

生物质甘油醚类调和燃料的QSPR研究

李 浔, 贺登辉, 徐 艳, 舒逢遥, 卢 思

(长沙理工大学化学与生物工程学院, 长沙 410004)

摘 要: 基于距离矩阵建立单拓扑指数 X , 根据 Grumberg-Nissan 等公式建立并运用新的混合拓扑指数 G 对甘油醚类调和燃料的相关理化性质(密度、运动粘度、低热值)进行回归分析, 建立定量结构-性质关系(QSPR)模型。所建 QSPR 模型皆具有良好的稳定性与预测能力, 能较好地反映甘油醚类调和燃料的相关理化性质的变化规律。

关键词: 甘油醚; 生物质; 调和燃料; 定量结构-性质关系; 拓扑指数

中图分类号: O641

文献标识码: A

0 引 言

日趋严重的能源问题推动了可再生能源-生物柴油在欧美的大规模商业化生产, 中国《可再生能源中长期发展规划》具体的发展目标是: 到 2020 年生物柴油的年生产能力达到 200 万 t。迅速发展的生物柴油市场使其生产过程中的副产物-生物质甘油出现相对过剩, 为生物质粗甘油寻找新的利用途径已备受关注^[1]。甘油催化制备叔丁基甘油醚是甘油利用的一个重要途径, 叔丁基甘油醚可作为良好的含氧生物燃料添加剂^[2], 但甘油催化制备叔丁基甘油醚的反应转化率和选择性均较低^[3,4], 研究表明可考虑将甘油催化制备叔丁基甘油醚反应体系原料、产物以及副产物处理后与汽油组成甘油醚类调和燃料, 另辟生物质粗甘油利用的新途径。甘油醚类调和燃料在利用过程中理化性能指标要求高, 但甘油醚类调和燃料组份多, 因此理清甘油醚类调和燃料的组份与理化性能指标之间的内在关系能较好地指导甘油醚类调和燃料制备和利用。

定量结构-性质关系(quantitative structure-property relationship, QSPR)运用理论计算方法和各种统计学方法研究有机化合物的各种理化性质和生物活性与其分子结构之间的定量关系。化合物

一些主要的理化性质, 如沸点、熔点、溶解度、表面张力等都可运用 QSPR 方法来描述预测。拓扑指数可反映化合物分子的相关结构信息, 并数值化。因为计算方法简便、受限制小等优点, QSPR 研究中作为分子结构的数学描述符的拓扑指数法也是目前较热门的研究领域之一^[5,6]。拓扑指数法对于脂肪烷烃的结构性质研究相对较多^[7,8], 但对于生物质能源的研究相对较少^[9,10]。本文建立新的混合拓扑指数 G , 用其表征化合物的结构特征, 并运用线性回归分析方法将混合拓扑指数 G 与生物质调和燃料的密度、运动粘度等理化性质进行定量构效关系研究, 对甘油醚类调和燃料制备和利用有较好指导意义, 进一步拓宽生物质甘油的利用途径。

1 甘油醚-汽油调和燃料的制备

以甘油醚体系为汽油添加剂, 固定汽油的含量, 改变添加剂的含量, 制备相应的调和燃料, 并检测相应理化性质。

1) 甘油与异丁烯在实验室自制催化剂的催化下制备得到甘油醚体系, 留取待用。

2) 常温下, 量取 10 mL 汽油(93#), 固定汽油的含量, 根据汽油的体积分量的 1%~25% 分别加入甘油醚体系, 制备得到相应的甘油醚-汽油调和燃料, 并检测相关理化性质数据^[11], 如表 1 所示。

收稿日期: 2016-09-22

基金项目: 国家自然科学基金(21376241)

