

中国科学院
中国科学院过程工程研究所
《计算机与应用化学》编辑部

主管
主办
出版



中文核心期刊
论文统计源期刊
中国期刊方阵期刊



ISSN 1001-4160
CN 11-3763/TP
CODEN JYYHE6

计算机与应用化学

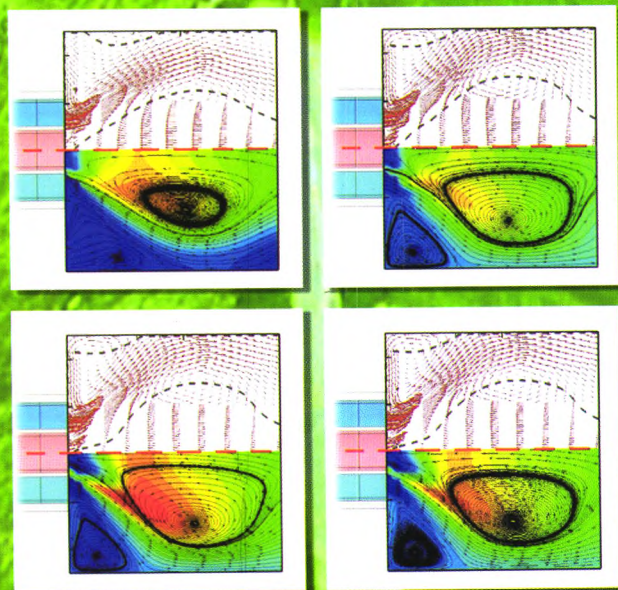
Jisuanji Yu Yingyonghuaxue

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

1

2014

Vol.31 No.1
第31卷 第1期



ISSN 1001-4160



万方数据

CONTENTS

Reviews

- Models to assess turbulence effects during heavy gas dispersion Wang Zheng, Li Xiangyang, Chen Jie and Zhao Xiangdi (124)
Intelligent decision-making of chemical logistics project construction using IT technology Zhang Guoming (128)

