

УДК: 004.032.26, 519.63

Нейросетевое моделирование полной системы нитрификации аммония с идентификацией параметров

А. О. Гречнева, В. Д. Тарасов, Д. А. Тархов, А. В. Шатров^а

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29

E-mail: ^а shatrov_av@spbstu.ru

Получено 22.03.2026, после доработки — 22.04.2026.

Принято к публикации 19.05.2026.

В статье рассматривается применение метода физически информированных нейронных сетей для моделирования процесса нитрификации при очистке сточных вод. Актуальность работы обусловлена необходимостью повышения эффективности очистки и оперативного контроля за изменениями параметров в реальном времени, что затруднительно при использовании традиционных подходов, таких как модели активного ила (ASM). Авторы предлагают подход, объединяющий решение прямой задачи и идентификацию параметров системы дифференциальных уравнений, описывающих окисление азота. В ходе исследования проведен сравнительный анализ трех архитектур нейронных сетей: с фиксированным одинаковым числом нейронов, с фиксированным различным числом нейронов и с растущим в процессе обучения числом нейронов. Для нахождения оптимальных параметров (числа нейронов и весового коэффициента функции потерь) использована многокритериальная оптимизация на основе построения фронта Парето. Результаты показали, что предложенный подход позволяет эффективно восстанавливать динамику концентраций азотистых соединений с высокой точностью. Наилучшее соответствие экспериментальным данным при допустимом уровне невязки уравнений обеспечила архитектура с различным постоянным числом нейронов при оптимально подобранных весовых коэффициентах.

Ключевые слова: физически информированные нейронные сети, PINN, очистка сточных вод, нитрификация, идентификация параметров, моделирование, машинное обучение, многокритериальная оптимизация

UDC: 004.032.26, 519.63

Neural network modeling of a complete ammonium nitrification system with parameter identification

A. O. Grechneva, V. D. Tarasov, D. A. Tarkhov, A. V. Shatrov^a

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
29 Polytechnicheskaya st., St. Petersburg, 195251, Russia

E-mail: ^a shatrov_av@spbstu.ru

Received 22.03.2026, after completion — 22.04.2026.

Accepted for publication 19.05.2026.

This paper explores the application of Physics-Informed Neural Networks for modeling the nitrification process in wastewater treatment. The relevance of this work stems from the need to improve treatment efficiency and enable real-time monitoring of parameter changes, which is challenging with traditional approaches such as Activated Sludge Models (ASM). The authors propose a method that combines solving the forward problem and identifying parameters of a system of differential equations describing nitrogen oxidation. The study conducts a comparative analysis of three neural network architectures: with a fixed identical number of neurons, with a fixed different number of neurons, and with a progressively growing number of neurons during training. Multi-criteria optimization based on the Pareto front construction was employed to find optimal parameters (number of neurons and the loss function weight coefficient). The results demonstrate that the proposed approach effectively reconstructs the dynamics of nitrogen compound concentrations with high accuracy. The architecture with a fixed different number of neurons, combined with optimally selected weight coefficients, provided the best agreement with experimental data while maintaining an acceptable residual of the equations.

Keywords: physics-informed neural networks, PINN, wastewater treatment, nitrification, parameter identification, modeling, machine learning, multi-criteria optimization

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2026, vol. 18, no. 4, pp. 909–928 (Russian).

1. Введение

Вода является фундаментальным ресурсом для поддержания жизни, однако ее доступность находится под серьезной угрозой из-за растущего уровня загрязнения, вызванного быстрой индустриализацией, сельскохозяйственной деятельностью и недостаточным контролем за сбросами сточных вод [Dikmen et al., 2025]. Особую озабоченность вызывают промышленные сточные воды, содержащие опасные химические вещества, тяжелые металлы и токсичные соединения, которые при попадании в водоемы приводят к деградации экосистем и создают риски для здоровья населения. Сточные воды содержат широкий спектр загрязнителей — от патогенных микроорганизмов и тяжелых металлов до фармацевтических препаратов и микропластика [Chavhan et al., 2025].

Загрязнение водных ресурсов происходит в результате чрезмерного сброса промышленных, сельскохозяйственных и бытовых сточных вод в пресноводные водоемы без предварительной очистки. Загрязнители, присутствующие в водных ресурсах, могут быть органические (красители, фармацевтические препараты, пестициды, удобрения, масла, жиры) или неорганические (тяжелые металлы) [Koksal et al., 2024].

Согласно исследованиям [Akhtar et al., 2025; Shamshad, Rehman, 2025] эффективное управление сточными водами требует баланса между технологическими инновациями, защитой окружающей среды и экономической целесообразностью для обеспечения устойчивого доступа к чистой воде.

