

مدلسازی و همبستگی هدایت گرمایی سردکننده های R152a و R142b, R123 در چگالی های پایین و متوسط

پریسا نصیری پور^۱ ، طیبه حسین نژاد^{۲*}

^۱گروه شیمی، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران

^۲گروه شیمی، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران

Email: tayebeh.hosseinejad@alzahra.ac.ir

چکیده

بهینه سازی سامانه های انتقال گرما سبب افزایش طول عمر مفید قطعات و کاهش هدررفتن انرژی می شود و این بهینه سازی در بیشتر موارد با استفاده از سیالات سردکننده صورت می گیرد. هدایت گرمایی این سیالات نقش مهمی در مهندسی فرایندهای انتقال گرما با کارایی بالا و توسعه فناوری های پایدار ایفا می کند. در این تحقیق، هدف اصلی مطالعه هدایت گرمایی سیالات سردکننده R152a و R142b, R123 در محدوده چگالی های پایین و متوسط ($2 \text{ mol/l} - 0.1$) با استفاده از فرمول بندی های ترمودینامیک آماری غیرتعادلی است. در گام اول انتگرالهای برخورد هدایت گرمایی سردکننده های رقیق R152a, R142b, R123 و R152a را با استفاده از روش چپمن-انسکوگ محاسبه و سپس اثرات درجات آزادی درونی را بر هدایت گرمایی بررسی و با داده های تجربی در دسترس مقایسه نمودیم و مدلسازی حاصله را جهت بهینه سازی پارامترهای پتانسیل در سردکننده های مذکور بکار گرفتیم. سپس، حالت های متناظر ضریب دوم و پیریل هدایت گرمایی را برای سیالات سردکننده مذکور با استفاده از روش رینواتر-فرند ارزیابی کرده و هدایت گرمایی را برای سردکننده های مذکور در محدوده چگالی های متوسط محاسبه و با دقیق ترین داده های تجربی در دسترس مقایسه کردیم. در نهایت، مدل بهینه ای را برای مطالعه هدایت گرمایی سیالات سردکننده R142b, R123 و R152a در محدوده چگالی های پایین و متوسط و محدوده دمایی ($450 \text{ K} - 200$) ارائه نمودیم که می تواند در طراحی بهینه فرایندهای انتقال گرما و مدلسازی دستگاه هایی با فناوریهای پایدار مورد استفاده واقع شود.

واژگان کلیدی: هدایت گرمایی، سیالات سردکننده، انتگرالهای برخورد، نظریه رینواتر - فرند، ضریب دوم و پیریل هدایت گرمایی

مقدمه

انتقال گرما بوسیله مایعات، فرایندی پیچیده است و عوامل مختلفی از جمله پایداری سیال، ترکیب درصد، ویسکوزیته^۱، بارسطحی و هدایت گرمایی^۲ نتایج نهایی را تحت تاثیر قرار می دهند. به ماده ای که در یک چرخه گرمایی بتواند علاوه بر دریافت گرما و پس دادن آن در نقطه ای دیگر، برگشت پذیر بوده و از مایع به گاز و برعکس تبدیل شود، سردکننده^۳ می گویند [۱].

سیستم های خنک کننده، همواره یکی از مهم ترین مسایل در صناعی است که با انتقال گرما سروکار دارند. سیالات سردکننده در بسیاری از زمینه های صنعتی مانند الکترونیک، سرمایه‌ی، تهویه مطبوع، داروسازی، صنایع غذایی، خودرو سازی و حمل و نقل و بسیاری از فناوریهای پایدار بکار گرفته می شوند. این سیالات در یخچال ها، فریزرها و اولترا فریزرها، چیلرها، کولرها، تولید فوم دستشویی صنعتی و انواع اسپری کاربرد دارند. برای مثال اولترا فریزرها برای نگهداری نمونه های تحقیقاتی و آزمایشگاهی در پژوهشگاه های ژنتیک، بیولوژیک، بیوتکنولوژی و آزمایشگاه های تحقیقاتی صنایع پزشکی، کشاورزی، غذایی و دارویی کاربرد دارد و میتوانند از مصادیق فناوریهای پایدار به شمار روند. به طور کلی سردکننده ها یک نوع ماده شیمیایی هستند که برای خنک سازی در سیستم های انتقال گرما بکار می روند. در فرایندهایی از قبیل حذف گرما از جریان گاز، کاهش دمای آب خنک کننده، کاهش دمای روغن و خنک سازی هوای فشرده از سردکننده ها استفاده می شود [۲ و ۳].

خواص انتقالی سردکننده ها، در گسترش وسایل انتقال دهنده گرما نقش مهمی را ایفا می کنند. با توجه به اهمیت مبحث انرژی در سراسر جهان، کنترل میزان انتقال گرما به وسیله تجهیزات صنعتی و کاهش میزان اتلاف انرژی، از اهمیت ویژه ای برخوردار است. بنابراین مدیریت گرمایی، یک عامل تعیین کننده در جهت بهبود عملکرد دستگاهها و افزایش عمر مفید

آنها در نظر گرفته می شود و باید در طراحی فرایندهایی که با محیط زیست سازگاری بیشتری دارند مورد توجه قرار گیرد. داده های خواص انتقالی، در تجهیزات مهندسی مانند مبدل های گرمایی، سردکننده ها، راکتورها، خنک کننده ها، فریزرها و اولترا فریزرها، تجزیه کننده ها و جاذب ها به کار برده می شود. به لحاظ نظری از این خواص برای محاسبه توابع انرژی پتانسیل بین مولکولی، تعیین نیروهای بین مولکولی^۴ گازهای با چگالی پایین و بسط تئوری های انتقال در سیالات نیز استفاده می شود [۴ و ۵].

این پدیده ها به همان اندازه که در فرایندهای پیچیده ای مانند واکنش آلاینده ها و انتشار آنها در اتمسفر مهم هستند، در زندگی روزانه انسان ها نیز حائز اهمیتند. پس داشتن درک درستی از قوانین فیزیکی حاکم بر پدیده های انتقال بسیار مهم است و میتواند در بهبود مهندسی فرایندهای انتقال گرما و طراحی دستگاه هایی با فناوریهای پایدار مورد استفاده واقع شود [۵].

با وجود اینکه شیوه های تجربی برای محاسبه خواص انتقالی وجود دارد، اما تنها برای تعداد کمی از سیستم ها، داده های تجربی دقیق موجود است. پس در مواردی که داده های تجربی در دسترس نیست، از روش های نظری برای تخمین مقادیر مورد نظر استفاده می شود [۶].

از جمله کارهای تحقیقاتی که در این خصوص قبلا گزارش شده است محاسبه خواص انتقالی بر اساس پتانسیل برهمکنش He و CH₄ با استفاده از روش وارونگی و اصل حالت های متناظر توسعه یافته است. توابع پتانسیل لنارد - جونزو پتانسیل BBMS^۵ به عنوان مدل های پتانسیل مورد نیاز در تکنیک وارونگی مورد استفاده قرار گرفت که نتایج پتانسیل لنارد جونزو توافق مناسبی با نتایج تجربی حاصل از پرتو مولکولی برخورد^۶ نشان داد. در این مطالعه پتانسیل برهم کنش از روش وارونگی اسمیت^۷ و همکارانش محاسبه گردید [۷].

