

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

# CAC

# 计算机与应用化学

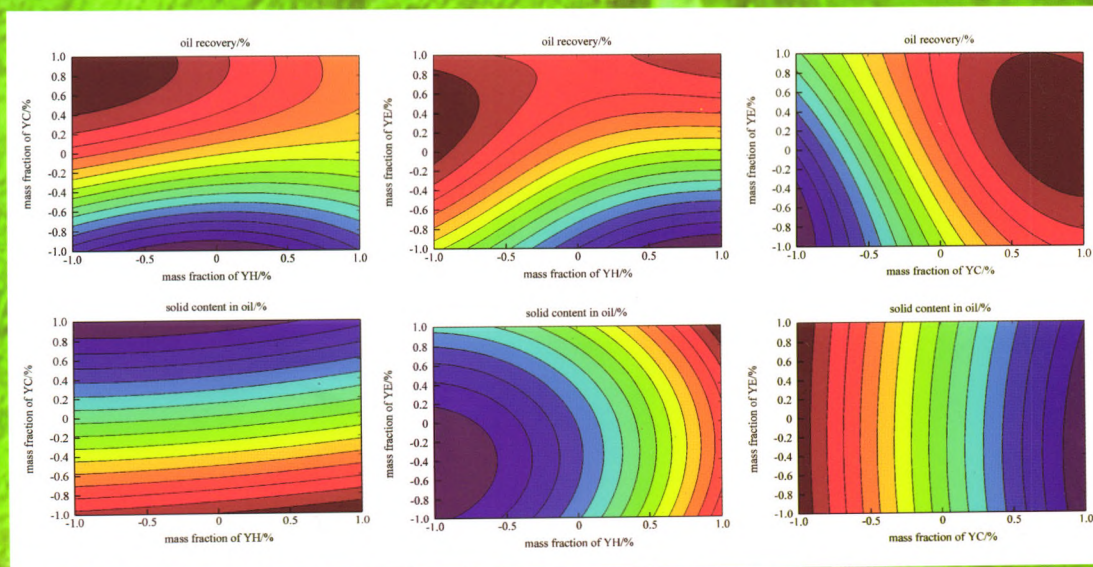
*Jisuanji Yu Yingyonghuaxue*

## COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

# 10

# 2014

Vol.31 No.10  
第31卷 第10期



ISSN 1001-4160



9 771001 416145

万方数据

**CONTENTS**

**Articles**

- The analysis of high-flux protein mass spectrometry based on BP neural network  
..... Zou Xiuming and Sun Huaijiang (1153)
- Fault detection based on kernel feature statistics of samples standardized with nearest neighborhood for batch process  
..... Guo Xiaoping, Jiang Qinqin and Li Yuan (1161)
- Using KPCA-LSSVM to predict breakdown voltage of transformer oil .....Xiong Yinguo (1164)
- Quantum chemical study on spontaneous mechanism of pyrogallol  
..... Xiao Nan, Zhu Yongchun, Bao Amin, Gao Ying and Xin Shigang (1169)
- Experimental study on optimizing separation agents of offshore polymer sludge through SVM and orthogonal design  
..... Wang Wenbin, Yin Xianqing, Zhang Jian, Shen Xizhou, Jing Bo, Liu Xiaoyu and Tan Guorong (1174)
- The effect of conjugation on the structure and electronic spectrum of carbazole derivatives  
..... Zhao Huiping and Dong Yuhui (1178)
- Process control of wastewater treatment based on PWM method .....Xie Linbo and Ding Wei (1183)
- Research on modeling and optimal solution of refined oil product blending  
..... Lu Hangwei and Yang Yao (1188)
- Temporal and spatial distribution and contamination assessment of PM<sub>2.5</sub> in Shanghai  
..... Cheng Yali and Wang Bo (1192)
- Analysis of PM<sub>2.5</sub> distribution characteristics and impacts of meteorological conditions on PM<sub>2.5</sub> concentration in Beijing  
..... Wang Qi, Sun Wei and Zhang Xinyu (1196)
- Thermodynamic analysis for Topsoe methanation process in coal gasification  
..... Hu Guoguang, Wang Daqing, Zhang Jing, Bao Xijun and Huang Xueli (1200)
- An improved DV-Hop localization algorithm based on adaptive particle swarm optimization  
..... Li Renhe, Ding Qin, Wang Hongyuan and Jiao Xiaoquan (1204)
- Study of phosgene recovery system without compression in TDI production  
..... Wu Xianli, Hu Yangdong, Gao Cheng and Wu Lianying (1208)
- The study of thermodynamics of bubble point synthesis of tert-amyl methy ether  
..... Xu Weiwei, Li Yonghong and Feng Chuanzhuang (1212)
- Identification of the key nodes in biological networks based on the similarity of overlapping communities  
..... Ding Dewu and Peng Xiufen (1216)
- The construction and screening of pharmacophore models with resistance of drug dependence  
..... Meng Jia, Zhu Yu, Zhang Liyang, Sun Ying and Zhang Yan (1220)
- The study of color reaction of 1,2-naphthoquinone-4-sulfonic acid sodium salt and adenine .....Liu Bing (1224)
- A high-accuracy molecular docking method with Intelligent Algorithm.....Fu Yi, Wu Xiaojun, Sun Jun and Zhao Ji (1228)
- Research on collaborative three-dimensional virtual simulation system for the chemical manufacturing  
..... Qi Miao, Zhang Yongce, Liu Zhiguang, Liu Zhe and Wang Ruixue (1234)
- Research on improved virtual force-directed particle swarm based on adaptive differential optimization  
..... Wang Huiquan and Wang Hongyuan (1239)
- The research in simulation algorithm of the TGA virtual laboratory  
..... Zhang Yongce, Cui Tao, Liu Zhiguang, Chen Kejun and Qu Xiaolin (1244)
- The photosensitivity of several rhubarb anthraquinone compounds from quantum chemistry calculations  
..... Yan Haiyan and Zheng Baobing (1249)
- KICA online monitoring based on phase and transition for batch process  
..... Xie Xiaoqing, Wang Jianlin, Zhao Liqiang and Yu Tao (1256)
- Design and implementation of high precision solar azimuth tracking system ..... Ma Shuaiqi (1261)
- Optimal control of fed-batch fermentation process with CMOPSO/D  
..... Bai Yang, Wang Jianlin, Yu Tao and Zhao Liqiang (1266)
- Color classification of different redried lamina based on the image processing and computer  
..... Dai Zeyuan, Yu Ling, Ren Wei, Yang Bin and Yang Zhengyu (1270)
- Research on hazardous chemicals logistics platform based on IOT .....Jiang Baihua and Suo Hansheng (1274)
- Chemical adsorption refrigeration: the influence of chemical reaction heat of adsorbent bed  
..... Yang Xiao, Gao Jiao, Lin Yan and He Yan (1277)
- Study of quinoline and indole in industrial methylnaphthalene  
..... Peng Xiaoxi, Xiong Jieming, Song Yunyan, Li Peipei and Zhang Liping (1280)

