中国科学院 主管
中国科学院过程工程研究所 主办
《计算机与应用化学》编辑部 出版

中文核心期刊
论文统计源期刊
中国期刊方阵期刊

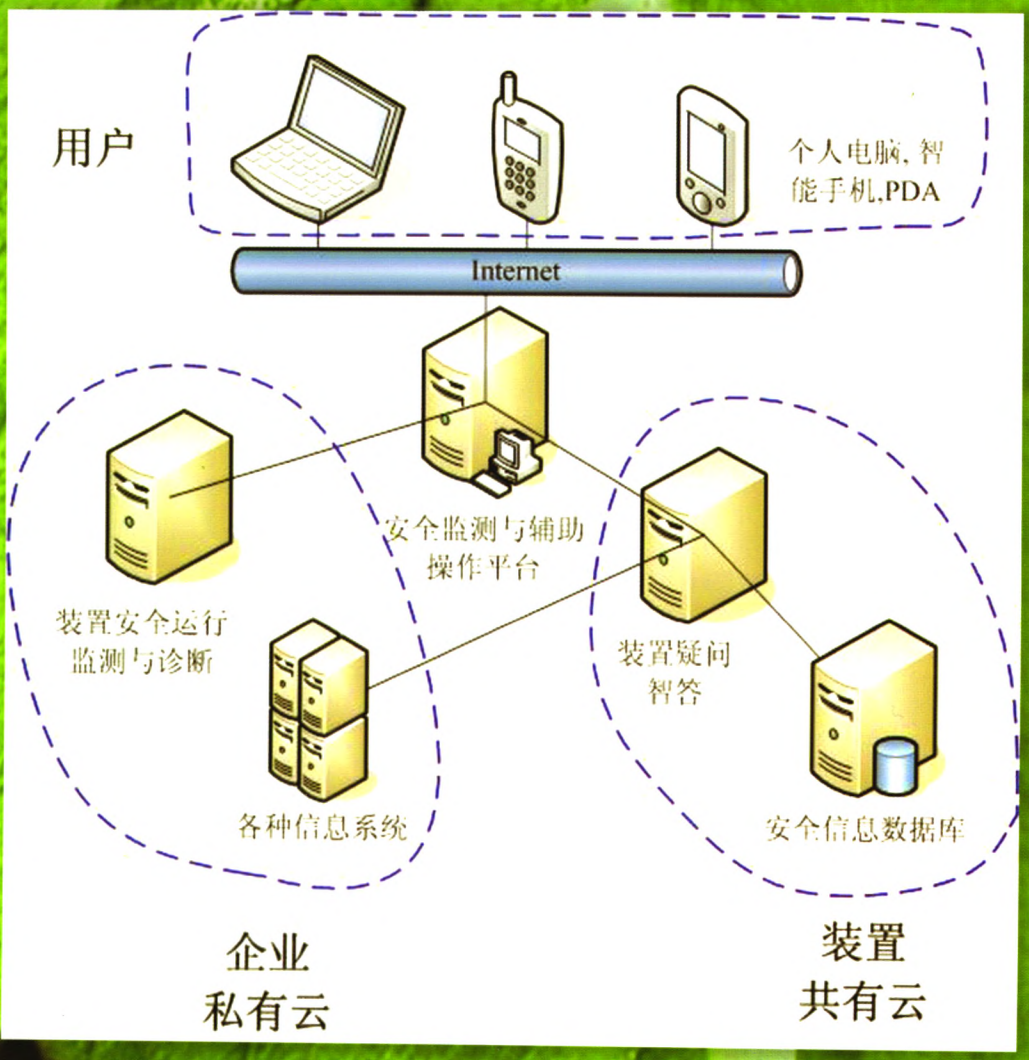
ISSN 1001-4160
CN 11-3763/TP
CODEN JYYHE6

CAC 计算机与应用化学

Jisuanji Yu Yingyonghuaxue

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

2
2014
Vol.31 No.2
第31卷 第2期



ISSN 1001-4160
02>
9 771001 416145

万方数据

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY Vol. 31, No. 2, February, 2014

CONTENTS

Reviews

Research progress of alarm systems in the process industries ..... Zhu Qunxiong, Gao Huihui, Liu Feifei, Peng Di, Xu Yuan and Gu Xiangbai (134)

Articles

Three-dimensional steady-state numerical simulation on proton exchange membrane fuel cell ..... Guo Yubao, Zhu Hong, Guo Zhijun and Wei Yongsheng (139)

