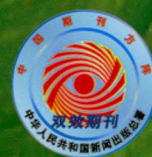


中国科学院
中国科学院过程工程研究所
《计算机与应用化学》编辑部

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

1

CAC

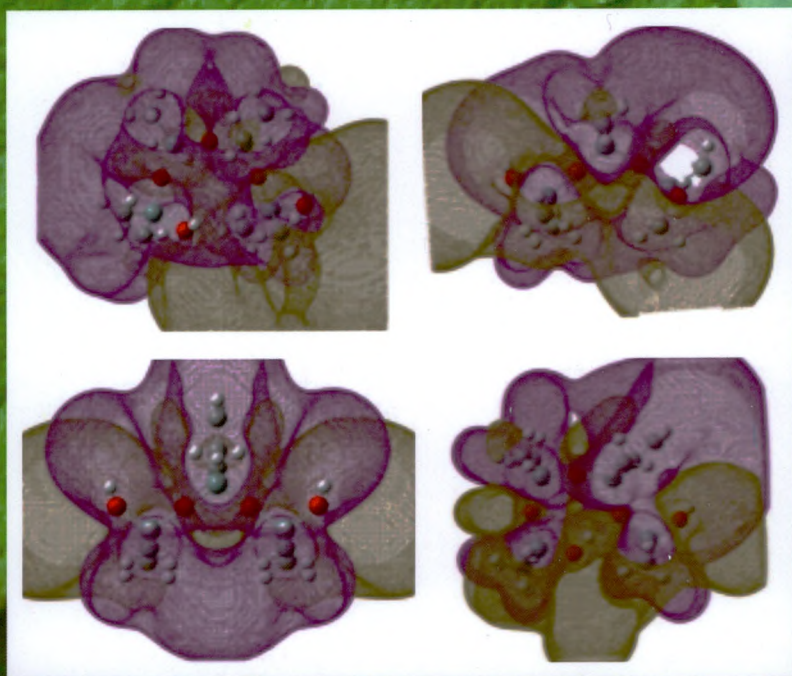
Jisuanji Yu Yingyonghuaxue

2015

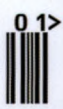
Vol.32 No.1

第32卷 第1期

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY



ISSN 1001-4160



9 771001 416152

万方数据

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 32 卷 第 1 期

2015 年 1 月

目 次

综述与进展

换热网络综合中管壳式换热器设计研究进展.....Osman Abuhallima, 张隽, 孙琳, 罗雄麟 (9)

研究论文

一种基于 CUDA 的并行多目标进化算法.....胡宾宾, 祁荣宾, 钱锋 (1)

中心氧比对 GE 气化炉内冷态流场分布影响的数值模拟研究
.....陈金花, 孔祥东, 胡贵华, 牛进伟, 钟伟民 (15)

一种基于 GS+LQ 采样学习的 DNA 微阵列数据分类方法.....陈念, 汪新 (20)

一种降低计算负荷的快速预测控制算法.....陈超, 梅华, 祁荣宾, 钱锋 (29)

基于 Aspen Plus 用户模型的 MTBE 反应精馏模拟.....诸林, 蒋鹏 (30)

空气氧化法制备氧化铁黄晶种的工艺条件研究
.....李华, 伍联营, 谢晓翠, 张伟涛, 胡仰栋 (35)

几种硅橡胶次级链结构辐射稳定性的理论研究
.....宋宏涛, 黄玮, 吴文昊, 傅依备, 张红平 (39)

取代苯甲酸苯酯羰基化学位移中的取代基相互作用
.....陈冠凡, 罗青青, 曹晨忠, 曾荣今, 刘万强 (46)

柴油低温流动改进剂的分子结构与降滤性能的关系研究.....李妍, 赵毅, 段庆华, 周涵 (47)

基于特征直方图的蛋白质结构分类和检索方法.....马金林, 康宝生, 马自萍 (53)

近红外光谱法快速判别水中杀螟硫磷残留.....顾从英, 唐倩倩, 相秉仁, 徐建平 (57)

岸站式河湖水质远程监控柜设计与开发.....于家斌, 许继平, 王小艺, 安孟夏, 韩孝军, 杨斌 (62)

基于最优化方法的组织特异代谢系统研究.....王玉芳 (70)

新型适用于基因表达数据的模型聚类方法.....宋东奇, 宋余庆, 刘哲, 凌青华 (71)

电子束辐照技术对甲醇-水溶液中艾司唑仑降解研究.....汪德进, 徐刚, 向甲甲, 吴明红 (75)

一氧化碳气体对煤吸附二氧化碳气体的影响研究.....王雪峰, 邓存宝, 王继仁, 周健, 戴凤威 (79)

酪胺分子印迹聚合物最佳功能单体筛选计算机模拟研究
.....李春丽, 齐晓娟, 张青叶, 刘纪红, 严守雷 (83)

MATLAB 软件对微波场中磷石膏温度变化影响因素的研究
.....李帅, 赵志曼, 刘育成, 韩松, 全思臣 (87)

换热器健康状态预测与实时监控.....苏岳龙, 于凤琴, 马天明 (91)

改进人工蜂群算法求解信道分配问题.....高珊, 马良, 张惠珍 (98)

自适应粒子群优化算法研究及其化工报警阈值优化应用.....杨洪雪 (103)

分子动力学研究钷晶体中的氦泡迁移与合并.....王丽莉, 刘建波, 肖永浩, 谢志毅 (107)

