 따라서 Burgess-Wheeler법칙에 의한 연소열과 폭발한계의 관계는 다음과 같다.

$$(\Delta H_c) \times (LEL) = 4390 \quad (3)$$

Suzuki[11]는 Burgess-Wheeler법칙을 근거로 유기화합물에 적용할 수 있는 다음과 같은 관계식을 제시하였다.

$$LEL = 1.80 - 3.42 \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) + 0.569 \Delta H_c + 0.0538 \Delta H_c^2 \quad (4)$$

Hanley[12]는 폭발한계와 폭발한계의 관계를 연구하기 위해 폭발한계의 예측을 다음과 같은 제시하였다. 식 (6)은 연소열에 의한 폭발상한계를 예측할 수 있는 유일한 식이다.

$$LEL = 4686 (\Delta H_c)^{-1} \quad (5)$$

연소열과 화학양론계수를 이용한 에테르류의 폭발한계의 예측

$$UEL = 22694(\Delta H_c)^{-1} \quad (6)$$

Hshieh[13]는 유기화합물 및 실리콘화합물에 대해 연소열에 의한 폭발하한계의 추산식을 다음과 같이 제시하였다.

$$LEL = -0.3822 + 1145.2246(-\Delta H_c)^{-0.7972} \quad (7)$$

3.2.2. 양론계수를 이용한 폭발한계의 예측

그동안 폭발하한계를 예측하기 위한 연구는 최근 까지도 꾸준히 진행되고 있으며, 이 가운데 화학양론 계수(C_{st})를 이용한 폭발하한계의 추산식들을 살펴보면, Jones[14]는 탄화수소류에 대해 다음과 같은 추산하는 식을 제시하였다.

$$LEL = 0.55 C_{st} \quad (8)$$

여기서 C_{st} 는 다음과 같이 계산된다.

$$C_{st} = \frac{\text{연료몰수}}{\text{연료몰수} + \text{공기몰수}} \times 100 \quad (9)$$

Hilado[15]는 C, H, O를 포함하는 물질에 대한 폭발하한계의 예측식을 다음과 같이 제시하였다.

$$LEL = 0.537 C_{st} \quad (10)$$

또한 Jones[16]는 C, H, O로 구성된 탄화수소 및 비탄화수소 화합물에 대한 폭발하한계 예측식을 다음과 같이 제시하였다.

$$LEL = 0.5 C_{st} \quad (11)$$

Jones[14]는 폭발상한계의 예측식을 다음과 같이 제시하였다.

$$UEL = 3.5 C_{st} \quad (12)$$

Mullin 등[17]은 다음과 같은 관계식을 제시하였고,

$$UEL = 3.3 C_{st} \quad (13)$$

Pintar[18]는 폭발상한계 예측에 필요한 보정계수에 대해 다음과 같이 제시하였다.

$$UEL = 3.8 C_{st} \quad (14)$$

또한 Zabetakis[19]는 폭발하한계에 의한 상한계의 예측식을 다음과 같이 제시하였다.

$$UEL = 6.5 \sqrt{LEL} \quad (15)$$

Jones[14]가 제시한 식 (8)을 식(15)에 대입하면 다음과 같은 폭발상한계의 예측식을 전개할 수 있다.

$$UEL = 4.82 C_{st}^{0.5} \quad (16)$$

IV. 연소열과 화학양론 계수에 의한 폭발한계의 예측 모델

4.1. 연소열과 화학양론계수에 의한 폭발한계 예측 모델

에테르류의 연소열에 의한 폭발한계를 위해서 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(Multiple Regression Analysis)을 이용하였다[20,21]. 다중회귀분석이란 독립변수와 종속 변수 간의 관련성을 수학적 모형(모델)을 이용하여 측정된 변수들의 자료로부터 추정하고 분석하는 통계적인 방법으로 추정된 모델을 사용하여 필요한 예측을 하거나 관심있는 통계적 추정과 검정을 실시한다.