⁵ Barker-Bob etic-Maitland-Smith (BBMS) Potential

⁶ Crossed Molecular Beam

⁷ Smit

¹ Viscosity

² Thermal conductivity

³ Refrigerant

⁴ Intermolecular forces

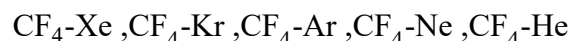
ابتدا مقادیر انتگرال های برخورد^{۱۲} هدایت گرمایی سردکننده های رقیق R123, R142b و R152a را با استفاده از روش چپمن - انسکوگ [۱۰] محاسبه و سپس سهم درجات آزادی انتقالی و اثرات درجات آزادی درونی را بر هدایت گرمایی بدست می آوریم. به بیان دقیقتر، سهم درونی هدایت گرمایی در سرد کننده های رقیق مذکور بر اساس روشهای رگرسیونی پارامتریزه گردید و معادلات همبستگی جدیدی برای محاسبات این سهم معرفی شد. از سوی دیگر، برای هر یک از مبردهای مذکور، دو دسته از پارامترهای نظری توابع انرژی پتانسیل برهمکنش جفتی در فرایند همبستگی در نظر گرفته شد و نتایج حاصل با داده های تجربی در دسترس مقایسه گردید و در نهایت پارامترهای بهینه پتانسیل معرفی شد.

شایان ذکر است که در اغلب مطالعات نیمه تجربی، پارامترهای تجربی ای نظیر دما و فشار نقطه بحرانی، نقطه سه گانه و یا نقطه جوش در همبستگی داده ها مورد استفاده قرار می گیرند. علاوه بر این، در سایر دیدگاه های نیمه تجربی در همبستگی داده های هدایت گرمایی سردکننده ها، حالت های متناظر برای هدایت گرمایی کل در یک محدوده از دما و چگالی همبسته شده اند و سهم درونی بطور مجزا با دیدگاه همبستگی فرمول بندی نشده است [۱۱ و ۱۲].

در گام بعد، معادلات همبستگی جدیدی برای محاسبه ضریب دوم ویرال هدایت گرمایی برای مبردهای مذکور پارامتریزه و معرفی شد که سپس مبنای محاسبات برای هدایت گرمایی این مبردها در چگالی های متوسط قرار گرفت. در مرحله آخر با بکارگیری مدل ارایه شده برای هدایت گرمایی در سردکننده های رقیق و بررسی معادلات همبستگی ضریب دوم ویرال^{۱۳} هدایت گرمایی بر اساس نظریه رینواتر - فرند^{۱۴} [۱۳]، هدایت گرمایی این سیالات در چگالی های متوسط را محاسبه نموده و با داده های تجربی در دسترس مقایسه نمودیم.

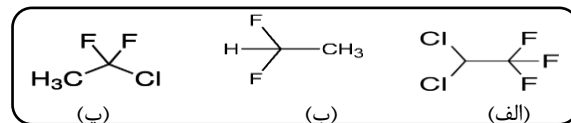
حقیقی^۸ و همکارانش نیز ویسکوزیته، ضریب نفوذ و نفوذ حرارتی ۵ مخلوط دوتایی کربن-مونوکسید گازهای نجیب را با استفاده از اصل حالت های متناظر و تکنیک وارونگی محاسبه کردند. بر اساس محاسبات بدست آمده مدل پتانسیل ابتدایی مورد نیاز برای تکنیک وارونگی را، پتانسیل لنارد-جونز در نظر گرفتند [۸]. در ادامه پژوهش های انجام شده بر روی مطالعه خواص انتقالی نفوذ، ویسکوزیته و نفوذ حرارتی توسط نظریه چپمن-انسکوگ^۹ و هدایت گرمایی توسط نظریه ی هابر^{۱۰} تعیین گردید و انحراف مقادیر محاسبه شده در محدوده ی دمایی (۱۰۰۰K - ۲۰۰) نسبت به مقادیر تجربی برای ویسکوزیته، نفوذ و هدایت گرمایی به ترتیب در حدود ۲٪، ۴٪ و ۸٪ است.

در این مطالعه نیک منش^{۱۱} و همکارانش، محاسبه ویسکوزیته، نفوذ، نفوذ حرارتی و هدایت گرمایی ۵ مخلوط گازی دوتایی شامل



را با استفاده از روش وارونگی بدست آوردند. مدل پتانسیل لنارد- جونز، مدل پتانسیل ابتدایی مورد استفاده در این تحقیق بود [۹].

هدف این تحقیق، دستیابی به یک مدل تئوری دقیق و مناسب برای محاسبه هدایت گرمایی سیالات R123, R142b و R152a در محدوده چگالی های پایین و متوسط است. مدل محاسباتی حاصل برای هدایت گرمایی سردکننده های مذکور، میتواند در طراحی بسیاری از مبدل های گرمایی و فریزرها و افزایش کارایی آنها و لذا پایدارتر کردن این فرایندها مورد استفاده قرار گیرد. ساختار مولکولی این سردکننده ها در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- ساختار مولکولی سرد کننده های (الف) R123، (ب) R152a و (ج) R142b

¹¹ Nikmanesh
¹² Collision integrals
¹³ Second virial coefficient
¹⁴ Rainwater-Friend theory

⁸ Haghghi
⁹ Chapman-Enskog
¹⁰ Huber

خواص انتقالی گازهای رقیق

محاسبه ضرایب انتقالی گازهای رقیق، با استفاده از نظریه جنبشی ساده گازها امکان پذیر است. در گازهای رقیق، فاصله طی شده بین دو برخورد متوالی، بسیار بیشتر از قطر مولکولی است و حرکت آزادانه مولکول‌ها، بیشترین سهم را در این انتقالات دارند.

محاسبه خواص انتقالی بر پایه حل معادله بولتزمن^{۱۵} توسط دو محقق به نامهای چپمن و انسکوگ امکان پذیر است. نتیجه نهایی نظریه چپمن-انسکوگ بیان ریاضی خواص انتقالی به صورت یکسری عبارات شناخته شده به نام انتگرال‌های برخورد، می باشد. انتگرال‌های برخورد با دینامیک برخوردهای دوتایی بین مولکولی مشخص می شود. در حقیقت تمام اطلاعات در خصوص پتانسیل بین مولکولی در انتگرال‌های برخورد نهفته است.

انتگرال‌های برخورد طبق روابط زیر به نیروهای بین مولکولی بستگی دارند.

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_m}^{\infty} \frac{r^{-2} dr}{(1 - (b^2/r^2) - [2u(r)/m\omega^2])^{1/2}} \quad (1)$$

$$Q^{(1)}(E) = 2\pi \left[1 - \frac{1+(-1)^l}{2(1+l)} \right]^{-1} \int_0^{\infty} (1 - \cos^l \theta) b db \quad (2)$$

$$\Omega^{(l,s)}(T) = [(s+1)! (k_B T)^{s+2}]^{-1} \int_0^{\infty} \left(Q^{(1)}(E) \times e^{\left(-\frac{E}{k_B T}\right)} E^{s+1} dE \right) \quad (3)$$

θ زاویه پراکندگی، $Q^{(1)}(E)$ سطح برخورد انتقال، b پارامتر برخورد، E انرژی جنبشی نسبی ذرات برخوردکننده، ω سرعت نسبی ذرات برخوردکننده است. l و s در Ω نیز فاکتورهای وزنی هستند که به مکانسیم انتقال توسط برخوردهای مولکولی مربوط می شوند [۱۴].