五原子平面四配位碳分子 CGa_3Pb 和 CGa_3Pb^- 的理论研究.....闵锁田, 周科 (114)

乙炔法氯乙烯合成固定床反应器的建模及分析.....杨霞, 梁真强, 吕玮, 郑世清 (115)

基于 Aspen Plus 的聚甲氧基二甲醚精馏过程模拟分析.....苗剑, 史高峰, 王国英, 苏金梅, 刘海晓 (119)

面向炼化业务的集成的计划优化与管理系统的.....王华, 杨磊, 汪洪涛 (124)

CONTENTS

Reviews

- Research advances in the design for shell-and-tube heat exchangers of heat exchanger networks
..... Osman Abuhallima, Zhang Jun, Sun Lin and Luo Xionglian (14)

Articles

- A parallel multi-objective evolutionary algorithm based on CUDA..... Hu Binbin, Qi Rongbin and Qian Feng (8)
- Numerical simulation analysis on the effect of the center oxygen ratio on the GE Gasification process
..... Chen Jinhua, Kong Xiangdong, Hu Guihua, Niu Jinwei and Zhong Weimin (19)
- A method of DNA micro array data classification based on GS+LQ sampling for learning algorithm
..... Chen Nian and Wang Xin (24)
- A fast algorithm for reducing the computation burden of model predictive control
..... Chen Chao, Mei Hua, Qi Rongbin and Qian Feng (25)
- Simulation of reactive distillation process for production of MTBE by developing user's module on Aspen Plus platform
..... Zhu Lin and Jiang Peng (34)
- Study on manufacture technology of yellow iron oxide crystal seed by air oxidation method
..... Li Hua, Wu Lianying, Xie Xiaocui, Zhang Weitao and Hu Yangdong (38)
- Theoretical exploration for radiation stability of several silicone secondary chains
..... Song Hongtao, Huang Wei, Wu Wenhao, Fu Yibei and Zhang Hongping (42)
- Indispensable substituent cross-interaction effect on ¹³C NMR chemical shifts of carbonyl group for disubstituted phenyl Benzoates..... Chen Guanfan, Luo Qingqing, Cao Chenzhong, Zeng Rongjin and Liu Wanqiang (43)
- Study on the relationship of the molecular structure and the performance of reducing cold filter plugging point of diesel cold flow improver Li Yan, Zhao Yi, Duan Qinghua and Zhou Han (52)
- A protein models classification and retrieval approach based on feature histogram
..... Ma Jinlin, Kang Baosheng and Ma Ziping (56)
- Near-infrared spectroscopy for rapidly discriminating fenitrothion residue in water
..... Gu Congying, Tang Qianqian, Xiang Bingren and Xu Jianping (61)
- The design and exploitation of the rivers and lakes' water quality remote monitoring and controlling cabinet on the shore
..... Yu Jiabin, Xu Jiping, Wang Xiaoyi, An Mengxia, Han Xiaojun and Yang Bin (66)
- Research on tissue-specific metabolism systems with optimization methods Wang Yufang (67)
- A new model clustering method for gene expression data
..... Song Dongqi, Song Yuqing, Liu Zhe and Ling Qinghua (74)
- Degradation of estazolam by electron beam radiolysis in methyl alcohol and aqueous solution
..... Wang Dejin, Xu Gang, Xiang Jiajia and Wu Minghong (78)
- Research on carbon monoxide gas to coal adsorption of carbon dioxide gas influence
..... Wang Xuefeng, Deng Cumbao, Wang Jiren, Zhou Jian and Dai Fengwei (82)
- Computer simulation study on the optimization of functional monomer for tyramine molecularly imprinted polymer
..... Li Chunli, Qi Xiaojuan, Zhang Qingye, Liu Jihong and Yan Shoulei (86)
- Study on temperature change influence factors of phosphogypsum in microwave field based on the MATLAB software
..... Li Shuai, Zhao Zhiman, Liu Yucheng, Han Song and Quan Sichen (90)
- Heat Exchanger healthy state prediction and online real-time monitoring
..... Su Yuelong, Yu Fengqin and Ma Tianming (97)
- Solving frequency assignment problem using an improved bee algorithm
..... Gao Shan, Ma Liang and Zhang Huizhen (102)
- Adaptive particle swarm optimization and its application in optimization of chemical alarm thresholds
..... Yang Hongxue (106)
- Molecular-dynamics study transfer and combination of helium bubbles in plutonium crystal
..... Wang Lili, Liu Jianbo, Xiao Yonghao and Xie Zhiyi (110)
- Theoretical studies on the penta-atomic planar tetracoordinate carbon molecules CGa₃Pb and CGa₃Pb⁻
..... Min Suotian and Zhou Ke (111)
- Modeling and analysis of fixed bed reactor for vinyl chloride synthesized from acetylene method
..... Yang Xia, Liang Zhenqiang, Lu Wei and Zheng Shiqing (118)
- Simulation of distillation process for polyoxymethylene dimethyl ethers by Aspen Plus
..... Miao Jian, Shi Gaofeng, Wang Guoying, Su Jinmei and Liu Haixiao (123)
- New integrated planning and management system in the field of refining-chemical
..... Wang Hua, Yang Lei and Wang Hongtao (128)

《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新性研究论文、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,线粗0.5~1,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

计算机与应用化学

(月刊) (1984年创刊)

2015年 第32卷 第1期

2015年1月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) \ (Started in 1984)

Vol.32 No.1 2015

January 28, 2015

《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

万方数据