

# CAC

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

# 计算机与应用化学 12

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

# 2016

第33卷 第12期 Vol.33 No.12

ISSN 1001-4160



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

**Articles**

- Research on the effect of the column polarity on QSRR model for saturated esters compounds  
..... Liu Fengping, Liu Wanqiang, Xie Wenlin and Zhou Su (1231)
- Prediction of critical temperatures of acyclic alkanes using topological indexes and its extrapolation  
..... Chen Mengyao, Xiao Kaixia, Cao Ting and Zhang Qingyou (1238)
- Solubility simulation of carbon monoxide in dimethyl carbonate using GEMC method  
..... Lu Miao, Xuan Aiguo, Wu Yuanxin, Yan Zhiguo and Du Zhiping (1243)
- Simultaneous optimization of heat exchanger networks synthesis and detailed heat exchanger design  
..... Zhao Boshi, Sun Lin and Luo Xionglian (1248)
- The chemical process simulation software development based on CAPE-OPEN standard  
..... Wang Le, Cai Zhenxing, Yu Mengmeng, Wang Jianping and Xiang Shuguang (1255)
- Numerical research on flow and heat transfer in helically coiled tubes with different cross-sections  
..... Huang Yunyun, Huang Yongshu and Wang Weiwang (1261)
- Soft-sensor for duty of thermosiphon reboiler..... Sun Jiangzihao, Li Hongyang and Zhu Lingyu (1267)
- The numerical simulation about temperature distribution of teeth-spherical catalyst by meshless method  
..... Wang Kuo, Zhao Bo, Li Zhenpeng, Cao Junfeng and Zhang Xiaoping (1272)
- A multi-model soft sensor development using Gaussian process regression for fermentation processes  
..... Mei Congli, Yin Liang, Yang Ming, Liao Zhiling and Liu Guohai (1279)
- Method for realizing virtual reality modeling of unit operation experiment  
..... Wang Xiaofeng, Xu Jian, Fu Xiangqing, Liu Guangxiang and Li Minghai (1286)
- Nonlinear fitting of calibration curves in atomic absorption spectrometry using Origin software  
..... Zhang Ying, Huang Wenyao, Wu Mengxi, Chen Ying and Wang Huaming (1289)
- QSPR study on the property of organic compounds based on the classification of the samples by KNN and K-means clustering  
algorithm----for the sensitization and the polarity parameters of some organic compounds .....Zhang Yaxiong and Wang Jing (1295)
- Thermodynamics and structure-activity relationship for organic compounds degradation under Fenton process  
.....Zhou Binjie, Guo Weimin and Shen Zhemin (1301)
- Thermodynamic simulation of heavy metals' emissions and control in coal combustion  
..... Wang Xiangxi, Tang Xiaoning, Zhang Bin, Liu Shaopu and Ma Li (1307)
- Marine microorganisms' metagenome dark matter property analysis  
.....Cai Zhengwen, Yi Zhiwei, Zeng Runying and Zhang Guangya (1313)
- QSSR research on ion mobility spectrometry for aliphatic aldehydes and ketones  
.....Liao Limin, Yang Huan and Lei Guangdong (1319)
- The detection model of kiwi fruit tissue cultured seedlings based on adaptive genetic algorithm  
.....Ren Han, Li Yong and Lyu Tianwen (1322)

# 计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 33 卷 第 12 期

2016 年 12 月

## 目 次

### 研究论文

- 交互柱法研究固定相极性参数对饱和酯 QSRR 建模的影响 ..... 刘凤萍, 刘万强, 谢文林, 周甦 (1231)
- 基于拓扑指数的链烷烃临界温度预测及外延 ..... 陈梦瑶, 肖凯霞, 曹婷, 张庆友 (1238)
- CO 在碳酸二甲酯中溶解度的 GEMC 模拟 ..... 卢苗, 宣爱国, 吴元欣, 闫志国, 杜治平 (1243)
- 换热器详细设计与换热网络综合同步优化方法研究 ..... 赵博实, 孙琳, 罗雄麟 (1248)
- 基于 CAPE-OPEN 标准的化工过程模拟软件开发 ..... 王乐, 蔡振兴, 于萌萌, 王建平, 项曙光 (1255)
- 不同截面形状螺旋管流动与传热的数值研究 ..... 黄云云, 黄永曙, 王为旺 (1261)
- 热虹吸式再沸器换热量软测量模型 ..... 孙蒋子豪, 李红阳, 祝铃钰 (1267)
- 基于无网格方法的齿球型催化剂体相温度分布数值模拟 ..... 王阔, 赵波, 李振鹏, 曹均丰, 张晓萍 (1272)
- 基于多模型的发酵过程高斯过程回归软测量建模研究 ..... 梅从立, 尹梁, 杨铭, 廖志凌, 刘国海 (1279)
- 单元操作实验的虚拟现实建模实现方法 ..... 王小锋, 徐鉴, 傅湘清, 刘光祥, 李明海 (1286)
- Origin 软件在原子吸收光谱标准曲线非线性拟合中的应用 ..... 张颖, 黄文耀, 吴梦溪, 陈颖, 王华明 (1289)
- 基于  $K$  最近邻与  $K$  均值聚类法的样本分类方法用于有机物的定量构效关系建模—对有机物致敏性及其极性参数的研究 ..... 张雅雄, 王静 (1295)
- Fenton 法降解有机物的热力学及构效关系研究 ..... 周彬杰, 郭卫民, 申哲民 (1301)
- 煤炭燃烧过程中重金属迁移及控制规律的热力学模拟 ..... 王祥曦, 唐晓宁, 张彬, 刘韶浦, 马力 (1307)
- 海洋微生物宏基因组暗物质性质分析 ..... 蔡征文, 易志伟, 曾润颖, 张光亚 (1313)
- 醛酮类化合物离子迁移谱 QSSR 研究 ..... 廖立敏, 杨欢, 雷光东 (1319)
- 基于自适应遗传算法的猕猴桃组培检测模型 ..... 任涵, 李勇, 吕天雯 (1322)

# 《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, 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

《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 12 期

2016 年 12 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.33 No.12 2016

December 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