

文章编号: 1006-3080(2011)03-0340-06

基于组合模型的交通流量预测方法

丛新宇, 虞慧群, 范贵生

(华东理工大学计算机科学与工程系, 上海 200237)

摘要: 随着智能交通系统的蓬勃发展, 交通控制和交通流诱导成为智能交通系统(ITS)研究的热门问题, 而实现交通控制诱导的关键问题是实时准确的短时交通流量预测, 预测的精度直接影响交通控制和诱导的效果。为此, 提出基于组合模型的交通流量预测方法, 该方法将历史趋势模型和多元回归模型加权组合以建立组合预测模型, 并利用加权平均的方法, 对较精确的预测值赋予较大的权重, 从而提高模型预测的精度。通过对2009年上海城市交通流量预测结果的分析, 证明该方法可提高预测准确度。

关键词: 交通流量预测; 组合模型; 历史趋势模型; 多元回归模型

中图分类号: TP311

文献标志码: A

Traffic Flow Forecasting Based on Combination Model

CONG Xin-yu, YU Hui-qun, FAN Gui-sheng

(Department of Computer Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: With the vigorous development of intelligent transportation systems(ITS), traffic control and traffic guidance have become a hot research issue. Real-time and accurate short-term forecasting of traffic flow is critical to traffic control and guidance, and the accuracy of forecasting directly influences the effect of traffic control and guidance. In order to improve forecast accuracy, this paper proposes a traffic flow forecasting method based on combination model, in which the historical trend model and the multiple regression model are weightedly combined to establish a forecasting model. Moreover, for the forecasting values of better accuracy, a larger weight will be given. By analyzing the forecasting results of Shanghai's traffic flow in 2009, it is shown that the proposed method can improve the accuracy of forecast.

Key words: traffic flow forecasting; combination model; historical trend model; multiple regression model

近年来, 随着社会经济的飞速发展, 诸如私家轿车等个人交通工具的迅速普及, 导致城市的交通流量逐年递增, 而城市的道路扩建速度往往无法满足交通流量日益增长的要求, 城市交通拥堵、交通事故等问题已成为困扰城市发展和居民出行的重要问

题。因此, 智能交通系统(Intelligent Transportation System, ITS)成为人们关注的热点。交通控制和疏导系统是ITS研究的核心部分, 而实现交通疏导系统的关键是实时、准确和高效的交通流量预测。交通流量是判断道路交通状态的一个关键因素。交

收稿日期: 2010-11-01

基金项目: 国家自然科学基金(60773094); 上海市曙光计划(07SG32)

作者简介: 丛新宇(1986), 男, 博士生, 主要研究方向为智能交通预测建模。

通讯联系人: 虞慧群, E-mail: yhq@ecust.edu.cn

通流量的预测可以为出行者提供最佳出行路线,从而缓解道路交通拥堵,避免社会资源的浪费^[1]。

交通流量预测近年来在国际上得到了比较多的关注,研究者们做了大量的工作,取得了显著的研究成果^[2-3]。较早得到研究的是历史趋势模型,其优点是简单易懂,便于应用。但缺点是其预测是静态的,无法反映交通流量的时变性,无法克服随机因素干扰的影响。1899年高尔顿把双变量的正态分布方法运用于传统的统计学,首次提出了“多元回归”的思想。60年代以后,随着计算机科学的发展,多元回归分析方法在许多学科的研究中得到了越来越广泛的应用^[4]。多元回归分析可以定量地描述某一现象和某些因素的线形函数关系,从而可以有效地预测某种现象的发生和发展。1969年Bates和Granger^[5]提出了组合预测的思想。所谓组合预测是对同一个对象,选用多种模型预测进行预测,并将其预测结果组合得到新的预测值。因此,即使一个预测结果不理想的模型,当与另一个较好的预测模型组合后,同样可以提升预测效果。组合模型能够更大化地利用信息,比单一预测方法更科学、有效。