Articles

- Numerical simulation and validation of syn-gas combustion Guo Peiqing, Zang Shusheng and Ge Bing (4)
Dynamic characteristics analysis of gas/liquid two-phase flow regimes based on multiscale spectrum entropy
..... Fu Chun, Dong Feng and Tan Chao (9)
Improved CP formula and its application in mechanical vibration fault diagnosis
..... Xu Baochang, Song Yongjie, Wang Rui and Zhang Zengjian (14)
Optimality detection technique based on principle component analysis
..... Ye Lingjian, Wang Lang, Ma Xiushui and Song Zhihuan (18)
Simulation of heat transfer performance of tubes with different shapes and optimum selection based on CFD method
..... Li Wenmin, An Weizhong, Lin Zixin and Zhu Jianmin (23)
Research of mass spectrum similarity approaches based on segment weighted dot-product
..... Li Baoqiang, Li Cuiping, Zhang Lin, Guo Chuntao, Zhang Zhongyao and Kong Jinglin (28)
Numerical simulation of rotary pressure exchanger Wang Ying, Zhang Yan, Wu Lianying and Hu Yangdong (32)
Multi-mode process fault diagnosis method based on GMM Sun Xianchang, Tian Xuemin and Zhang Ni (39)
A new PSO algorithm and its application in the continuous casting of steel Wang Shichun (47)
Analysis on spatial resolution of load crystallization containing NaY zeolite
..... Wang Kuo, Yang Dongkui, Wang Jifeng, Zhao Bo and Ji Honghai (54)
Synthesis and crystal structure of a one-dimensional heterometallic coordination polymer based on cucurbit[5]uril
..... Zhang Guiling, Luo Xuqiang, Ran Liang and Zeng Jia (55)
The electronic structure investigation of the linear I_3^- anion by the "electron complementary" method
..... Liao Rongbao, Zhu Yun, Jin Xiaoyan, Guan Qingmei and Tian Zhimei (62)
Octane model based on neural network by near-infrared spectroscopy and its application
..... Luan Guohong, He Kaixun, Cheng Hui and Qian Feng (68)
Reviews on catalytic distillation process for alkylation desulfurization Guo Xiaoyan (72)
Theoretical study on the favorable active site and the mechanism of acid-catalyzed transesterification reaction for
biodiesel production Zhang Pingbo, Han Qiuju, Fan Mingming and Jiang Pingping (73)
Batch process monitoring and fault diagnosis based on recursive multi-model kernel multi-way fisher discriminant analysis
..... Xiao Yingwang, Yang Jun, Zhang Chenzhong, Yao Meiyang and Du Ying (85)
3D-QSAR studies on didehydropiperazine-2, 5-dione derivatives as potent antimicrotubule agents
..... Li Xiurong, Shu Mao, Wang Yuanqiang, Yang Wenjuan and Lin Zhihua (90)
The linear regression of coded orthogonal test $L_{16}(4^5)$ in sulfuric acid extraction of Fe from burning residue of pyrite
..... Guo Junwang, Liu Xufeng and Wei Caiyun (94)
Research on chromatographic retention indices of alkyl benzene compounds by using vertex eigenvalue
..... Li Jianfeng and Liao Limin (95)
The prediction of strength of Escherichia coli promoters Zhou Xuan, Zhou Xin and Zhong Zhaojian (104)
A density functional theory study of the interaction between fullerene $D_{3h}C_{74}$ and fluorine
..... Guo Lijuan, Cui Xiaoying, Fu Xinling and Zeng Ming (108)
Modeling of nonlinear partial least squares method and its application in near infrared spectroscopy
..... Xia Qiaosheng (112)
Simulation and experimental study of the separation of butanol-isobutanol by extractive distillation
..... Chen Qi and Gu Zhenggui (113)
Classification of rapeseed varieties using fourier transform mid-infrared photoacoustic spectroscopy (FTIR-PAS) combined
with support vector machines (SVM) Lu Yuzhen, Du Changwen, Yu Changbing and Zhou Jianmin (120)
- Notes**
- Study on the mode matching-based transformer chromatogram baseline extraction method
..... Hu Jingsong and Wu Ligang (42)

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第31卷 第1期

2014年1月

目次

综述与进展

- 重气扩散场中复杂障碍物周围湍流效应的评估..... 王正, 李向阳, 陈杰, 赵祥迪 (121)
利用 IT 技术构建化工物流方案智能化决策..... 张国明 (125)