Очистка сточных вод важна не только с экологической точки зрения, но и с социальной и экономической. В развивающихся странах вода загрязняется в результате промышленной, коммерческой, бытовой и сельскохозяйственной деятельности, вызывая быстрое сокращение ресурсов, тем самым увеличивая проблемы доступа к воде. Очистка сточных вод имеет большое значение с точки зрения защиты водных ресурсов и реализации целей устойчивого развития. Традиционные методы очистки сточных вод характеризуются высоким энергопотреблением, необходимостью использования химических реагентов и проблемами утилизации осадка, что ограничивает их устойчивость. Кроме того, обнаружение критических параметров, таких как химическое потребление кислорода и биохимическое потребление кислорода, традиционными лабораторными методами занимает значительное время, не позволяя оперативно реагировать на изменения в процессе очистки. Искусственный интеллект и машинное обучение открывают новые возможности для оптимизации процессов очистки сточных вод, обеспечивая мониторинг в реальном времени, раннее обнаружение аномалий и прогнозирование качества очищенной воды на основе анализа нелинейных зависимостей между параметрами [Riedmiller, Braun, 1993; Sin, Al, 2021].

Модели активного ила (ASM), такие как ASM1, ASM2d и ASM3 [Henze et al., 1999], разработанные Международной ассоциацией по исследованию и контролю загрязнения воды, стали стандартным инструментом для моделирования процессов биологической очистки сточных вод, включая удаление органических веществ, нитрификацию и денитрификацию. Эти детерминистические модели массового баланса объединяют кинетические уравнения со стехиометрическими структурами процессов и широко применяются при проектировании и оптимизации очистных сооружений [Petersen et al., 2002].

Однако, несмотря на свою фундаментальную значимость, ASM-модели имеют ряд существенных ограничений. Как отмечают исследователи в своей работе [Kurçin, Uygur, 2025], эти модели «достигли своих пределов в отношении сложности и точности применения». Модели ASM требуют детальной характеристики сточных вод и идентификации большого числа кинетических параметров, что создает проблемы при эксплуатации в реальном времени. Кроме того, традиционные модели сталкиваются с такими проблемами, как необходимость больших наборов данных и более частого отбора проб, зашумленность измерений и переобучение. ASM-модели

также ограничены в способности отражать вариабельность, наблюдаемую в реальных системах, особенно при работе с низкими концентрациями микроэлементов и микрозагрязнителей.

В последние годы для преодоления этих ограничений все большее внимание привлекают физически информированные нейронные сети ФИНС (PINN) [Luo et al., 2025; Meng et al., 2025; Fan, Chen, 2026]. Данный подход объединяет сильные стороны механистических моделей и моделей, основанных на данных, интегрируя физические принципы непосредственно в процесс обучения нейронных сетей. PINN позволяют решать проблему ограниченности данных, эффективно работать с зашумленными измерениями и обеспечивают более высокую обобщающую способность моделей.

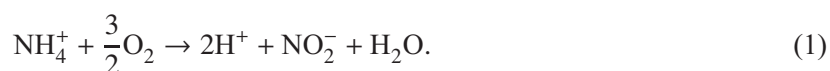
В контексте очистки сточных вод PINN продемонстрировали высокую эффективность при прогнозировании ключевых параметров, таких как концентрация растворенного кислорода в активном иле и химическое потребление кислорода на выходе из отстойника [Heyde et al., 2025]. Интеграция физических знаний в модель позволяет учитывать нелинейные зависимости между параметрами и обеспечивать соблюдение фундаментальных законов сохранения массы и энергии, что особенно важно при моделировании сложных биохимических процессов.

В недавних исследованиях [Garakani, Chew, 2025] была продемонстрирована эффективность физически информированных моделей машинного обучения для прогнозирования загрязнения мембран, авторы [Helali et al., 2025] рассмотрели применение PINN для мониторинга производительности систем обратного осмоса. В работе [Frankel et al., 2025] авторы показали преимущества использования PINN для моделирования качества питьевой воды при неполных данных о реакциях. Модификация ST-PINN, предложенная [Mu et al., 2025], реализует графовую физически информированную нейронную сеть для прогнозирования качества воды в распределительных системах и при этом демонстрирует высокую точность предсказаний.

2. Постановка задачи

Очистка сточных вод включает множество сложных этапов. В данной работе основное внимание уделяется процессу удаления компонентов азотной группы (NH_4^+ , NO_2^- , NO_3^-), что обусловлено значительным вкладом этой группы в загрязнение водных объектов. Удаление осуществляется путем нитрификации и следующей за ней денитрификации. Нитрификация — процесс окисления ионов аммония NH_4^+ до нитратов NO_3^- , который осуществляется в два этапа.

