

# CAC

ISSN 1001-4160

CN 11-3763/TP

CODEN JYYHE6

# 计算机与应用化学

# 8

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

# 2016

## 第33卷 第8期 Vol.33 No.8

ISSN 1001-4160



9 771001 416169

08>

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 8 期

2016 年 8 月

## 目 次

### 研究论文

- 基于焓分析的乙烯装置蒸汽系统操作优化.....孙海青, 赵均, 徐祖华, 蒋鹏飞, 徐阳 (847)
- 金矿氰渣氯化挥发烟气回收工艺的技术研究  
.....刘洪晓, 肖力, 宋裕华, 曹艳军, 冷启龙, 张敬闯, 叶树峰 (852)
- 煤氧化自燃活化能优化计算软件的开发及应用.....孙艳秋, 卢振龙 (857)
- 基于局部加权线性回归模型的凝结水流量在线报警方法.....王占华, 刘振波, 朱迪, 杨子江 (861)
- 加氢脱硫反应分子在  $\text{MoS}_2$  表面吸附的分子模拟研究.....赵晓光, 王薇, 李会峰, 周涵, 李明丰 (866)
- 固阀塔内颗粒夹带特性研究.....王清立, 顾军民, 陈亮, 钟思青 (871)
- 分子模拟研究不同随机 RNA 片段适体与大肠杆菌紧密黏附素的相互作用.....王明华, 李杜娟 (881)
- 噻唑类 Fascin 蛋白抑制剂的 3D-QSAR 研究.....文晓荣, 王娟, 安春红, 舒茂, 林治华 (886)
- Box-Behnken 响应面法优选墨旱莲总黄酮超声提取工艺  
.....李敏婷, 刘湘, 赖珍珠, 董丽艳, 梁少梅, 陶移文, 张鑫 (891)
- 官能数可控的聚合反应分子模拟方法.....傅康裕, 刘静, 邱新龙, 吴荣亮 (898)
- 基于混合样本质控的代谢组学数据校正和整合策略  
.....刘佳健, 赵晴, 郑晓皎, 游懿君, 陈天璐 (905)
- 三呋咱并氧(氮)杂环庚三烯的密度泛函理论研究.....廉鹏, 来蔚鹏, 吕剑, 刘英哲, 尉涛, 王伯周 (909)
- 基于 EPANET 的配水管网水龄变化规律研究.....马霞, 庞博, 党志良, 田翔 (915)
- $\text{CoMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$  催化剂上 FCC 汽油加氢脱硫活性研究.....李自夏, 常晓昕, 孙伟 (920)
- 采暖季一氧化碳中毒风险防控系统设计及实现.....蔡有林, 许继平, 王小艺, 熊洪武 (925)
- 常压下丙醛-水-甘油体系汽液平衡测定与关联.....宋浩, 顾正桂 (929)
- 便携式河湖水质在线监测仪表的研发与设计  
.....于家斌, 王登乾, 许继平, 王小艺, 王昭洋, 王立, 张慧妍 (933)
- 碳四烃反应精馏分离异丁烯的模拟研究.....陈伟, 杨卫胜 (938)

