

CAC

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

计算机与应用化学

2

Jisuanji Yu Yingyonghuaxue
COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

2016

第33卷 第2期 Vol.33 No.2

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

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 33 卷 第 2 期

2016 年 2 月

目 次

研究论文

- 一种 MES 业务流程风险应对措施决策优化算法.....李诚, 郭延海, 陈守文, 马姝婧, 荣冈 (129)
- 红外光谱法用于单组分含氧化合物的定量分析研究
.....张晓彤, 姚岳, 石丽华, 孙兆林, 宋丽娟, 李强, 孙挺 (134)
- 1-丁基-3-甲基咪唑四氯化铁离子液体与正辛 2-烷/对二甲苯相互作用的理论研究
.....商云龙, 唐辉, 屈一新 (139)
- 空气污染指数的前馈神经网络预测方法.....韩广, 徐璐, 孙晓云, 卢兆楠, 田家辉 (147)
- 基于 S 变换特征提取和隐马尔科夫模型的故障诊断方法研究.....徐宏武, 范玉刚, 吴建德 (152)
- 基于 KPLS-LSSVM 的航煤闪点和干点软测量应用研究.....赵超, 王贵评, 戴坤成, 黄云云 (157)
- 动态选择性集成神经网络软测量建模.....夏陆岳, 朱群娣, 王海宁, 潘海天 (163)
- 利用 MATLAB 编程计算精馏塔的热损失速率.....黄铁垓, 范宝安, 任晓静, 余凡 (168)
- 加氢裂化分馏塔多目标优化操作和产品方案分析.....周靖, 汪坤, 史彬, 鄢烈祥 (173)
- 基于 PSO-LSSVM 的水松纸透气度软测量.....张笑迪, 钱斌, 胡蓉 (177)
- 基于图像增强的 ORB 匹配算法研究.....陈海棠, 黄国勇, 吴建德 (183)
- LabVIEW 软件在储氢材料 PCT 曲线测试中的应用
.....李文彪, 程宏辉, 韩兴博, 吴长乐, 陆沉 (187)
- 一种基于滞后检测值的残糖浓度模糊控制.....刘辉, 赵忠盖 (191)
- 微量热法拟合分析石榴皮有效组分的抗菌活性.....张坤, 李忠琴, 林茂, 赖晓健, 徐继松 (200)
- 近红外光谱结合反向区间偏最小二乘法检测药用辅料糊精.....韩君, 孙长海, 方洪壮 (205)
- 苯酚及其衍生物对水生梨形四膜虫急性毒性的 QSTR 研究.....张雅雄, 李琴, 杨彩蓉 (209)
- 丙烷-正丁烷混合热裂解反应机理及相互作用机理的数值模拟
.....李金莲, 张红梅, 李春秀, 孙维, 郝玉兰, 李丽丽, 赵亮, 张永军 (213)
- 基于多属性群决策层次分析的 POPs 污染处理技术评价模型研究.....张启伦, 杨韵桐 (218)
- 基于模糊神经网络的出水总磷软测量方法研究.....郭民, 张一弛, 韩红桂 (223)
- 基于偏最小二乘法的二萜类生物碱化合物毒性定量构效关系研究
.....李晓, 毕开顺, 李清, 隋振宇, 常丽娟, 李佐静 (228)
- 一种基于数字图像处理和最小二乘拟合的打孔水松纸透气度检测方法
.....张桂莲, 钱斌, 胡蓉, 张笑迪 (231)
- 双率 CARMA 模型的广义最小方差自校正控制.....肖永松, 刘艳君 (237)
- 微型通道内 Taylor 流动的计算机模拟.....季喜燕, 李军湘, 刘丽静, 郭玉玮 (241)
- 2,3-二甲基-5-(7'-十六烷基)苯磺酸钠油水界面的分子模拟
.....曲广森, 梁爽, 薛春龙, 李钟, 程杰成, 丁伟 (246)
- 近红外分析技术在烟草中的应用.....张翼, 杨征宇, 葛炯, 刘太昂, 张浩博, 蔡峰, 束茹欣 (251)

研究简报

- BP 神经网络法结合红外光谱快速测定在用润滑油胺类抗氧化剂含量
.....王菊香, 邢志娜, 李伟, 刘洁 (197)

