

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

3

2017

第34卷 第3期

Vol.34 No.3

ISSN 1001-4160



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

### 目 次

#### 研究论文

- 拉丁超立方抽样在传染性疾病预防风险分析中的应用  
..... 卢易, 李健, 王剑英, 陈沁, 钮冰 (177)
- $Au_n(n=2-60)$  的结构及其性能的理论研究  
..... 高锦花, 韩清珍, 苏巧智, 温浩, 江兆潭 (183)
- 苍山铁矿选矿工艺试验研究  
..... 姚树建, 韩培伟, 钱鹏, 叶树峰 (188)
- 基于压缩感知的双视角气泡重建算法  
..... 郭剑, 孟凡勇, 乔志伟 (195)
- 基于 RLSSVM-CPSOSA 的 PEM 燃料电池系统建模  
..... 赵超, 陈培江, 王贵评, 戴坤成 (201)
- 基于相对焓矩阵的精馏塔控制结构选择  
..... 叶尧, 周猛飞, 蔡亦军, 潘海天 (207)
- 带有辅泵的循环水系统研究  
..... 陈福利, 王戩斐, 冯霄 (213)
- COSMO-SAC 模型预测含丙三醇体系的汽液相平衡  
..... 李进龙, 袁本峰, 叶贞成 (217)
- 基于 CAPE-OPEN 标准的反应组件开发  
..... 刘博谦, 宋泓阳, 陈玉石, 孙晓岩, 项曙光 (222)
- 基于 CAPE-OPEN 标准的管路单元模块开发  
..... 周鑫, 马英, 陈玉石, 孙晓岩, 项曙光 (227)
- 基于自适应 Tikhonov 正则化约束的红外光谱重构及在药品辨识中的应用  
..... 刘秋霞, 肖莎, 郭振辉, 刘海 (238)
- 乳清酸核苷单磷酸盐脱羧动力学同位素效应的理论研究  
..... 密士珍, 王居亮 (242)
- 酿酒酵母发酵过程的仿真  
..... 潘多涛, 刘军, 史洪岩, 袁德成 (243)
- 安全仪表系统软件开发完整生命周期的研究  
..... 徐兵兵, 顾海涛 (247)
- 基于忆容器混沌电路设计及图像加密算法  
..... 冯泽仲, 王晓东 (251)

CONTENTS

**Articles**

- The application of latin hypercube sampling in risk analysis of infectious disease  
..... Lu Yi, Li Jian, Wang Jianying, Chen Qin and Niu Bing (182)
- Theoretical study on the structure and properties of  $Au_n (n=2-60)$  clusters  
..... Gao Jinhua, Han Qingzhen, Su Qiaozhi, Wen Hao and Jiang Zhaotan (187)
- Experimental research on the beneficiation of cangshan iron ores  
..... Yao Shujian, Han Peiwei, Qian Peng and Ye Shufeng (194)
- Two projection angles bubbles reconstruction algorithm based on compressed sensing  
..... Guo Jian, Meng Fanyong and Qiao Zhiwei (200)
- Modeling of PEMFC stack based on RLSSVM-CPSOSA algorithm  
..... Zhao Chao, Chen Peijiang, Wang Guiping and Dai Kuncheng (206)
- Control structure selection for distillation columns based on relative exergy array  
..... Ye Yao, Zhou Mengfei, Cai Yijun and Pan Haitian (212)
- Study on an auxiliary pump network for recirculating cooling water system  
..... Chen Fuli, Wang Yufei and Feng Xiao (216)
- Prediction of vapor-liquid phase equilibrium for binary mixture containing glycerol with COSMO-SAC  
..... Li Jinlong, Yuan Benfeng and Ye Zhencheng (221)
- The development of reaction component based on the CAPE-OPEN standard  
..... Liu Boqian, Song Hongyang, Chen Yushi, Sun Xiaoyan and Xiang Shuguang (226)
- The development of pipe unit module based on CAPE-OPEN  
..... Zhou Xin, Ma Ying, Chen Yushi, Sun Xiaoyan and Xiang Shuguang (233)
- Infrared spectra reconstruction with adaptive tikhonov regularization and its applications in drug identification  
..... Liu Qiuxia, Xiao Sha, Guo Zhenhui and Liu Hai (234)
- The kinetic isotope effect studies on the decarboxylation of Orotidine 5'-monophosphate  
..... Mi Shizhen and Wang Juliang (239)
- Simulation of *Saccharomyces cerevisiae* fermentation process  
..... Pan Duotao, Liu Jun, Shi Hongyan and Yuan Decheng (246)
- Research of systems development life cycle of Safety Instructmented System  
..... Xu Bingbing and Gu Haitao (250)
- The design of a chaotic circuit based on memcapacitor and image encryption algorithm  
..... Feng Zezhong and Wang Xiaodong (256)

# 《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、文字精练、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, 须由作者单位出具证明。

## 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 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登的论文, 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

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 3 期

2017 年 3 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly) \ (Started in 1984)

Vol.34 No.3 2017

March 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