本文首先以上海城市交通流量的历史数据为基础,建立历史趋势和多元回归预测模型,进行交通流量预测,并在预测结果的基础上,合理计算权重,建立组合模型进行预测。最后通过对各模型预测结果的分析比较,说明组合预测模型相对前两种单一模型取得了更精确的预测效果。

1 组合模型算法

组合预测模型是将几种预测方法所得的预测结果选取适当的权重进行加权平均的一种预测方法。设对某一预测对象采用 m 种预测方法,观测 n 个时刻,其中在 $t(t=1, 2, \dots, n)$ 时刻得到 m 种模型的预测值 $f_{it}(i=1, 2, \dots, m; t=1, 2, \dots, n)$,并选取一组适当的权重系数 $W(w_1, w_2, \dots, w_m)$,其中 $w_i(i=1, 2, \dots, m)$ 为第 i 种预测方法在组合预测模型中的权重系数,且满足 $\sum_{i=1}^m w_i = 1$,则 t 时刻组合预测模型的

预测值可表示为 $f_{ct} = \sum_{i=1}^m w_i f_{it}$ ^[6]。

1.1 算法权系数的确定

提高组合预测质量的关键问题是权系数的确定。最优加权法是比较重要的组合预测方法,这种方法通过对组合预测模型的预测误差平方和求极小值,从而获得最优加权系数^[7]。

设 y_t 为 t 时刻的实际观测值, $f_{it}(i=1, 2, \dots, m; t=1, 2, \dots, n)$ 为第 i 种预测模型在 t 时刻的预测值, $e_{it}=y_t-f_{it}$ 为第 i 种模型在 t 时刻的预测误差,

则组合模型在 t 时刻的预测误差 $e_t = \sum_{i=1}^m w_i e_{it}$,若

记组合模型的预测误差平方和为 J ,则 $J = \sum_{t=1}^n e_t^2$ 。

基于条件 $\sum_{i=1}^m w_i = 1$ 对 J 求极小值,并记

$$E = \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^n e_{1t}^2 & \sum_{t=1}^n e_{1t}e_{2t} & \dots & \sum_{t=1}^n e_{1t}e_{mt} \\ \sum_{t=1}^n e_{2t}e_{1t} & \sum_{t=1}^n e_{2t}^2 & \dots & \sum_{t=1}^n e_{2t}e_{mt} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{t=1}^n e_{mt}e_{1t} & \sum_{t=1}^n e_{mt}e_{2t} & \dots & \sum_{t=1}^n e_{mt}^2 \end{pmatrix}$$

$W = [w_1, w_2, \dots, w_m]^T$,则 J 可以表示为 $J = W^T E W$ 。进一步记 $R = [1, 1, \dots, 1]^T$,则条件

$\sum_{i=1}^m w_i = 1$ 可改写为 $R^T W = 1$ 。那么求最优加权系数问题可转化为以下最优化问题:

$$\begin{cases} \min J = W^T E W \\ R^T W = 1 \end{cases}$$

根据Lagrangian乘数法求条件极值问题,可推得最优加权系数

$$W = \frac{E^{-1}R}{R^T E^{-1}R} \quad (1)$$

1.2 算法使用模型

在组合模型权重计算过程中将使用到历史趋势模型和多元回归模型。

1.2.1 历史趋势模型 历史趋势模型基于如下假设:交通流量的增减总体上是趋于稳定的,即相同类别的日子(比如不同星期的星期一)的交通流特性在对应的每一个时间段具有相似的趋势,从而可以简单地使用该路段的历史数据。历史趋势模型具体采用的算法为指数平滑法。

由于历史上不同周相同天同一时刻的交通流量有一定的历史趋势,对其交通流量取时间序列 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_t$,并选定平滑系数,按式(2)~式(4)求出1~3次的平滑值。

