

연소열 및 화학양론계수를 이용한 알데히드류의 폭발한계의 예측

†하동명

세명대학교 보건안전공학과
(2015년 2월 4일 접수, 2015년 3월 30일 수정, 2015년 3월 31일 채택)

Prediction of Explosion Limits of Aldehydes Using Chemical Stoichiometric Coefficients and Heats of Combustion

†Dong-Myeong Ha

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

(Received February 4, 2015; Revised March 30, 2015; Accepted March 31, 2015)

요약

폭발한계는 가연성물질의 화재 및 폭발위험성을 결정하는데 주요한 특성치 가운데 하나이다. 많은 알데히드류는 연소열과 폭발한계, 화학양론계수와 폭발한계가 상관관계가 있음을 보여주고 있다. 본 연구에서, 알데히드류의 폭발하한계와 상한계에 대해 연소열과 화학양론계수를 이용하여 예측하였다. 제시된 예측식에 의한 예측값은 문헌값과 적은 오차범위에서 일치하였다. 제시된 방법론을 사용하여 다른 알데히드류의 폭발한계 예측이 가능해졌다.

Abstract - The explosion limit is one of the major combustion properties used to determine the fire and explosion hazards of the flammable substances. The explosion limit of aldehydes have been shown to be correlated the heat of combustion and the chemical stoichiometric coefficients. In this study, the lower explosion and upper explosion limits of aldehydes were predicted by using the heat of combustion and chemical stoichiometric coefficients. The values calculated by the proposed equations agreed with literature data above determination coefficient 0.99. From the given results, using the proposed methodology, it is possible to predict the explosion limits of the aldehydes.

Key words : explosion limit, heat of combustion, chemical stoichiometric coefficients, determination coefficient, aldehydes

I. 서론

최근 화학산업의 사고 형태를 보면 누출뿐만 아니라 화재 및 폭발 사고가 대부분이다. 공정에서의 화재 및 폭발로 인한 손실을 최소화하기 위해서는 화재 및 폭발의 시작 자체를 방지하는 것과 이들이 일어난 후 피해를 최소화하는 것이 가장 중요하다.

최소화를 방안으로는 취급하는 물질의 제고량을 줄이고, 위험이 덜한 물질로 대체하고, 공정에서 낮은 온도와 압력을 사용해야 한다. 그러나 화학공장의 특성상 이와 같이 할 수 없는 경우가 많다. 따라서 사고 예방을 위해서는 취급하는 물질의 연소특성치 연구가 선행되어야 한다. 연소특성치 가운데 폭발한계는 공정안전 확보에 반드시 필요한 자료인데도 불구하고 이론 및 실험적 연구가 한정되어 이루어지고 있다.

사업장에서 취급하고 있는 가연성 가스 혹은 증

†Corresponding author: hadm@semyung.ac.kr
Copyright © 2015 by The Korean Institute of Gas

기는 공기 중에서 어느 한정된 범위의 농도가 되었을 때에만 연소가 일어난다. 즉 공기 중 가연성가스나 증기의 혼합비율이 너무 낮으면 폭발을 일으키지 않으며, 또한 너무 높아도 폭발을 일으키지 않는다. 이 농도의 범위를 폭발범위(연소범위)라 하고, 그 한계를 폭발한계라고 한다. 폭발한계는 폭발하한계(LEL, Lower Explosion Limit)와 폭발상한계(UEL, Upper Explosion Limit)로 구분한다[1].

특히 OECD-IGUS (International Group of Experts on the Explosion Risk Unstable Substance)에서는 화학공정의 중대 사고를 예방하기 위해서 사업장에서 취급, 저장, 수송하고 있는 위험물질들에 대한 화재 및 폭발 위험성에 관련된 물질의 실험 및 예측 방법의 중요성을 강조하고 있다. 공정 안전의 중요성을 인식하면, 완전하지 않은 예측식을 사용하기보다는 실험에 의해 확인하는 것이 바람직하나, 그러나 실험하기 어려운 가연성물질인 경우 예측식을 사용하여 안전을 확보할 수밖에 없다. 실제와 가까운 경험식을 사용하는 것은 실험에 소요되는 시간, 노력 및 경비를 줄일 수 있으며, 또한 상황에 따라 제한된 실험을 할 수밖에 없는 경우 실험에서 얻어진 측정 결과의 신뢰성 고찰에 활용할 수 있다.