에테르류의 연소열 및 화학양론계수과 폭발한계의 문헌 자료를 분석한 결과 이들이 서로 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 따라서 연소열 및 화학양론계수에 의한 폭발하한계(LEL)와 상한계(UEL)의 예측이 가능할 것으로 판단되어 다음과 같은 관계식들을 이용하여 최적화 된 추산 모델을 제시하고자 한다.

$$LEL(\text{or } UEL) = a C_{st} \quad (17)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b C_{st} \quad (18)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b C_{st} + c C_{st}^2 \quad (19)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) \quad (20)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) \quad (21)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) + c \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right)^2 \quad (22)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) + c \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right)^2 + d \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right)^3 \quad (23)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b \Delta H_c + c \Delta H_c^2 + d \Delta H_c^3 \quad (24)$$

4.2. 문헌값과 추산값의 비교 방법

추산값과 문헌값의 차이의 정도를 알기 위해 A.A.D.(Average Absolute Deviation)을 사용하였다[21].

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

여기서 $EL_{est.}$ 는 추산식에 의해 계산된 폭발하한계 및 상한계 값이고, $EL_{exp.}$ 는 문헌에 의한 폭발하한계 및 상한계 값이며, 그리고 N은 자료수이다.

V. 결과 및 고찰

5.1. 폭발하한계의 예측

에테르류에 대해 연소열 및 화학양론계수와 폭발하한계의 관계를 규명하기 위해 앞서 제시한 식 (17)에서 식 (24)를 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 Fitting한 결과 다음과 같은 최적화된 모델을 얻었다.

$$LEL = 7.483 - 4.280 \times 10^{-3} \Delta H_c - 1.008 \times 10^{-6} \Delta H_c^2 + 7.993 \times 10^{-11} \Delta H_c^3 \quad (26)$$

식 (26)에 의해 예측된 폭발하한계를 문헌값과 Suzuki식, Hanley식 그리고 Hsieh식에 의한 예측값을 비교하여 Table 2에 나타내었고, Fig. 1에는 문헌값과 예측값의 차이 정도를 쉽게 볼 수 있도록 나타내었다. 본 연구에서 제시한 예측식에 의한 예측값과

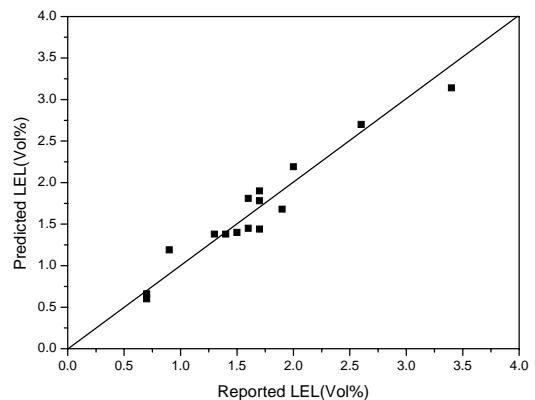


Fig. 1. Comparison between reported and predicted lower explosion limits(LEL) for ethers.

Table 2. Comparison between reported and predicted LEL by means of heats of combustion for ethers

No.	Nomenclatures	LEL (Vol%)	LEL (Suzuki)	LEL (Hanley)	LEL (Hsieh)	This work
1	Dimethyl ether	3.4	3.42	3.42	3.06	3.13
2	Ethyl methyl ether	2.0	2.46	2.37	2.18	2.19
3	Divinyl ether	1.7	2.16	2.07	1.92	1.90
4	Ethyl vinyl ether	1.7	2.02	1.93	1.80	1.78
5	Diethyl ether	1.9	1.89	1.81	1.70	1.68
6	tert-Butyl methyl ether	1.6	1.49	1.47	1.37	1.45
7	Ethyl propyl ether	1.7	1.49	1.46	1.37	1.44
8	Dibutyl ether	0.9	0.93	0.93	0.83	1.19
9	Diphenyl ether	0.7	0.92	0.80	0.70	0.66
10	Propyl ether	1.3	1.21	1.23	1.14	1.38
11	iso-Propyl ether	1.4	1.22	1.23	1.14	1.38
12	Amyl ether	0.7	0.89	0.80	0.70	0.60
13	Methyl vinyl ether	2.6	3.03	2.90	2.63	2.70
14	2-Methoxyethylene ether	1.5	1.33	1.32	1.23	1.40
15	Ethylene glycol dimethyl ether	1.6	2.05	1.96	1.83	1.81
Average Absolute Deviation (A.A.D.)		0.22	0.18	0.17	0.15	

