

ISS QK1922140

CN11-3763/TP

CODEN JYYHE6

# 计算机与应用化学

# **COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY**

第36卷 第1期 Vol.36 No.1

	1	H	2	He																																	
氢	Hydrogen	1 (0.078)	氦	helium																																	
锂	Lithium	3 (0.078)	铍	boron																																	
钠	Sodium	11 (0.078)	镁	magnesium																																	
钾	Potassium	19 (0.078)	钙	calcium																																	
铷	Rubidium	37 (0.078)	锶	sodium																																	
铯	Cesium	55 (0.078)	钡	barium																																	
钫	Francium	87 (0.078)	镭	radium																																	
			锕系	actinoids																																	
3	锂 Li	4	铍 Be																																		
5	硼 B	6	碳 C	7	氮 N	8	氧 O	9	氟 F	10	氖 Ne																										
11	钠 Na	12	镁 Mg	13	硼 B	14	碳 C	15	氮 N	16	氧 O	17	氟 F																								
19	钾 K	20	钙 Ca	21	钪 Sc	22	钛 Ti	23	钒 V	24	铬 Cr	25	锰 Mn	26	铁 Fe	27	钴 Co	28	镍 Ni	29	铜 Cu	30	锌 Zn	31	镓 Ga	32	铟 In	33	锗 Ge	34	磷 P	35	硫 S	36	氯 Cl	37	氩 Ar
37	铷 Rb	38	锶 Sr	39	钇 Y	40	锆 Zr	41	铌 Nb	42	钽 Ta	43	钼 Mo	44	钌 Ru	45	铑 Rh	46	钯 Pd	47	银 Ag	48	镉 Cd	49	锎 Cf	50	锡 Sn	51	锑 Sb	52	碲 Te	53	碘 Iodine	54	氙 Xe		
55	铯 Cs	56	钡 Ba	57-71	铪 Hf	72	铪 Hf	73	钽 Ta	74	钨 W	75	铼 Re	76	锇 Os	77	铱 Ir	78	铂 Pt	79	金 Au	80	汞 Hg	81	铊 Tl	82	铅 Pb	83	铋 Bi	84	钋 Po	85	砹 At	86	氡 Rn		
87	钫 Fr	88	镭 Ra	89-103	锕系 actinoids	104	𬬻 Rf	105	𬭊 Dubnium	106	镆 Bk	107	镆 Bk	108	镆 Hassium	109	镆 Me	110	镆 Darmstadtium	111	镆 Roentgenium	112	镆 Cn	113	镆 Nh	114	𫓧 Th	115	镆 Mc	116	𫟷 Lv	117	𫟷 Ts	118	𫟷 Og		

国际化学元素周期表主题年纪念版

**2019 01**



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36卷 第1期

2019年2月

### 目 录

基于 ILNS-SVDD 的多工况过程故障检测应用研究 谢彦红、薛志强、冯立伟、张成、李元 .....	(1)
多时变扰动下的 PID 控制性能评估 徐锐、王志国、赵顺毅、刘飞 .....	(9)
基于 CAPE-OPEN 标准的 Gibbs 反应器单元模块开发 郑俊强、孙晓岩、王建平、曹晓荣、项曙光 .....	(17)
喹诺酮酸类 HIV-1 整合酶链转移抑制剂的 2D-QSAR 研究 康家雄、朱江、李爱秀、肖泽云、李凯 .....	(24)
基于 HDH 的沼液浓缩过程的厂级动态控制设计 李想、薄翠梅、李俊、张广明、李洋、凌祥 .....	(35)
页岩油中芳烃加氢集总反应动力学研究 代飞、张雅琳、王刚、王燕、王二强、王红岩、李春山 .....	(43)
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 微观水合结构 DFT 研究 刘红艳、周永全、房春晖、朱发岩、张文倩、韩丽 .....	(50)
基于 SolidWorks 的换热器管板参数化设计 周安吉、阎志祥、雪冰峰、史彬、鄢烈祥 .....	(65)
物联网中的无线传感器网络技术综述 郭志鹏、李娟、赵友刚、官洪民、韩仲志 .....	(72)
RIPP 汽油精准调合技术 王雁君、张蕾、房輝、王鑫磊 .....	(84)
汽油管道调合优化控制方法及半实物仿真实验平台的研究 苏伟、宫会彬、白锐 .....	(91)