알데히드류의 경우를 보면 Sigma 문헌[2]에 약 150여종의 물질에 대해 물리적 특성들이 제시되어 있고 있는데, 이는 150여종의 알데히드류가 공정에서 사용되고 있다는 증거이다. 그러나 이들 알데히드류의 화재 및 폭발 특성치는 물리적 특성치에 비해 약 7% 정도만 제시되어 있다. 따라서 제시되지 않은 알데히드류의 연소특성치 연구가 반드시 필요하다.

본 연구에서는 산업 현장에서 유기합성연료, 고분자 원료, 방부제, 초산류와 알코올류의 제조 원료, 접착제 등 다양한 분야에 사용되고 있는 알데히드류(Aldehydes)의 폭발한계를 연소열과 화학양론계수를 이용하여 예측할 수 있는 경험식(Empirical Equation)을 제시하고자 한다. 여기서 제시한 방법론을 이용하여 실험에서 찾고자 하는 다른 알데히드류의 폭발한계 연구에 도움을 주고, 알데히드류의 산화, 발화, 연소의 공정의 안전을 확보하는데 목적이 있다.

II. 알데히드류의 화재 및 폭발 특성

알데히드류는 탄화수소 사슬의 말단에서 수소 2 원자가 상실되고, 대신에 산소 1원자가 2중결합으로 결합한 화합물이다. 케톤과 마찬가지로 카르보닐기 >C=O를 가지고 있으므로 성질이 케톤과 비슷하지만 케톤보다 잘 산화된다. 탄화수소기에 알데히드가

(-CHO)가 결합한 유기 화합물의 총칭이며, 아세트알데히드의 약칭으로도 사용된다. 일반식은 R-CHO로 나타낸다. 지방족 알데히드와 방향족 알데히드가 있고 탄소수가 적은 것을 저급 알데히드라 한다. 알코올의 산화로 생성되며 메틸알코올은 포름알데히드, 에틸알코올은 아세트알데히드로 바뀐다.

일반적으로 알데히드류의 증기는 공기보다 무거우므로 낮은 곳에 체류하며, 점화원에 의해 인화나 폭발을 할 수 있다. 특히 탄소수가 적은 알데히드류는 비점과 인화점, 발화온도가 낮고 폭발범위가 넓어 위험성이 크다. 장기간 공기 중에 방치하면 불안정하고 폭발성의 과산화물을 생성한다. 그리고 강산화물질, 아민류, 강알칼리 등과의 혼축을 피해야 한다. 소화방법으로는 물분무, CO₂, 알코올형 포가 유효하다.

III. 알데히드류의 연소특성치 및 폭발한계 연구

3.1. 알데히드류의 연소특성치

알데히드류의 폭발한계를 예측하기 위한 필요한 자료를 Table 1에 나타내었다. Table 1에는 알데히드류의 화학식, 연소열, 폭발하한계, 폭발상한계 그리고 폭발한계와 화학양론계수의 관계를 나타내었다[3].

연소열은 반응성 화학물질이 연소할 때 단위 당량에서 발생하는 열량으로서, 물질의 안전한 취급에 필요한 파라미터이다. 연소열은 측정하거나 문헌을 통해서 얻을 수 있다[3,4]. 그렇지 않을 경우에는 가연성가스나 액체의 증기 연소열과 폭발한계와의 일정한 관계, 또는 유기화합물의 구조와 연소열과의 사이에 규칙적인 관계를 이용하여 근사적으로 구할 수 있다. 최근에는 모든 유기화합물에 널리 적용될 수 있는 추산식으로 Cardozo 방식[5] 을 이용하여 예측하고 있다. 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 값 이 계산되면, N 값을 식 (2)에 대입하여 연소열을 예측할 수 있다.