انتگرال برخورد کاهش یافته به صورت رابطه (۴) تعریف می شود. استفاده از مقادیر انتگرال‌های برخورد بدون واحد کاهش یافته، محاسبات خواص انتقالی را آسان تر می کند.

$$\Omega^{*(l,s)} = \Omega^{(l,s)} / \pi \sigma^2 \quad (4)$$

σ پارامتر فاصله است و فاصله بین مولکولی مربوط به پتانسیل صفر را نمایش می دهد.

برآورد دقیق خواص انتقالی در طراحی، شبیه سازی، بهینه سازی و کنترل فرایندهای حوزه شیمی بسیار حائز اهمیت است. خواصی نظیر نفوذ^{۱۶}، ویسکوزیته و هدایت گرمایی جز خواص انتقالی محسوب می شوند. آنها از قانون کلی که در آن سرعت انتقال متناسب با مشتق مکانی یک کمیت است پیروی می کنند.

یکی از پارامترهای مهم در زمینه انتقال گرما، هدایت گرمایی است که دانشمندان و محققان همواره سعی بر تعیین روش هایی برای اندازه گیری این پارامتر داشته اند. هدایت گرمایی، انتقال انرژی گرمایی به علت وجود گرادیان دمایی درون سیال است. این خاصیت با دما تغییر می کند و با استفاده از آزمایش تعیین می شود. واحد هدایت گرمایی در سیستم متریک، $\frac{W}{m.K}$ می باشد. نرخ انتقال در روش هدایت با استفاده از قانون فوریه^{۱۷} بیان می شود. در این حالت انتقال گرما از ناحیه دمای بالا به ناحیه دمای پایین شارش دارد. انرژی از طریق هدایت انتقال یافته و آهنگ انتقال گرما متناسب است با رابطه (۵) که در زیر آورده شده است.

$$Q = -kA \left(\frac{dT}{dx} \right) \quad (5)$$

که در آن Q نرخ حرارت با استفاده از روش هدایت، k ضریب هدایت حرارتی جسم، A سطح عمود بر جهت انتقال حرارت و $\frac{dT}{dx}$ گرادیان دما می باشد. ضریب انتقالی هدایت گرمایی به دما و چگالی وابسته است و معیاری از برهمکنش های بین مولکولی است. در حین برخوردهای بین مولکولی، مولکول هایی که انرژی بیشتری دارند انرژی خود را به مولکول های با انرژی کمتر می دهند. این انتقالات باعث می شوند که انرژی از ناحیه ای با دمای بالاتر به ناحیه ای با دمای پایین تر جریان یابد. در گازها، مولکول ها آزادانه حرکت می کنند و باهم برخورد می کنند و انرژی از طریق برخورد مولکول ها با هم منتقل می شود. در مایعات و جامدات مولکول ها آزادانه حرکت نمی کنند و انرژی مولکولی از طریق برخوردهای متوالی بین مولکول ها در لایه های مجاور، بدون آن که مولکول ها از نقطه ای به نقطه ای دیگر بروند، انتقال می یابند.

¹⁷ Fourier law

¹⁵ Boltzmann equation

¹⁶ Diffusion

$$\lambda = \frac{75}{64} \left(\frac{KT}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{f_{\lambda}}{\sigma^2 \Omega_{(2,2)}^*(T^*)} \quad (۸)$$

$$f_{\lambda} = 1 + \frac{1}{42} (8E^* - 7)^2 \quad (۹)$$

که f_{λ} ضریب اصلاحی هدایت گرمایی، $\Omega_{(2,2)}^*(T^*)$ انتگرال برخورد کاهیده نسبت به انتگرال برخورد کره سخت، T^* دمای کاهیده که برابرست با $\frac{KT}{\varepsilon}$ و σ پارامتر فاصله پتانسیل است. همچنین E^* طبق رابطه (۱۰) به دست می آید.

$$E^* = \frac{\Omega_{(2,3)}^*}{\Omega_{(2,2)}^*} \quad (۱۰)$$

با استفاده از پتانسیل عزیز و معادلاتی که توسط نجفی و همکارانش ارائه شده، معادله قابل استفاده برای کلیه دماها برای محاسبه $\Omega_{(2,2)}^*(T^*)$ به صورت رابطه (۱۱) است:

$$\Omega_{(2,2)}^*(T^*) = \exp \sum_0^6 a_i (\ln T^*)^i \quad (۱۱)$$

که ضرایب بسط عبارتند از:

$$a_0 = ۴ \times ۳۶۹^{-۱} \cdot ۱۰ \pm ۷/۸ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_1 = -۴ \times ۵۰۵^{-۱} \cdot ۱۰ \pm ۱/۳ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_2 = ۵ \times ۳۲۶^{-۲} \cdot ۱۰ \pm ۸/۱ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_3 = ۳ \times ۵۱۹^{-۲} \cdot ۱۰ \pm ۹/۲ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_4 = -۱/۷۵۱ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰ \pm ۴ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_5 = ۲ \times ۷۷۲^{-۳} \cdot ۱۰ \pm ۷ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

$$a_6 = -۱/۵۲۹ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰ \pm ۴/۳ \times ۴^{-۱} \cdot ۱۰$$

در واقع انتگرال برخورد کاهیده فقط تابعی از دمای کاهش یافته است [۱۵].

در گازهای چنداتمی، به دلیل وجود برخوردهای غیر الاستیک^{۱۸} که در اثر درجات آزادی درونی به وجود می آیند و همچنین غیرکروی بودن پتانسیل های برهمکنش، محاسبه هدایت گرمایی پیچیده تر از گازهای تک اتمی است. به بیانی دقیق تر، در مولکول های چنداتمی به علت وجود برخوردهای غیرالاستیک، انرژی جنبشی برخوردهای مولکولی پایسته نبوده اما تکانه و جرم همچنان پایسته باقی می ماند. بر این اساس ویسکوزیته و نفوذ چندان تحت تاثیر وجود درجات آزادی درونی قرار نمی گیرند. در حالیکه مقادیر هدایت گرمایی به اثرات غیرالاستیک بودن برخوردها ناشی از سهم

در گازهای با چگالی پایین، فاصله طی شده در حین دو برخورد متوالی بسیار بیشتر از قطر مولکولی است و حرکت آزادانه مولکول ها، بیشترین سهم را در این انتقالات دارند.

روش کلی برای بررسی خواص انتقالی سیالات چگال، بسط نظریه جنبشی مربوط به خواص انتقالی سیال رقیق است. یک روش مناسب، بسط خواص انتقالی به صورت یک سری توانی از چگالی عددی، مشابه معادله ویربال گازهای حقیقی می باشد. سری توانی که هدایت گرمایی را توصیف می کند به صورت رابطه (۶) نوشته می شود:

$$\bar{\lambda}(\rho, T) = \lambda_0(T) [1 + B_{\lambda}\rho + C_{\lambda}\rho^2 \ln \rho + \dots] \quad (۶)$$

نظریه جنبشی گازها قصد داشت خواص ماکروسکوپی گازها را بر اساس حرکت و برهمکنش بین مولکول ها تعیین کند. این نظریه بر پایه تابع توزیع ماکسول - بولتزمن بنا شده است و هدف اصلی آن، حل معادله بولتزمن است.