На первом этапе бактерии вида *Nitrosomonas* окисляют аммоний до нитрита NO_2^- по схеме



На втором этапе бактерии *Nitrobacter* окисляют нитрит до нитрата по схеме



Денитрификация — процесс восстановления нитратов до молекулярного азота. Схема этого процесса приведена в таблице 1.

Таблица 1. Схема процесса денитрификации

$\text{NO}_3^- \rightarrow$	$\text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO} \rightarrow$	$\text{N}_2\text{O} \rightarrow$	N_2
Изменение массы субстрата	Поступление массы субстрата	Убыль субстрата	Исчезновение субстрата

В работе [Vavilin et al., 1995] рассмотрена модель нитрификации, в которой процессы, связанные с окислением азота, рассматриваются отдельно от остальных процессов биологической очистки:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = -\mu_1 \frac{N_1}{K_{N_1} + N_1} B_1, \\ \frac{dN_2}{dt} = \frac{\mu_1}{Y_1} \frac{N_1}{K_{N_1} + N_1} B_1 - \frac{\mu_2}{Y_2} \frac{N_2}{K_{N_2} + N_2} B_2, \\ \frac{dN_3}{dt} = \frac{\mu_2}{Y_2} \frac{N_2}{K_{N_2} + N_2} B_2, \\ \frac{dB_1}{dt} = \mu_1 \frac{N_1 B_1}{K_{N_1} + N_1} - k_{d_1} B_1, \\ \frac{dB_2}{dt} = \mu_2 \frac{N_2 B_2}{K_{N_2} + N_2} - k_{d_2} B_2. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь N_1, N_2, N_3 — концентрации аммония, нитритов и нитратов соответственно; B_1, μ_1, k_{d_1} и B_2, μ_2, k_{d_2} — концентрации, максимальные удельные скорости, константы отмирания микроорганизмов *Nitrosomonas* и *Nitrobacter* соответственно; Y_1, Y_2 — экономические коэффициенты; K_{N_1}, K_{N_2} — константы полунасыщения.

По этим параметрам и системе (3) построим решение с помощью численных методов высокой точности и сопоставим его с данными измерений.

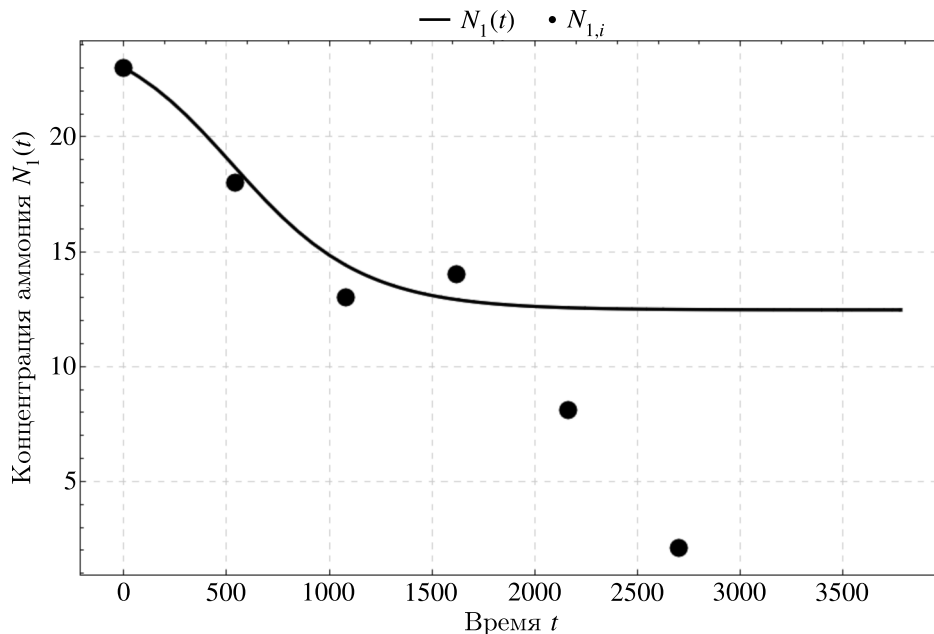


Рис. 1. График зависимости концентрации аммония от времени. Численное решение

Доверительные интервалы данных измерений рассчитываются исходя из среднеквадратичных ошибок для доверительной вероятности $\gamma = 0,95$ и числа измерений $n = 7$. Результаты расчета доверительных интервалов приведены в таблице 3.