(1) 指数平滑值的生成

$$S_0^{(i)} = x_1 (i=1, 2, 3) \quad (2)$$

$$S_t^{(0)} = x_t (t > 0) \quad (3)$$

$$S_t^{(i)} = \alpha S_t^{(i-1)} + (1-\alpha) S_{t-1}^{(i)} \quad (t > 0; i=1, 2, 3) \quad (4)$$

式中: $S_t^{(i)}$ ($i=1, 2, 3$) 表示交通流量的时间序列在 t 时刻第 i 次 ($i=1, 2, 3$) 的平滑值; $S_t^{(0)}$ 表示交通流量的时间序列在 t 时刻的值, 交通流量为 x_t ; $S_0^{(i)}$ ($i=1, 2, 3$) 为平滑初始值, 交通流量为 x_1 ; α 表示平滑系数, 通常先根据时间序列的数据波动大小, 参照经验确定其取值范围。一般如果数据波动较小, α 取较小值 (0.1~0.4); 反之如果数据波动较大, α 取较大值 (0.5~0.8)。然后取几个不同的 α 值进行试算, 选取预测误差最小的 α 值。

(2) 建立预测模型。在选定平滑系数 α 并求出指数平滑值 $S_t^{(i)}$ ($t>0; i=1, 2, 3$) 后, 可建立如下数学模型:

$$F_{t+T} = a_t + b_t T + c_t T^2 \quad (5)$$

其中

$$a_t = 3S_t^{(1)} - 3S_t^{(2)} + S_t^{(3)} \quad (6)$$

$$b_t = \frac{\alpha}{2(1-\alpha)^2} [(6-5\alpha)S_t^{(1)} - 2(5-4\alpha)S_t^{(2)} + (4-3\alpha)S_t^{(3)}] \quad (7)$$

$$c_t = \frac{\alpha^2}{2(1-\alpha)^2} (S_t^{(1)} - 2S_t^{(2)} + S_t^{(3)}) \quad (8)$$

式中: T 表示自 t 时刻起向前或向后预测的时期数; F_{t+T} 表示 $t+T$ 时刻的预测值。

1.2.2 多元回归模型 在交通流量的预测中, 许多因素和交通流量之间有着一定的联系, 比如车辆的速度、道路状况和周边路段的交通流量等, 这些因素影响着交通流量的变化。通过研究这些因素之间的关系, 得出交通流量随这些因素变化的规律, 从而可对交通流量进行预测。回归分析是应用统计方法对大量的观测数据进行整理、分析和研究, 从而得出反映事物内部规律性的一些结论^[8]。将多个因素设为自变量, 交通流量设为因变量, 用多元回归法分析交通流量和各个影响因素之间的关系, 从而对交通流量进行预测^[9-10]。

多元回归模型为

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_k X_k + u$$

其中 u 为随机扰动观测值。假设 k 个影响因素, n 个观测值, 对于第 i 个观测值有

$$Y_i = b_0 + b_1 X_{1i} + b_2 X_{2i} + \dots + b_k X_{ki} + u_i \\ i = 1, 2, \dots, n$$

表示为矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{kn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$$

即: $Y = Xb + u$ 。

令参数 b_0, b_1, \dots, b_k 估计值为 $\hat{b}_0, \hat{b}_1, \dots, \hat{b}_k$, 并取 Q 为观测值与预测值的偏差平方和, 即 $Q = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{b}_0 - \hat{b}_1 x_{1i} - \hat{b}_2 x_{2i} - \dots - \hat{b}_k x_{ki})^2$, 为使 Q 达到最小值, 由最小二乘法分别对 b_0, b_1, \dots, b_k 求偏导并令其为 0, 整理得