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(v_i \frac{\partial f_i}{\partial r} \right) + \left(\frac{X_i}{M_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial v_i} \right) = \sum \iiint (f_i f_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\varepsilon dv_j \quad (۷)$$

که X_i نیروهای خارجی احتمالی در سیستم، M_i جرم مولکولی گونه i ام، b پارامتر برخورد و g_{ij} سرعت نسبی اولیه است.

محاسبه خواص انتقالی بر پایه حل معادله بولتزمن توسط دو محقق به نام های چپمن و انسکوگ امکان پذیر است. آن ها ثابت کردند که خواص انتقالی گازها ی تک اتمی و مخلوط آنها به خواص مولکول ها وابسته است. نتیجه نهایی نظریه چپمن - انسکوگ بیان ریاضی خواص انتقالی به صورت یک سری عبارات شناخته شده به نام انتگرال های برخورد هستند. این عبارات بیان کننده دینامیک برخوردها هستند. چپمن و انسکوگ پیشنهاد کردند که خواص گازها تنها به پتانسیل جفت و دما وابسته است.

رابطه ای که چپمن و انسکوگ برای بیان هدایت گرمایی گازهای رقیق بیان کردند به صورت معادله (۸) است. شایان ذکر است که این رابطه بدون در نظر گرفتن سهم درجات آزادی درونی برای سیالات چنداتمی فرمولبندی شده است.

¹⁸ Inelastic collisions

رینواتر و فرند، مدل پتانسیل خام^{۱۹} لنارد - جونز^{۲۰} است که نجفی و همکارانش، با بهره‌گیری از پتانسیل واقعی هارتری فاک محاسبات خود را برای گازهای نادر و مولکولی تکرار کردند و نتایج این محاسبات توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی داشت [۹]. از این نظریه در چگالی‌های بالا استفاده نمی‌شود. زیرا در چگالی‌های بالا، جملات بعدی بسط نیز مهم است. کارایی این نظریه از نظر چگالی با کاهش دما کاهش می‌یابد، زیرا با کاهش دما وابستگی خواص انتقالی به چگالی زیاد شده و در نتیجه جملات بعدی بسط مهم می‌شوند. این نظریه را می‌توان به صورت رابطه زیر نوشت [۱۶]:

$$\lambda_{RF} = \lambda^{\circ} (1 + N_A \sigma^3 B_{\lambda}^* \rho) \quad (15)$$

که B_{λ}^* دومین ضریب ویریا کاهیده هدایت گرمایی در دمای کاهیده، σ فاصله ای که پتانسیل بین اتمی صفر می‌شود و λ° هدایت گرمایی در حد چگالی پایین است که توسط نظریه چپمن-انسکوگ محاسبه می‌شود.

طبق این نظریه B_{λ}^* به صورت رابطه زیر بدست می‌آید:

$$B_{\lambda}^* = B_{\lambda}^{(2)*} + B_{\lambda}^{(3)*} + B_{\lambda}^{(M-D)*} \quad (16)$$

که $B_{\lambda}^{(2)*}$ سهم برخوردها مونومر - مونومر، $B_{\lambda}^{(3)*}$ اثر وجود ذره سوم در برخوردهای مونومر - مونومر و $B_{\lambda}^{(M-D)*}$ سهم برخوردهای مونومر - دایمر است [۱۷-۱۹].

برای ارزیابی دقیق سهم دو مونومری $B_{\lambda}^{(2)*}$ ، نظریه رینواتر - فرند شامل نتایجی از نظریه جنبشی گازهای چگال می‌باشد، بدین معنی که علاوه بر اثرات انتقالی برخورد، اثرات جنبشی را نیز در نظر می‌گیرد. برای محاسبه مقادیر قابل قبول برای $B_{\lambda}^{(2)*}$ ، رینواتر نتایج برخی محققین را توسعه داد، به این ترتیب که اولاً دینامیک دو ذره ای را برای پتانسیل‌های واقعی‌تر مانند پتانسیل لنارد - جونز در نظر گرفت و ثانیاً از اثرات شرایط مرزی برای حل انتگرال‌های پیچیده توصیف‌کننده سهم دو مونومری صرف نظر کرد. با افزایش چگالی، احتمال برخورد‌های سه تایی به طور هم‌زمان نیز وجود دارد. وجود ذره سوم حتی می‌تواند بر توزیع مکانی برخورد‌های دو تایی اثر گذاشته و به عنوان یک عامل وابسته

درجات آزادی درونی وابسته هستند. به این ترتیب، هدایت گرمایی گازهای چنداتمی را می‌توان به صورت مجموع سهم‌های ناشی از درجات آزادی انتقالی و درونی در نظر گرفت.

$$\lambda^{\circ} = \lambda_{tr}^{\circ} + \lambda_{int}^{\circ} \quad (12)$$

که λ° هدایت گرمایی گاز در چگالی پایین، λ_{tr}° سهم درجات آزادی انتقالی هدایت گرمایی در چگالی پایین و λ_{int}° سهم درجات آزادی درونی هدایت گرمایی در چگالی پایین است [۱۳].

سهم درونی هدایت گرمایی طبق معادله ریاضی زیر بدست می‌آید:

$$\lambda_{int} = \sum_{i=0}^4 a_i (T)^i \quad (13)$$

که با همبستگی داده‌های تجربی، می‌توان این معادله را بهینه نمود.

نظریه چپمن - انسکوگ فقط سهم درجات آزادی انتقالی در چگالی پایین را محاسبه می‌کند. برای محاسبه هدایت گرمایی باید سهم درجات آزادی درونی را محاسبه و به سهم درجات آزادی انتقالی که به وسیله نظریه چپمن - انسکوگ محاسبه شده، افزود.

از آنجایی که در معادله بولتزمن تنها برخوردهای دو تایی در نظر گرفته می‌شود، پس نتایج نظریه خواص انتقالی برای گازهای رقیق قابل استفاده است. اما این نظریه در چگالی‌های بالا که برخوردهای سه تایی هم مهم هستند، معتبر نیست. پس این نظریه به تنهایی نمی‌تواند هدایت گرمایی گازهای چنداتمی را محاسبه کند.