# 计算机与应用化学

## JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 31 卷 第 10 期

2014 年 10 月

### 目 次

#### 研究论文

- 反向传播神经网络的蛋白质质谱高通量分析方法研究..... 邹修明, 孙怀江 (1156)
- 近邻标准化样本核特征量驱动的间歇过程故障检测..... 郭小萍, 姜芹芹, 李元 (1157)
- 用 KPCA-LSSVM 预测变压器油击穿电压..... 熊印国 (1162)
- 邻苯三酚自氧化机理的量子化学研究..... 肖楠, 朱永春, 宝阿敏, 高鹰, 辛士刚 (1165)
- SVM 和正交设计优化海上含聚油泥分离药剂的实验研究  
..... 王文斌, 尹先清, 张健, 沈喜洲, 靖波, 刘晓瑜, 檀国荣 (1170)
- 共轭性取代对咪唑类衍生物结构和光谱性质影响的理论研究..... 赵慧萍, 董玉慧 (1175)
- 基于 PWM 方法的污水处理过程控制研究..... 谢林柏, 丁伟 (1179)
- 成品油调和建模及优化方法研究..... 吕杭蔚, 杨遥 (1184)
- 上海市 PM<sub>2.5</sub> 的时空分布特征及污染评估..... 成亚利, 王波 (1189)
- 北京地区 PM<sub>2.5</sub> 质量浓度分布及其与气象条件影响关系分析..... 王琪, 孙巍, 张新宇 (1193)
- 煤制气托普索甲烷化工艺热力学分析..... 胡国广, 王大庆, 张静, 鲍喜军, 黄雪莉 (1197)
- 基于自适应粒子群算法的改进 DV-Hop 定位算法..... 李仁和, 丁勤, 王洪元, 焦筱俊 (1201)
- TDI 生产中无压缩光气回收工艺的研究..... 吴现力, 胡仰栋, 高澄, 伍联管 (1205)
- 甲基叔戊基醚泡点合成的热力学研究..... 徐伟伟, 李永红, 冯传壮 (1209)
- 基于交叠社团相似性的生物网络关键节点识别..... 丁德武, 彭秀芬 (1213)
- 抗药物依赖药效团模型的构建与虚拟筛选..... 孟佳, 朱钰, 张丽杨, 孙颖, 张严 (1217)
- 1,2-萘醌-4-磺酸钠与腺嘌呤的显色作用研究..... 刘冰 (1221)
- 量子粒子群优化智能算法的高精度分子对接方法研究..... 傅毅, 吴小俊, 孙俊, 赵吉 (1225)
- 协同式化工生产三维虚拟仿真系统的研究..... 齐森, 张永策, 刘志广, 刘哲, 王瑞雪 (1229)
- 基于自适应差分优化的改进虚拟力导向粒子群算法研究..... 汪汇泉, 王洪元 (1235)
- 热重分析虚拟实验室的模拟算法研究..... 张永策, 崔桃, 刘志广, 陈珂君, 曲晓琳 (1240)
- 几种大黄萘醌类化合物光敏性的量子化学计算..... 闫海燕, 郑宝兵 (1245)
- 基于时段及过渡区域的 KICA 间歇过程监测方法..... 谢晓庆, 王建林, 赵利强, 于涛 (1250)
- 高精度太阳方位跟踪系统设计与实现..... 马帅旗 (1257)
- CMOPSO/D 算法的发酵过程补料优化控制..... 柏杨, 王建林, 于涛, 赵利强 (1262)
- 基于计算机图像获取不同产区复烤片烟颜色的探索..... 戴泽元, 余苓, 任伟, 杨斌, 杨征宇 (1267)
- 基于物联网技术的危化品物流应用平台研究..... 蒋白桦, 索寒生 (1271)
- 化学吸附式制冷-化学反应热对吸附床的影响..... 杨晓, 高佼, 林艳, 何燕 (1275)
- 工业甲基萘中喹啉和吡啶的研究..... 彭晓希, 熊杰明, 宋云艳, 李佩佩, 张丽萍 (1278)

# 《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). 出版社: 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。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

计算机与应用化学

(月刊) (1984年创刊)

2014年 第31卷 第10期

2014年10月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.31 No.10 2014

October 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

万方数据