

밀폐식 장치를 사용한 Water+1-Propanol 과 Water+2-Propanol의 인화점 측정과 계산

하동명* · 이성진**†

세명대학교 보건안전공학과*, 세명대학교 임상병리학과**†

(2016년 10월 10일 접수, 2016년 11월 25일 수정, 2016년 11월 28일 채택)

The Calculation and Measurement of Flash Point for Water+1-Propanol and Water+2-Propanol Using Closed Cup Aparatus

Dong-Myeong Ha* · Sungjin Lee**†

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University*,

†Department of Clinical Laboratory Science, Semyung University**

(Received 10 October 2016, Revised 25 November 2016, Accepted 28 November 2016)

요 약

인화점은 가연성 액체 용액을 안전하게 취급하기 위한 중요한 성질 중 하나이다. 본 논문에서는 Seta flash 밀폐식 장치를 이용하여 이성분계 용액인 water+1-propanol과 water+2-propanol계의 인화점을 측정하였다. 회귀 분석법을 이용하여 인화점을 계산하였다. 또한 라울의 법칙을 이용하여 인화점을 계산하였고, van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시키는 방법을 통해 인화점을 예측하였다. 각 인화점 계산 결과와 측정 결과를 비교하였다. 그 결과, 회귀 분석법에 의한 인화점 계산치가 가장 측정치를 잘 모사하였다.

주요어 : 인화점, Seta flash 밀폐식 장치, 이성분계 혼합물, 비가연성, 단순 회귀분석법

Abstract - Flash point is the one of the important properties for the safe handling of inflammable liquid solution. In this paper, flash points of binary liquid solutions, water+1-propanol and water+2-propanol, were measured by using Seta flash closed cup apparatus. Flash point was estimated using regression analysis method. Flash points were also estimated by the method based on Raoul's law and the method optimizing the binary parameters of van Laar equation. Experimental results were compared with the calculated results. The regression analysis method is able to estimate the flash point fairly well for water+1-propanol and water+2-propanol mixture.

Key words : Flash point, Seta flash closed cup apparatus, binary liquid mixtures, nonflammable, regression analysis

1. 서 론

인화점은 가연성 액체에서 발생하는 증기가 공기와 섞여서 혼합기체를 형성하고, 여기에 점화원을 가까이

접근시켰을 때 섬광을 내면서 인화하는 최저 온도로 정의된다⁽¹⁾. 또한 혼합물의 인화점은 액체의 증기압과 하부폭발한계의 농도가 같을 때의 온도이다. 따라서 혼합물의 인화점은 혼합물의 액상 조성, 증기압, 하부폭발한계 등과 밀접한 관련성이 있다⁽²⁾.

가연성 액체의 안전한 취급을 위해 인화점은 가장 중요한 정보 중 하나이다. 가연성 액체를 저장, 이송,

†To whom corresponding should be addressed.

Tel : +82-43-649-1286, E-mail : pappi68@hanmail.net

화학 공정에서 사용할 때, 취급자의 부주의는 화재와 폭발 사고로 연결되어 크나큰 인명/재난 피해를 발생시킬 수 있다. 따라서 가연성 액체의 취급자에게 정확한 인화점 정보를 제공하는 것은 매우 중요한 것이다.

인화점은 실험과 계산 방법을 통해 확보할 수 있다.

인화점을 실험을 통해 측정하는 것은 여러 가지의 방법이 있다. 일반적으로 Seta flash 밀폐식, Tag 밀폐식과 Pensky-Martens 밀폐식 등의 방법과, Cleveland 개방식과 Tag 개방식 등의 방법 등이 있다⁽³⁾. 인화점은 측정 방법에 따라 다르게 측정될 수 있으며, 일반적으로 밀폐식이 개방식 보다 낮게 측정된다. 이는 측정 방식의 특성에 기인한다.