Research of water Bloom prediction based on Bagging ensemble learning ..... Ma Xinyu, Shi Yan, Wang Xiaoyi, Xu Jiping, Wang Li and Yu Jiabin (144)

Application of MATLAB software in calculating thermodynamic parameters of alloy hydriding/dehydriding ..... Cheng Honghui, Yang Yanneng, Chu Xinxin, Lu Lijun, Liu Wei and Li Xiaolin (148)

Study on the effects of particle size on thermodynamics properties of the reaction of nano-copper with sodium bisulfate by quantum chemistry ..... Xia Xiaoyan, Cui Zixiang, Wang Jiarong, Li Mengran and Xue Yongqiang (152)

Artificial glowworm swarm optimization algorithm mimicking biological ideal free distribution model ..... Mo Yuanbin, Liu Fuyong and Ma Yuanzhui (160)

An improved algorithm for mining frequent sub-graph ..... Li Liang, Chen Li, Li Hua, Wang Shanshan and Zhang Minchao (165)

The prediction of protein thermostability based on theparameters of SVM optimized by ACO ..... Bian Nayun and Ding Yanrui (170)

A comprehensive analysis of single nucleotide polymorphisms in the protein ubiquitination sites ..... Yu Haiyan, Song Xiaofeng (174)

Inclusion of trimethoprim with hydroxypropyl-β-cyclodextrin ..... Lu Chaocheng, Fu Hualin, Zhang Wei, Zou Yuzhu, Zhou Tao, Jin Chao, Luo Li and Cao Hang (180)

The CFD simulation study of flow characteristics of three dimension flow in a fluidizedbed reactor at elevated pressure ..... Huang Kesong, Zhao Xiaojun, Yang Jingyi and Xu Xinru (184)

QSAR study of AchEI by using support vector regression ..... Wang Xueyuan, Zhang Can, Jiang Li, Liu Xin, Niu Bing and Chen Fuxue (188)

Measurement of specific surface area for gas-liquid mass transfer in microchannel ..... Ji Xiyan, Li Junxiang and Liu Lijing (196)

Theoretical study on nuclear magnetic resonance spectra of the four kinds of p-substituted curcumin analogues ..... Jia Feiyun, Ran Ming and Su Yu (196)

Theoretical study on the interactions of C_2H radical with $Cu_n^{0/-}$ (n=1-4) clusters ..... Xu Qiuhong, Li Dazhi, Bian He, Song Mingzhi and Zhang Shiguo (202)

Soft sensor of polypropylene melt index based on KPCA-SNNs ..... Pan Zelin, Xia Luyue, Zhou Mengfei and Pan Haitian (206)

Modularization analysis of metabolic network based on information theory ..... Ding Dewu (209)

The design of precise quantitative monitoring system of high pure water mass flow rate ..... Shi Yungui and Suo Yajie (212)

R&D of petrochemical process safety management platform based on cloud computing ..... Li Chuankun, Tao Shaohui, Wang Chunli and Gao Xinjiang (216)

Theoretical study on the reaction of difluorocarbene with ozone ..... Shi Congyun, Cai Huaxue and Yu Jiadong (222)

Study on characters of clenbuterol hydrochloride by density functional theory ..... Liu Cunhai, Zhang Yong, Liu Ye and Zhang Jilei (225)

Estimation of surface fractal dimension of energetic materials and influence on friction sensitivity ..... Lu Tao, Zhao Yan and Ouyang Dihua (230)

Synthesis, crystal structure and quantum chemistry of the organotin complex [n-$BuSnCl_3$(phen)] ..... Zhang Zhijian, Kuang Daizhi, Zhang Fuxing, Jiang Wujiu, Yu Jiangxi and Zhu Xiaoming (234)

Stochastic simulation method of annubar flowmeter measurement point positioning ..... Yan Qing and Peng Xiaoping (238)

The application of sparse partial least squares method to speatral wavelength selection and quantitative analysis ..... Chen Yuedong (243)

The real-time simulation of two-capacity water tank based on equation of state model ..... Cao Yubo, Gao Weiping and Yang Ying (246)

7.0 T small animal magnetic resonance imaging equipment facilities ..... Chen Daxing, Lei Jianfeng, Zhao Yuanyuan and Zhang Jinlu (250)

The design and realization of wave numerical forecasting visualization system ..... Wang Dejin and Fang Ying (256)