通信作者: 李 浔(1972—), 男, 博士、教授, 主要从事生物质液体燃料方面的研究。lixun126@126.com

表1 甘油醚-汽油调和燃料理化性质

Table 1 Physical and chemical properties of glycerol ether-gasoline blended fuels

| 序号 | 甘油基/ % | 密度/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ | 运动粘度/ $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ | 低热值/ $\text{kJ} \cdot \text{g}^{-1}$ |
|-----|-----------|--|--|---|
| T1 | 1 | 0.745 | 0.82 | 45.86 |
| T2 | 2 | 0.758 | 0.85 | 45.80 |
| T3 | 3 | 0.769 | 0.89 | 45.62 |
| T4 | 4 | 0.782 | 0.95 | 45.29 |
| T5 | 5 | 0.799 | 0.99 | 45.05 |
| T6 | 6 | 0.818 | 1.08 | 45.00 |
| T7 | 7 | 0.823 | 1.22 | 44.87 |
| T8 | 8 | 0.828 | 1.35 | 44.73 |
| T9 | 9 | 0.836 | 1.48 | 44.59 |
| T10 | 10 | 0.845 | 1.60 | 44.45 |
| T11 | 15 | 0.865 | 2.05 | 44.05 |
| T12 | 20 | 0.935 | 2.96 | 42.55 |
| T13 | > 25% | | 不互溶 | |

2 混合拓扑指数 G 的建立

本文在调和燃料制备过程中,固定汽油含量,仅改变添加剂甘油醚的相对含量,所以拟运用甘油醚添加剂的混合拓扑指数 G 与甘油醚-汽油调和燃料的理化性质进行线性拟合,建立 QSPR 模型,混合拓扑指数 G 具体计算步骤如下文。

2.1 单拓扑指数 X 的计算

根据甘油醚化体系之中各物质的分子结构隐氢图,得到各物质的距离矩阵 D ,因体系中醇类物质、醚类物质含 O 原子,所以引用相对键强和 R_i 来修饰距离矩阵 D [12]。相对键长 f_{ij} 定义为原子间的真实键长与 C—C 的键长比值,如 C—C 的相对键长为 $0.154/0.154=1$, C—O 的相对键长为 $0.134/0.154=0.8701$ 。相对键能 e_{ij} 定义为原子间的真实键能与 C—C 的键能的比值,如 C—C 的相对键能为 $345.6/345.6=1$, C—O 的相对键能为 $357.9/345.6=1.035$ 。相对键强 r_{ij} 的定义如式(1)所示:

$$r_{ij} = \begin{cases} e_{ij}/f_{ij} \\ 0 (i=j) \end{cases} \quad (1)$$

式中, r_{ij} ——顶点 i 到 j 之间所有键的相对键强。

因此分子的相对键强矩阵 R 便可得到,将矩阵 R 中每一列数值相加得到相对键强和矩阵 R_i :

$$R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1j} \\ r_{21} & r_{22} & \cdots & r_{2j} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ r_{i1} & r_{i2} & \cdots & r_{ij} \end{bmatrix}$$

本文还引入支化度参数 g_i 来修饰距离矩阵 D ,具体计算如式(2)所示:

$$g_i = \left(\sum k \right)^{0.5} \quad (2)$$

式中, $\sum k$ ——分子中编号为 i 的原子成键的非氢单键数之和,其中双键按 2 个单键计算,三键按 3 个单键进行计算 [13]。

将相对键强和矩阵 R_i 与支化度参数 g_i 分别加入距离矩阵 D 的第 1 列和第 2 列得增广矩阵 Q :

$$Q = \begin{bmatrix} R_1 & g_1 & d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ R_2 & g_2 & d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ R_n & g_n & d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix}$$

求出矩阵 Q 的转置矩阵 Q^T ,然后求取 $Q \times Q^T$ 的最大特征值 M ,定义拓扑指数 X 的计算方法如式(3)所示:

$$X = \sqrt{N} \times \ln M \quad (3)$$

式中, N ——分子中的非氢原子数。

2.2 混合拓扑指数 G 的建立

甘油与异丁烯反应生成甘油醚体系,该体系的主要产物为 1-叔丁基甘油醚、1,2-二叔丁基甘油醚、1,2,3-三叔丁基甘油醚和未反应完的甘油,其体积分数大致为 1-叔丁基甘油醚 45%, 1,2-二叔丁基甘油醚 30%、1,2,3-三叔丁基甘油醚 15%、甘油 10%,根据优化过的 Grumberg-Nissan 公式 [14, 15] 计算得出甘油醚体系的混合拓扑指数 A ,具体公式如式(4)所示:

$$\ln A = \sum x_i \ln A_i \quad (4)$$

式中, x_i ——各组分的体积分数; A_i ——各组分的单拓扑指数。

因为甘油醚-汽油调和燃料中甘油醚相对于汽油的体积含量不断不变化,所以调和燃料之中甘油醚添加剂的混合拓扑指数 G 的计算如式(5)所示:

