

# CAC

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

# 计算机与应用化学 10

*Jisuanji Yu Yingyonghuaxue*  
**COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY**

# 2016

第33卷 第10期 Vol.33 No.10

ISSN 1001-4160



9 771001 416169

万方数据

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

CONTENTS

**Reviews**

- Progress of petrochemical plant layout researches ..... Wu Yan, Wang Yufei and Feng Xiao (1039)
- Application progress in QSAR modeling methods for catalysts..... Wang Jiye and Xiang Shuguang (1045)
- Overview on the development trends of process system engineering technology for fine and specialty chemical processes  
..... Zou Zhiyun, Wang Zhizhen, Meng Lei, Guo Ning, Zhao Dandan and Liu Xinhong (1050)

**Rapid Communications**

- New technologies of multiphase combinatorial oxidation reactors coupled with separation.....(1055)

**Articles**

- Controlled variable selection of combustion air concerning CO promoters in a Fluid Catalytic Cracking unit  
..... Xu Feng, Wang Rui and Luo Xionglin (1056)
- Simulation of flow and chemical reactions in Claus converter..... Shen Renjie, An Yue and Bu Yufan (1063)
- CFD simulation of the influence of nozzle structure on the performance of liquid-liquid ejector  
.....Bie Haiyan, Li Chunhong, An Weizhong, Lin Zixin and Zhu Jianmin (1068)
- Simulation analysis of the judgement of hydraulic flip with plain-orifice nozzle  
.....Li Jiansong, Tan Xinshun and Bi Rongshan (1074)
- Simulation study on the purification process of crude ethylene glycol product by syngas..... Li Yuan and Shen Renjie (1080)
- Construction of intelligent computing service environment in MES platform and its application  
.....Liu Gang, Chen Xianglin and Zhang Shaoning (1086)
- Dynamic simulation and analysis of distillation column considering condenser leakage  
..... Lu Yanjia, Hu Jianqing, Wu Lianying and Hu Yangdong (1091)
- Control configuration design of block decentralized control system..... Yuan Weiwei, Xu Feng and Luo Xionglin (1096)
- Temperature control of medium frequency induction furnace based on fractional order (PID)<sup>γ</sup> controller  
..... Dong Jia, Wang Zhiqiang, Cui Yanjun and Feng Yun (1103)
- A two-time scale model predictive control algorithm based on state-space model  
..... Miao Mengmeng, Xu Jun and Luo Xionglin (1108)
- The AEA combined with simplex method and its application to parameter estimation of heavy oil thermal cracking three lumps  
kinetics model ..... Qiao Xinlei, Yang Yihang, Zheng Yinghao, Yu Tianyu and Li Shaojun (1115)
- The development of sensitivity analysis module in Aspen Plus based on software integration  
.....Liao Sichao, Cheng Xi'an, Wang Sigui and Yang Xia (1121)
- Multi-objective optimization of amine system for desulfurization in the refinery  
..... Sun Shanshan, Xiao Xiang, Wang Kun, Huang Hui, Ma Menghong, Shi Bin and Yan Liexiang (1125)
- Utilization of low-temperature waste heat in refineries..... Li Wanyao and Feng Xiao (1130)

# 计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 33 卷 第 10 期

2016 年 10 月

## 目 次

### 综述

- 石化工厂设施布局研究进展 ..... 吴艳, 王彧斐, 冯霄 (1039)
- 催化剂定量构效关系建模方法应用进展 ..... 王继叶, 项曙光 (1045)
- 精细化工过程系统工程技术的若干发展趋势探讨 ..... 邹志云, 王志甄, 孟磊, 郭宁, 赵丹丹, 刘兴红 (1050)

### 研究快报

- 多相氧化组合反应器与耦合分离新技术 ..... (1055)

### 研究论文

- CO 助燃剂作用下催化裂化主风流量控制回路选择 ..... 许锋, 王锐, 罗雄麟 (1056)
- 克劳斯转化器中流动与化学反应的模拟 ..... 沈人杰, 安月, 卜宇凡 (1063)
- 喷嘴结构对液-液喷射器性能影响的 CFD 模拟 ..... 别海燕, 李春红, 安维中, 林子昕, 朱建民 (1068)
- 平孔喷嘴内柱塞流判定模拟分析 ..... 李建松, 谭心舜, 毕荣山 (1074)
- 合成气制乙二醇粗产品提纯工艺的模拟研究 ..... 李媛, 沈人杰 (1080)
- MES 平台智能计算服务环境构建及应用 ..... 刘刚, 谌湘临, 张少宁 (1086)
- 考虑冷凝器泄漏的精馏塔动态模拟与分析 ..... 卢妍嘉, 胡建清, 伍联营, 胡仰栋 (1091)
- 过程块分散控制系统结构设计 ..... 袁未未, 许锋, 罗雄麟 (1096)
- 基于分数阶(PID)<sup>λ</sup>控制器的中频感应电炉温度控制 ..... 董佳, 王志强, 崔彦军, 冯云 (1103)
- 基于状态空间模型的双时间尺度预测控制算法 ..... 苗萌萌, 许璠, 罗雄麟 (1108)
- 融合单纯形算法的 AEA 算法研究及其在重油热解参数估计中的应用  
..... 乔辛磊, 杨一航, 郑应豪, 余天宇, 李绍军 (1115)
- 基于软件集成技术的 Aspen 灵敏度分析模块的开发与应用 ..... 廖思超, 程希安, 王思贵, 杨霞 (1121)
- 炼厂胺液脱硫系统多目标优化 ..... 孙珊珊, 肖翔, 汪坤, 黄辉, 马萌宏, 史彬, 鄢烈祥 (1125)
- 炼厂低温热系统的综合利用 ..... 李婉瑶, 冯霄 (1130)

# 《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 600~1200;
- (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、Email;
- (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:** 投稿请用 Email 投稿或者平信寄 1 份打印稿, 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 Email 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 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)

Email: jshx@ipe.ac.cn

本期副主编: 刘桂莲 教授 西安交通大学 化工系

刘永忠 教授 西安交通大学 化工系

《计算机与应用化学》编辑部

计算机与应用化学

(月刊) (1984 年创刊)

2016 年 第 33 卷 第 10 期

2016 年 10 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.33 No.10 2016

October 28, 2016

《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

责任编辑: 袁茵

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街 1 号

邮政编码: 100190

Email: 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

Responsible Editor: Yuan Yin

Editor: Zhang Tao

Published by Editorial Board of Computers and Applied Chemistry

Address: 1 Zhongguancun No.2 North Street, Haidian District,

Beijing 100190, China

Email: 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 中国标准连续出版物号: ISSN 1001-4160  
CN 11-3763/TP

国外发行代号: 6346BM 国内邮发代号: 82-500 零售价: 60.00 元