Notes

A study on line inspection management system of long-distance crude oil pipeline ..... Li Yaping (253)

万方数据

计 算 机 与 应 用 化 学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 31 卷　第 2 期　　2014 年 2 月

目　次

综述与进展

过程工业报警系统研究进展 ..... 朱群雄，高慧慧，刘菲菲，彭荻，徐圆，顾祥柏 (129)

蛋白质泛素化位点单核苷酸多态性的研究进展 ..... 喻海燕，宋晓峰 (171)

研究论文

质子交换膜燃料电池三维稳态数值模拟 ..... 郭玉宝，朱红，魏永生，郭志军 (135)

基于 Bagging 集成学习的水华预测方法研究 ..... 马新宇，施彦，王小艺，许继平，王立，于家斌 (140)

MATLAB 软件在合金吸放氢热力学参数计算中的应用 ..... 程宏辉，杨艳能，楚鑫新，吕丽君，刘卫，李晓林 (145)

粒度对纳米铜与硫酸氢钠反应热力学性质影响的量子化学研究 ..... 夏晓艳，崔子祥，王甲荣，李梦然，薛永强 (149)

模拟生物理想自由分布模型的萤火虫算法 ..... 莫愿斌，刘付永，马彦追 (153)

一种改进的频繁子图挖掘算法 ..... 李亮，陈莉，李华，王珊珊，张敏超 (161)

基于 ACO 优化 SVM 参数的蛋白质耐热性预测 ..... 卞娜云，丁彦蕊 (166)

羟丙基-β-环糊精对甲氧苄啶包合过程研究 ..... 卢朝成，符华林，邹玉珠，张伟，周涛，金超，罗莉，曹航 (175)

加压条件下气固流化床流动特性的 CFD 模拟研究 ..... 黄克松，赵晓军，杨敬一，徐心茹 (181)

基于支持向量机的乙酰胆碱酯酶抑制剂的构效关系研究 ..... 王雪源，张灿，蒋莉，刘欣，钮冰，陈付学 (185)

微通道内气液传质过程比表面积的测定 ..... 季喜燕，李军湘，刘丽静 (189)

4 种对位取代姜黄素类似物核磁共振谱的理论研究 ..... 贾飞云，冉鸣，苏宇 (193)

C_2H 自由基与 $Cu_n^{0/-}$（n=1-4）团簇的相互作用研究 ..... 徐秋红，李大枝，卞贺，宋明芝，张士国 (197)

KPCA-SNNs 的聚丙烯熔融指数软测量 ..... 潘泽林，夏陆岳，周猛飞，潘海天 (203)

基于信息论方法的代谢网络模块化分析 ..... 丁德武 (207)

高纯水批量流量精确定量监控系统设计 ..... 施云贵，索亚杰 (210)

基于云计算的石化过程安全管理平台研发 ..... 李传坤，陶少辉，王春利，高新江 (213)

二氟卡宾与臭氧反应的理论研究 ..... 石从云，蔡华学，余加东 (217)

盐酸克伦特罗的密度泛函理论研究 ..... 刘存海，张勇，柳叶，张纪磊 (223)

含能材料表面分形维数计算及其对摩擦感度影响 ..... 鲁涛，赵雁，欧阳的华 (226)

配合物[n-$BuSnCl_3$(phen)]的合成、晶体结构及量化计算 ..... 张志坚，邝代治，张复兴，蒋伍玖，庾江喜，朱小明 (231)

均速管流量计测量点定位的随机模拟法 ..... 颜清，彭小平 (235)

稀疏偏最小二乘方法用于光谱波长选择及定量分析 ..... 陈月东 (239)

基于状态方程模型的双容水箱实时仿真 ..... 曹玉波，高维平，杨莹 (244)

7.0 T 小动物磁共振成像仪器设施建设 ..... 陈大兴，雷建锋，赵媛媛，张进禄 (247)

波浪数值预报可视化系统的设计与实现 ..... 汪德进，方莹 (254)

研究简报

原油长输管道巡线管理系统探讨 ..... 李亚平 (251)

公告 ..... (148) (152)

万方数据

《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) 中国图书分类法号码：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缮写；单位按照“中华人民共和国计量标准”及有关 GB 标准规定缮写；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-mial 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酬摘引者，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 2 期
2014 年 2 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry
(Monthly)\ (Started in 1984)
Vol.31 No.2 2014
February 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 CN 11-3763/TP 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

万方数据