$$\begin{cases} nb_0 + \hat{b}_1 \sum_{i=1}^n x_{1i} + \hat{b}_2 \sum_{i=1}^n x_{2i} + \dots + \\ \hat{b}_k \sum_{i=1}^n x_{ki} = \sum_{i=1}^n Y_i \\ \hat{b}_0 \sum_{i=1}^n x_{1i} + \hat{b}_1 \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 + \hat{b}_2 \sum_{i=1}^n x_{2i} x_{1i} + \dots + \\ \hat{b}_k \sum_{i=1}^n x_{ki} x_{1i} = \sum_{i=1}^n x_{1i} Y_i \\ \vdots \\ \hat{b}_0 \sum_{i=1}^n x_{ki} + \hat{b}_1 \sum_{i=1}^n x_{1i} x_{ki} + \hat{b}_2 \sum_{i=1}^n x_{2i} x_{ki} + \dots + \\ \hat{b}_k \sum_{i=1}^n x_{ki}^2 = \sum_{i=1}^n x_{ki} Y_i \end{cases} \quad (9)$$

求解上述联立方程组可得 $\hat{b}_0, \hat{b}_1, \dots, \hat{b}_k$ 的值, 由此可得模型 $Y_i = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 X_{1i} + \hat{b}_2 X_{2i} + \dots + \hat{b}_k X_{ki}$ 。

2 交通流量预测实现与分析

为了证明组合模型的有效性和准确性, 获取更精确的预测精度, 取时间段 [2009-03-09] ~ [2009-05-25] 内, 每周一早上 10:00, 路段为东侧鲁班立交入口匝道至徐家汇下匝道, 以 1 h 为测量间隔获得的交通流量, 分别对 3 种模型进行检验。其中将时间段 [2009-03-09] ~ [2009-04-20] 的数据作为训练数据, 时间段 [2009-04-27] ~ [2009-05-25] 的数据作为测试数据, 如表 1 所示。

2.1 模型的求解

2.1.1 历史趋势模型 取预测路段历史数据表中的训练数据作为模型的输入, 由于数据波动不大, 平滑系数 α 取值较小。通过不断试算 α 取 $\alpha=0.35$, 计算得到指数平滑值, 如表 2 所示。

取 [2009-04-20] 为预测起始点, 即为 t 时刻, 按照式 (6)~式 (8), 计算得到模型参数 $a_t = 11\,068.6$, $b_t = 254.29$, $c_t = 11.37$, 由此得到预测模型 $F_{t+T} = 11\,068.6 + 254.29T + 11.37T^2$ 。

表 1 预测路段历史数据表

Table 1 Historical data of forecast road

Date	Flow	Date	Flow
2009-03-09	9 768	2009-04-20	11 258
2009-03-16	9 980	2009-04-27	11 053
2009-03-23	10 388	2009-05-04	11 234
2009-03-30	10 542	2009-05-11	11 294
2009-04-06	10 964	2009-05-18	12 047
2009-04-13	10 242	2009-05-25	11 997

表 2 指数平滑值表

Table 2 Exponential smoothing value

Date	t	Real flow	Exponential smoothing value		
			$S_t^{(1)}$	$S_t^{(2)}$	$S_t^{(3)}$
2009-03-09	1	9 768	9 768.00	9 768.00	9 768.00
2009-03-16	2	9 980	9 842.20	9 793.97	9 777.08
2009-03-23	3	10 388	10 033.23	9 877.71	9 812.30
2009-03-30	4	10 542	10 211.29	9 994.46	9 876.05
2009-04-06	5	10 964	10 474.73	10 162.55	9 976.32
2009-04-13	6	10 242	10 393.27	10 243.30	10 069.76
2009-04-20	7	11 258	10 695.92	10 401.70	10 185.94

2.1.2 多元回归模型 表 3 数据为时间段[2009-03-09]~[2009-05-25]预测路段的交通流量、与预测路段相邻的两个路段的交通流量以及预测路段的平均车速。取表中训练数据作为模型的输入,并按照式(9)计算得回归系数 $\hat{b}_0 = 277.3$, $\hat{b}_1 = 1.28$, $\hat{b}_2 =$