Графики на рис. 1–3 показывают, что система (3) описывает далеко не все процессы нитрификации, поэтому требуется при построении модели использовать не только уравнения, но и данные измерений. По сути, это означает, что в процессе построения решения необходимо

Таблица 2. Параметры модели нитрификации и начальные условия

Обозначение	Описание	Значение	Единица измерения
μ_1	Максимальная удельная скорость потребления аммония (Nitrosomonas)	0,424	мин ⁻¹
μ_2	Максимальная удельная скорость потребления нитритов (Nitrobacter)	0,173	мин ⁻¹
K_{N_1}	Константа полунасыщения по аммонiu	315,5	мг/дм ³
K_{N_2}	Константа полунасыщения по нитритам	5,2	мг/дм ³
k_{d_1}	Константа отмирания Nitrosomonas	0,01	мин ⁻¹
k_{d_2}	Константа отмирания Nitrobacter	0,01	мин ⁻¹
Y_1	Экономический коэффициент для Nitrosomonas	2,25	безразмерный
Y_2	Экономический коэффициент для Nitrobacter	1,35	безразмерный
$N_1(0)$	Начальная концентрация аммония	23,0	мг/дм ³
$N_2(0)$	Начальная концентрация нитрита	0,4	мг/дм ³
$N_3(0)$	Начальная концентрация нитрата	0,0	мг/дм ³
$B_1(0)$	Начальная концентрация Nitrosomonas	0,3	мг/дм ³
$B(0)$	Начальная концентрация Nitrobacter	0,6	мг/дм ³
t_{end}	Конечное время моделирования	4000	мин
t_{out}	Шаг вывода результатов	0,4	мин

Таблица 3. Доверительные интервалы данных измерения

№ п/п	Концентрация измеряемой величины	Доверительные интервалы δ_i в точках i						
		1	2	3	4	5	6	7
1	N_1	0,639	0,500	0,361	0,389	0,225		
2	N_2	0,033	0,022	0,006	0,003			
3	N_3	0,007	0,083	0,081	0,083	0,194	0,278	0,278

дополнительно произвести идентификацию модели (3). Такие методы построения моделей по гетерогенной информации на основе физически информированных нейронных сетей рассматриваются далее.

3. Методы

Ключевой особенностью предлагаемого подхода к моделированию процесса нитрификации является одновременная идентификация параметров системы в ходе решения прямой задачи.