研究论文

- 合成气燃烧数值模拟与验证..... 郭培卿, 臧述升, 葛冰 (1)
基于多尺度谱熵的气液两相流型动力学特性分析..... 傅春, 董峰, 谭超 (5)
改进的 CP 公式及其在机械振动故障诊断中的应用..... 徐宝昌, 宋永杰, 王锐, 张增建 (10)
基于主元分析的最优状态检测技术..... 叶凌霄, 王朗, 马修水, 宋执环 (15)
不同形状换热管传热性能的 CFD 模拟及优化选型..... 李文敏, 安维中, 林子昕, 朱建民 (19)
基于分段加权的点积相似度方法研究..... 李宝强, 李翠萍, 张琳, 郭春涛, 张众垚, 孔景临 (24)
旋转式压力能交换器的数值模拟..... 王颖, 张妍, 伍联营, 胡仰栋 (29)
一种基于 GMM 的多工况过程故障诊断方法..... 孙贤昌, 田学民, 张妮 (33)
一种新的 PSO 算法及其在钢的连续铸造中应用..... 王史春 (43)
高岭土负载晶化 NaY 分子筛空间分辨分析..... 王阔, 杨东奎, 王继锋, 赵波, 季洪海 (48)
大环配体五员瓜环的异核配位聚合物的合成及晶体结构..... 张桂玲, 罗绪强, 冉靛, 曾加 (58)
直线型 I₃⁻ 离子的“电子互补”法研究..... 廖荣宝, 朱云, 金晓艳, 管清梅, 田志美 (59)
基于神经网络的近红外光谱辛烷值模型的研究及应用..... 栾郭宏, 贺凯迅, 程辉, 钱锋 (63)
催化精馏技术在烷基化硫转移中的应用研究..... 郭晓艳 (69)
酸催化酯交换反应制备生物柴油的优先活性位及反应机理的理论研究..... 张萍波, 韩秋菊, 范明明, 蒋平平 (78)
基于 RMKMFDA 的间歇过程监测与故障诊断..... 肖应旺, 杨军, 张承忠, 姚美银, 杜瑛 (79)
2,5-二酮哌嗪类微管蛋白抑制剂的 3D-QSAR 研究..... 李秀荣, 舒茂, 王远强, 杨文娟, 林治华 (86)
正交试验 L₁₆(4⁵) 的线性回归方法在硫酸浸取硫铁矿烧渣工艺条件优化中的应用..... 郭俊旺, 刘旭峰, 魏彩云 (91)
顶点特征值用于烷基苯类化合物色谱保留指数研究..... 李建凤, 廖立敏 (100)
大肠杆菌启动子启动强度的预测..... 周璇, 周欣, 钟兆健 (101)
富勒烯 D_{3h}-C₇₄ 与氟原子相互作用的密度泛函理论研究..... 郭丽娟, 崔小莹, 付薪菱, 曾明 (105)
非线性偏最小二乘建模方法及在近红外光谱建模上的应用..... 夏巧生 (109)
萃取精馏法分离正丁醇-异丁醇的模拟和实验研究..... 陈琦, 顾正桂 (116)
红外光声光谱技术结合支持向量机鉴别油菜籽品种..... 陆宇振, 杜昌文, 余常兵, 周健民 (117)

研究简报

- 基于模式匹配的变压器色谱基线提取方法..... 胡劲松, 吴礼刚 (40)

《计算机与应用化学》征稿简则

《计算机与应用化学》是化学、化工类中文核心期刊。该刊重点刊登应用化学,以及应用计算机技术在化学、化工、材料、生物技术、生命科学、医药、农药、石油化工、能源、冶金、资源与环境、系统工程、安全技术等领域中应用的原创性研究论文、研究快报、学术论坛、应用技术、软件介绍、信息交流、书讯、讲座、广告,以及评述性综述文章。

来稿要求:作者须遵守《中华人民共和国著作权法》,不得一稿多投,引用他人作品时,务必在参考文献中著录,严禁抄袭,文责自负。来稿应论点明确、文字精炼、数据可靠、符号正确、治学严谨、文风勿虚。作者投稿必须使用正版软件,如使用非正版软件,其发生的相关法律责任由作者自负。属于研究生的稿件要求由导师审查后在稿件上签署姓名和日期,同意在本刊发表。属于课题研究项目和涉及密级内容的文章,须由作者单位出据证明。

投稿注意事项:

1. 研究论文:要求具有创新性的研究内容;
2. 研究简报:要求对于研究内容具有重要发现、重大改进和阶段性的报道;
3. 评述、论坛:要求具有国内外相关学科发展前沿、进展状况的内容;
4. 新技术介绍:要求具有使用价值、先进性和可靠性。

写作注意事项:

