

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

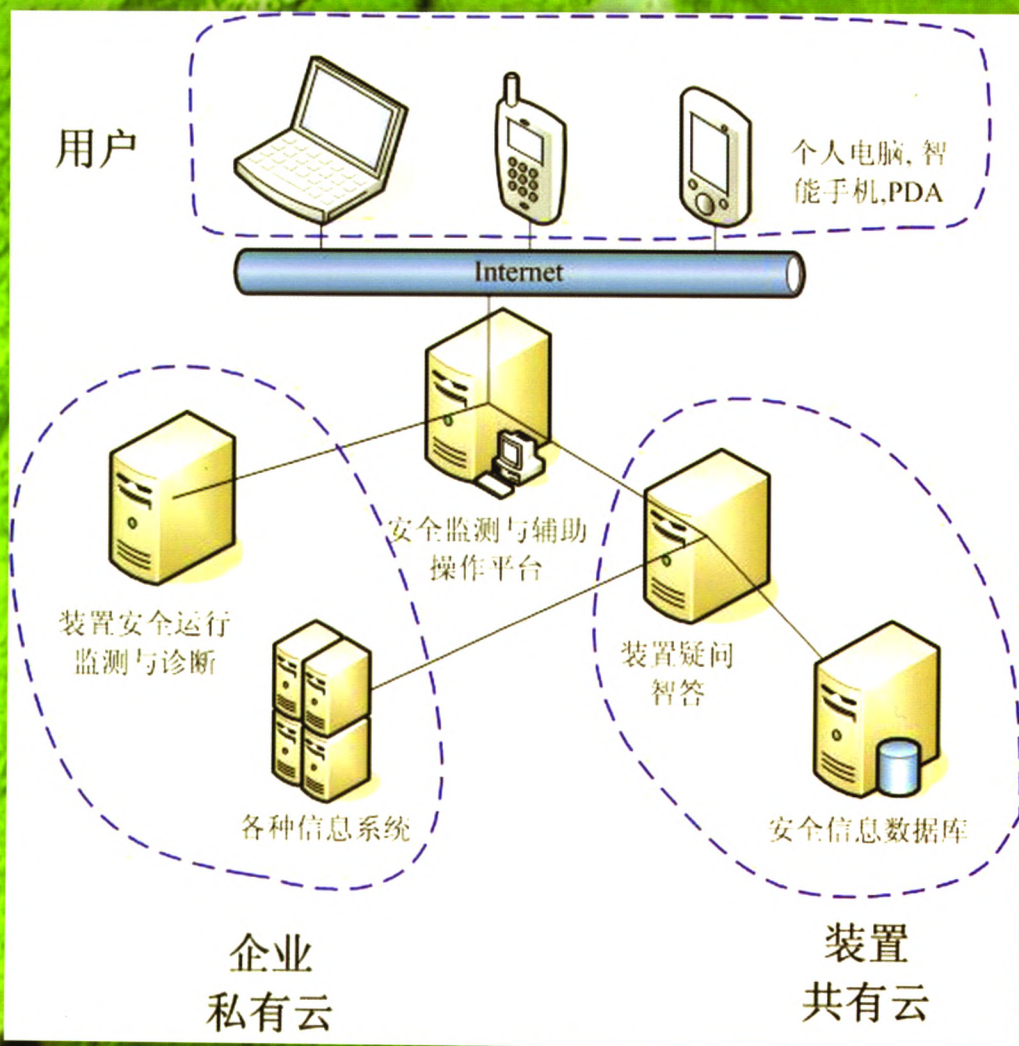
Jisuanji Yu Yingyonghuaaxue

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

2

2014

Vol.31 No.2
第31卷 第2期



ISSN 1001-4160



9 771001 416145

万方数据

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 the parameters 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 fluidized bed 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 Qihong, 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 -BuSnCl₃(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 spectral 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)

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)

《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,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条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二条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