0.92, $\hat{b}_3 = -1.92$, 由此得到多元回归预测模型为 $Y_i = 277.3 + 1.28x_{1i} + 0.92x_{2i} - 1.92x_{3i}$ 。

2.1.3 组合模型 将历史趋势模型和多元回归模型进行组合,得到组合模型在 t 时刻的预测值 $f_{at} = w_1 f_{1t} + w_2 f_{2t}$ ($t = 1, 2, \dots, n$), 其中 f_{1t} 和 f_{2t} 分别为历史趋势模型和多元回归模型在 t 时刻的预测值,并参照式(1),分别计算不同时刻历史趋势模型和多元回归模型的权重,结果如表 4 所示。

2.2 模型的预测结果

将计算得到的模型应用到历史数据中,使用不同模型针对测试数据进行预测,并针对训练数据进行回溯预测,得到预测值如表 5。图 1 为对于训练数据,交通流量实际值和各个模型回溯预测值的折线图;图 2 为对于测试数据,交通流量实际值和各个模型预测值的折线图。从图中可以看出,组合模型预测值折线与实际值折线最为贴近,预测效果最好。

2.3 模型分析比较

为了从数据上更直观地证明组合模型预测的优

表 3 预测路段与相邻路段历史数据表

Table 3 Historical data of forecast road and adjacent roads

Date	Flow	Flow of adjacent road		Average speed/ (km · h ⁻¹)
		1	2	
2009-03-09	9 768	2 286	7 434	44
2009-03-16	9 980	2 318	7 700	28
2009-03-23	10 388	1 940	8 352	52
2009-03-30	10 542	2 478	7 382	24
2009-04-06	10 964	2 236	8 544	54
2009-04-13	10 242	1 858	8 294	55
2009-04-20	11 258	2 322	8 804	29
2009-04-27	11 053	2 348	8 180	21
2009-05-04	11 234	2 230	8 383	27
2009-05-11	11 294	2 318	8 547	43
2009-05-18	12 047	2 301	8 853	55
2009-05-25	11 997	2 416	8 747	47

表 4 权系数表

Table 4 Weight value

Date	w_1	w_2
2009-04-27	0.15	0.85
2009-05-04	0.17	0.83
2009-05-11	0.22	0.78
2009-05-18	0.01	0.99
2009-05-25	0.48	0.52

越性,取平均绝对百分误差(MAPE)作为预测评价

基准。其中, $MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} \times 100 \right|$ (n 为预测次数, Y_i 为流量实际值, \hat{Y}_i 为流量预测值)。

分别对训练数据回溯预测和测试数据预测计算各模型的平均绝对百分误差,如表 6 所示。从表中可以看出,各模型的平均绝对百分误差值都小于 10,具有较高的预测精度。而组合模型的平均绝对百分误差小于各个单一模型,说明组合模型能均衡各单一预测模型的优点,具有更高的预测精度。此外,在单项模型的预测过程中,可能出现突变点,导致预测出现较大的偏差,比如表 5 中多元回归模型在时间[2009-05-18]的预测值出现了较大的误差,是一个突变点。而要修复突变点带来的影响,可能需要多个预测序列逐步修复,从而使整个模型预测精度降低。而组合模型预测过程中,即使遇到突变点,该突变点预测误差会在下一个预测权系数的计算过程中得到考虑,使该突变点所在模型的权系数降低,从而消除突变点对整个预测过程带来的影响,