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

Table 1의 화합물질 위에 표시가 없는 연소열은

Table 1. Several characteristics of aldehydes

No.	Nomenclatures	Molecular Formular	Heats of Combustion [kJ]	LEL [Vol%]	UEL [Vol%]	C _{st} [Vol%]	LEL/C _{st}	UEL/C _{st}
1	Formaldehyde	CH ₂ O	571	7.0	73.0	17.7	0.402	4.195
2	Acetaldehyde	C ₂ H ₄ O	1193	4.0	60.0	7.7	0.519	7.792
3	Propionaldehyde	C ₃ H ₆ O	1852	2.6	17	5.0	0.520	3.400
4	Acrolein	C ₃ H ₄ O	*1721	2.8	31	5.7	0.491	5.439
5	Isobutyraldehyde	C ₄ H ₈ O	2502	2.0	10.0	3.7	0.541	2.703
6	Butyaldehyde	C ₄ H ₈ O	2513	1.9	12.5	3.7	0.514	3.378
7	Crotonaldehyde	C ₄ H ₆ O	*2336	2.1	15.5	4.0	0.525	3.875
8	2-Ethylbutyaldehyde	C ₆ H ₁₂ O	*3566	1.2	7.7	2.4	0.500	3.208
9	2-Ethylhexanal	C ₈ H ₁₆ O	5135	0.85	7.2	1.8	0.472	4.000
10	Benzaldehyde	C ₇ H ₆ O	*4182	1.4	-	2.6	0.538	-

CRC[4]에서 얻은 자료이고, (*)를 표시한 물질의 Cardozo 방식을 이용한 예측값이다.

Table 1에서 LEL/C_{st}의 범위는 0.40~0.54, UEL/C_{st}의 범위는 2.70~7.79이다. 따라서 폭발한계와 화학양론계수의 관계가 폭발상한계와 화학양론계수의 관계보다 연관성이 크다고 판단할 수 있으며, 이를 근거로 알데히드류의 폭발한계를 예측하고자 한다.

3.2. 폭발한계의 예측 연구

3.2.1. 연소열에 의한 폭발한계의 예측

일반적으로 화염에는 그 이하의 온도는 없다고 하는 최저온도가 있고, 그 값은 탄화수소화합물 등에서는 약 1200 °C가 된다. 이와 같은 단일화염온도의 한계가 생기는 것은 탄화수소의 폭발한계와 연소열에 관계를 이용한 Burgess-Wheeler법칙으로 설명이 가능하다[1,6]. 이 법칙은 폭발한계에 있어서 발생하는 열량은 연료의 종류에 관계없이 동일하다. 따라서 그것에 관계되는 화염온도는 일정하고 동시에 최저가 되기 때문에 Burgess-Wheeler법칙에 의한 연소열과 폭발한계의 관계는 다음과 같다.

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

여기서 폭발한계의 단위를 Vol%, 연소열의 단위를 kJ/mol이다.

Suzuki[7]는 Burgess-Wheeler법칙을 근거로 유기 화합물에 적용할 수 있는 다음과 같은 관계식을 제시하였다.

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

Hanley[8]는 폭발한계와 폭발한계의 관계를 연구하기 위해 폭발한계의 예측을 다음과 같이 제시하였다.

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

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

Hshieh[9]는 유기화합물 및 실리콘화합물에 대해 연소열에 의한 폭발한계의 추산식을 다음과 같이 제시하였다.

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

Ha[10]는 유기산류에 대해 연소열에 의한 폭발한계의 예측식을 제시하였다.

$$LEL = -5.98 \times 10^{-3} + 5166 \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right) - 1.96 \times 10^{-6} \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right)^2 + 4.678 \times 10^8 \left(\frac{1}{\Delta H_c} \right)^3 \quad (8)$$

3.2.2. 양론계수를 이용한 폭발한계 예측

폭발한계를 예측하기 위한 연구는 꾸준히 진행되고 있으며, 이 가운데 화학양론 계수(C_{st})를 이용한 폭발한계의 추산식들을 살펴보면, Jones[11]는

탄화수소류에 대해 다음과 같은 추산하는 식을 제시하였다.

$$LEL = 0.55 C_{st} \quad (9)$$

여기서 C_{st} 는 다음과 같이 계산된다.

$$C_{st} = \frac{\text{연료몰수}}{\text{연료몰수} + \text{공기몰수}} \times 100 \quad (10)$$

Hilado[12]는 C, H, O를 포함하는 물질에 대한 예측식을 다음과 같이 제시하였다.

$$LEL = 0.537 C_{st} \quad (11)$$

그러나 최근의 문헌[13]을 보면, C, H, O로 구성된 탄화수소 및 비탄화수소 화합물에 대해 폭발한계 예측을 위해 보정계수를 0.5(Half Stoichiometric Rule)로 제시한 연구도 있다.