$$G = y_i \times A \quad (5)$$

式中, y_i ——调和燃料中甘油醚的添加量。

3 结果与讨论

3.1 调和燃料的密度与拓扑指数 G 的相关性

将 12 组调和燃料的密度数据分成训练集和检测集,随机抽取 3 个样本(T2,T5,T9)组成检测集,其余 9 个样本组成训练集,再根据训练集调和燃料的密度与其对应的拓扑指数进行线性回归分析,得到密度的 QSPR 模型如式(6)所示:

$$D = 0.71574 + 0.07587 \times G - 0.01664 \times G^2 + 0.00155 \times G^3 \quad (6)$$

式中, R^2 ——复相关系数, $R^2 = 0.9907$; SD ——标准偏差, $SD = 0.0069$; F ——Fisher 检验值, $F = 176.6460$; P ——显著性概率, $P < 0.0001$; D ——密度。

式(6)中复相关系数 R^2 为 0.9907,接近 1,表明调和燃料的密度与拓扑指数 G 具有优良的线性关系;标准偏差值较小,表明模型预测值与实验值非常接近; F 值为 176.6460,数值较大,表明模型的线性相关度良好;且显著性概率小于 0.0001,表明整个方程有意义。从内部检验的各项指标分析可知模型较为可靠。

运用式(6)重新计算调和燃料的密度,并进行比较,具体结果如表 2 所示。

表 2 调和燃料训练集密度的实验值与计算值比较

Table 2 Comparison between experimental and calculated values of the density of blended fuel's training set

| 编号 | 拓扑指数 G | 密度/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ | | 相对误差/% |
|-----|----------|-------------------------------------|-------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T1 | 0.328 | 0.745 | 0.739 | 0.82 |
| T3 | 0.983 | 0.769 | 0.776 | 0.87 |
| T4 | 1.310 | 0.782 | 0.790 | 1.03 |
| T6 | 1.965 | 0.818 | 0.812 | 0.69 |
| T7 | 2.293 | 0.823 | 0.821 | 0.25 |
| T8 | 2.620 | 0.828 | 0.828 | 0.02 |
| T10 | 3.275 | 0.845 | 0.840 | 0.57 |
| T11 | 4.913 | 0.865 | 0.871 | 0.65 |
| T12 | 6.550 | 0.935 | 0.934 | 0.07 |

由表 2 可知,调和燃料的密度随着拓扑指数增加而增加,训练集的平均相对误差基本在 1%内,表

明模型的模拟效果较好。一个可靠的模型不仅内部检验要合格,更要进行外部检验,本研究采取交互检验法,运用式(6)模拟计算检测集的 3 个样本的密度,具体如表 3 所示。

表 3 调和燃料检测集密度的实验值与计算值比较

Table 3 Comparison between experimental and calculated values of the density of blended fuel's detective set

| 编号 | 拓扑指数 G | 密度/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ | | 相对误差/% |
|----|----------|-------------------------------------|-------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T2 | 0.655 | 0.758 | 0.759 | 0.10 |
| T5 | 1.638 | 0.799 | 0.802 | 0.40 |
| T9 | 2.948 | 0.836 | 0.835 | 0.18 |

由检测集相关计算数据求得: $PRESS = 0.1 \times 10^{-4}$, $SSY = 0.0029$, $R_{cv}^2 = 0.9913$ ^[16]。其中, $PRESS$ 为预测残差平方和, SSY 为实验残差平方和。 $PRESS/SSY$ 远小于 0.1,且 R_{cv}^2 与 R^2 数值相差不大,表明误差较小。通过外部检验与内部检验,该 QSPR 模型具有良好的稳定性与预测性,是一个可靠的模型。

3.2 调和燃料的运动粘度与拓扑指数 G 的相关性

将 12 组调和燃料的运动粘度数据分成训练集和检测集,随机抽取 3 个样本(T3,T4,T7)组成检测集,其余 9 个样本组成训练集,再根据训练集调和燃料的运动粘度与其对应的拓扑指数进行线性回归分析,得到运动粘度的 QSPR 模型如式(7)所示:

$$K = 0.72824 + 0.17423 \times G + 0.01658G^2 + 0.00127 \times G^3 \quad (7)$$

式中, K ——运动粘度; R^2 ——复相关系数, $R^2 = 0.9923$; SD ——标准偏差, $SD = 0.0764$; F ——Fisher 检验值, $F = 214.1906$; P ——显著性概率, $P < 0.0001$ 。