- (1) 中、英文标题:要具有描述性,能够准确地精炼表达文章内容,约15个字;
- (2) 中、英文作者:作者1~5人;作者单位全称,省,市,邮政编码;
- (3) 中、英文摘要:以第三人称写明本文的创新内容,写明研究目的、具体方法、结果和结论,中文约10行,英文约15行;
- (4) 中、英文关键词:3~5个主题词;
- (5) 中、英文图表:具有图表标题和文字说明,图中坐标、线条、单位、符号、图注等应标注准确、完整,图中文字中文宋体6号字,英文字体 Times New Roman, 字号7 pt, 双栏图 5 cm(高)×7.5 cm(宽), 单栏图 7 cm(高)×12 cm(宽), 图的分辨率 1200~2400;
- (6) 中、英文参考文献:英文文献在前,中文文献译成英文与英文文献顺序排列一致,将中文文献列于全文之后,内部资料、私人通讯等未公开发表的文献一律不引用;
刊:作者(姓前名后). 文章名(第1个字母大写其余小写). 刊名(主词首字母大写), 年, 卷(期):页-页.
书:作者(姓前名后). 书名(主词首字母大写). 出版地:出版社, 年.
- (7) 中国图书分类号:在图书馆查阅中国图书分类法;
- (8) 脚注写明国家、省、部、市级和国外资助项目名称及编号;
- (9) 作者简介:出生年、性别、籍贯、学历、职称、专业、E-mail;
- (10) 标准化:名词术语请参照全国科学技术名词规定编写;单位按照“中华人民共和国计量标准”及有关 GB 标准规定编写;物理量符号一律用斜体,单位符号和词头用正体字母。
- (11) 可提供最多3名推荐审稿人和最多3名回避审稿人。提交 Cover Letter 1份和图文摘要1份。

投稿时需注明详细联系地址(市、区、街、门牌号、单位信箱)、电话(手机)及 E-mail,

附注事项:投稿请平信寄1份打印稿或者用 E-mail 投稿,同时缴纳100元注册费,审稿周期一般为3个月,稿件录用后按文章内容交纳发表费,缴送最后定稿的.DOC文件和原始.TIF、Photoshop、Origin、Visual 等其他图文件,并寄1份修改打印稿。国外作者可直接用 E-mail 投英文稿件。优秀稿件可优先发表。凡要求作者修改的稿件若6个月内未回复编辑部,将视为自行撤稿处理。不录用的稿件底稿一律不退。

遵照《中华人民共和国著作权法》作者须将该文版权(含各种媒体的版权)授权给计算机与应用化学编辑部,国内外各大文献检索系统摘录本刊刊出的论文,凡不同意被检索刊物无稿摘引者,请在投稿时事先声明,否则,本刊一律视为已获作者授权认可。

银行汇款: 户名:计算机与应用化学编辑部

账号:0200004509014483432

银行:中国工商银行北京市分行海淀西区支行

来稿请寄:北京市海淀区中关村北二街2条1号 王红(收), 邮政编码:100190, (中国科学院过程工程研究所院内西北侧小二楼)

E-mail: jshx@ipe.ac.cn

《计算机与应用化学》编辑部

协办单位:中国系统工程学会过程系统工程专业委员会、

中国化学会计算机化学专业委员会、中国化工学会信息技术应用专业委员会

计算机与应用化学

(月刊) (1984年创刊)

2014年 第31卷 第1期

2014年1月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.31 No.1 2014

January 28, 2014

《计算机与应用化学》编辑部版权所有 违者必究

主管单位:中国科学院

主办单位:中国科学院过程工程研究所

主编:王基铭

总编辑:王红

编辑:张涛

出版单位:《计算机与应用化学》编辑部

地址:北京市海淀区中关村北2条1号

邮政编码:100190

E-mail: jshx@ipe.ac.cn

印刷单位:北京北林印刷厂

国内发行:全国各地邮电局

国外发行:中国国际图书贸易总公司中文报刊科

广告经营许可证号:京海工商广字第0141号

Copyright © Editorial Board of Computers and Applied Chemistry

Editor in Chief: Wang Jiming

Executive Editor: Wang Hong

Editor: Zhang Tao

Published by Editorial Board of Computers and Applied Chemistry

Address: 1 Zhongguancun Bei 2 Tiao, Haidian District,

Beijing 100190, China

E-mail: jshx@ipe.ac.cn

Printed by Beijing Bei Lin Printing House

Domestic Distributed by Local Post Offices

Abroad Distributed by China International Book Trading

Corporation; Order by the Editorial

国内外公开发行 刊号: ISSN 1001-4160 国外发行代号: 6346BM 国内邮发代号: 82-500 每期征订价: 50.00元 零售价: 60.00元
CN 11-3763/TP