$$LEL = 0.5 C_{st} \quad (12)$$

폭발상한계의 예측식으로 Jones[11]는 역시 화학양론계수(C_{st})를 이용한 탄화수소류에 적용할 수 있는 폭발상한계 추산식을 다음과 같이 제시하였다.

$$UEL = 3.5 C_{st} \quad (13)$$

Mullin 등[14]은 다음과 같은 관계식을 제시하였고,

$$UEL = 3.3 C_{st} \quad (14)$$

Ha[15]는 유기산류에 대해 화학양론계수에 의한 폭발상한계의 예측식을 제시하였다.

$$UEL = 4.95 + 1.72 C_{st} + 1.56 \times 10^{-3} C_{st}^2 \quad (15)$$

IV. 연소열과 화학양론계수에 의한 폭발한계 예측 모델

4.1. 연소열과 화학양론계수에 의한 폭발한계 예측 모델

알데히드류의 연소열과 화학양론계수에 의한 폭발한계를 위해서 최적화된 모델을 찾기 위해 다중회

귀분석(Multiple Regression Analysis)을 이용하였다. 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 실시하는 방법이다. 이 방법에 대해서는 이미 여러 문헌[15,16]을 통하여 소개되었으므로 생략하고 폭발한계 예측 모델을 제시하고자 한다.

알데히드류의 폭발한계는 연소열 및 화학양론계수와 상관관계가 있음을 알 수 있었다. 따라서 연소열 및 화학양론계수에 의한 폭발한계 예측이 가능하므로 본 연구에서 제시된 연소열과 화학양론 계수에 의한 폭발한계 및 폭발상한계의 예측 모델들은 다음과 같이 제시하였다.

$$LEL(\text{or } UEL) = a C_{st} \quad (16)$$

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

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b C_{st} + c C_{st}^2 \quad (18)$$

$$LEL(\text{or } UEL) = a + b C_{st} + c C_{st}^2 + d C_{st}^3 \quad (19)$$

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

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

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

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

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

4.2. 문헌값과 예측값의 비교 방법

예측값과 문헌값의 차이의 정도를 알기 위해 A.A.D. (Average Absolute Deviation)와 결정계수(r^2)를 사용하였다[17].

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

$$r^2 = \left(\frac{SSR}{SST} \right) \quad (26)$$

여기서 $EL_{est.}$ 는 예측식에 의해 계산된 폭발하한계 및 상한계 값이고, $EL_{ref.}$ 는 문헌에 의한 폭발하한계 및 상한계 값이며, 그리고 N 은 자료수이다. r^2 은 결정계수, SSR 은 회귀에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Regression), SST 는 SSR 과 잔차에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Residual Error)의 합이다.

V. 폭발한계 예측의 결과 및 고찰

5.1. 알데히드류의 폭발하한계의 예측

알데히드류의 폭발하한계를 예측하기 위해 Graphical 방법을 사용하여 연소열 및 화학양론계수와 의 상관관계를 살펴보았다. 앞서 제시한 식 (16)에서 식 (24)을 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 Fitting한 결과 폭발하한계를 예측할 수 있는 최적화된 모델은 다음과 같다.

$$LEL = -0.23 + 0.63 C_{st} - 1.26 \times 10^{-2} C_{st}^2 \quad (27)$$

식 (27)에 의해 예측된 폭발하한계를 문헌값과 식 (16), 식 (20), Suzuki식, Hanley식 그리고 Hshieh 식에 의한 예측값을 비교하여 Table 2에 나타내었다. 문헌값과 예측값의 차이 정도를 쉽게 알 수 있도록 Fig. 1에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 예측식에 의한 예측값과 문헌값의 결정계수(r^2)는 0.99이고, A.A.D.는 0.05 Vol%로서, Suzuki 식은 0.18 Vol%,

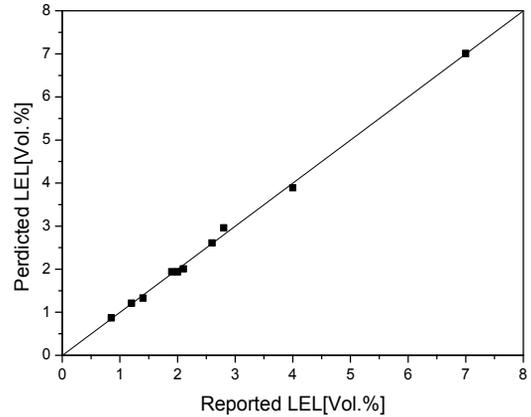


Fig. 1. Comparison between reported and predicted lower explosion limits(LEL) for aldehydes.