현재까지 개발된 인화점 계산 방법은 크게 세 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 라울의 법칙을 이용하는 방법이며, 둘째는 수정된 라울의 법칙과 활동도계수 식을 이용하는 방법이며, 셋째는 회귀 분석에 의한 실험식을 이용하는 방법이다.

Affens와 McLaren⁽⁴⁾은 기상은 이상기체로, 액상은 이상용액으로 가정한 라울의 법칙을 이용하여 경유와 휘발유의 인화점을 계산하는 방법을 개발하였으며, White 등⁽⁵⁾은 Affens와 McLaren의 모델에서 하부폭발한계의 온도의존성을 무시하여 보다 간편한 인화점 계산 방법을 개발하였다.

Hanley⁽⁶⁾는 활동도계수 식인 Margules 식⁽⁷⁾을 이용하여 혼합물의 인화점을 계산하는 방법을 개발하였다. Liaw 등⁽⁸⁾은 혼합물의 기상을 이상기체로 가정하고 액상의 비이상성을 반영한 수정된 라울의 법칙을 적용하여, 이성분계 혼합물의 인화점을 계산하는 방법을 개발하였다. Ha 등⁽⁹⁾은 Liaw 등의 모델을 적용하여 활동도계수 식의 이성분계 파라미터를 인화점 측정치와 상관시킨 계산 방법을 제시하였다.

Catoire 등⁽¹⁰⁾은 가연성 액체 혼합물의 인화점을 계산하기 위해 다중 회귀분석법을 이용한 계산 방법을 개발하였다. 이들은 혼합물의 증기압, 표준 증발 엔탈피와 평균 탄소수를 독립 변수로, 가연성 액체 혼합물의 인화점 측정값을 종속 변수로 선정하여, 독립 변수와 종속 변수의 상관성을 통계적으로 연관시켜 가연성 혼합물의 인화점을 예측하였다. 또한 Kim 등⁽²⁾은 MLR(multiple linear regression)법을 이용하여 가연성 이성분계 혼합물의 인화점을 경험식을 통해 예측하였다.

1-Propanol과 2-propanol은 소수성과 친수성을 함께 가진 양쪽성 물질이다. 이 물질들과 물을 섞은 혼합물

에 수용성이 약한 유기 화합물을 녹이면 그 용해도가 증가한다. 이와 같은 특성을 이용하여 1-propanol 수용액과 2-propanol 수용액은 다양한 산업 분야에서 활용되고 있다. 특히 의약품, 인쇄용 잉크, 페인트, 동결 방지제 제조 산업 등에서 주요하게 사용되고 있다⁽¹¹⁾. 1-Propanol 수용액과 2-propanol 수용액의 인화점 정보는 이를 취급하는 산업 현장의 안전 확보를 위해 매우 중요한 자료이다.

따라서 본 연구에서는 water+1-propanol과 water+2-propanol계를 선정하였고, Seta flash 밀폐식 장치를 이용하여 인화점을 측정하였다. 또한 라울의 법칙을 이용한 계산 방법, van Laar 식⁽⁷⁾의 이성분계 파라미터를 최적화시킨 계산 방법, 이성분계 혼합물의 액상 조성을 인화점 측정값과 상관시킨 실험식(empirical equation)을 이용한 계산 방법 등을 통해 인화점을 계산하였다. 또한 그 계산 결과들과 측정 결과를 비교하였다.

2. 인화점 측정

Water+1-propanol과 water+2-propanol계의 인화점을 Seta flash 밀폐식 장치를 이용하여 측정하였다. 1-Propanol(99.0%)는 한국의 Samchun 사, 2-propanol(99.0%)는 J.T. Baker 사, water(HPLC grade)는 J.T. Baker 사에서 각각 구입하여, 별도의 정제 과정을 거치지 않고 그대로 사용하였다.

