


 I QK1934978
 CN11-3763/TP
 CODEN JYYHE6

计算机与应用化学

COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY

第36卷 第3期 Vol.36 No.3

1 H 氢 hydrogen 1.00784(7)																2 He 氦 helium 4.002602																			
3 Li 锂 lithium 6.941		4 Be 铍 beryllium 9.0122																		5 B 硼 boron 10.811		6 C 碳 carbon 12.011		7 N 氮 nitrogen 14.0064		8 O 氧 oxygen 15.999		9 F 氟 fluorine 18.998		10 Ne 氖 neon 20.180					
11 Na 钠 sodium 22.990		12 Mg 镁 magnesium 24.305																		13 Al 铝 aluminum 26.982		14 Si 硅 silicon 28.086		15 P 磷 phosphorus 30.974		16 S 硫 sulfur 32.06		17 Cl 氯 chlorine 35.45		18 Ar 氩 argon 39.948					
19 K 钾 potassium 39.098		20 Ca 钙 calcium 40.078		21 Sc 钪 scandium 44.956		22 Ti 钛 titanium 47.88		23 V 钒 vanadium 50.942		24 Cr 铬 chromium 51.996		25 Mn 锰 manganese 54.938		26 Fe 铁 iron 55.845		27 Co 钴 cobalt 58.933		28 Ni 镍 nickel 58.693		29 Cu 铜 copper 63.546		30 Zn 锌 zinc 65.38		31 Ga 镓 gallium 69.723		32 Ge 锗 germanium 72.631		33 As 砷 arsenic 74.922		34 Se 硒 selenium 78.971		35 Br 溴 bromine 79.904		36 Kr 氪 krypton 83.798	
37 Rb 铷 rubidium 85.468		38 Sr 锶 strontium 87.62		39 Y 钇 yttrium 88.906		40 Zr 锆 zirconium 91.224		41 Nb 铌 niobium 92.906		42 Mo 钼 molybdenum 95.94		43 Tc 锝 technetium 98.906		44 Ru 钌 ruthenium 101.07		45 Rh 铑 rhodium 101.07		46 Pd 钯 palladium 106.42		47 Ag 银 silver 107.87		48 Cd 镉 cadmium 112.41		49 In 铟 indium 114.82		50 Sn 锡 tin 118.71		51 Sb 锑 antimony 121.76		52 Te 碲 tellurium 127.6		53 I 碘 iodine 126.905		54 Xe 氙 xenon 131.29	
55 Cs 铯 caesium 132.91		56 Ba 钡 barium 137.33		57-71 镧系 lanthanoids		72 Hf 铪 hafnium 178.49		73 Ta 钽 tantalum 180.95		74 W 钨 tungsten 183.84		75 Re 铼 rhenium 186.21		76 Os 锇 osmium 190.23		77 Ir 铱 iridium 192.22		78 Pt 铂 platinum 195.08		79 Au 金 gold 196.97		80 Hg 汞 mercury 200.59		81 Tl 铊 thallium 204.38		82 Pb 铅 lead 207.2		83 Bi 铋 bismuth 208.98		84 Po 钋 polonium		85 At 砹 astatine		86 Rn 氡 radon	
87 Fr 钫 francium		88 Ra 镭 radium		89-103 锕系 actinoids		104 Rf 𨭇 rutherfordium		105 Db 𨭈 dubnium		106 Sg 𨭉 seaborgium		107 Bh 𨭊 bohrium		108 Hs 𨭋 hassium		109 Mt 𨭌 meitnerium		110 Ds 𨭍 darmstadtium		111 Rg 𨭎 roentgenium		112 Cn 𨭏 copernicium		113 Nh 𨭐 nihonium		114 Fl 𨭑 flerovium		115 Mc 𨭒 moscovium		116 Lv 𨭓 livermorium		117 Ts 𨭔 tennessine		118 Og 𨭕 oganesone	

57 La 镧 lanthanum 138.91	58 Ce 铈 cerium 140.12	59 Pr 镨 praseodymium 140.91	60 Nd 钕 neodymium 144.24	61 Pm 钷 promethium	62 Sm 钐 samarium 150.36	63 Eu 铕 europium 151.96	64 Gd 钆 gadolinium 157.25	65 Tb 铽 terbium 158.93	66 Dy 镝 dysprosium 162.50	67 Ho 铥 thulium 168.93	68 Er 铒 erbium 167.26	69 Tm 铥 thulium 168.93	70 Yb 镱 ytterbium 173.05	71 Lu 镥 lutetium 174.967
89 Ac 锕 actinium	90 Th 钍 thorium 232.04	91 Pa 镤 protactinium 231.04	92 U 铀 uranium 238.03	93 Np 镎 neptunium	94 Pu 钚 plutonium	95 Am 镅 americium	96 Cm 锔 curium	97 Bk 锫 berkelium	98 Cf 锿 californium	99 Es 镄 einsteinium	100 Fm 镆 fermium	101 Md 镅 mendelevium	102 No 镎 nobelium	103 Lr 铹 lawrencium