**CONTENTS**

**Articles**

- Exergy analysis based operation optimization for steam system in ethylene equipments  
.....Sun Haiqing, Zhao Jun, Xu Zuhua, Jiang Pengfei and Xu Yang (847)
- Study on the recovery process of cyanide residue in gold mine  
..... Liu Hongxiao, Xiao Li, Song Yuhua, Cao Yanjun, Leng Qilong, Zhang Jingchuang and Ye Shufeng (852)
- Optimal calculation software development and application of coal spontaneous combustion activation energy  
..... Sun Yanqiu and Lu Zhenlong (857)
- An online alarming method for flow of condensate pump based on locally weighted linear regression model  
..... Wang Zhanhua, Liu Zhenbo, Zhu Di and Yang Zijiang (861)
- Molecular simulation of reactant molecules adsorption on MoS<sub>2</sub> surface in hydrodesulfurization process  
..... Zhao Xiaoguang, Wang Wei, Li Huifeng, Zhou Han and Li Mingfeng (866)
- Particle entrainment characteristics in fixed valve tray column..... Wang Qingli, Gu Junmin, Chen Liang and Zhong Siqing (871)
- Study on different random RNA fragment and enteropathogenic Escherichia coli intimin interaction by molecular modelling  
..... Wang Minghua and Li Dujuan (881)
- 3D-QSAR studies on thiazole derivatives as Fascin protein inhibitors  
..... Wen Xiaorong, Wang Juan, An Chunhong, Shu Mao and Lin Zhihua (886)
- Optimization of ultrasonic extraction technology for total flavonoids from *Eclipta alba* by Box-Behnken response surface methodology ..... Li Minting, Liu Xiang, Lai Zhenzhu, Dong Liyan, Liang Shaomei, Tao Yiwen and Zhang Xin (891)
- The molecular simulation method for functionality controllable polymerization  
.....Fu Kangyu, Liu Jin, Qiu Xinlong and Wu Rongliang (898)
- Metabolomic data calibration and integration strategy based on pooled quality controls  
..... Liu Jiajian, Zhao Qing, Zheng Xiaojiao, You Yijun and Chen Tianlu (905)
- A DFT study of bifurazano [b, f] furoxano [d] oxa (azo) cycloheptatriene  
..... Lian Peng, Lai Weipeng, Lü Jian, Liu Yingzhe, Yu Tao and Wang Bozhou (909)
- The change law of water-age in water distribution network based on EPANET  
..... Ma Xia, Pang Bo, Dang Zhiliang and Tian Xiang (915)
- Research of hydrodesulfurization activity of FCC gasoline on CoMo/ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts  
..... Li Zixia, Chang Xiaoxin and Sun Wei (920)
- Carbon monoxide poisoning risk prevention and control system design and implementation in Heating season  
.....Cai Youlin, Xu Jiping, Wang Xiaoyi and Xiong Hongwu (925)
- Measurement and correlation of vapor-liquid equilibria for propionaldehyde-water-glycerin system at atmospheric pressure  
..... Song Hao and Gu Zhenggui (929)
- The research and design of the portable rivers and lakes' water quality on-line monitoring instrument  
..... Yu Jiabin, Wang Dengqian, Xu Jiping, Wang Xiaoyi, Wang Zhaoyang, Wang Li and Zhang Huiyan (933)
- Simulation of separating isobutene from C<sub>4</sub> hydrocarbons by reactive distillation  
..... Chen Wei and Yang Weisheng (938)

# 《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8期

2016年8月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.33 No.8 2016

August 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 国外发行代号: 6346BM 国内邮发代号: 82-500 零售价: 60.00元  
CN 11-3763/TP

## 中国石化石油化工科学研究院龙军博士荣获 达索 Biovia/创腾“分子炼油创新领袖奖”

2016年7月27日下午，烈日炎炎，晴空万里，DassaultSystèmesBiovia 的首席科学家、企业发展部高级总监 Michael Doyle 博士一行从大洋彼岸抵达北京，来到中国石化石油化工科学研究院（简称石科院），为石科院院长龙军博士颁发“分子炼油创新领袖奖”（“Innovation Leader Award: Molecular Refinery”），以表彰龙军博士在分子水平炼油领域的卓越领导和突出贡献。

