

目 次

最优化方法及其工程应用

约束优化问题稳定序列二次规划方法研究综述	刘美杏, 简金宝(385)
线性比式和分式规划问题的分支定界算法	申培萍, 李丹华(392)
二次半定规划一个原始对偶路径跟踪算法	黎健玲, 王培培(396)
基于非精确数据的非光滑优化强次可行方向法	唐春明, 律金曼(404)
计及 CO ₂ 排放机组组合问题的加速广义 Benders 分解法	郑海艳(409)
求解线性逆问题的谱共轭梯度法	王华军, 王 硕, 曹义超(416)
非凸两分块问题乘子交替方向法的收敛性分析	邓 钊, 晁锦涛, 简金宝(422)
一种广义 BFGS Levenberg-Marquardt 算法	冀祥麟, 韦增欣(428)

功能材料与计算模拟

相场法研究初始微结构对晶粒长大的影响	罗志荣, 卢成健, 高英俊(432)
晶体相场模拟取向角对晶界湮没过程的影响	刘 瑶, 袁龙乐, 卢强华, 等(437)
双位错滑移运动的晶体相场模拟	杨瑞琳, 刘 瑶, 胡绪志, 等(443)
纳米级缺口起裂临界条件的晶体相场模拟	温振川, 宁岁婷, 张 睿, 等(448)
不同晶向取向的裂纹扩展演化模拟	黄礼琳, 叶 里, 胡绪志, 等(454)
晶界位错运动的空位晶体相场模拟	黄世叶, 李胜男, 胡绪志, 等(459)
基于无机 p 型 NiO 缓冲层的钙钛矿发光二极管发光特性研究	卢经文, 袁 文, 李德怀, 等(465)
拉应力作用下晶界位错运动过程的晶体相场模拟	叶 里, 胡绪志, 黄礼琳, 等(470)
晶体弹性行为的晶体相场模拟	叶 里, 黄礼琳, 孔令一, 等(474)

特邀栏目

龙江河水体重金属污染状况及健康风险评价	卢 秋, 邓渠成, 卢 苇, 等(478)
---------------------------	-----------------------

本期责任编辑: 尹 闯 陆 雁 米慧芝 竺利波 黎贞崇
英文审读: 严少敏 编务: 李智娟

CONTENTS

Optimization Methods and Their Applications in Engineering

An Overview of the Researches on Stabilized Sequential Quadratic Programming Methods for Constrained Optimization Problems *LIU Meixing, JIAN Jinbao* (385)

A Branch and Bound Algorithm for the Sum of Linear Ratios Problem
..... *SHEN Peiping, LI Danhua* (392)

A Primal-dual Path-following Algorithm for Quadratic Semi-definite Programming
..... *LI Jianling, WANG Peipei* (396)

Strongly Sub-feasible Direction Method with Inexact Data for Nonsmooth Optimization
..... *TANG Chunming, LV Jinman* (404)

Accelerating Generalized Benders Decomposition Method for the Unit Commitment Problem with CO₂-Emission *ZHENG Haiyan* (409)

A Spectral Conjugate Gradient Method for Solving Linear Inverse Problems
..... *WANG Huajun, WANG Shuo, CAO Yichao* (416)

Convergence Analysis of Alternating Direction Method of Multipliers for Two Block Nonconvex Problems *DENG Zhao, CHAO Miantao, JIAN Jinbao* (422)

A Generalized BFGS Levenberg-Marquardt Algorithm *JI Xianglin, WEI Zengxin* (428)

Functional Material and Computational Simulation

Phase Field Study on Effect of Initial Microstructure on Grain Growth
..... *LUO Zhirong, LU Chengjian, GAO Yingjun* (432)

Phase-field-crystal Simulation of Effect of Different Orientation Angle on Annihilation of Grain Boundary *LIU Yao, YUAN Longle, LU Qianghua, et al.* (437)

Phase-field-crystal Simulation of Double Dislocation Gliding
..... *YANG Ruilin, LIU Yao, HU Xuzhi, et al.* (443)

Phase-field-crystal Simulation of Critical Conditions for the Crack Initiation of Nanoscale Notch
..... *WEN Zhenchuan, NING Suiting, ZHANG Rui, et al.* (448)

Simulation Study of Crack Propagation and Evolution in Different Crystal Orientations
..... *HUANG Lilin, YE Li, HU Xuzhi, et al.* (454)