미국의 Koehler 사에서 제작된 인화점 측정 장치를 사용하였다. 이 장치는 온도계, 온도조절기, 항온조, 점화원 장치, 시료컵, 배수로, 레벨 게이지 등으로 구성되었다. 기본 구조도는 앞서 발표한 논문⁽¹²⁾에 제시되어 있다. 시약들을 다양한 몰분율로 혼합하여 ASTM D1310-86⁽¹³⁾ 규정에 따라 인화점을 측정하였다.

3. 인화점 계산

3-1. 라울의 법칙에 의한 인화점 계산

이성분계 혼합물의 성분 i 의 하부폭발한계(LEL, low explosive limit)는 다음과 같이 정의된다.

$$LFL_i = \frac{P_{i,fp}^{sat}}{P} \quad (1)$$

여기서 P 는 혼합물의 전체 압력이며, $P_{i,fp}^{sat}$ 는 인화점에서의 성분 i 의 포화증기압이다.

이성분계 혼합물의 기상을 이상기체로 가정하면, 기-액 상평형 상태에서 성분 i 는 다음과 같은 관계식을 만족한다.

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (2)$$

여기서 x_i 는 성분 i 의 액상 몰분율, r_i 는 성분 i 의 활동도계수, P_i^{sat} 는 성분 i 의 포화증기압이다.

Le Chatelie의 법칙⁽¹⁴⁾에 의하면, 이성분계 혼합물의 i 성분의 기상 몰분율과 하부폭발한계는 다음과 같은 관계를 따른다.

$$\frac{y_1}{LEL_1} + \frac{y_2}{LEL_2} = 1 \quad (3)$$

여기서 y_1 과 y_2 는 각각 성분 1과 2의 기상 몰분율, LEL_1 과 LEL_2 는 성분 1과 2의 하부폭발한계이다.

Liaw 등은 이성분계 혼합물에서 water와 같은 비가연성이 물질이 포함되어 있는 경우, water를 성분 1으로 하여 식 (3)을 다음과 같이 수정하였다⁽⁸⁾.

$$\frac{y_2}{LEL_2} = 1 \quad (4)$$

여기서 성분 2는 이성분계 혼합물 중 가연성 성분이다.

또한 Liaw 등⁽⁸⁾은 식 (1)과 식 (2)에 의해 성분 2의 관계식을 각각 유도하고, 그 결과를 식 (4)에 대입하여 다음과 같은 관계식을 유도하였다.

$$\frac{x_2 \gamma_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (5)$$

이성분계 혼합물의 액상을 이상용액으로 가정하면, 성분 2의 활동도계수는 “1”이 되어 식 (5)는 다음과 같이 표현할 수 있다⁽⁸⁾.

Table 1. The Antoine coefficients for pure substances

Components \ Properties	A	B	C
1-Propanol	8.37895	1788.02	227.438
2-Propanol	8.87829	2010.33	252.636

$$\frac{x_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (6)$$

식 (5)와 식 (6)에서, 성분 2의 포화증기압(P_2^{sat})과 인화점에서의 성분 2의 포화증기압($P_{2,fp}^{sat}$)은 다음의 Antoine 식⁽⁷⁾으로 계산할 수 있다.

$$\log P_2^{sat} = A_2 - \frac{B_2}{t + C_2} \quad (7)$$

여기서 t 는 섭씨 온도(°C)이며 A_2 , B_2 와 C_2 는 성분 2의 Antoine 상수이다. 본 연구에서 사용한 가연성 성분들의 Antoine 상수는 문헌 자료⁽¹⁵⁾에서 얻었으며, 다음의 Table 1에 제시하였다.

식 (7)을 식 (6)에 대입하여 정리하면 다음과 같다.

$$t = \frac{B_2}{\frac{B_2}{t_{2,fp} + C_2} + \log(x_2)} - C_2 \quad (8)$$

여기서 t 는 비가연성 성분이 포함된 이성분계 혼합물의 인화점, B_2 와 C_2 는 성분 2의 Antoine 상수, $t_{2,fp}$ 는 가연성 성분 2의 인화점, x_2 는 성분 2의 액상 몰분율이다.