نظریه رینواتر - فرند

یک روش مناسب برای بررسی خواص انتقالی سیالات چگال، بسط خواص انتقالی به صورت یک سری توانی از چگالی عددی، مشابه معادله ویریا گازهای حقیقی می‌باشد. سری توانی که هدایت گرمایی را توصیف می‌کند به صورت رابطه (۱۴) نوشته می‌شود:

$$\bar{\lambda}(\rho, T) = \lambda_0(T) [1 + B_{\lambda} \rho + C_{\lambda} \rho^2 \ln \rho + \dots] \quad (14)$$

نظریه رینواتر - فرند کامل‌ترین نظریه برای محاسبه خواص انتقالی در چگالی‌های متوسط می‌باشد. مبنای محاسبات

²⁰ Lennard- Jones

¹⁹ Crude

ضریب دوم ویریل هدایت گرمایی به برهمکنش های بین مولکولی و دمای کاهیده وابسته است. رینواتر - فرند با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز، B_{λ}^* را تعیین کرد. همچنین نجفی و همکارانش با استفاده از پتانسیل های واقع بینانه عزیز در گازهای تک اتمی، برای B_{λ}^* معادله (۱۷) را در محدوده $0.5 < T^* < 5$ ارائه دادند:

$$B_{\lambda}^* = \sum_{i=0}^n a_i (T^*)^{-i} \quad (17)$$

معادله بالا را می توان برای تعیین ضریب دوم ویریل هدایت گرمایی در گازهای چنداتمی نیز بکار برد [۲۶ و ۲۷]

بحث و نتیجه گیری

۱- بررسی پارامترهای پتانسیل برهمکنش بین مولکولی

و اثرات درجات آزادی درونی در هدایت گرمایی

بسیاری از خواص انتقالی مواد به پتانسیل بین مولکولی جفت ، وابسته هستند. بر اساس نظریه جنبشی و مکانیک آماری، می توان یک عبارت تئوری برای انرژی پتانسیل بین مولکولی جفت ارائه داد. برای استفاده از تابع پتانسیل بین مولکولی جفت در محاسبات، لازم است که یک مدل پتانسیل مشخص با پارامترهایی از قبیل $\frac{E}{k}$ و σ تعریف کرد. این پارامترها قابل تنظیم می باشند و می توان نتایج مربوط به محاسباتی که با چندین دسته از پارامترها انجام شده است را با داده های تجربی مقایسه کرد و پارامترهای بهینه را برای هر یک از سردکننده ها به دست آورد.

در اینجا، برای هر کدام از سردکننده ها، به بررسی دو دسته از پارامترهای پتانسیل بین مولکولی پرداختیم و میزان دقت هر کدام از پارامترها را در محاسبه هدایت گرمایی در چگالی های پایین (0.5 mol/l -) سنجیدیم. سپس پارامترهای پتانسیل بهینه را برای محاسبه هدایت گرمایی در محدوده چگالی های متوسط (2 mol/l - 0.5) به کار بردیم. شایان ذکر است که چگالی 0.5 mol/l در سردکننده های R123، R142b و R152a به ترتیب معادل $50/247$ ، $76/465$ ، و

به چگالی در سطح مقطع برخورد های دوتایی وارد می گردد. برخورد های سه تایی علاوه بر این، بر انتقال اندازه حرکت در یک سیال اثر می گذارد. سهم های دو مونومری و سه مونومری از پتانسیل لنارد - جونز و بدون استفاده از داده های تجربی محاسبه می شوند ولی سهم مونومر - دایمر از داده های تجربی ضرایب اول چگالی به دست می آیند.

سهم مونومر - مونومر ابتدا توسط اسنایدر^{۲۱} و همکارانش با به کار بردن تصحیح معادله بولتزمن، ارائه شده توسط بوگولیووف^{۲۲} و گرین^{۲۳} برای پتانسیل های دافعه به دست آمد. رینواتر - فرند این جمله را برای پتانسیل های حقیقی که نیروهای جاذبه را نیز در برداشتند یعنی پتانسیل لنارد - جونز محاسبه نمودند [۲۱-۱۷]. در این کار، انتگرال گیری فقط بر روی سهم برخوردهای دوتایی در فضای فاز دو - ذره ای انجام شد. تأثیر حالت های مقید و شبه پایدار در $B_{\lambda}^{(MD)*}$ ظاهر می شود. تجزیه و تحلیل سهم برخوردهای سه تایی بر نتایج حاصل از مدل پتانسیل کره سخت مبتنی است که توسط انسکوگ معرفی شد. شکل دقیق تر این تصحیح توسط هافمن^{۲۴} - کرتیس^{۲۵} به دست آمد که یک تخمین منطقی را برای محاسبه این جمله در مورد پتانسیل های واقعی ارائه می - کرد. هافمن - کرتیس، بنت^{۲۶} - کرتیس و رینواتر - فرند هر کدام این سهم را به صورت عددی محاسبه کردند [۲۵-۲۲]. محاسبه سهم مونومر - دایمر برای خواص انتقالی، بر پایه نظریه جنبشی مخلوط های گازی دوتایی رقیق صورت می - پذیرد. با فرض داشتن پتانسیل برهم کنش بین مونومرها و دایمرها و به کار گیری نظریه انسکوگ - چپمن برای مخلوط ها، می توان این سهم را محاسبه نمود. به علت پیچیدگی برخوردهای واقعی مونومر - ، توسط استوگرین - هرشفیلدر^{۲۷} تقریبی برای ساده تر کردن مسأله اعمال شد که براساس این تقریب، پتانسیل برهم کنش مونومر - دایمر از نظر ریاضی شکل یکسانی با پتانسیل های مونومر - مونومر دارد اما پارامترهای آن متفاوت است [۱۴].

²⁵ Curtiss

²⁶ Bennett

²⁷ Stogryn and Hirschfelder

²¹ Snider

²² Bogolioubov

²³ Green

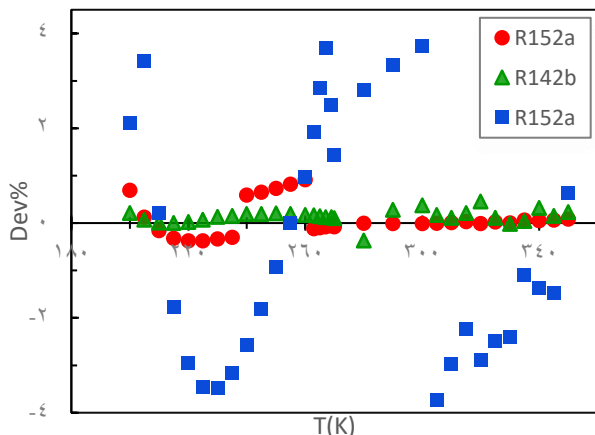
²⁴ Hoffman

فرایند تا جاییکه همگرایی حاصل شود، انجام شد و میزان نرخ یادگیری 10×10^{-5} در نظر گرفته شد. (۳۵). در جدول ۲ مقادیر پارامترهای بهینه سهم درجات آزادی درونی هدایت گرمایی برای هر سردکننده گزارش شده است.

جدول ۲- مقادیر پارامترهای بهینه سهم درجات آزادی درونی هدایت گرمایی در سردکننده های R123, R142b و R152a

پارامتر بهینه λ_{int}°	R123	R142b	R152a
a ₀	$9/3^{-1} \times 358$	$3/2^{-1} \times 764$	$3/2^{-1} \times 263$
a ₁	$1/3^{-1} \times 327$	$-6/4^{-1} \times 29$	$-6/4^{-1} \times 897$
a ₂	$6/6^{-1} \times 84$	$3/6^{-1} \times 985$	$4/6^{-1} \times 92$
a ₃	$1/8^{-1} \times 477$	$-1/8^{-1} \times 65$	$-1/8^{-1} \times 281$
a ₄	$1/11^{-1} \times 179$	$1/11^{-1} \times 92$	$1/11^{-1} \times 332$

در نمودار ۱ میزان درصد انحراف هدایت گرمایی محاسباتی بر اساس بهترین پارامترهای پتانسیل نسبت به مقادیر تجربی برای هر کدام از سردکننده های R123, R142b و R152a نشان داده شده است.