Vacancy Phase-field-crystal Simulation of Dislocation Motion of Grain Boundary
..... *HUANG Shiye, LI Shengnan, HU Xuzhi, et al.* (459)

Improved Performance by Introducing Inorganic p-Type NiO Layer for Perovskite Light-emitting Diodes *LU Jingwen, YUAN Wen, LI Dehuai, et al.* (465)

Phase-field-crystal Simulation of Grain Boundary Dislocation Motion Under Tensile Stress
..... *YE Li, HU Xuzhi, HUANG Lilin, et al.* (470)

Phase-field-crystal Simulation for Elastic Behavior of Crystals
..... *YE Li, HUANG Lilin, KONG Lingyi, et al.* (474)

Special Columns

Assessment on the Status and Health Risks of Heavy Metal Pollutions of Longjiang River
..... *LU Qiu, DENG Qucheng, LU Wei, et al.* (478)

主 编: 黄日波

Chief Editor: Huang Ribo

副主编: 钟会超 何 求 陈 波

Associate Editors: Zhong Huichao He Qiu Chen Bo

编辑部主任: 黎贞崇

Director of Editorial Office: Li Zhenchong

编 辑: 尹 闯 陆 雁 米慧芝 陈小玲 竺利波 黎贞崇

Editors: Yin Chuang Lu Yan Mi Huizhi Chen Xiaoling Zhu Libo Li Zhenchong

编委(兼栏目主编,按姓氏笔画顺序排列):

Members of Editorial Board(Doubles as Editors-in-Chief, the Order of Names is According to Alphabetical Order):

丁兰平 Ding Lanping

牛建峰 Niu Jianfeng

韦宇拓 Wei Yutuo

刘布鸣 Liu Buming

吴 光 Wu Guang

何 求 He Qiu

陈 波 Chen Bo

陈武华 Chen Wuhua

何宜军 He Yijun

李宝泉 Li Baoquan

李陶深 Li Taoshen

范航清 Fan Hangqing

罗海鹏 Luo Haipeng

钟会超 Zhong Huichao

郭 进 Guo Jin

高英俊 Gao Yingjun

梁达奉 Liang Dafeng

黄日波 Huang Ribo

黄庶识 Huang Shushi

温远光 Wen Yuanguang

童张法 Tong Zhangfa

简金宝 Jian Jinbao

缪剑华 Miao Jianhua

黎贞崇 Li Zhenchong

广 西 科 学 GUANGXI KEXUE

2016 年 10 月 第 23 卷 第 5 期 Vol. 23 No. 5 October 2016

主管单位: 广西壮族自治区科学技术厅

Supervised by Department of Science and Technology of Guangxi Zhuang Autonomous Region

主办单位: 广西科学院、广西壮族自治区科学技术协会

Sponsored by Guangxi Academy of Sciences, Association for Science and Technology of Guangxi Zhuang Autonomous Region

协办单位: 广西壮族自治区计算中心

Co-sponsored by Computing Center of Guangxi Zhuang Autonomous Region

编辑出版:《广西科学》编辑部〔广西南宁市大岭路 98 号 530007 电话:(0771)2503923,2503999 传真:(0771)2503923〕

Edited & Published by the Editorial Office of *Guangxi Sciences*. Add: 98, Dalinglu, Nanning, Guangxi, 530007, China.

Telephone: (0771)2503923, 2503999; Fax: (0771)2503923; E-mail: gxkxbjb@vip.126.com

网址 Web Site: <http://gxkk.cbpt.cnki.net/>

印 刷: 广西瑞丰印务有限公司

Printed by Guangxi Ruifeng Printing Co., Ltd

国内发行: 广西科学编辑部

Domestic Distributed by the Editorial Office of *Guangxi Sciences*

海外发行: 中国出版对外贸易总公司(北京 782 信箱)

Overseas Distributed by China National Publishing Industry Trading Corporation(P.O.Box 782, Beijing, China)

刊 期: 1994 年创刊, 双月刊, 2 月、4 月、6 月、8 月、10 月、12 月出版。

Periodical: Started in 1994, Bimonthly, Issued in February, April, June, August, October and December.

刊 号: ISSN 1005-9164
CN 45-1206/G3

国内定价: 10.00 元