따라서 식 (8)을 만족하는 t 는 구하면 라울의 법칙에 의한 인화점을 계산할 수 있다⁽⁸⁾.

3-2. van Laar 식의 이성분계 파라미터 최적화 방법에 의한 인화점 계산

식 (5)에서 성분 2의 활동도계수는 van Laar 식에 따르면 다음과 같다.

$$\gamma_2 = \exp\left(A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right)^2\right) \quad (9)$$

식 (7)과 식 (9)을 식 (5)에 대입하여 정리하면 다음과 같다⁽⁸⁾.

$$\frac{x_2 \cdot \exp\left(\frac{A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right)^2}{10 \left(A_2 - \frac{B_2}{t + C_2}\right)}\right) \cdot 10^{\left(A_2 - \frac{B_2}{t + C_2}\right)}}{10^{\left(A_2 - \frac{B_2}{t_{2,fp} + C_2}\right)}} = 1 \quad (10)$$

여기서 A_{12} 와 A_{21} 는 van Laar 식의 이성분계 파라미터, t 는 이성분계 혼합물의 인화점이다.

A_{12} 와 A_{21} 의 초기값을 임의로 결정하고, SIMPLEX 방법⁽¹⁶⁾에 의해 초기값에 일정한 값을 더하거나 감해 식 (10)을 만족하는 t 를 계산하였다. 계산한 인화점과 측정된 인화점을 비교하기 위하여 다음과 같은 목적 함수(F)를 설정하였다.

$$F = \sum_{i=1}^N |T_{i,fp}^{exp} - T_{i,fp}^{cal}| \quad (11)$$

여기서 N 은 인화점 측정값의 총 개수, $T_{i,fp}^{exp}$ 는 인화점 측정값, $T_{i,fp}^{cal}$ 는 식 (10)을 만족하는 인화점 계

산값(t)이다.

식 (11)의 목적함수(F)를 최소화시키는 이성분계 파라미터를 계산하였으며, 그 때의 인화점을 계산하여 van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시킨 인화점으로 결정하였다.

3-3. 회귀 분석법에 의한 인화점 계산

본 연구에서는 다음과 같은 실험식을 이용하였다.

$$t = a + bx_2 + cx_2^2 + dx_2^3 \quad (12)$$

여기서 $t(^{\circ}C)$ 는 이성분계 혼합물의 인화점, x_2 는 가연성 성분 2의 액상 몰분율, a, b, c, d 는 t 와 x_2 의 상관 관계를 연결시키는 매개변수들이다.

인화점 측정값과 식 (12)에 의해 계산된 인화점 간 차이를 최소화시키는 매개변수 a, b, c, d 를 회귀 분석법을 이용해 구했으며, 그 때의 식 (12)의 t 값을 회귀 분석법에 의한 인화점으로 결정하였다.

4. 결과 및 고찰

4-1. 인화점 측정 결과

Water+1-propanol과 water+2-propanol 계의 인화점을 Seta flash 밀폐식 장치에 의해 측정하였다. 그 결과를 Table 2와 3에 그리고 Fig. 1과 2에 제시하였다.

Table 2. The experimental and calculated flash points for water+1-propanol system

Mole Fractions		Flash points ($^{\circ}C$)			
x_1	x_2	Exp.	Raoult	van Laar	Empirical
0.000	1.000	21.0	-	-	21.0
0.105	0.895	24.5	22.7	22.6	24.4
0.302	0.698	27.5	26.5	25.7	27.8
0.500	0.500	29.0	31.8	28.6	29.0
0.701	0.299	30.5	40.5	30.5	30.0
0.900	0.100	31.5	61.1	31.5	32.8
0.950	0.050	35.0	75.8	35.0	34.1
AAE			14.3	0.7	0.4