نمودار ۱- درصد انحراف هدایت گرمایی محاسباتی با داده های تجربی [۲۹ - ۳۴] بر اساس دسته بهینه پارامترهای پتانسیل برهمکنش برای سردکننده های R123, R142b و R152a در محدوده دمایی (۳۵۰ K - ۲۰۰) و محدوده چگالی های رقیق (۰/۵ mol/l - ۰)

نتایج محاسباتی نشان داد که مقدار انحراف مطلق میانگین^{۳۱} (AAD) به دست آمده برای هدایت گرمایی سردکننده

$30/025 \text{ Kg/m}^3$ است و چگالی 2 mol/l در این سردکننده ها در سیستم متریک به ترتیب معادل $305/862$ ، $200/99$ و $132/102 \text{ Kg/m}^3$ می باشد.

در جدول (۱) مقادیر پارامترهای پتانسیل برای هر سردکننده گزارش شده است. شایان ذکر است که پارامترهای پتانسیل مذکور با استفاده از روش های نیمه تجربی وارونگی داده های خواص انتقالی و نیز با استفاده از محاسبات شیمی کوانتومی و روش های آغازین^{۲۸} نظیر خوشه های جفت شده^{۲۹} (۲۸) برای سیالات موردنظر به دست آمده اند.

جدول ۱- مقادیر پارامترهای پتانسیل بر همکنش بین مولکولی در سردکننده های R123, R142b و R152a

پارامتر پتانسیل	R123 [29,30]		R142b [31,32]		R152a [33,34]	
	دسته اول	دسته دوم	دسته اول	دسته دوم	دسته اول	دسته دوم
$\frac{\epsilon}{K}$	۳۳۶/۲	۲۷۵/۱	۲۷۸/۲	۳۶۳	۳۵۴/۸	۳۳۴
$\sigma(\text{nm})$	۰/۵۸۷	۰/۵۹۰۹	۰/۵۳۶	۰/۵۱۸	۰/۴۶۱۱	۰/۴۶۷۴

همانطور که گفته شد، نظریه چپمن - انسکوگ تنها سهم درجات آزادی انتقالی هدایت گرمایی سیالات رقیق را محاسبه می کند. در واقع برای محاسبه هدایت گرمایی سیالات سردکننده در محدوده چگالی های رقیق و متوسط، باید سهم درجات آزادی درونی را محاسبه و به سهم درجات آزادی انتقالی اضافه کنیم.

λ_{int}° با استفاده از داده های تجربی موجود [۲۹-۳۴] در یک محدوده دمایی به دست می آید. سپس مقادیر محاسباتی λ_{int}° با استفاده از روش حداقل مربعات با یک مدل ریاضی مناسب در نرم افزار متلب برازش می شود و با مقایسه داده های محاسباتی با نتایج تجربی، پارامترهای بهینه مدل بدست می آید. بدین منظور روش گرادیان کاهشی^{۳۰} برای کمینه سازی مجموع مربعات خطا، تعیین جهت کاهش خطا و تکرار

³⁰ Gradient descent

³¹ Average absolute deviation

²⁸ ab-initio

²⁹ Coupled cluster

R123 بر اساس دسته اول و دوم پارامترهای پتانسیل به ترتیب برابر با ۲/۶۶٪ و ۲/۳۷٪ می باشد. مقادیر درصد انحراف طبق رابطه زیر تعریف می شود.

$$\text{Deviation} = \frac{\lambda_{\text{cal}} - \lambda_{\text{exp}}}{\lambda_{\text{exp}}} \times 100 \quad (18)$$

از آنجاییکه دسته دوم پارامترها دارای میانگین درصد انحراف کمتری است پس به عنوان مدل مطلوب برای محاسبه هدایت گرمایی سیال R123 در چگالی های پایین در نظر گرفته می شود. در سردکننده R142b نیز میزان AAD حاصل از دسته اول و دوم پارامترهای پتانسیل به ترتیب برابر با ۰/۴۷۲٪ و ۰/۱۶۸٪ می باشد و دسته دوم پارامترها به عنوان دسته بهینه در نظر گرفته می شود. مقادیر AAD در سردکننده R152a نیز براساس دسته اول و دوم پارامترهای پتانسیل به ترتیب برابر با ۰/۲۹۳٪ و ۰/۱۸۲٪ می باشد و چون دسته دوم میزان AAD کمتری دارد به عنوان مدل بهینه انتخاب می شود.

علاوه بر این، آنالیز نمودارهای انحراف و مقادیر انحراف مطلق میانگین همگی حاکی از دقت مناسب مقادیر محاسباتی و در محدوده ی ناپیچینی تجربی این خاصیت است.

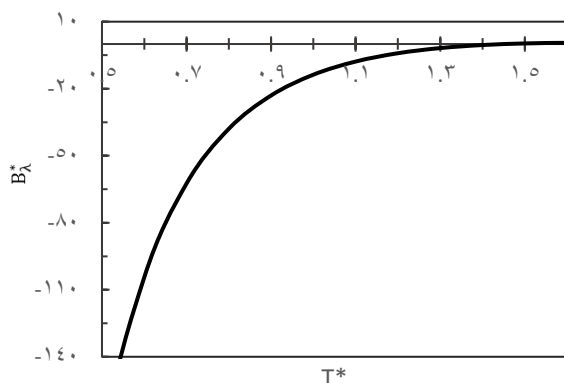
۲-مدلسازی وابستگی مرتبه اول هدایت گرمایی سردکننده ها به چگالی

همانطور که گفته شد، با استفاده از نظریه رینواتر - فرند می توان هدایت گرمایی سیالات سردکننده R123, R142b و R152a را در محدوده نیمه چگال محاسبه کرد. در این نظریه میزان وابستگی هدایت گرمایی به چگالی، با عبارت B_{λ}^* بیان می شود. B_{λ}^* اولین مرتبه تصحیح روی وابستگی هدایت گرمایی نسبت به چگالی است و به آن ضریب دوم ویریا هدایت گرمایی کاهش یافته نیز می گویند. در این تحقیق با استفاده از روش حداقل مربعات برای دو مدل معادله همبستگی B_{λ}^* میزان ضرایب a_i طبق رابطه ۱۷ محاسبه و یک مدل مناسب برای محاسبه B_{λ}^* ارائه شد. لازم به ذکر است که در معادله مذکور برای محاسبه B_{λ}^* سه جمله اول بسط جهت بهینه سازی پارامترها مورد توجه قرار گرفت. در جدول (۳) ضرایب B_{λ}^* معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برای هر سردکننده گزارش شده است.

