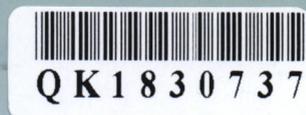


ISSN 1001-4160
CN11-3763/TP
CODEN JYYHE6

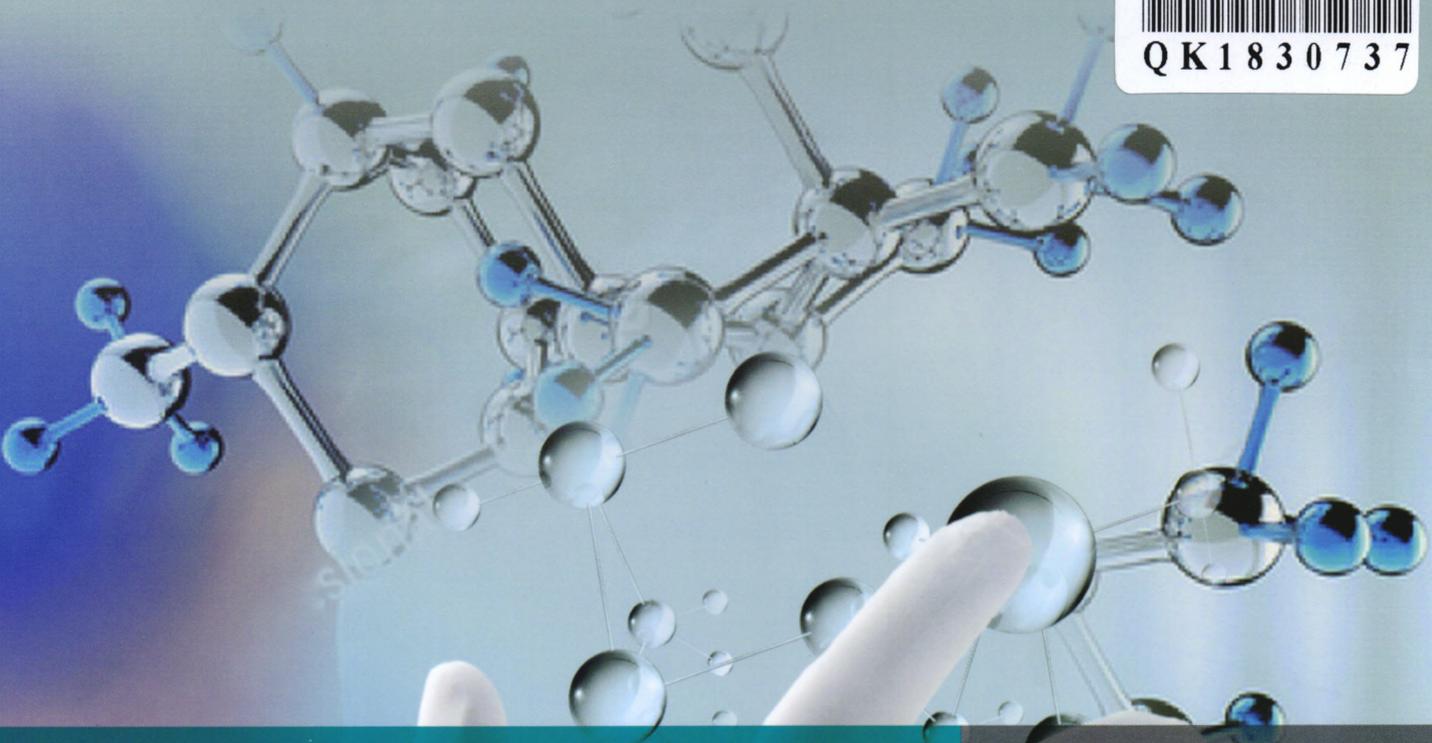
计算机与应用化学

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

第35卷 第4期 Vol.35 No.4



QK1830737



2018 04

ISSN 1001-4160



9 771001 416183

中国科学院 主管
中国化学学会过程工程研究所 主办
《计算机与应用化学》编辑部 出版

CONTENTS

Retrofit of cooling water system through dual supply loops
..... YANG Haipeng, WANG Yufei and FENG Xiao (259)

Adsorption and reaction of thiophene on CoMoS active sites
.....WANG Wei, ZHAO Xiaoguang, LI Huifeng, ZHOU Han and LI Mingfeng (269)

Evaluation study for edge importance and identifying drive edge in heat exchanger network based on complex network
..... LIU Xiaoqiang, WANG Zheng, DONG Yunqing, YUAN Jianbao and QIN Yan (277)

QSPR study on the melting points of some organic compounds based on the classification of the samples by K-nearest neighbor, K-means clustering method and projection pursuit algorithm
..... MA Xin and ZHANG Yaxiong (290)

Theoretical study on the structure and properties of polynitromethylazofurazan derivatives
..... LIAN Peng, CHEN Song, KANG Chao, ZHANG Yaoxuan, FAN Xinchun and LAI Weipeng (301)

Molecular dynamic simulation on glass transition temperatures of energetic binders
..... ZENG Xiulin, WANG Huan, ZHANG Changshan and JU Xuehai (310)

Molecular dynamic simulation on glass transition temperatures of energetic binders
..... WANG Yan, WU Zhe, WANG Lexiang and LING Dan (317)

Correlation between the ring stretching vibration Raman spectroscopic frequency and aromaticity for $[\eta^5-C_5X_5]^-$ (X=H,F~Br)
..... HAN Linan, LIU Zizhong, LIU Hongxia and SHEN Chenfei (325)

Pseudo-on-line optimal scheduling for 2-keto-L-gulonic acid fermentation processes
.....CUI Lei, XU Tao and WANG Zhifeng (333)

Application of hydrogen balance and optimization technology in Qilu petrochemical company
..... SU Yaodong (341)

计算机与应用化学

JISUANJI YU YINGYONG HUAXUE

第 35 卷 第 4 期

2018 年 4 月

目 录

采用双供水回路的循环水系统改造	杨海鹏、王彧斐、冯霄 (259)
噻吩在钴钼硫活性中心上的吸附及反应化学研究	王薇、赵晓光、李会峰、周涵、李明丰 (269)
基于复杂网络理论的换热网络边重要性排序及其控制驱动边识别	刘晓强、王政、董云青、袁健宝、秦艳 (277)
K-最近邻、K 均值聚类法和投影寻踪模式识别方法用于有机物熔点的定量构效关系研究	马昕、张雅雄 (290)
多硝甲基氧化偶氮咪唑衍生物结构与性能的理论研究	廉鹏、陈松、康超、张么玄、范鑫辰、来蔚鹏 (301)
含能黏合剂玻璃化转变温度的分子动力学模拟	曾秀琳、王欢、张常山、居学海 (310)
基于时序模型系数的半导体批次过程故障诊断	王妍、吴哲、王乐祥、凌丹 (317)
$[\eta^5\text{-C}_5\text{X}_5]^-$ (X=H,F~Br) 的芳香性及其与拉曼光谱的相关性	韩立楠、刘子忠、刘红霞、沈臣飞 (325)
古龙酸工业发酵过程的拟在线补料优化	崔蕾、徐涛、汪志锋 (333)
氢气平衡与优化技术在齐鲁石化的应用	苏耀东 (341)

《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。

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、陈可先

计算机与应用化学

(月刊 1984 年创刊)

2018 年 第 35 卷 第 4 期

2018 年 4 月 28 日出版

Computers and Applied Chemistry

(Monthly Since 1984)

Vol.35 No.4 2018

April 28, 2018

《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
CN 11-3763/TP