Table 3. The experimental and calculated flash points for water+2-propanol system

Mole Fractions		Flash points (°C)			
x_1	x_2	Exp.	Raoult	van Laar	Empirical
0.000	1.000	12.0	-	-	11.8
0.108	0.892	15.0	13.7	13.6	15.2
0.312	0.688	18.0	17.8	16.6	18.2
0.507	0.493	19.0	23.2	19.0	18.7
0.700	0.300	19.5	31.6	20.1	19.3
0.899	0.101	21.5	51.9	20.9	22.6
0.950	0.050	25.0	66.7	25.0	24.2
AAE			15.0	0.7	0.4

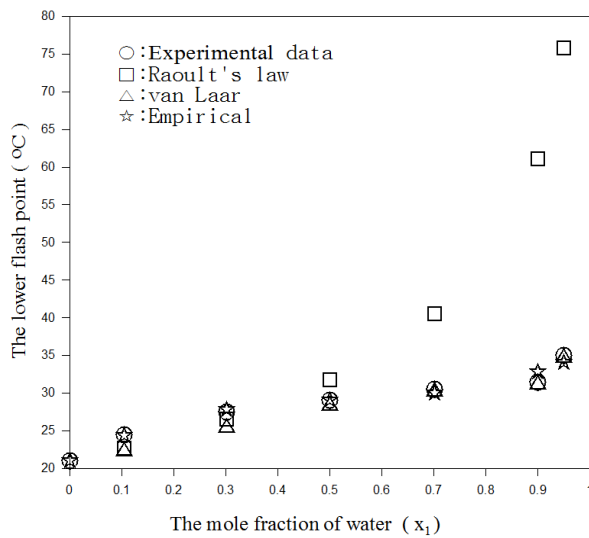


Fig. 1. The comparison of calculated flash points with experimental flash points for water+1-propanol system

그림에서 알 수 있듯이, 비가연성 성분인 water의 몰분율이 0.7이상에서, 인화점이 급격하게 증가하는 현상을 보였다.

4-2. 인화점 계산 결과

Water+1-propanol과 water+2-propanol계의 인화점을 라울의 법칙, van Laar 식의 이성분계 파라미터 최적화 방법, 회귀 분석법에 의한 실험식 등에 의해 계산하였다. 그 계산 결과를 Table 2와 3에, 그리고 Fig. 1과 2에 각각 제시하였다. Table에 제시한 AAE(aver-

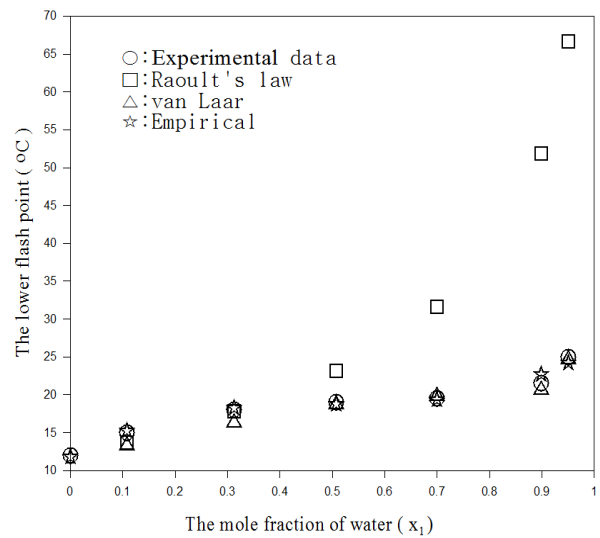


Fig. 2. The comparison of calculated flash points with experimental flash points for water+2-propanol system

age absolute error)⁽¹⁷⁾는 인화점 측정값과 계산값 간의 일치 정도를 나타내는 척도이며 다음과 같다.

$$AAE = \sum_{i=1}^N \frac{|T_i^{\text{exp}} - T_i^{\text{cat}}|}{N} \quad (13)$$

여기서 T_i^{exp} 는 i 번째 인화점 측정값, T_i^{cat} 는 i 번째 인화점 계산치, N 은 측정값의 총 개수이다.