式(7)中的复相关系数 R^2 为 0.9923,接近 1,表明调和燃料的运动粘度与拓扑指数 G 具有优良的线性关系;标准偏差值较小,表明模型预测值与实验值非常接近; F 值为 214.1906,因此模型的线性相关度良好;且显著性概率小于 0.0001,故整个方程有意义。从内部检验的各项指标分析可知模型较为可靠。

运用式(7)重新计算出调和燃料的运动粘度,并进行比较,具体结果如表 4 所示。

表4 调和燃料训练集运动粘度的实验值与计算值比较
Table 4 Comparison between experimental and calculated values of kinematic viscosity of blended fuel's training set

| 编号 | 拓扑指数 G | 运动粘度/ $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ | | 相对误差/% |
|-----|----------|---|------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T1 | 0.328 | 0.82 | 0.79 | 4.00 |
| T2 | 0.655 | 0.85 | 0.85 | 0.02 |
| T5 | 1.638 | 0.99 | 1.06 | 7.44 |
| T6 | 1.965 | 1.08 | 1.14 | 5.95 |
| T8 | 2.620 | 1.35 | 1.32 | 2.12 |
| T9 | 2.948 | 1.48 | 1.42 | 4.16 |
| T10 | 3.275 | 1.60 | 1.52 | 4.92 |
| T11 | 4.913 | 2.05 | 2.14 | 4.15 |
| T12 | 6.550 | 2.96 | 2.94 | 0.75 |

由表4可看出,调和燃料的运动粘度与拓扑指数呈正相关,但其相对误差比密度的实验数据的相对误差大。可能原因为:1)混合拓扑指数 G 依据甘油醚体系建立,未考虑汽油的相关影响,在一定程度上影响模型的准确性。2)建立拓扑指数过程中未考虑分子间氢键,而氢键可能影响调和燃料的运动粘度,造成一定误差。

同时,由表4可看出实验值与计算值间相对误差基本在5%内,仅有T5和T6这2组数据的相对误差超过5%,平均误差低于5%,属于实验误差允许范围,可接受。运用式(7)模拟计算检测集的3个样本的密度,具体如表5所示。

表5 调和燃料检测集运动粘度的实验值与计算值比较
Table 5 Comparison between experimental and calculated values of the kinematic viscosity of blended fuel's detective set

| 编号 | 拓扑指数 G | 运动粘度/ $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ | | 相对误差/% |
|----|----------|---|------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T3 | 0.983 | 0.89 | 0.92 | 3.00 |
| T4 | 1.310 | 0.95 | 0.99 | 3.98 |
| T7 | 2.293 | 1.22 | 1.23 | 0.84 |

由检测集的相关计算数据求得: $PRESS=0.0026$, $SSY=0.0529$, $R^2_{cv}=0.993$ 。 $PRESS/SSY=0.04918$ 小于0.1,且 R^2_{cv} 与 R^2 数值误差低于1%,实验值与预测值的相对误差在4%内,属实验误差允许范围内。通过内部与外部检验,实验值与预测值

间的误差,属于实验误差允许范围内,因此该QSPR模型可靠。

3.3 调和燃料的低热值与拓扑指数 G 的相关性

将12组调和燃料的低热值数据分成训练集和检测集,随机抽取3个样本(T2, T4, T8)组成检测集,其余9个样本组成训练集,再根据训练集调和燃料的低热值与其对应的拓扑指数进行线性回归分析,得到QSPR模型如式(8)所示:

$$C = 46.27229 - 1.05013 \times G + 0.24701G^2 + 0.02638 \times G^3 \quad (8)$$

式中, C ——低热值; R^2 ——复相关系数, $R^2=0.9912$; SD ——标准偏差, $SD=0.1156$; F ——Fisher检验值, $F=186.6872$; P ——显著性概率, $P<0.0001$ 。

式(8)中的复相关系数 R^2 为0.9912,表明调和燃料的运动粘度与拓扑指数 G 具有优良的线性关系;标准偏差值为0.1156,表明模型预测值与实验值非常接近; F 值为186.6872,说明模型的线性相关度良好;且显著性概率小于0.0001,表明整个方程有意义。从内部检验的各项指标分析可知模型较可靠。运用式(8)重新计算出调和燃料的低热值,并进行比较,具体结果如表6所示。