表 5 各模型预测值表

Table 5 Forecast results of different models

Backward prediction of training data					Prediction of testing data				
Date	Real flow	Historical trend	Multiple regression	Combination	Date	Real flow	Historical trend	Multiple regression	Combination
2009-03-09	9 768	9 951.5	9 958.2	9 956.9	2009-04-27	11 053	11 334.3	10 768	10 852.9
2009-03-16	9 980	10 081.4	10 274.6	10 245.0	2009-05-04	11 234	11 622.6	10 792.2	10 933.4
2009-03-23	10 388	10 232.8	10 344.5	10 327.2	2009-05-11	11 294	11 934.7	11 025.0	11 225.1
2009-03-30	10 542	10 408.1	10 194.5	10 226.1	2009-05-18	12 047	12 267.6	11 261.7	11 271.7
2009-04-06	10 964	10 605.5	10 896.2	10 852.4	2009-05-25	11 997	12 623.7	11 326.8	11 949.3
2009-04-13	10 242	10 825.6	10 180.4	10 276.7					
2009-04-20	11 258	11 068.6	11 293.4	11 259.3					

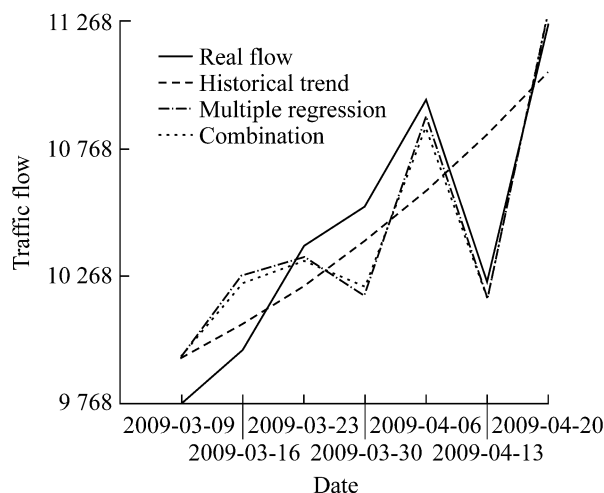


图 1 各模型回溯预测图

Fig. 1 Backward Prediction of different models

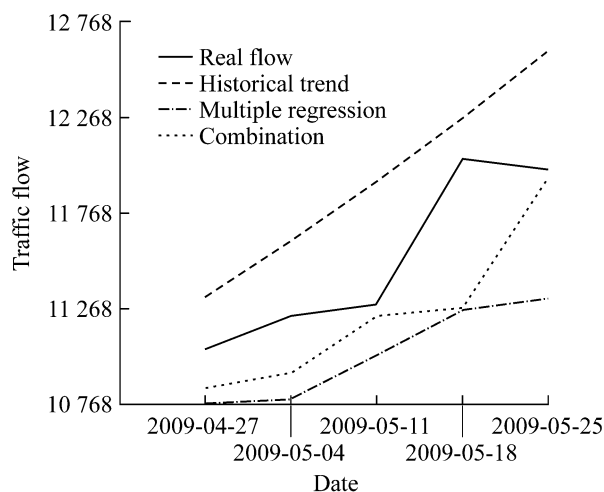


图 2 各模型预测图

Fig. 2 Prediction of different models

有效地提高了预测精度。如表 5 所示, 组合模型消除了多元回归模型突变点的影响, 其[2009-05-18]的预测误差在[2009-05-25]的预测中得到了修复。

表 6 各模型误差值表

Table 6 Error of different models

Model	MAPE	
	Backward prediction of training data	Prediction of testing data
Historical trend	2.33	3.74
Multiple regression	1.45	4.20
Combination	1.36	2.43

3 结束语

建立一个精确的城市交通流量预测模型是一项非常困难的工作, 因为交通流量是受人、车、路段和环境等因素的共同影响的。因此, 很难构造一种单一模型能够较好地准确预测交通流量。本文将组合模型应用于上海城市交通流量的预测, 通过赋予合理权重, 将历史趋势模型和多元回归模型加权组合建立组合预测模型。通过对预测结果的分析, 证明了组合模型能够均衡各单一模型的优点, 扬长避短, 具有更高的预测精度, 并且组合模型能够克服预测突变带来的误差, 具有较好的稳定性, 是一种能够有效预测交通流量的方法。但组合预测模型也存在一定的局限性, 由于组合模型的预测值是由各单一模型的预测值组合得到的, 如果各单一模型的预测值都不够精确的话, 那么组合模型也无法取得理想的预测效果。

参考文献:

- [1] 陆化普. 智能交通系统概论[M]. 北京: 人民交通出版社, 2004.
- [2] 刘静, 关伟. 交通流预测方法综述[J]. 公路交通科技, 2004.