식 (11)의 목적함수를 최소화시킨 van Laar 식의 이성분계 파라미터를 계산하여, 다음의 Table 4에 제시한다.

Table 4. The Optimized Binary Parameters of van Laar Equation for Each Binary System

Systems	Parameters	van Laar	
		A ₁₂	A ₂₁
water+1-propanol		1.02188	2.75294
water+2-propanol		1.17502	2.74392

인화점 측정값과 성분 2의 액상 물분율 간의 상관 관계를 회귀 분석하여, water+1-propanol과 water+2-propanol계의 실험식인 식 (12)의 매개변수 a, b, c, d 를 각각 구했다. 그 결과는 각각 다음과 같다.

$$t = 35.593 - 33.349x_2 + 61.557x_2^2 - 42.786x_2^3 \quad (14)$$

여기서 식 (14)는 water+1-propanol계의 인화점 실험식이다.

$$t = 26.075 - 42.237x_2 + 81.859x_2^2 - 53.869x_2^3 \quad (15)$$

여기서 식 (15)은 water+2-propanol계의 인화점 실험식이다.

제시된 Table 2와 Table 3에서 보면 water+1-propanol계의 경우, 라울의 법칙에 의한 계산 결과의 절대 평균오차는 14.3°C였고, van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시킨 방법에 의한 계산 결과의 절대 평균오차는 0.7°C이었으며, 회귀 분석법에 의한 식 (14)의 실험식에 의한 계산 결과의 절대평균오차는 0.4°C이었다.

Water+2-propanol계의 경우, 라울의 법칙에 의한 계산 결과의 절대평균오차는 15.0°C였고, van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시킨 방법에 의한 계산 결과의 절대평균오차는 0.7°C이었으며, 회귀 분석법에 의한 식 (15)의 실험식에 의한 계산 결과의 절대 평균오차는 0.4°C이었다.

다음의 Fig. 3과 Fig. 4는 water+1-propanol과 water+2-propanol계의 액상 물분율과 활동도계수 간의 관계를 나타낸 그림이다. 활동도계수는 van Laar 식에 의해 계산하였다. 또한 이성분계 파라미터는 Table 4의 자료를 이용하였다. Fig. 3과 Fig. 4에서 알 수 있듯이 water+1-propanol과 water+2-propanol계에서, 비

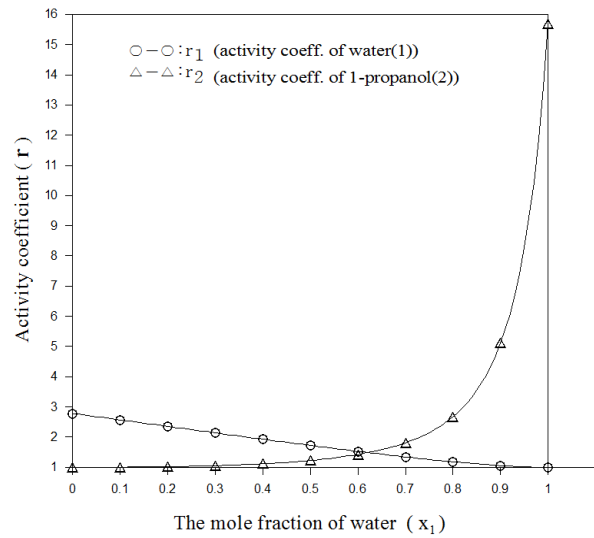


Fig. 3. Activity coefficient vs. liquid mole fraction diagram for water+1-propanol system