Table 3. Comparison between reported and predicted UEL by means of heats of combustion for ethers

No.	Nomenclatures	UEL (Vol%)	UEL (Hanley)	This work
1	Dimethyl ether	27	15.54	28.41
2	Ethyl methyl ether	10.1	10.77	25.67
3	Divinyl ether	27	9.41	23.59
4	Ethyl vinyl ether	28	8.81	22.09
5	Diethyl ether	36	8.25	20.38
6	tert-Butyl methyl ether	15.1	6.68	15.62
7	Ethyl propyl ether	9.0	6.66	15.62
8	Dibutyl ether	8.5	4.21	6.92
9	Diphenyl ether	6.0	3.66	4.92
10	Propyl ether	7.0	5.58	12.40
11	iso-Propyl ether	7.0	5.61	8.84
12	Amyl ether	5.5	3.63	3.88
13	Methyl vinyl ether	39	13.19	27.19
14	2-Methoxyethylene ether	17.4	6.02	14.85
15	Ethylene glycol dimethyl ether	10.4	8.94	22.61
Average Absolute Deviation (A.A.D.)			9.16	5.81

문현값의 상관계수(R)는 0.97이고, A.A.D.는 0.15 %로서, Suzuki 식의 0.22 %, Hanley 식의 0.18 % 그리고 Hsieh 식의 0.17 % 보다 문현값과 일치함을 보여주고 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 방법론과 예측식을 활용하여 다른 에테르류의 폭발한계의 예측이 가능하다.

5.2. 폭발상한계의 예측

에테르류에 대해 연소열 및 화학양론계수와 폭발상한계의 관계를 식 (17)에서 식 (24)를 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 Fitting한 결과 다음과 같은 최적화된 모델을 얻었다.

$$UEL = -12.944 + 13.572 C_{st} - 1.109 C_{st}^2 \quad (27)$$

식 (27)에 의해 예측된 폭발상한계를 문현값과 Hanley 식에 의한 예측값과 비교하여 Table 3에 나타내었고, Fig. 2에는 문현값과 예측값의 차이 정도를 쉽게 볼 수 있도록 나타내었다. 식 (27)에 의한 계산값과 문현값의 상관계수는 0.82 그리고 A.A.D.는 5.81 %로서 근사성이 크지 않으나, 기존의 추산식에 의한 9.16 %보다는 문현값과 일치함을 보여주고 있다.

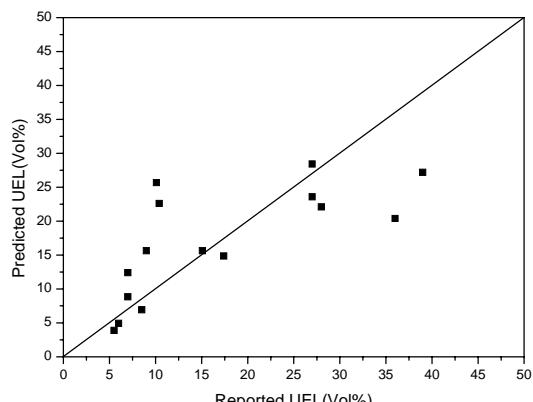


Fig. 2. Comparison between reported and predicted upper explosion limits(UEL) for ethers.

VI. 결 론

에테르류에 대해 연소열과 화학양론계수를 이용하여 폭발한계의 관계를 규명하고, 수학적 및 통계적인 방법으로 연소열과 화학양론계수에 의한 폭발한계와 상관계를 예측할 수 있는 최적화된 추산식을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 에테르류의 폭발한계는 연소열 및 화학양론계수와 상관관계가 있었다.