国际化学元素周期表主题年纪念版



2019 03



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 3 期

2019 年 6 月

目 录

电解质 NRTL 模型研究与开发 韩莎莎、孙晓岩、陈玉石、项曙光	(185)
进料位置对双组分精馏过程耗能原因的分析 李金莲、毛欣欣、张红梅、李丽丽、喻琴、吴红军、赵晶莹	(195)
AHP-TFN 在反应-再生系统 FTA 模型定量分析中的应用 李国友、闫春玮、宋成全、孟岩、王维江	(201)
多级闪蒸海水淡化系统的稳态模拟与优化 高寒寒、江爱朋、蒋恩辉、王剑、黄景涛	(212)
六种酪氨酸激酶抑制剂的电子结构与药效关系的理论研究 李祥辉、杨文胜、张小玲、于丹、倪碧莲、孙伟明	(223)
基于虚拟现实的安全教育系统与教学实践 徐圆、朱群雄	(234)
微通道内不同挡板结构液液混合的数值模拟 汪金、严生虎、张跃、刘建武、沈介发、付双成、陈代祥、辜顺林、马晓明	(238)
石化行业智能工厂能力成熟度模型研究 任崑、索寒生、招庚、徐逢露、王雨茜	(247)
基于自适应加权最小二乘支持向量机的芳烃产量软测量建模 赵超、陈肇泉、陈晓彦	(255)
取代苯及其衍生物电离能中的新取代基参数 李媛媛、陈冠凡、时统昊、赵龙、刘万强、曹晨忠	(265)
红曲黄色素降低胆固醇能力的 DFT 研究 刘轶、吕庆章	(274)
染料敏化太阳能电池中 N-环戊二烯基染料分子的理论研究 于子博、李天发、李经纬、刘群	(286)

CONTENTS

Research and development of electrolyte NRTL model
HAN Shasha, SUN Xiaoyan, CHEN Yushi and XIANG Shuguang.....(185)

Energy consumption analysis of feeding stage for two-component distillation process
LI Jinlian, MAO Xinxin, ZHANG Hongmei, LI Lili, YU Qin, WU Hongjun and ZHAO Jingying.....(195)

Application of AHP-TFN in quantitative analysis of FTA model of reaction-regeneration system
LI Guoyou, YAN Chunwei, SONG Chengquan, MENG Yan and WANG Weijiang(201)

Steady-state simulation and optimization of multi-stage flash desalination system
GAO Hanhan, JIANG Aipeng, JIANG Enhui, WANG Jian and HUANG Jingtao(212)

Theoretical study on the relationship between electronic structures and pharmaceutical effect of six tyrosine kinase inhibitors
LI Xianghui, YANG Wensheng, ZHANG XiaoLing, YU Dan, NI Bilian and SUN Weiming.....(223)

Safety education system and teaching practice based on virtual reality
XU Yuan and ZHU Qunxiong(234)

Numerical simulation of liquid-liquid mixing of different baffle structures in microchannels
WANG Jin, YAN Shenghu, ZHANG Yue, LIU Jianwu, SHEN Jiefa, FU Shuangcheng, CHEN Daixiang, GU Shunlin and MA Xiaoming.....(238)

Smart factory capability maturity model in petrochemical industry
REN Wei, SUO Hansheng, ZHAO Geng, XU Fenglu and WANG Yuxi.....(247)

A soft sensor modeling for aromatics yield based on adaptive weighted least squares support vector machine
ZHAO Chao, CHEN Zhaoquan and CHEN Xiaoyan.....(255)

A new substituent constant from IP of substituted benzenes
LI Yuanyuan, CHEN Guanfan, SHI Tonghao, ZHAO Long, LIU Wanqiang and CAO Chenzhong.....(265)

Cholesterol-lowering capability of monascus pigments based on DFT calculation
LIU Yi and LV Qingzhang.....(274)

Computational study of metal-free N-annulated perylene-based organic dyes for dye sensitized solar cell applications
YU Zibo, LI Tianfa, LI Jingwei and LIU Qun.....(286)

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3期

2019年6月28日出版

Computers and Applied Chemistry

(Bimonthly Since 1984)

Vol.36 No.3 2019

June 28, 2019

《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

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