Table 2. Comparison between reported and predicted LEL by means of chemical stoichiometric coefficients for aldehydes

No.	Nomenclatures	LELref. [Vol. %]	LEL. (Suzuki)	LEL. (Hanley)	LEL. (Hshish)	Eqn. (16)	Eqn. (20)	Eqn. (26)
1	Formaldehyde	7.0	7.48	8.21	6.89	7.76	7.57	7.01
2	Acetaldehyde	4.0	4.01	3.93	3.66	3.78	3.62	3.89
3	Propionaldehyde	2.6	2.78	2.53	2.46	2.19	2.33	2.61
4	Acrolein	2.8	2.97	2.72	2.63	2.50	2.51	2.96
5	Isobutylaldehyde	2.0	2.08	1.87	1.86	1.62	1.73	1.94
6	Butylaldehyde	1.9	2.07	1.86	1.85	1.62	1.72	1.94
7	Crotonaldehyde	2.1	2.23	2.01	1.98	1.75	1.85	2.01
8	2-Ethylbutylaldehyde	1.2	1.41	1.31	1.30	1.05	1.21	1.21
9	2-Ethylhexanal	0.85	0.96	0.91	0.88	0.79	0.84	0.87
10	Benzaldehyde	1.4	1.18	1.12	1.10	1.14	1.03	1.33
	A.A.D.	-	0.18	0.21	0.15	0.36	0.26	0.05

Table 3. Comparison between reported and predicted UEL by means of chemical stoichiometric coefficients for aldehydes

No.	Nomenclatures	UELref. [Vol.%]	UEL (Hanley)	Eqn. (16)	Eqn. (20)	Eqn. (27)
1	Formaldehyde	73.0	39.71	80.44	78.31	73.04
2	Acetaldehyde	60.0	19.01	34.99	37.51	59.30
3	Propionaldehyde	17.0	12.24	22.72	24.16	21.87
4	Acrolein	31.0	13.18	25.90	26.00	30.19
5	Isobutyraldehyde	10.0	9.06	16.81	17.89	10.72
6	Butyaldehyde	12.5	9.02	16.81	17.81	10.72
7	Crotonaldehyde	15.5	9.71	18.18	19.16	12.72
8	2-Ethylbutyaldehyde	7.7	6.36	10.91	12.55	6.99
9	2-Ethylhexanal	7.2	4.42	8.18	8.71	8.37
10	Benzaldehyde	-	5.42	-	-	7.01
	A.A.D.	-	12.35	6.81	7.03	1.51

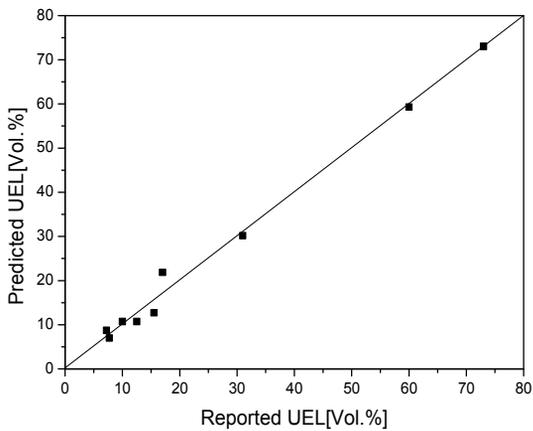


Fig. 2. Comparison between reported and predicted upper explosion limits(UEL) for aldehydes.

Hanley식은 0.21 Vol% 그리고 Hshieh 식은 0.15 Vol% 보다 문헌값과 일치함을 보여주고 있다. 본 연구에서 제시한 방법론과 예측식을 활용하여 다른 가연성물질의 연소특성 연구가 가능하다고 본다.