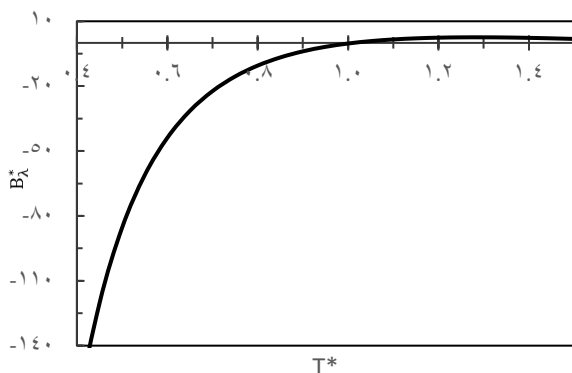
جدول ۳- مقادیر ضرایب معادله همبستگی بهینه ضریب دوم ویریا هدایت گرمایی سردکننده های R123, R142b و R152a

پارامتر B_{λ}^* بهینه	R123	R142b	R152a
a_0	$-3 \times 10^{-1} / 451$	$-3 \times 10^{-1} / 335$	$-1 \times 10^{-1} / 491$
a_1	$1 \times 10^{-2} / 149$	$9 \times 10^{-1} / 218$	$4 \times 10^{-1} / 165$
a_2	$-9 \times 10^{-1} / 412$	$-5 \times 10^{-1} / 911$	$-2 \times 10^{-1} / 676$

در نمودارهای ۲ تا ۴، شکل کلی رفتار منحنی معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برحسب دمای کاهش یافته برای هر کدام از سردکننده ها نمایش داده شده است.



نمودار ۲- رفتار منحنی معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برحسب دمای کاهش یافته برای سردکننده R123



همبستگی نوع اول و دوم B_{λ}^* به ترتیب برابر با ۰/۲۸۶٪ و ۰/۵۲۲٪ می باشد. با توجه به اینکه معادله همبستگی نوع اول B_{λ}^* دارای AAD پایین تری است پس به عنوان مدل مناسب برای محاسبه هدایت گرمایی سیال R123 در چگالی های متوسط در نظر گرفته می شود. در سردکننده R142b نیز میزان AAD حاصل از معادله همبستگی نوع اول و دوم B_{λ}^* به ترتیب برابر با ۰/۰۴۶۹٪ و ۲/۰۹۸٪ می باشد و معادله همبستگی نوع اول به عنوان معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* در نظر گرفته می شود.

مقادیر AAD در سردکننده R152a نیز براساس معادله همبستگی نوع اول و دوم B_{λ}^* به ترتیب برابر با ۰/۷۸۱٪ و ۱/۲۶۹٪ می باشد و چون معادله همبستگی نوع اول میزان AAD کمتری دارد به عنوان مدل بهینه انتخاب می شود.

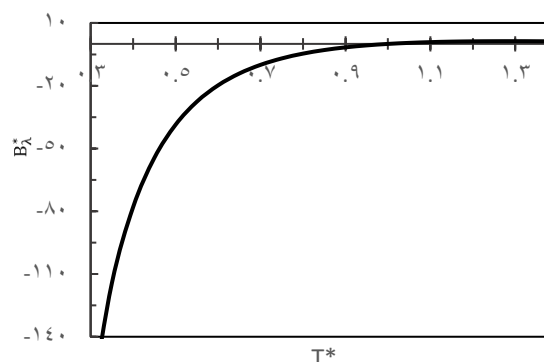
نتیجه گیری

در این کار تحقیقاتی هدف اصلی ما ، محاسبه هدایت گرمایی سیالات سردکننده R123، R142b، R152a در محدوده چگالی های پایین و متوسط با استفاده از فرمولبندی یا نظریه های مبتنی بر ترمودینامیک آماری است. یک مدل نظری مناسب برای محاسبه انتگرال های برخورد، ضریب دوم و بریال هدایت گرمایی بر اساس نظریه چپمن - انسکوگ و رینواتر - فرند ارائه می شود به طوری که دقت مدل های نظری پیشنهادی در محدوده ی نایقینی در اندازه گیری های تجربی می باشد.

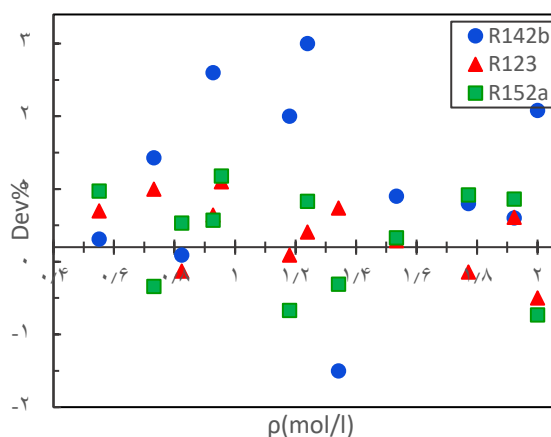
در ابتدا طبق نظریه چپمن - انسکوگ و با استفاده از دو دسته پارامترهای پتانسیل ، سهم انتقالی و درونی هدایت گرمایی محاسبه و با داده های تجربی در دسترس مقایسه شد. در این مرحله، عبارات همبستگی مناسب برای محاسبه سهم درونی هدایت گرمایی به دست آمد. مقایسه ی نتایج با داده های تجربی نشان داد که برای هریک از سردکننده ها، کدام دسته از پارامترهای پتانسیل بیشترین تطابق را با داده های تجربی دارد و به عنوان مدل بهینه برای محاسبه هدایت گرمایی این سیالات در محدوده چگالی های پایین معرفی گردید.

در گام بعد، با استفاده از نظریه رینواتر - فرند و پارامترهای بهینه حاصل از محاسبات چگالی های پایین و متوسط، دو

نمودار ۳- رفتار منحنی معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برحسب دمای کاهش یافته برای سردکننده R142b



نمودار ۴- رفتار منحنی معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برحسب دمای کاهش یافته برای سردکننده R152a



نمودار ۵- درصد انحراف هدایت گرمایی محاسباتی از مقادیر تجربی [۳۴ - ۲۹] بر اساس معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* برای سردکننده های نیمه چگال R123، R142b و R152a در محدوده دمایی (۲۵۰ - ۴۵۰ K) و محدوده چگالی های متوسط (۰/۵ - ۲ mol/l)

نمودار ۵ میزان درصد انحراف هدایت گرمایی محاسباتی طبق معادله همبستگی بهینه B_{λ}^* نسبت به مقادیر تجربی بر حسب چگالی را نشان می دهند.

نتایج محاسباتی نشان داد که مقادیر AAD به دست آمده برای هدایت گرمایی سردکننده های نیمه چگال مذکور همگی از دقت مناسب و در محدوده نایقینی تجربی است. مقدار انحراف مطلق میانگین برای مقادیر هدایت گرمایی در سردکننده R123 در محدوده نیمه چگال بر اساس معادله

[7] Ghatee M H., Papari M M., Boushehri A., Direct Calculation of CH₄-He Interaction Potential from the Extended Principle of Corresponding States, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*. **1997**, 70(11), 2643-2646.

[8] Haghighi B., Fathabadi M., Papari M M., Calculation of the transport properties of CO-noble gases mixtures at low density by the semi-empirical inversion method, *Fluid phase equilibria*. **2002**, 203(1-2), 205-225.

[9] Nikmanesh S., Moghadasi J., Papari M M., Calculation of transport properties of CF₄+ noble gas mixtures, *Chinese Journal of Chemical Engineering*. **2009**, 17(5), 814-821.

[10] Moghadasi J., Mohammad-Aghaie D., Papari M M., Predicting gas transport coefficients of alternative refrigerant mixtures, *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2006**, 45(26), 9211-9223.

[11] Nguyen Q., Beni M H., Parsian A., Malekahmadi O., Karimipour A., Discrete ordinates thermal radiation with mixed convection to involve nanoparticles absorption, scattering and dispersion along radiation beams through the nanofluid, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. **2021**, 143(3), 2801-2824.