表6 调和燃料训练集低热值的实验值与计算值比较

Table 6 Comparison between experimental and calculated values of calorific value of blended fuel's training set

| 编号 | 拓扑指数 G | 低热值/ $\text{kJ} \cdot \text{g}^{-1}$ | | 相对误差/% |
|-----|----------|--------------------------------------|-------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T1 | 0.328 | 45.86 | 45.95 | 0.20 |
| T3 | 0.983 | 45.62 | 45.45 | 0.36 |
| T5 | 1.638 | 45.05 | 45.10 | 0.11 |
| T6 | 1.965 | 45.00 | 44.96 | 0.08 |
| T7 | 2.293 | 44.87 | 44.85 | 0.06 |
| T9 | 2.948 | 44.59 | 44.65 | 0.13 |
| T10 | 3.275 | 44.45 | 44.56 | 0.24 |
| T11 | 4.913 | 44.05 | 43.95 | 0.23 |
| T12 | 6.550 | 42.55 | 42.58 | 0.07 |

由表6可知,调和燃料的低热值与拓扑指数呈负相关,计算值与实验值的相对误差皆在1%内,误差较小。运用式(8)模拟计算检测集的3个样本的低热值,求得预测值如表7所示。

表 7 调和燃料检测集低热值的实验值与计算值比较

Table 7 Comparison between experimental and calculated values of the calorific value of blended fuel's detective set

| 编号 | 拓扑指数 G | 低热值/ $\text{kJ}\cdot\text{g}^{-1}$ | | 相对误差/% |
|----|----------|------------------------------------|-------|--------|
| | | 实验值 | 计算值 | |
| T2 | 0.655 | 45.80 | 45.68 | 0.26 |
| T4 | 1.310 | 45.29 | 45.26 | 0.06 |
| T8 | 2.620 | 44.73 | 44.74 | 0.03 |

由检测集的相关计算数据求得 $PRESS=0.0154$, $SSY=0.44$, $R^2_{cv}=0.9913$ 。 $PRESS$ 与 SSY 的比值为 0.0347, 小于 0.1, 且 R^2_{cv} 与 R^2 数值误差仅为 0.0001, 实验值与预测值的相对误差在 1% 内。通过检验, 该 QSPR 模型可靠, 能较好的反映调和燃料低热值的变化规律。

4 结 论

1) 基于调和燃料中汽油组分复杂且含量难以测定, 因此固定汽油含量, 改变甘油醚类添加的相对体积含量制备调和燃料, 并运用甘油醚组分的混合拓扑指数 G 建立 QSPR 模型, 成功预测模拟甘油醚-汽油调和燃料的理化性质。

2) 甘油醚体系之中含有 O 原子, 故运用相对键强和矩阵 R_i 与支化度参数 g_i 修饰分子的距离矩阵 D , 依此单拓扑指数 X , 根据 Grumberg-Nissan 等公式建立混合拓扑指数 G , 并与实验测定的甘油醚-汽油调和燃料的密度、运动粘度、低热值进行 QSPR 研究, 模型的相关性良好, 能较好反映调和燃料理化性质的变化规律。为调和燃料的制备与研究提供一定的理论指导。

3) 调和燃料的密度、运动粘度、低热值与拓扑指数 G 建立 3 个 QSPR 数学模型, 其中密度与低热值的 QSPR 模型中实验值与计算值间的相对误差值皆在 5% 内, 各项分析指标优良, 具有较好的模拟预测性。但在运动粘度的分析预测中存在一定的误差, 笔者认为是由于在拓扑指数的建立之中未考虑分子间作用力与氢键的相关影响, 以后还需继续改进混合拓扑指数, 以期能更广泛的应用到调和燃料理化性质的预测分析之中。

[参考文献]

[1] Atabani A E, Silitonga A S, Badruddin I A, et al. A

comprehensive review on biodiesel as an alternative energy resource and its characteristics[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2012, 25(12): 118—124.

[2] Kong Pei San, Aroua M K, Wan Daud W M A, et al. Catalytic role of solid acid catalysts in glycerol acetylation for the production of bio-additives: A review [J]. Royal Society of Chemistry Advances, 2016, 6 (73): 68885—68905.