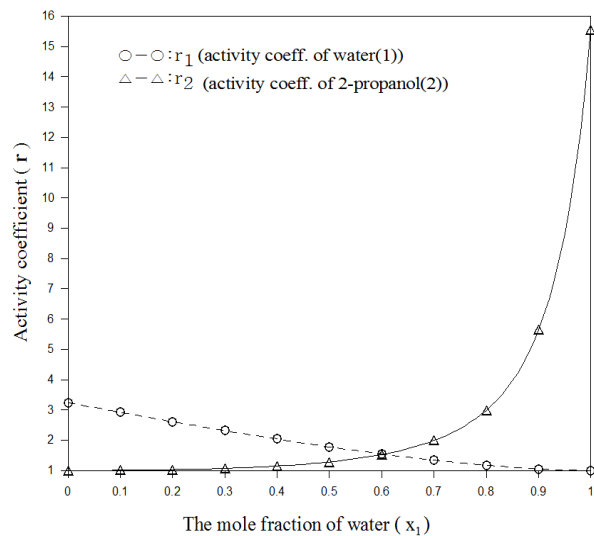


Fig. 4. Activity coefficient vs. liquid mole fraction diagram for water+2-propanol system

가연성 성분인 water의 물분율이 증가함에 따라 가연성 성분 2의 활동도계수(γ_2)값이 “1”에서 크게 벗어나는 경향을 보였다.

라울의 법칙을 이용하여 유도된 식 (8)은 가연성 성분의 활동도계수를 반영하지 않았다. Fig. 1과 Fig 2에서 알 수 있듯이 식 (8)에 의한 계산값은 water의 몰분율이 증가할수록 실험값에서 크게 벗어났다. 특히 water의 몰분율이 0.7이상에서는 매우 많이 벗어났다. 이는 앞 단락에서 분석한 “ x_1 이 증가함에 따라 γ_2 가 1에서 크게 벗어나는 경향”을 식 (8)이 반영하지 않았기 때문이다. 따라서 라울의 법칙에 의한 계산 방법은 본 논문의 이성분계 혼합물에는 적용할 수 없다는 결론을 내렸다.

반면 식 (10)은 가연성 성분 2의 활동도계수를 반영하기 위하여 van Laar 식을 이용하였다. 이와 같은 식 (10)과, 식 (11)을 연동시켜 계산한 인화점의 절대평균오차는 water+1-propanol과 water+2-propanol계에서 각각 0.7°C이다. 따라서 인화점 실험값의 모사성이 라울에 법칙에 의한 것보다 뛰어난 것을 확인할 수 있었다.

또한 회귀 분석법에 의한 식 (14)과 식 (15)는, 절대평균오차에서 알 수 있듯이 본 연구에서 사용한 세 가지 계산 방법 중 가장 좋은 실험값에 대한 모사성을 보였다.

본 연구에서는 water+1-propanol과 water+2-propanol계의 인화점을 각각 6개 조성에서 측정하였다. Table 2와 Table 3에서 제시한 조성에서 벗어난 혼합물인 경우, 본 연구에서 제시한 van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시킨 계산 방법과 회귀 분석법에 의한 계산 방법을 이용하여 인화점을 계산하기를 제안한다.

5. 결론

Seta flash 밀폐식 장치를 이용하여 water+1-propanol과 water+2-propanol계의 인화점을 측정하였다. 또한 라울의 법칙에 의한 방법, van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시키는 방법, 회귀 분석법에 의한 방법 등을 통해 인화점을 계산하여, 측정값과 비교하였으며 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) Water+1-propanol계의 경우 라울의 법칙에 의한 계산값과 측정값 간의 절대평균오차는 14.3°C이었다. van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시키는 방법에 의해 계산한 값과 측정값 간의 절대평균오차는 0.7°C이었다. 또한 실험식에 의한 계산값과 측정

값 간의 절대평균오차는 0.4°C이었다.