龙军博士，男，教授级高工，现任石油化工科学研究院院长，中国石化科技委炼油组组长，兼任国家石油燃料与润滑剂产品标准审查委员会主任，中国石油学会炼制分会副主任，石油学报（石油加工）、石油炼制与化工期刊编委会主任等等。1990年在石油大学（北京）获得博士学位。1997年被批准享受政府特殊津贴，1998至1999年在美国 PHILLIPS 石油公司做高级访问学者。2008年获“中国化学会—中国石油化工股份有限公司化学贡献奖”，2012年获“全国优秀科技工作者”称号。主要从事石油精细炼制、石油分子炼制化学等领域的研究工作。在清洁汽油生产，劣质原油和重质渣油加工、润滑剂生产等炼油工业关键技术领域，成功开发出具有国际先进、领先水平的技术。共获得国家和省部级科技奖励二十余项，获授权中国发明专利一百七十余件，在国内外发表论文八十余篇。近年来，龙军博士指导开发出基于分子结构特性的抗氧剂分子设计，有力推动了抗氧剂化学结构的创新。首次设计并制备出的两种新结构抗氧剂，在润滑油中表现出优异的抗氧化性能，已被世界权威化学物质数据库 CAS REGISTRYSM 收录，并获得 CAS 登录号。



从左至右依次为：创腾总经理曹凌霄，Biovia 首席科学家 Michael Doyle 博士，石科院院长龙军博士，Biovia 战略发展部总监 Max Petersen 博士

在龙军博士指导下开发的基于石油酸分子模拟和量子化学理论研究的高酸原油直接催化脱酸裂化成套技术，同时实现脱酸和裂化，已在工业生产中成功应用，低成本解决了严重的设备腐蚀问题，比常规加工技术具有更好的经济性，为炼油企业扩大原油资源选择范围、降本增效提供了有效技术保障。

Michael Doyle 博士表示：“达索 Biovia 这次能够前来北京，和合作公司创腾一起为龙军博士颁出这一科学创新奖，我们感到非常荣幸。我们认为，龙军博士提出的分子炼油方法从根本上打破了传统的试错研究方法框架，从分子水平上理解石油化学的概念，包括但不仅仅局限于结构、构象、反应、性质的研究，并将这些知识应用到多尺度的挑战，专注研究十余年，提出了大量高起点的创新技术构思，并总结了很多深刻的经验，在石油炼制与化工领域具有非常重要的开拓性意义。”

在过去 20 年中，这一科学创新奖授予了三位具有卓越贡献的科学家。第一位是赛诺菲安万特全球研发部的领导者 Jim Connelly 博士，他致力于人类代谢生物学和生物动力学模型的商业协同系统，对人类而言这是一个艰巨的复杂的挑战。第二位是施贵宝的制药发展信息技术主管 Jason Bronfeld 教授，他致力于制药工业过程分析和信息学的发展，尤其是过程预测和复杂配方放大研究。第三位是默克的科学研究首席战略官 Chris Waller。

---

## 会议简讯:

随着科研信息化的创新与发展，分子模拟及相关的信息智能技术已经成为实验科学家和信息与计算专家共同使用的平台级技术，世界范围内的研究学者都在努力促进计算技术、信息（数字化）技术、实验技术三者的有机结合，并将其融合在一起应用于材料和生命等研究领域，加速新材料的研发速度（材料基因组计划），加速新药研发。

由大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室、中国科学院上海药物研究所、创腾科技有限公司、中国化学会计算(机)化学专业委员会联合举办主办的“**第八届国际分子模拟与信息技术应用学术会议**”，简称 8th-ICMS&I，将于 9 月 24-26 日在风景秀丽的大连举办，本届会议将在分子模拟与信息智能技术应用于大数据时代的科研创新以及如何建立基于模型的新型研发模式等方面进行深入地探讨和广泛地交流。

截至 8 月 20 日，接受邀请报告的专家已超过 90 人，其中包括国内外材料科学和生命科学领域的专家学者、知名的医药企业、国际上提供医药信息技术的著名企业。届时该领域的专家学者将齐聚大连，深度探讨子模拟及信息智能在化学、材料和生命科学领域中的应用与发展、挑战与机遇，思考未来发展的模式和方向，积极推动分子模拟技术的全面发展。

欢迎广大相关领域的研究工作者报名参会，欲了解大会详情请登录会议网址 <http://icmsi.neotrident.com/>，期待大连相聚！