[3] Dong Chaoqi, Geng Yanlou, Zhao Xinqiang, et al. Progress of etherification of glycerol yoalkyl glyceryl etjer catalyzed by acid [J]. Chemistry, 2012, 75 (11): 988—993.

[4] Oprescu E-E, Stepan E, Dragomir R E, et al. Synthesis and testing of glycerol ketals as components for diesel fuel[J]. Fuel Processing Technology, 2013, 110: 214—217.

[5] Dearden J. The history and development of quantitative structure-activity relationships (QSARs) [J]. International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships, 2016, 1(1): 1—44.

[6] Hu Jiwei, Zhang Xiaoyi, Wang Zhengwu. A review on progress in QSPR studies for surfactants [J]. International Journal of Molecular Sciences, 2010, 11 (3): 1020—1047.

[7] Atabati M, Emamalizadeh R. A quantitative structure property relationship for prediction of flash point of alkanes using molecular connectivity indices [J]. Chemical Journal of Chemical Engineering, 2013, 21 (4): 420—426.

[8] 戴益民, 黄可龙, 李 浔, 等. 多环芳烃气相色谱保留指数与结构参数的定量关系 [J]. 中南大学学报: 自然科学版, 2011, 42(8): 2227—2232.

[8] Dai Yimin, Huang Kelong, Li Xun, et al. Quantitative relationship between gas chromatography retention indeces and structural parameters for PAHs [J]. Journal of Central South University: Science and Technology, 2011, 42(8): 2227—2232.

[9] Felipe R-V L. Models for predicting the surface tension of biodiesel and methyl esters [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, 41: 202—216.

[10] Li Xun, Yuan Yanping. Study on miscibility of gasoline in glycerol based biofuel and the prediction of it with QSPR method [J]. Advanced Materials Research, 2011, 233-235: 1275—1280.

[11] 安星辰. 介孔氧化锆固体酸的制备及其在甘油醚化

- 和调和燃料方面的应用[D]. 长沙: 长沙理工大学, 2015.
- [11] An Xingchen. Preparation of mesoporous zirconia solid acid and its applications in glycerin etherification and mixed fuels[D]. Changsha: Changsha University of Science & Technology, 2015.
- [12] Yuan Hong, Yang Bolun, Yang Jiming. Predicting properties of biodiesel fuels using mixture topological index[J]. Journal of the American Oil Chemists Society, 2009, 86(4): 375—382.
- [13] 聂长明, 戴益民, 文松年, 等. 烷烃同系物气相色谱保留指数的分子拓扑研究[J]. 色谱, 2005, 23(1): 1—6.
- [13] Nie Changming, Dai Yimin, Wen Songnian, et al. Molecular topological study on gas chromatographic retention indices of alkane series[J]. Chinese Journal of Chromatography, 2005, 23(1): 1—6.
- [14] Shu Qing, Wang Jinfu. Predicting the surface tension of biodiesel fuels by a mixture topological index method [J]. Fuel, 2008, 87(17-18): 3586—3590.
- [15] Shu Qing, Yang Bolun, Yang Jiming. Predicting the viscosity of biodiesel fuels based on the mixture topological index method[J]. Fuel, 2007, 86(12-13): 1849—1854.
- [16] Tropsha A, Gramatica P, Gombar V K. The importance of being earnest: Validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models [J]. Quantitative Structure- Activity Relationships, 2003, 22(1): 69—77.

QSPR STUDY ON BIOMASS BLENDED FUELS OF GLYCEROL ETHER

Li Xun, He Denghui, Xu Yan, Shu Fengyao, Lu Si

(College of Chemical and Biological Engineering, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410004, China)

Abstract: The blended fuel of the glycerol ether is a new way to effectively use "biomass glycerin". In this paper, the distance matrix based on molecular structure established the single topological index X , then according to the Grumberg-Nissan formula to establish and use the new mixture topological index G with the related physical and chemical properties of blended fuels of the glycerol ether (density, kinematic viscosity, calorific value) for regression analysis, and models of quantitative structure-property relationship (QSPR) was established. The related QSPR models has good prediction ability and stability. The change rule of physicochemical properties of blended fuels of the glycerol ether can indicated very well.

Keywords: glycerol ether; biomass; blended fuels; quantitative structure-property relationship; topological index