2) 연소열 및 화학양론계수를 이용한 에테르류의 폭발하한계와 상한계의 예측식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} LEL &= 7.483 - 4.280 \times 10^{-3} \Delta H_c - 1.008 \times 10^{-6} \Delta H_c^2 + \\ &\quad 7.993 \times 10^{-11} \Delta H_c^3 \\ UEL &= -12.944 + 13.572 C_{st} - 1.109 C_{st}^2 \end{aligned}$$

3) 폭발하한계의 예측식에 의한 예측값과 문헌값의 차이는 평균 0.15%, 폭발상한계의 문헌값과 예측값은 평균 0.51 %로서, 기존의 예측식 보다 문헌값에 대한 근사성을 보였다. 따라서 본 연구에서 제시한 방법론을 이용하여 다른 에테르류의 폭발한계 예측이 가능해졌다.

참고문헌

- [1] Lees, F.P., Loss Prevention in the Process Industries Vol. 1, 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann, (1996)
- [2] Meyer, E., Chemistry of Hazardous Materials, 2nd ed., Prentice-Hall, (1990)
- [3] Ha, D.M., "Estimation of Explosion Limits by Using Heat of Combustion for Esters", T. of Korean Institute of Fire Sci. & Eng., 24(30), 66-71, (2010)
- [4] Lenga, R.E. and K.L. Votoupal, The Sigma Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Volume I ~ III, Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc., (1993)
- [5] NFPA, Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids, NFPA 325M, NFPA, (1991)
- [6] Kanury, A.M., SFPE Handbook of Fire Protection Engineering ; Ignition of Liquid Fuels, 2nd ed., SFPE, (1995)
- [7] Perry, R.H. and G.W. Green, Perry's Chemical Engineers' Handbook, 7th ed., McGraw-Hill, New York, (1997)
- [8] Lide, D.R., Handbook of Chemistry and Physics, 76th ed., CRC Press, Boca Raton, (1995)
- [9] Cardozo, R.D., "Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", AIChE Journal, 32(5), 844-847, (1986)
- [10] Drysdale, D., An Introduction to Fire Dynamics, John Wiley and Sons, (1985)
- [11] Suzuki, T., "Empirical Relationship Between Lower Flammability Limits and Standard Enthalpies of Combustion of Organic Compounds", Fire and Materials, 18, 333-336, (1994)
- [12] Hanley, B.F., "A Model for the Calculation and the Verification of Closed Flash Points Multicomponent Mixtures", Process Safety Progress, 17(2), 86-97, (1998)
- [13] Hsieh, F-Y., "Predicting Heats of Combustion and Lower Flammability Limits of Organosilicon Compounds", Fire and Materials, 23, 79-89, (1999)
- [14] Jones, G.W., "Inflammation Limits and Their Practical Application in Hazardous Industrial Operation", Chem. Rev., 22(1), 1-26, (1938).
- [15] Hilado, C.J., "A Method for Estimating Limits of Flammability", J. of Fire and Flammability, 6, 130-139, (1975)
- [16] Jones, J.C., "Reid Vapour Pressure as a Route to Calculating the Flash Points of Petroleum Fractions", J. of Fire Sciences, 16(3), 222-227, (1998)
- [17] Mullins, B.P., Bubble-points, Flammability-limits and Flash-points of Petroleum Products, Combustion Researches and Reviews, Butterworths, London, (1957)
- [18] Pintar, A.J., "Predicting Lower and Upper Flammability Limits", Proc. Ind. Conf. on Fire Safety, 28, Product Safety Corp., Sissonville WV, (1999)
- [19] Zabetakis, G.M., Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors, US Bureau of Mines, Bulletin, (1965)
- [20] Box, G.E.P. and N.R. Draper, Empirical Model-Building and Response Surface, John Wiley and Sons, Inc., (1987)
- [21] Ha, D.M., "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., 19(4), 26-31, (2005)