- 21(3): 82-85.
- [3] 贺国光, 李宇, 马寿峰. 基于数学模型的短时交通流预测方法探讨[J]. 系统工程理论与实践, 2000, 20(12): 51-56.
- [4] 周纪芑. 回归分析[M]. 上海: 华东师范大学出版社, 1993.
- [5] Smith B L, Demetsky M J. Traffic flow forecasting: Comparison of modeling approaches[J]. Journal of Transportation Engineering, 1997, 123(4): 261-266.
- [6] 王莎莎, 陈安, 苏静, 等. 组合预测模型在中国 GDP 预测中的应用[J]. 山东大学学报: 工学版, 2009, 44(2): 2-4.
- [7] 易丹辉. 统计预测方法与应用[M]. 北京: 钟鼓统计出版社, 2001.
- [8] 何晓群, 刘文卿. 应用回归分析[M]. 北京: 中国人民大学出版社, 2001.
- [9] Smith B L, Williams B M, Oswald R K. Comparison of parametric and nonparametric models for traffic flow forecasting[J]. Transportation Research: Part C, 2002, 10: 303-321.
- [10] Clark Stephen. Traffic prediction using multivariate nonparametric regression[J]. Journal of Transportation Engineering, 2003, 129(2): 161-165.

第13届亚洲化学大会论文摘要

Spherical Polyelectrolyte Brushes Synthesized by Thermo-Controlled Emulsion Polymerization

XU Jun, WANG Xiang, WU Shuang, LI Li, GUO Xu-hong*

(State Key Laboratory of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: Nano-sized spherical polyelectrolyte brushes (SPB) which consist of a solid polystyrene core and a poly (acrylic acid) (PAA) shell were successfully prepared by thermo-controlled emulsion polymerization. During the preparation, a new home-made thermo-initiator which possesses an azo group and end C=C bonds at both ends was synthesized and employed. Dynamic light scattering (DLS) was used to determine the particle size and to monitor the growth of brushes from the core surface. The size of polyelectrolyte brushes changed significantly upon changing of pH which confirmed the formation of core-shell structure. The grafting density of PAA brushes was measured by hydrolysis of polyelectrolyte brushes in 2 mol/L NaOH aqueous solution which indicated the grafted PAA chains are dense enough to form a brush structure. SPBs are ideal candidates for metal ion sorbents, protein carriers and diagnostic tools after attaching diagnostic groups inside the brushes.

Modelling of Chlorobenzene Nitration by Mixed Acid in Stirred Tank Reactor

XU Wen-lin*, LIU Xiao

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225002, Jiangsu, China)

Abstract: A mathematical model of chlorobenzene nitration by mixed acid in the stirred tank reactor was set up, while the reaction was controlled simultaneously by both the nitration kinetics and mass transfer. The modelling equations were solved by the MATLAB program. The simulating results of the mathematical models that solved by the MATLAB program were coincident with the literature and the experiment results, which proved that this mathematical models, the parameters of model equations and the computing programs were correct and reliable. The nitration is controlled by mass transfer under industrialized conditions and controlled by nitration kinetics under the condition of low temperature and low D.V.S. The nitration can be strengthened by enhancing the mixing effect. These simulating results provide important theory criteria and technology parameters for experiment research and process industrialization design, amplification and operation optimization of chlorobenzene nitration by mixed acid in the stirred tank reactor.