

QK1738902

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

CAC

# 计算机与应用化学

*Jisuanji Yu Yingyonghuaaxue*  
**COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY**

**10**  
**2017**

第34卷 第10期

Vol.34 No.10

ISSN 1001-4160

9 771001 416176 > 10

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 34 卷 第 10 期

2017 年 10 月

## 目 次

### 研究论文

- 格子 Boltzmann 方法多 GPU 并行性能的研究  
..... 张纲、王利民、葛蔚(739)
- 四种抗非小细胞肺癌药的谱学性质及其概念密度泛函分析  
..... 王燕妮、黄鹏、李慧丹、徐佳祺、王朝杰(749)
- 临沂某铁矿生产超级铁精粉的试验研究  
..... 宋裕华、韩培伟、王建光、刘洪晓、叶树峰(759)
- 对于循环水系统的大小泵匹配问题的研究  
..... 陈福利、王彧斐、冯霄(767)
- 石油馏分偏心因子估算方法及评价  
..... 齐丽、孙晓岩、王建平、项曙光(774)
- 汽-液-液三相平衡计算研究  
..... 于萌萌、张衍壮、孙晓岩、陈玉石、项曙光(780)
- 基于 FCM-LSSVM-GSA 空调负荷预测  
..... 赵超、郑守锦(787)
- 自适应 JITL-PID 控制器设计方法  
..... 周成宇、杨鑫(796)
- 一种基于 T-S 模糊模型的残差加权故障诊断方法  
..... 杨马英、张书桂(802)
- 甲醇制烯烃分离工艺的热集成  
..... 马钊、段明哲、张志刚、乔星星、张晶、马啸(809)
- 能源系统焓成本图示方法与应用研究  
..... 王明华(815)
- 先进控制技术在乙苯脱氢法苯乙烯装置中的应用  
..... 江凤月、郑信春、金晓明(822)
- 催化裂化反再过程先进控制与优化应用研究  
..... 郑信春、金晓明、吴国权、张亮亮(828)

**CONTENTS**

**Articles**

- Parallel performance of lattice Boltzmann method with multi-GPUs  
..... ZHANG Gang, WANG Limin and GE Wei1 (739)
- Spectroscopic properties and conceptual density functional theory analysis of four kinds anti-non-small cell lung cancer drugs  
..... WANG Yanni, HUANG Peng, LI Huidan, XU Jiazhen and WANG Chaojie (749)
- Experimental study on the production of super iron concentrate from Linyi iron ore  
..... SONG Yuhua, HAN Peiwei, WANG Jianguang, LIU Hongxiao and YE Shufeng (759)
- Study on a parallel pump network composed of different sizes of pumps for recirculating cooling water system  
..... CHEN Fuli, WANG Yufei and FENG Xiao (767)
- Evaluation of Estimation Method for Acentric Factor of Petroleum Fractions  
..... Qi Li, Sun Xiaoyan, Wang Jianping and Xiang Shuguang (774)
- Study on vapor-liquid-liquid three phase equilibrium calculation  
..... YU Mengmeng, ZHANG Yanzhuang, SUN Xiaoyan, CHEN Yushi and XIANG Shuguang (780)
- A prediction for air-conditioning load base on FCM- LSSVM-GSA model  
..... ZHAO Chao and ZHENG Shoujin (787)
- Adaptive JITL-PID Controller Design  
..... ZHOU Chengyu and YANG Xin (796)
- A Residual Weighting Fault Diagnosis Method Based on T-S Fuzzy Model  
..... YANG Maying and ZHANG Shugui (802)
- Heat integration in methanol to olefins distillation process  
..... MA Zhao, DUAN Mingzhe, ZHANG Zhigang, QIAO Xingxing, ZHANG Jing and MA Xiao (809)
- Study on the method and application of exergy cost in energy system  
..... WANG Minghua (815)
- The Application of Advanced Process Control Technology in Plant of ethylbenzene dehydrogenation Method  
..... JIANG Fengyue, ZHENG Xinchun and JIN Xiaoming (822)
- Research on advanced control and optimization of catalytic cracking reverse process  
..... ZHENG Xinchun, WU Guoquan, and ZHANG Liangliang (828)

# 《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新性研究论文、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: 按文献顺序排列, 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) 中国图书分类法号码: 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。

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。

**银行汇款说明:** 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

Email: jshx@ipe.ac.cn

QQ 群: 248805925

编辑部网站: <http://jsyh.cbpt.cnki.net>

《计算机与应用化学》编辑部

副主编: 陈可先

学科责任编辑: 李杰、邱彤、覃覃、陈可先

计算机与应用化学

(月刊) (1984 年创刊)

2017 年 第 34 卷 第 10 期

2017 年 10 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly)/(Started in 1984)

Vol.34 No.10 2017

October 28, 2017

《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

Email: [jshx@ipe.ac.cn](mailto:jshx@ipe.ac.cn)

印刷单位: 北京宝昌彩色印刷有限公司

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: 1 Zhongguancun No.2 North Street, Haidian District,  
Beijing 100190, China

Email: [jshx@ipe.ac.cn](mailto:jshx@ipe.ac.cn)

Printed by Beijing Baochang Color Printing Co., Ltd, 100094

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

万方数据