

D-BAUG

Jahresbericht 2015

Annual Report 2015



Kris Villez, Alma Masic, EAWAG;
Sriniketh Srinivasan, Julien Billeter, Dominique Bonvin, EPFL

Interpretierbare Black-Box-Modelle

Konventionelle biokinetische Modelle basieren auf empirischen Beobachtungen. Die Modelle beschreiben die Effekte von Substratkonzentrationen auf Wachstums- und Absterberaten von Bakterien. Es gibt eine Reihe von unterschiedlichen Modellansätzen, was zur Folge hat, dass nicht nur Modellparameter sondern auch Modellstruktur geschätzt werden müssen. Eine flexiblere Modellstruktur ist notwendig, um räumliche und zeitliche Variabilität der qualitativen Verhaltensweisen annähern zu können.

Die Verhaltensweisen von fünf hypothetischen Bioreaktoren wurden mit unterschiedlichen biokinetischen Modellen simuliert (Abb. 1). Jedes Modell hat zwei Parameter und jeweils ein monotones und konkaves Profil, um die Substrataffinität zu beschreiben. Bei hohen Konzentrationen beschreiben alle Kinetiken ein Verhalten nullter Ordnung – bei tiefen Konzentrationen ein Verhalten erster Ordnung. Wie schnell die Kinetiken von nullter zur ersten Ordnung übergehen ist der wichtigste Unterschied zwischen den Kinetiken. In Abb. 2 sind simulierte Batchexperimente mit Rauschen dargestellt. Als Alternative zu dieser Vielzahl von Kinetiken wird eine Spline mit eingeschränkter Form (shape constrained spline, SCS) vorgeschlagen, um alle Kinetiken wiederzugeben. Diese SCS Funktion ist aus kubischen Polynomen zusammengestellt und ermöglicht jede monotone und konkav Funktion zu arbiträrer Präzision durch das Vergrößern der Anzahl der Polynome anzunähern. Dies wird in Abb. 1 dargestellt, wo eine SCS Funktion mit 26 Polynomen (27 Parametern) alle Kinetiken direkt abbilden kann. In der Praxis wird ein SCS Modell mit den Messwerten aus Batchexperimenten kalibriert (Abb. 2).

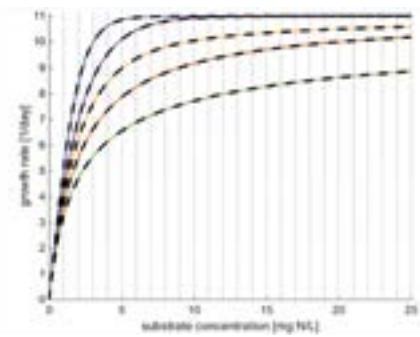
Die Anwendung einer einheitlichen Modellstruktur für alle Kinetiken ermöglicht die Entwicklung einer einheitlichen Strategie für Überwachung und Automatisierung, da man das Modellstrukturidentifizierungsproblem mit einem Parameterschätzungsproblem ersetzt. Aktuelle Resultate zeigen, dass das SCS Modell für diese Aufgabe ausreichend ist. Außerdem sichert die Einschränkung der Funktionsform die intuitive und mechanistische Interpretierbarkeit des SCS Modells.

Interpretable Black-box Models

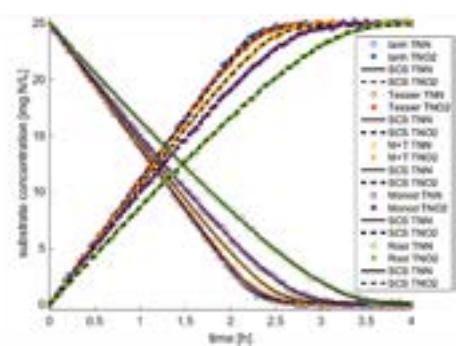
Conventional biokinetic modelling is based on empirical rate functions. These models describe concentration effects on the growth and decay rates of bacteria. However, the family of available models shows limited flexibility and therefore requires repeatedly solving model structure identification problems. To account for spatial and temporal variability, a new model structure is needed, where slight variations of qualitatively identical behaviors can be approximated.