## **CONTENTS**

- Research on application of fault detection based on ILNS-SVDD in multi-state process  
*XIE Yanhong, XUE Zhiqiang, FENG Liwei, ZHANG Cheng and LI Yuan* .....(1)
- Performance assessment of PID control with multiple time-varying disturbance  
*XU Rui, WANG Zhiguo, ZHAO Shunyi and LIU Fei* .....(9)
- Development of Gibbs reactor unit module based on CAPE-OPEN standard  
*ZHENG Junqiang, SUN Xiaoyan, WANG Jianping, CAO Xiaorong and XIANG Shuguang* .....(17)
- 2D-QSAR study on quinolone carboxylic acids as integrase strand transfer inhibitors of HIV-1  
*KANG Jiaxiong, ZHU Jiang, LI Aixiu, XIAO Zeyun and LI Kai* .....(24)
- Plantwide dynamic control design of biogas concentration process based on HDH  
*LI Xiang, BO Cuimei, LI Jun, ZHANG Guangming, LI Yang and LIN Xiang* .....(35)
- Lumping reaction kinetics of aromatics hydrogenation in shale oil  
*DAI Fei, ZHANG Yalin, WANG Gang, WANG Yan, WANG Erqiang, WANG Hongyan and LI Chunshan* .....(43)
- DFT study on microstructure of  $\text{SO}_4^{2-}$   
*LIU Hongyan, ZHOU Yongquan, FANG Chunhui, ZHU Fayan, ZHANG Wenqian and HAN Li* .....(50)
- Tube sheet parametric design of heat exchanger based on SolidWorks  
*ZHOU Anji, YAN Zhixiang, XUE Bingfeng, SHI Bin and YAN Liexiang* .....(65)
- Review of wireless sensor networks technology in internet of things  
*GUO Zhipeng, LI Juan, Zhao Yougang, Guan Hongmin and Han Zhongzhi* .....(72)
- RIPP Precise gasoline blending technology for gasoline production  
*WANG Yanjun, ZHANG Lei, FANG Wei and WANG Xinlei* .....(84)
- The optimization control method of gasoline pipeline and the research of semi-physical simulation experiment platform  
*SU Wei, GONG Huibin and BAI Rui* .....(91)

## 郑重声明

有不法分子冒充《计算机与应用化学》编辑部设立假网站或者冒充编辑部发送邮件骗取版面费和审稿费，请各位仔细甄别。《计算机与应用化学》编辑部不允许以个人姓名作为收款人，与各位读者与作者的官方联系方式如下，其它均为假冒，特此声明。

编辑部网站及在线投稿入口：

<http://jsyh.cbpt.cnki.net>

通讯地址：北京市海淀区中关村北二街 1 号中国科学院过程所  
《计算机与应用化学》编辑部

微信公众号：ComputApplChem

E-mail: jshx@ipe.ac.cn

QQ 群：248805925

副主编：陈可先

学科责任编辑：李杰、邱彤、陈可先

青年编委：邓春 高小永 廖祖维 刘安敏 刘玉柱 焦龙 王彧斐 吴志生 许映杰 张宁 周寅宁  
周永全



## 计算机与应用化学

(双月刊 1984 年创刊)

2019 年 第 36 卷 第 1 期

2019 年 2 月 28 日出版

## Computers and Applied Chemistry

(Bimonthly Since 1984)

Vol.36 No.1 2019

February 28, 2018

《计算机与应用化学》编辑部版权所有 违者必究

Copyright © Editorial Board of Computers and Applied Chemistry

主管单位：中国科学院

Editor in Chief: WANG Jiming

主办单位：中国科学院过程工程研究所

Executive Editor: WANG Hong

主编：王基铭

Editor: ZHANG Tao

总编辑：王红

Published by Editorial Board of Computers and Applied Chemistry

出版单位：《计算机与应用化学》编辑部

Address: 1 Zhongguancun No.2 North Street, Haidian District,

地址：北京市海淀区中关村北二街 1 号

Beijing 100190, China

邮政编码：100190

Email: jshx@ipe.ac.cn

Email: jshx@ipe.ac.cn

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

印刷单位：北京宝昌彩色印刷有限公司

Domestic Distributed by Local Post Offices

国内发行：全国各地邮电局

Abroad Distributed by China International Book Trading

国外发行：中国国际图书贸易总公司中文报刊科

Corporation; Order by the Editorial

广告经营许可证号：京海工商广字第 0141 号

ISSN 1001-4160

中国标准连续出版物号：ISSN 1001-4160  
CN 11-3763/TP



国内外公开发行  
国外发行代号：6346BM  
国内邮发代号：82-500  
零售价：60.00 元