

CAC

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

计算机与应用化学

Jisuanji Yu Yingyonghuaxue
COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

第34卷 第2期

Vol.34 No.2

2
2017

ISSN 1001-4160



9 771001 416176

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

- The applications of molecular simulation in the extreme pressure antiwear additives research
.....Li Yiya, Long Jun, Duan Qinghua, Dai Zhenyu, Zhao Yi and Su Shuo (102)
- Short cut design and steady state analysis of Kaibel column
..... Song Erwei and Wang Erqiang (108)
- Adsorption of chloroacetic acid and dichloroacetic acid in ZSM-5 zeolite by grand canonical monte carlo simulation
.....Sun Xiaoyan, Song Hongyang and Xiang Shuguang (113)
- Optimization for steam power system based on different carbon reduction targets
.....Xu Dong, Shi Bin and Yan Liexiang (118)
- Real-time optimization of cracking furnace systems's load distribution
.....Wu Lingyun, Du Wenli and Ye Zhencheng (127)
- Multimode process monitoring method over outliers
..... Xu Yuanyuan, Song Bing, Tan Shuai and Shi Hongbo (134)
- The research of new Gilliland correlation in rectification tower design process
..... Ma Ying, Wang Jianping, Sun XiaoyanI and Xiang Shuguang (139)
- Study on a kind of oil transportation job scheduling optimization system in crude oil depot
..... Li Chuankun, Zhao Dongfeng, Wang Chunli, Gao Xinjiang and Zhang Guixin (144)
- The water ammonia nitrogen prediction research based on a recursive RBF neural network
..... Qiao Junfei, Ma Shijie and Xu Jinchao (151)
- Summarize of gene function prediction methods based on biological networks and expression profiles
..... Yang Huadong, Tao Ling and Song Xiaofeng (156)
- Development and validation of pharmacophore of G protein-coupled receptor 40 agonists
..... Shen Daoming, Yang Jiajun, Gu Enke, Lu Yongbin and Feng Bainian (162)
- Sensory quality prediction of tobacco based on rough sets and gray system
..... Zhang Guanghui, Li Junli and Chen Haitang (166)
- Using multivariate models and dimensionality reduction to assess the impacts of various factors in a complex system
..... Wu Jingjing, Huang Shansong, Zhou Yun, Jiang Ganghui and Shao Limin (171)
- The construction of the model and properties simulation of crosslinking epoxy resin based on Perl
..... Yang Luxia, Guo Zhijing, Guo Liyuan, Liu Yaqing and Fu Yizheng (176)

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 34 卷 第 2 期

2017 年 2 月

目 次

研究论文

- 分子模拟方法在极压抗磨剂研究中的应用
..... 李义雅, 龙军, 段庆华, 代振宇, 赵毅, 苏朔 (97)
- Kaibel 隔板塔筒捷设计和稳态分析..... 宋二伟, 王二强 (103)
- ZSM-5 分子筛上氯乙酸和二氯乙酸吸附行为的蒙特卡罗研究
..... 孙晓岩, 宋泓阳, 项曙光 (109)
- 基于不同碳减排目标的蒸汽动力系统优化..... 徐东, 史彬, 鄢烈祥 (114)
- 裂解炉炉群负荷分配的实时优化 吴凌云, 杜文莉, 叶贞成 (119)
- 针对离群点影响的多模态过程监控方法
..... 许圆圆, 宋冰, 谭帅, 侍洪波 (128)
- 精馏塔设计过程的新 Gilliland 关联式研究
..... 马英, 王建平, 孙晓岩, 项曙光 (135)
- 一种原油罐区输油作业调度优化系统研究
..... 李传坤, 赵东风, 王春利, 高新江, 张桂鑫 (140)
- 基于递归 RBF 神经网络的出水氨氮预测研究
..... 乔俊飞, 马士杰, 许进超 (145)
- 基于生物网络与表达谱信息的基因功能预测与分析综述
..... 杨华冬, 陶玲, 宋晓峰 (152)
- GPR40 激动剂药效团模型的构建及验证
..... 沈道明, 杨加举, 顾思科, 陆咏斌, 冯柏年 (157)
- 融合粗糙集和灰色系统的烟叶感官质量预测
..... 张光辉, 李俊丽, 陈海棠 (163)
- 多元线性模型和数据降维用于评价复杂体系中各因素的影响程度
..... 吴晶晶, 黄善松, 周芸, 蒋光辉, 邵利民 (167)
- 基于 Perl 语言的交联环氧树脂分子模型的构建和性能仿真
..... 杨滢霞, 郭志婧, 郭丽媛, 刘亚青, 付一政 (172)

万方数据

《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: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。

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 Email。

附注事项: 投稿请用 Email 投稿或者平信寄 1 份打印稿,投稿缴纳 100 元或 200 元(网站)注册费,审稿周期一般为 1-3 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

副主编:陈可先

学科责任编辑:邱彤、李杰、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2期

2017年2月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) (Started in 1984)

Vol.34 No.2 2017

February 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

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

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

万方数据

CN 11-3763/TP