

CAC

ISSN 1001-4160

CN 11-3763/TP

CODEN JYYHE6

计算机与应用化学

9

Jisuanji Yu Yingyonghuaxue
COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

2016

第33卷 第9期 Vol.33 No.9

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

Articles

- Research on blank roasting-acid leaching of Dunhuang bone coal
..... Song Yuhua, Liu Hongxiao, Lü Cuicui, Feng Jinmin and Ye Shufeng (943)
- Synthesis and catalytic performances in the MTO process of SAPO-18
..... Niu Wenjun, Dong Hexin, Han Li, Wang Jianfeng, Zhan Yuzhong, Li Zhaoifei, Yan Lijun, Yue Xianglong and Wang Zheng (949)
- The synthesis of nano-titanium dioxide in cyclohexane/n-butanol/Tween80/ water system and study of degradation of methyl orange on catalysts under visible light..... Huang Xiaodong, Guo Guowei, Liu Haodong and Wang Jianfeng (955)
- Study on molecular structure and fluorescence spectra of barium rhodizonate precipitate by PM7 method
..... Su Guitian, Xu Jia, Xiao Nan and Zhu Yongchun (959)
- Synthesis, characterization and fluorescence properties of a novel polymer compound
..... Liao Limin, Xie Yonghong, Deng Bing and Lei Guangdong (963)
- Synthesis, characterization and quantum chemistry calculation of (SP-4-2)- [(1R, 2R)-1, 2-Cyclohexanediamine- *N, N'*] bis(myristato-O) platinum(II)..... Kang Wang, Huo Suhong, Shao Yuping, Yu Dahai and Li Zhigang (967)
- Study of the action mechanism of Yinhuang oral liquid on the respiratory tract infections using the network pharmacology methods
..... Su Zhenzhen, Li Na, Cao Liang, Ding Weixian, Ding Gang, Wang Zhenzhong and Xiao Wei (971)
- A virtual instrument system for optical activity measurement..... Wu Qijun and Gong Xun (976)
- Water system integration in a plastic plant by using the distributed effluent regeneration recycling units
..... Chang Kailiang, Feng Xiao and Wang Li (979)
- Molecular dynamics simulation of water molecular confined in MER type zeolite
..... Shi Qin, Dai Hao and Huang Xueli (983)
- Simulation of Texaco gasification process..... Liu Huan, Liu Tiecheng and Feng Xiao (989)
- Fuzzy adaptive PID control by GA for the pressure of flash tank Li Guoyou, Zhang Letian and Wang Hongshuai (995)
- Embedded training system based on interactive technology for petrochemical fire engines
..... Wang Chun, Li Lei, Liu Gang and Zhang Jialiang (999)
- Explorations to the virtual process engineering offabrication and property measurement of nanomaterials
..... Hou Chaofeng, Gao Guoxian and Xu Ji (1003)
- The analysis about characteristics of the shock wave in the steam ejector's mixing chamber
..... Wang Sigui, Bi Rongshan and Zheng Shiqing (1008)
- Distillation system multi-objective optimization based on artificial immune multi-Agent
..... Xiang Long, Li haiqing and Shi Xuhua (1013)
- The analysis of simulation on wet desulfurization process and pH adjustment
..... Zhang Wen, Yue Jincai and Zheng Shiqing (1019)
- Study on the performance of three typical dividing wall columns for a given BTX separation
..... Zhu Zhexi, Wang Jianhong, Liu Qinjun, Du Zengzhi, Zhao Zhijian and Sun Wei (1023)
- Numerical simulation of the gas-liquid mass transfer in Taylor flow in the microchannel
..... Ji Xiyang, Li Junxiang, Liu Lijing and Guo Yuwei (1027)
- Design and application of the data management system for determining the repeatability and reproducibility of method Based on VBA..... Tian Wenqing, Li Jiwen and Wang Chuan (1032)

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 33 卷 第 9 期

2016 年 9 月

目 次

研究论文

- 敦煌石煤空白焙烧-酸性浸出的工艺研究 宋裕华, 刘洪晓, 吕翠翠, 冯金敏, 叶树峰 (943)
- SAPO-18 分子筛的合成及 MTO 催化性能研究
..... 牛文军, 董贺新, 韩丽, 王剑峰, 詹予忠, 李兆飞, 阎立军, 岳祥龙, 王政 (949)
- 环己烷/正丁醇/Tween80/水体系中纳米二氧化钛的合成及其可见光下光催化降解甲基橙性能的研究
..... 黄晓冬, 郭国伟, 刘浩东, 王剑峰 (955)
- 玫红酸钡分子结构及荧光光谱的 PM7 半经验分子轨道法研究 苏桂田, 徐佳, 肖楠, 朱永春 (959)
- 一种高分子化合物的合成、结构表征及荧光性能 廖立敏, 谢永红, 邓兵, 雷光东 (963)
- (SP-4-2)-[(1R, 2R)-环己基-1, 2-二胺-*N, N'*]双(十四烷酸-O)合铂(II)的合成、表征及量子化学计算
..... 康旺, 霍素红, 邵玉平, 余大海, 李志刚 (967)
- 基于网络药理学方法探讨银黄口服液抗呼吸道感染的作用机制
..... 苏真真, 李娜, 曹亮, 丁为现, 丁岗, 王振中, 萧伟 (971)
- 旋光度测量的虚拟仪器系统开发 吴其俊, 龚勋 (976)
- 采用分布式废水再生循环的塑料厂水系统集成 常凯亮, 冯霄, 王黎 (979)
- 受限于 MER 型沸石中水的分子动力学模拟 石勤, 戴浩, 黄雪莉 (983)
- 德士古水煤浆气化过程模拟 刘欢, 刘铁成, 冯霄 (989)
- 基于 GA 的闪蒸罐压力模糊自适应 PID 控制 李国友, 张乐天, 王红帅 (995)
- 石化企业消防车基于交互的嵌入式培训系统 王春, 李磊, 刘刚, 张嘉亮 (999)
- 纳米材料制备及物性测量的虚拟过程工程初探 侯超峰, 高国贤, 徐骥 (1003)
- 蒸汽喷射器混合段流场激波特性分析 王思贵, 毕荣山, 郑世清 (1008)
- 基于人工免疫多 Agent 的分馏系统多目标优化 项龙, 李海琴, 史旭华 (1013)
- 湿法脱硫的模拟分析与 pH 调节 张文, 岳金彩, 郑世清 (1019)
- 三类典型间壁式精馏塔分离给定 BTX 物系的效果探究
..... 朱哲熹, 王健红, 刘秦君, 杜增智, 赵志建, 孙巍 (1023)
- 微通道中 Taylor 气泡传质过程的数值模拟 季喜燕, 李军湘, 刘丽静, 郭玉玮 (1027)
- 精密度试验数据处理的 VBA 程序设计及应用 田文卿, 李继文, 王川 (1032)

《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7pt, 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: 名词术语语请参照全国科学技术名词规定撰写;单位按照“中华人民共和国计量标准”及有关GB标准规定撰写;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9期

2016年9月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.33 No.9 2016

September 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