Distinct biokinetic rate laws are used to simulate the behavior of five hypothesized biological reactors (Fig. 1). Each of the simulated rate laws has two parameters and a monotonic concave shape, which reflects a substrate affinity effect on the growth rate. Moreover, the rate laws emulate close to first-order behavior at low and zero-order behavior at high substrate concentrations. The rate laws differ in how fast the transition from zero- to first-order behavior occurs. Batch experiments are simulated to generate noisy substrate and product concentrations (Fig. 2). A shape-constrained spline rate (SCS) function is proposed to model each reactor. This SCS function is composed of cubic polynomial segments and can approximate any monotonic and concave function to arbitrary precision by increasing the number of segments. This is demonstrated by fitting an SCS function with 26 segments (27 parameters) to the simulated rate laws (Fig. 1). In practice, the model is fit to concentration measurements obtained in the batch experiments (Fig. 2).

The use of a unified model structure for all reactors facilitates the development of a one-size-fits-all strategy for monitoring and automation by replacing the difficult task of model structure selection with automated parameter optimization. Current results indicate that the proposed SCS model is an excellent candidate for this task. Moreover, enforcing shape constraints ensures that the SCS model interpretation remains intuitive and mechanistic.



1



2

|1
Fünf simulierte Kinetiken mit der gleichen monoton steigenden und konkaven Form. Das SCS Modell kann jedes Geschwindigkeitsgesetz gut annähern.

|2
Simulierte Batch Daten und beste Modellsimulation mit dem SCS Modell. Das SCS Modell bildet jedes der Experimente gut ab.

|1
Five simulated rate laws with the same fundamental isotonic and concave shape. The SCS model can approximate each rate law to satisfaction.

|2
Simulated batch data and best-fit model simulations with the shape constrained spline (SCS) model. The SCS model fits well to each data set.

HERAUSGEBER

Departement Bau, Umwelt und Geomatik

REDAKTIONSLIGUNG

Dr. Patrick O. Dilger

TEAM

Edith Altenburger (Lektorat, Versand)
Thomas Berchtold (Datenbank, Versand)

LAYOUT

qgraphics GmbH
Grafik + Design
Wädenswilerstrasse 11
CH-8712 Stäfa

FOTOS

ETH Zürich / D-BAUG

1. Auflage April 2016

2000 Exemplare

D-BAUG ist ClimatePartner

CO2-Äquivalente
550 kg
Unterstütztes Klimaschutzprojekt
Wasseraufbereitung
West-Kenia
Kenia
ClimatePartner-ID
www.climate-id.com/11700-1604-1001 →

Dieser Jahresbericht wurde auf Refutura Papier gedruckt. Refutura stammt zu 100% aus Altpapier, das dem Recyclingkreislauf entnommen wurde. Refutura wurde vom WWF auf Umweltverträglichkeit getestet und mit «exzellent» bewertet:
<http://checkyourpaper.panda.org/papers/855> →

PUBLISHED BY

Department of Civil, Environmental and Geomatic Engineering

EDITOR-IN-CHIEF

Dr. Patrick O. Dilger

TEAM

Edith Altenburger (proofreading, dispatch)
Thomas Berchtold (database, dispatch)

LAYOUT

qgraphics GmbH
Grafik + Design
Wädenswilerstrasse 11
CH-8712 Stäfa

PHOTOS

ETH Zurich / D-BAUG

1st Edition April 2016

2000 copies

D-BAUG is ClimatePartner

CO2-equivalent
550 kg
Supported climate protection project
Water preparation
West-Kenia
Kenia
ClimatePartner-ID
www.climate-id.com/11700-1604-1001 →

This Annual Report was printed on Refutura paper. Refutura is made out of 100% recycled paper, which was taken out of the waste recycling circle. Refutura has been tested by the WWF on its environmental compatibility and was rated "excellent":
<http://checkyourpaper.panda.org/papers/855> →



Druck | ID: 11700-1604-1001