5.2. 알데히드류의 폭발상한계의 예측

알데히드류에 대해 연소열 및 화학양론계수와 폭발상한계의 관계를 규명하기 위해 앞서 제시한 식 (16)에서 식 (24)을 이용하여 수학적 및 통계적인 방법으로 Fitting한 결과 폭발상한계의 예측식은 다음과 같다.

$$UEL = 29.91 - 17.00 C_{st} + 4.02 C_{st}^2 + 0.16 C_{st}^3 \quad (28)$$

식 (28)에 의해 예측된 폭발상한계를 문헌값과 식 (16), 식 (20), Hanley 식에 의한 예측값을 비교하여 Table 3에 나타내었다. 문헌값과 예측값의 차이 정도를 쉽게 알 수 있도록 Fig. 2에 나타내었다. 제시된 추산식에 의해 추산된 폭발상한계와 문헌값의 결정계수는 0.99 그리고 A.A.D.는 1.51 Vol%로서 예측식에 계산값이 문헌값과 근사함으로 제시한 예측식을 사용하여 다른 알데히드의 폭발한계 예측이 가능해졌다.

VI. 결론

알데히드류에 대해 폭발한계와 연소열 그리고 화학양론계수의 관계를 규명하고, 연소열과 화학양론

계수에 의한 폭발한계 예측 모델들을 이용하여 최적화된 예측식을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 화학양론계수를 이용한 알데히드류의 폭발한계와 상한계의 예측식은 다음과 같다.

$$LEL = -0.23 + 0.63 C_{st} - 1.26 \times 10^{-2} C_{st}^2$$

$$UEL = 29.91 - 17.00 C_{st} + 4.02 C_{st}^2 + 0.16 C_{st}^3$$

2) 본 연구에서 제시한 예측식에 의한 폭발하한계의 예측값은 문헌값과 평균 0.08 Vol%, 폭발상한계의 예측값은 문헌값과 1.08 Vol%의 차이로서 기존의 예측식 보다 향상된 결과를 보였다.

3) 제시된 예측식의 계산값은 문헌값과 근사함으로 제시한 예측식을 사용하여 다른 알데히드류의 사용 공정에서 안전성 확보가 가능하다.

감사의 글

이 논문은 2014학년도 세명대학교 교내학술연구비 지원에 의해 수행된 연구임.

REFERENCES

[1] F. P. Lees, *Loss Prevention in the Process Industries Vol. 1*, 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann (1996)

[2] R. E. Lenga and K. L. Votoupal, *The Sigma Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Volume I ~ III*, Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc. (1997)

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

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

[5] R. D. Cardozo, "Prediction of the Enthalpy of Combustion of Organic Compounds", *AIChE Journal*, **32**(2), 844-847 (1986)

[6] V. Babrauskas, *Ignition Handbook*, Fire Science Publishers, SFPE, (2003)

[7] T. Suzuki, "Empirical Relationship Between Lower Flammability Limits and Standard Enthalpies of combustion of Organic Com-

pounds", *Fire and Materials*, **18**, 333-336 (1994)

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

[9] F. Y. Hshieh, "Predicting Heats of Combustion and Lower Flammability Limits of Organosilicon Compounds", *Fire and Materials*, **23**, 79-89 (1999)

[10] D. M. Ha, "Prediction of Explosion Limits of Organic Acids Using Combustion Chemical Stoichiometric Coefficients and Heats of Combustion", *Journal of the Korean Institute Fire Science & Engineering*, **27**(3), 47-51 (2013)

[11] G. W. Jones, "Inflammation Limits and Their Practical Application in Hazardous Industrial Operation", *Chemical Review*, **22**(1), 1-26 (1938)

[12] C. J. Hilado, "A Method for Estimating Limits of Flammability", *Journal of Fire and Flammability*, **6**, 130-139 (1975)

[13] J. C. Jones, "Reid Vapour Pressure as a Route to Calculating the Flash Points of Petroleum Fractions", *Journal of Fire Sciences*, **16**(3), 222-227 (1998)

[14] B. P. Mullins, "Bubble-points, Flammability-limits and Flash-points of Petroleum Products", *Combustion Researches and Reviews*, Butterworths, London (1957)

[15] J. C. Park, D. M. Ha and M. G. Kim, "Modified Response Surface Methodology (MRS) for Phase Equilibrium. - Theoretical Background-", *Korean J. of Chemical Engineering*, **13**(2), 115-122, (1996)

[16] D. M. Ha, "Prediction of Explosion Limits of Organic Halogenated Hydrocarbons by Using Heat of Combustions", *Journal of Korean Institute of Fire Science & Engineering*, **26**(4), 63-69 (2012)

[17] D. M. Ha, "Prediction of Explosion Limits of Esters by Using Heats of Combustion and Stoichiometric Coefficients", *Journal of the Korean Institute of Gas*, **15**(4), 44-50 (2011)