[12] Yang S., Tian J., Jiang H., Corresponding state principle based correlation for the thermal conductivity of saturated refrigerants liquids from T_{tr} to 0.90 T_c, *Fluid Phase Equilibria*. **2020**, 509, 112459-112465.

[13] Hosseinejad T., Behnejad H., Viscosity and thermal conductivity of some refrigerants at moderate and high densities on the basis of Rainwater-Friend theory and the corresponding states principle, *Fluid Phase Equilibria*. **2008**, 263(1), 85-95.

[14] Hirschfelder J O., *Intermolecular forces* (Vol. 24), John Wiley & Sons. **2009**.

[15] O'hara H., Smith F J., Transport collision integrals for a dilute gas, *Computer Physics Communications*. **1971**, 2(1), 47-54.

[16] Bzowski J., Kestin J., Mason E A., Uribe F J., Equilibrium and transport properties of gas mixtures at low density: Eleven polyatomic gases and five noble gases, *Journal of Physical and*

نوع معادله همبستگی برای ضریب دوم ویریل هدایت گرمایی کاهش یافته ارائه شد. دقت این معادلات نیز از طریق مقایسه با داده های تجربی ارزیابی گردید. تحلیل انحراف نتایج محاسباتی برای ضریب دوم ویریل هدایت گرمایی با داده های تجربی، منجر به ارائه مدل نظری مناسب برای این کمیت در هر یک از سیالات سرد کننده گردید. در مرحله نهایی، مدل ریاضی همبستگی ضریب دوم ویریل هدایت گرمایی را برای هر یک از سردکننده ها به کار برده و هدایت گرمایی این سیالات را در محدوده چگالی های متوسط محاسبه و با داده های تجربی مورد ارزیابی و مقایسه قرار دادیم.

قدردانی و تشکر

نویسندگان این پژوهش از دانشگاه الزهرا (س) جهت امکانات و تجهیزاتی که برای انجام این پروژه ارایه داده است، کمال قدردانی را دارد.

منابع

[1] Mohanraj M., Jayaraj S., Muraleedharan C., Environment friendly alternatives to halogenated refrigerants—A review, *International Journal of Greenhouse Gas Control*. **2009**, 3(1), 108-119.

[2] Sekhar S J., Lal D M., HFC134a/HC600a/HC290 mixture a retrofit for CFC12 systems, *International Journal of Refrigeration*. **2005**, 28(5), 735-743.

[3] Wongwises S., Chimres N., Experimental study of hydrocarbon mixtures to replace HFC-134a in a domestic refrigerator, *Energy Conversion and Management*. **2005**, 46(1), 85-100.

[۴] موسوی نائینیان، س.م. مواد سرمازا و وضعیت میردها در قرن بیست و یکم، نشریه انرژی ایران، جلد ۹ (شماره ۲۳)، ۱۳۸۴، ۴۴-۵۴.

[5] Maitland G C., Mason E A., Viehland L A., Wakeham W A., A justification of methods for the inversion of gas transport coefficients, *Molecular Physics*. **1978**, 6(3), 797-816.

[6] Maitland G., Rigby M., Smith E., Wakeham W., Henderson D., Intermolecular forces: their origin and determination, *Clarendon Press, Oxford*. **1981**.

- artificial neural network, *Frontiers in chemistry*. **2017**, 5, 99-107.
- [28] Hellmann R., Jäger B., and Bich E., State-of-the-art ab initio potential energy curve for the xenon atom pair and related spectroscopic and thermophysical properties, *J. Chem. Phys.* **2017**, 147, 034304.
- [29] Tsvetkov O B., Laptev Y A., Asambaev A G., Thermal conductivity of refrigerants R123, R134a, and R125 at low temperatures, *International Journal of Thermophysics*. **1994**, 15(2), 203–214.
- [30] Mahbubul I M., Saidur R., Amalina M A., Investigation of viscosity of R123-TiO₂ nanorefrigerant, *Proceedings of Regional Tribology Conference 2011: RTC*. **2011**, 1.
- [31] Saleh B., Wendland M., Screening of pure fluids as alternative refrigerants, *International Journal of Refrigeration*. **2006**, 29(2), 260–269.
- [32] Kim S H., Kim D S., Kim M S., Ro S T., The thermal conductivity of R22, R142b, R152a, and their mixtures in the liquid state, *International Journal of Thermophysics*. **1993**, 14(4), 937–950.
- [33] Vega C., Saager B., Fischer J., Molecular dynamics studies for the new refrigerant R152a with simple model potentials, *Molecular Physics*. **1989**, 68(5), 1079–1093.
- [34] Krauss R., Weiss V C., Edison T A., Sengers J V, Stephan K., Transport properties of 1, 1-difluoroethane (R152a), *International Journal of Thermophysics*. **1996**, 17(4), 731–757.
- [35] Yan X. and Gang Su X., *Linear Regression Analysis: Theory and Computing*, World Scientific Publishing Co., Inc., **2009**.
- Chemical Reference Data*. **1990**, 19(5), 1179–1232.
- [17] Snider R F., Curtiss C F., Kinetic theory of moderately dense gases, *The Physics of Fluids*. **1958**, 1(2), 122–138.
- [18] Snider R F., McCourt F R., Kinetic Theory of Moderately Dense Gases: Inverse Power Potentials, *The Physics of Fluids*. **1963**, 6(7), 1020–1025.
- [19] Snider R F., Curtiss C F., Kinetic Theory of Moderately Dense Gases: Rigid Sphere Limit, *The Physics of Fluids*. **1960**, 3(6), 903–904.
- [20] Bogoliubov N N., Problems of Dynamical Theory in Statistical Physics, *J. Phys.(USSR)*. **1946**, 10, 256-261.
- [21] Herrmann S., Vogel E., Viscosity and Density of Normal Butane Simultaneously Measured at Temperatures from (298 to 448) K and at Pressures up to 30 MPa Incorporating the Near-Critical Region., *Journal of Chemical & Engineering Data*. **2015**, 60(12), 3703-3720.
- [22] Abbaspour M., Transport, thermodynamic, and structural properties of fluid ammonia using a new intermolecular potential: The inversion method and molecular dynamics simulation, *Chemical Physics*. **2011**, 389(1-3), 121-127.
- [23] Waldrop J M., Song B., Patkowski K., Wang X., Accurate ab initio potential for the krypton dimer and transport properties of the low-density krypton gas, *The Journal of chemical physics*. **2015**, 142(20), 204307-204313.
- [24] Bastea S., Transport properties of dense fluid argon, *Physical Review E*. **2003**, 68(3), 031204-031211.
- [25] Teske V., Buttig D., Vogel E., The viscosity of triethylamine vapor at low densities and in the saturated vapor phase, *Fluid Phase Equilibria*. **2010**, 293(2), 190-195.
- [26] Najafi B., Araghi R., Rainwater J C., Alavi S., Snider R F., Prediction of the thermal conductivity of gases based on the Rainwater-Friend theory and a new corresponding states function, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. **2000**, 275(1–2), 48–69.
- [27] Ghaderi F., Ghaderi A H., Ghaderi N., Najafi B., Prediction of the thermal conductivity of refrigerants by computational methods and