

# CAC

# 计算机与应用化学

Q K 1 7 3 0 9 5 3

ISSN 1001-4160

CN 11-3763/TP

CODEN JYYHE6

*Jisuanji Yu Yingyonghuaxue*

**COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY**

9

2017

第34卷 第9期 Vol.34 No.9

ISSN 1001-4160



09>

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

# 计算机与应用化学

## JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第34卷 第9期

2017年9月

### 目 次

#### 研究论文

- 精细化过程非接触式检测技术的若干研究实例 ..... 邹志云, 孟磊, 常颖, 郭宇晴, 黄越, 刘英莉, 赵丹丹(649)
- 基于混沌游走表示的 p53 家族基因的进化差异性分析 ..... 钱东, 潘以红, 朱平(655)
- 大系统的常规控制系统结构设计 ..... 许锋, 袁未未, 罗雄麟(661)
- QM/MM 在计算 DNA 与配体评分函数的准确性研究 ..... 冯荣楷, 刘若云, 陈趣汶, 林凯盈, 许梦莹(669)
- 预测控制中存在模型失配时的卡尔曼滤波校正 ..... 费莹, 许鳌, 罗雄麟(673)
- 间壁式精馏塔在芳烃分离工艺中的研究与应用 ..... 彭雷, 孙巍, 杜增智, 王健红, 谭聪(681)
- 一种新的非线性迭推多模型核 MFDA 的间歇过程监控方法 ..... 肖应旺, 刘军, 张绪红(685)
- 基于改进 PCA 的古龙酸工业发酵过程关键阶段识别 ..... 崔蕾, 汪志锋, 徐涛, 宋海辉(693)
- 预测控制动态过程对控制目标可达性影响分析 ..... 刘冰洁, 罗雄麟(697)
- 基于 PCA-PSO-LSSVM 的造纸废水厌氧处理系统出水 COD 软测量 ..... 孙军, 成忠, 杨瑞芹, 单胜道(706)
- 基于 CAPE-OPEN 标准的复杂吸收塔单元模块开发 ..... 司东东, 张裕凯, 郑俊强, 陈玉石, 项曙光(711)
- 基于 CAPE-OPEN 标准的萃取塔单元模块开发 ..... 张裕凯, 司东东, 夏力, 王建平, 项曙光(717)
- 蒸汽管网运行评价技术及应用 ..... 吴荣伟, 陈振宇, 尤天蓉, 王宽心, 吴玉成, 吉勇(724)
- 先进控制系统在乙烯裂解炉上的应用 ..... 武东升, 王玉芹, 张亮亮, 郑信春(729)
- #### 研究简报
- 网络虚拟现实技术在煤化工外操培训中的应用研究 ..... 许冬涛, 李继雄(735)

**CONTENTS**

**Articles**

- Some Research Examples on the Non-Destructive Detection Technology of Fine Chemical Processes ..... ZOU Zhiyun, MENG Lei, CHANG Ying, GUO Yuqing, HUANG Yue, LIU Yingli and ZHAO Dandan (649)
- The analysis of p53 family's evolutionary diversity based on chaos game representation ..... QIAN Dong, PAN Yihong and ZHU Ping (655)
- Regulatory control configuration design for large-scale systems ..... XU Feng, YUAN Weiwei and LUO Xionglin (661)
- Evaluation of QM/MM Scoring Functions in DNA-ligand Complexes ..... FONG Pedro, LIU Ruoyun, Chan Choi man, Lam Hoieng and XU Mengying (669)
- Kalman Filter Correction When there is Model Mismatch in Model Predictive Control ..... YUN Ying, XU Jun and LUO Xionglin (673)
- Research and Application of a dividing wall column for separating of a multi-component Aromatics mixture ..... PENG Lei, SUN Wei, DU Zengzhi, WANG Jianhong and TAN Cong (681)
- A novel non-linear recursive multi-model kernel MFDA batch process monitoring method ..... XIAO Yingwang, LIU Jun and ZHANG Xuhong (685)
- Phase identification using modified principal component analysis for industrial 2-keto-L-gulonic acid fermentation ..... CUI Lei, WANG Zhifeng, XU Tao and SONG Haihui (693)
- Impact of Dynamic Process on the Reachability of Control Target of Model Predictive Control ..... LIU Bingjie and LUO Xionglin (697)
- Soft-sensor modeling for paper mill effluent COD based on PCA-PSO-LSSVM ..... SUN Jun, CHENG Zhong, YANG Ruijin and SHAN Shengdao (706)
- Development of complex absorption tower unit module based on CAPE-OPEN standard ..... SI Dongdong, ZHANG Yukai, ZHENG Junqiang, CHEN Yushi and XIANG Shuguang (711)
- Development of extraction tower unit module based on CAPE-OPEN standard ..... ZHANG Yukai, SI Dongdong, XIA Li, WANG Jianping and XIANG Shuguang (717)
- Steam Pipe Network Operation Evaluation Technology and Application ..... WU Rongwei, CHEN Zhenyu, YOU Tianrong, WANG Kuanxin, WU Yucheng and GU Yong (724)
- The application of advanced control system in the ethylene cracking furnace ..... WU Dongsheng, WANG Yuqin, ZHANG Liangliang and ZHEN Xinchun (729)

**Notes**

- Research on Application of Network Virtual Reality Technology in Coal Chemical Industry Training ..... XU Dongtao and LI Jixiong (735)

# 《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](mailto: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 9 期  
2017 年 9 月 28 日出版

**Computers and Applied Chemistry**  
(Monthly)\ (Started in 1984)  
Vol.34 No.9 2017  
September 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