(2) Water+2-propanol계의 경우 라울의 법칙에 의한 계산값과 측정값 간의 절대평균오차는 15.0°C이었다. van Laar 식의 이성분계 파라미터를 최적화시키는 방법에 의해 계산한 값과 측정값 간의 절대평균오차는 0.7°C이었다. 또한 실험식에 의한 계산값과 측정값 간의 절대평균오차는 0.4°C이었다.

(3) 절대평균오차 값에서 알 수 있듯이 본 연구에서 제시한 실험식에 의한 계산 방법이 비가연성 성분이 포함된 이성분계 액체 혼합물의 인화점을 가장 잘 예측하였다.

감사의 글

본 연구는 2014년도 소방방재청의 연구비 지원으로 수행되었습니다.

References

1. Phoon, L.. et al., 2014, A Review of Flash Point Prediction Models for Flammable Liquid Mixtures, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 53, pp. 12523-12565
2. Kim, S. Y.. et al., 2006, Prediction of Flash Point of Binary Systems by Using Multivariate Statistical Analysis (in Korean), *KIGAS*, Vol. 10, No. 4, pp. 29-33
3. Lance, R. C.. et al., 1979, Measurement of Flash Points : Apparatus, Methodology, Applications, *J. of Hazardous Materials*, Vol. 3, pp. 107-119
4. Affens, W. A. and McLaren, G. W., 1972, Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in Air, *J. of Chem. Ind. Eng. Chem.*, Vol. 17, No. 4, pp. 482-488
5. White, D.. et al., 1997, Flame Spread on Aviation Fuels, *Fire Safety Journal*, Vol. 28, pp. 1-31
6. Hanley, B., 1998, A Model for the Calculation and the Verification of Closed Cup Flash Points for Multicomponent Mixtures, *Process Saf. Prog.*, Vol. 17, No. 2, pp. 86-97
7. Poling, B. E.. et al., 2001, The Properties of Gases and Liquids, 5th Ed., McGraw-Hill, New York

8. Liaw, H. et al., 2002, A Mathematical Model for Predicting the Flash Point of Binary Solutions, *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 15, pp. 429-438
9. Ha, D. M. and Lee, S. J., 2006, The Estimation of Lower Flash Point for n-Pentanol+n-Propionic Acid and n-Pentanol+n-Butyric Acid Systems Using Optimization Method (in Korean), *KIGAS*, Vol. 11, No. 4, pp. 73-78
10. Caoire, L. et al., 2006, Estimation of Closed Cup Flash Points of Combustible Solvent Blends, *J. Phy. Chem. Ref. Data*, Vol. 35, No. 1, pp. 9-14
11. Taha, M., 2016, Designing New Mass-Separating Agents Based on Piperazine-Containing Good's Buffers for Separation of Propanols and Water Azeotropic Mixtures Using COSMO-RS method, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 425, pp. 40-46
12. Ha, D. M. and Lee, S. J., 2013, The Measurement of the Lower Flash Points for Binary Mixtures (in Korean), *J. of the Korean Society of Safety*, Vol. 28, No. 1, pp. 35-39
13. In 2011 Annual Book of ASTM Standards ; ASTM International, 2011, Standard Test Methods for Flash Point of Liquids by Small Scale Closed-Cup Apparatus(ASTM D3278), West Conshohocken, PA
14. Chatelier, H. L., 1891, Estimation of Firedamp by Flammability Limits, *Ann. Minnes*, Vol. 19, No. 8, pp. 388-395
15. Gmehing, J. et al., 1980, Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection, Vol. 1, Part1-Part7, DECHEMA
16. Kuester, J. L. and Mixe, J .H., 1973, Optimization Techniques with Fortran, McGraw-Hill, New York,
17. Lim, J. et al., 2013, Solubility of Triclocarban in Pure Alkanols at Different Temperatures, *Korean J. Chem. Eng.*, Vol. 30, No. 1, pp. 181-186