CONTENTS

Articles

- An optimal decision algorithm for treatment selection in MES workflow risk
..... Li Cheng, Guo Yanhai, Chen Shouwen, Ma Shujing and Rong Gang (133)
- Quantitative analysis of single-component oxygen compound by infrared spectroscopy
..... Zhang Xiaotong, Yao Yue, Shi Lihua, Sun Zhaolin, Song Lijuan, Li Qiang and Sun Ting (138)
- Theoretical study on interaction between 1-butyl-3-methylimidazolium tetrachloroferrate(III) and octane/p-xylene
..... Shang Yunlong, Tang Hui and Qu Yixin (146)
- A feedforward neural network modeling method with improved learning rates for API prediction
..... Han Guang, Xu Lu, Sun Xiaoyun, Lu Zhaonan and Tian Jiahu (151)
- The research on fault diagnosis method based on feature extraction by S-transform and hidden Markov Model
..... Xu Hongwu, Fan Yugang and Wu Jiande (156)
- Soft sensor modeling of aviation kerosene flash and dry points based on KPLS-LSSVM
..... Zhao Chao, Wang Guiping, Dai Kuncheng and Huang Yunyun (162)
- Soft sensor modeling method based on dynamic selective ensemble neural networks
..... Xia Luyue, Zhu Qundi, Wang Haining and Pan Haitian (167)
- Calculation of heat loss rate for rectifying tower by using MATLAB programming
..... Huang Tiegai, Fan Baoan, Ren Xiaojing and Yu Fan (172)
- Multi-objective optimization and product schemes analysis of hydrocracking fractionator
..... Zhou Jing, Wang Kun, Shi Bin and Yan Liexiang (176)
- Soft sensing of the tipping paper porosity based on PSO-LSSVM
..... Zhang Xiaodi, Qian Bin and Hu Rong (182)
- Study on image matching algorithm of ORB based on image enhancement
..... Chen Haitang, Huang Guoyong and Wu Jiande (186)
- Application of LabVIEW software in measuring PCT curve of hydrogen storage material
..... Li Wenbiao, Cheng Honghui, Han Xingbo, Wu Changle and Lu Chen (190)
- A fuzzy controller for residual sugar concentration based on delayed measurements
..... Liu Hui and Zhao Zhonggai (196)
- Separation and assay of antimicrobial components from rind of *Punica granatum L.* with high-speed counter-current chromatography and microcalorimetry..... Zhang Kun, Li Zhongqin, Lin Mao, Lai Xiaojian and Xu Jisong (204)
- Testing of dextrin content of pharmaceutical excipients by near infrared spectroscopy in combination with backward interval PLS..... Han Jun, Sun Changhai and Fang Hongzhuang (208)
- A QSTR study of the acute toxicity of phenol derivatives to aquatic *Tetrahymena pyriformis*
..... Zhang Yaxiong, Li Qin and Yang Cairong (212)
- Numerical simulation on reaction mechanism of pyrolysis of propane, n-butane and their mixture
..... Li Jinlian, Zhang Hongmei, Li Chunxiu, Sun Wei, Hao Yulan, Li Lili, Zhao Liang and Zhang Yongjun (217)
- Research on the evaluation model of POPs pollution processing technology based on MAGDM level analysis
..... Zhang Qilun and Yang Yuntong (222)
- Effluent total phosphorus detecting method and its application based on soft-sensor and FNN techniques
..... Guo Min, Zhang Yichi and Han Honggui (227)
- The investigation on quantitative structure-toxicity relationship for norditerpenoid alkaloids using partial least square method
..... Li Xiao, Bi Kaixun, Li Qing, Sui Zhenyu, Chang Lijuan and Li Zuoqing (230)
- A method based on digital image processing and least squares fitting for perforated tipping paper porosity measurement
..... Zhang Guilian, Qian Bin, Hu Rong and Zhang Xiaodi (236)
- Generalized minimum variance self-tuning control for a dual-rate CARMA model
..... Xiao Yongsong and Liu Yanjun (240)
- Numerical simulation of Taylor flow in microchannel
..... Ji Xiyan, Li Junxiang, Liu Lijing and Guo Yuwei (245)
- Molecular simulation of 2,3-dimethyl-5-(7'-hexadecyl) benzene sulfonate sodium at oil/water interface
..... Qu Guangmiao, Liang Shuang, Xue Chunlong, Li Zhong, Cheng Jiecheng and Ding Wei (250)
- The application of near-infrared spectroscopy in tobacco
..... Zhang Yi, Yang Zhengyu, Ge Jiong, Liu Taiang, Zhang Haobo, Cai Feng and Shu Ruxin (254)

Notes

- Rapid determination of amino antioxidant content in in-service lubricating oil based on BP-ANN combined with FTIR
..... Wang Juxiang, Xing Zhina, Li Wei and Liu Jie (199)

《计算机与应用化学》征稿简则

《计算机与应用化学》(月刊)是中国科学院主管,中国科学院过程工程研究所主办,《计算机与应用化学》编辑部出版的科技期刊。重点刊登计算化学,以及应用计算机技术在化学、化工、材料、药物化学、生物化学、生命科学、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、研究简报、学术论坛及综述栏目的文章。

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、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: 投稿可用 E-mail 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缴纳发表费,缴送最后定稿的.DOC文件和原始.TIF、Photoshop、Origin、Visual 等其他原始图文件。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)授予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)

编辑部 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

计算机与应用化学

(月刊) (1984年创刊)

2016年 第33卷 第2期

2016年2月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.33 No. 2 2016

February 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

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

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: Zhongguancun North Second Street No.1, Beijing 100190,

P.R. 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: 60.00元 零售价: 60.00元
CN 11-3763/TP