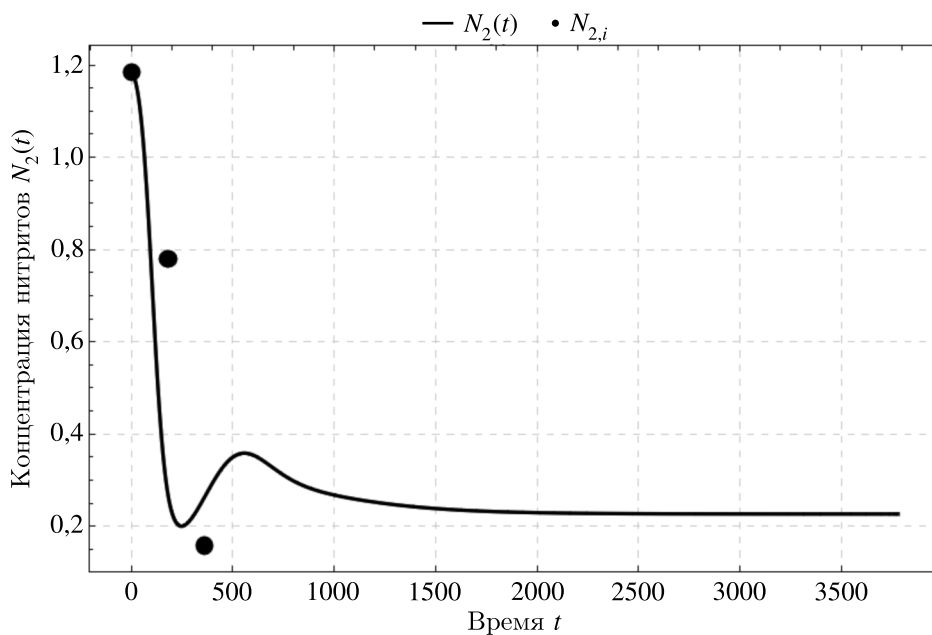


Рис. 2. График зависимости концентрации нитрита от времени. Численное решение

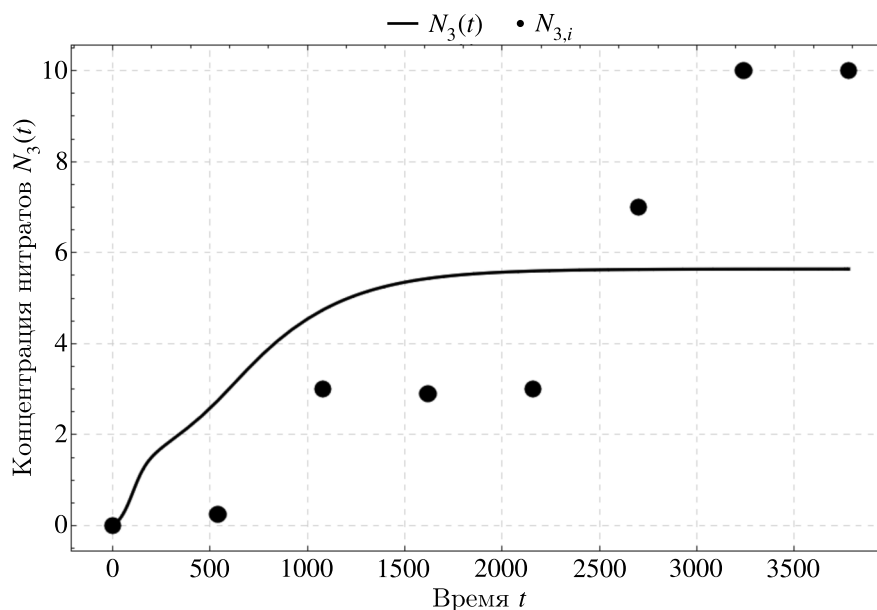


Рис. 3. График зависимости концентрации нитрата от времени. Численное решение

Традиционные подходы к использованию нейронных сетей для моделирования, как правило, реализуют двухэтапную процедуру. На первом этапе по имеющимся экспериментальным данным идентифицируются параметры модели, то есть подбираются такие значения коэффициентов, при которых модель наилучшим образом описывает наблюдения. Затем, после того как параметры зафиксированы, на втором этапе решается система дифференциальных уравнений уже с этими найденными коэффициентами, часто классическими численными методами либо с помощью другой нейронной сети. Таким образом, процесс идентификации и процесс решения оказываются разделены, что может приводить к накоплению ошибок. В данной работе используется метод физически информированных нейронных сетей (Physics-Informed Neural Networks, PINN), кото-

рый позволяет объединить обе процедуры. Нейронная сеть аппроксимирует искомые функции концентраций, а неизвестные параметры модели (например, максимальные удельные скорости роста, константы полунасыщения и коэффициенты отмирания) вводятся как обучаемые переменные. Таким образом, в процессе минимизации функции потерь одновременно уточняются и веса нейронной сети, и физические параметры системы. При этом используется унифицированный подход построения нейросетевых моделей [Antonov et al., 2018; Tarkhov, Vasilyev, 2020]. В соответствии с этим подходом на первом этапе собирается информация о моделируемом объекте. В данном случае мы считаем известными уравнения химических реакций (3) и данные измерений концентраций аммония, нитритов и нитратов. При этом как уравнения, так и измерения заведомо не точны и средние ошибки их составляют порядка 3 %. Кроме того, концентрации бактерий, аммония, нитритов и нитратов заведомо неотрицательны.

На втором этапе строится функция потерь, которая преобразует задачу решения системы дифференциальных уравнений в задачу оптимизации. Она состоит из двух основных частей: первая отвечает за выполнение самих дифференциальных уравнений (невязка уравнений в заданных точках области), а вторая — за соответствие имеющимся экспериментальным данным (среднеквадратичная ошибка на множестве точек наблюдений). Эти две составляющие могут иметь разные порядки величин и противоречить друг другу: улучшение соответствия уравнениям может несколько ухудшить попадание в данные, и наоборот. Кроме того, добавляется слагаемое, отличное от нуля в точках, в которых концентрации бактерий, аммония, нитритов и нитратов становятся отрицательными. Для балансировки вкладов в функцию потерь вводятся весовые коэффициенты Ag , Ar . Выбор этих коэффициентов существенно влияет на результат идентификации. Функция потерь формально выглядит следующим образом:

$$E(N, B) = \sum_{i=1}^m P_i + Ag \sum_{i=1}^{m1} Z_i + Ar \sum_{i=1}^{m1} W_i. \quad (4)$$

В уравнении (4) приняты обозначения:

$$P_i = \Delta N_1^2(t_i) + \Delta N_2^2(t_i) + \Delta N_3^2(t_i) + \Delta B_1^2(t_i) + \Delta B_2^2(t_i), \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Delta N_1 &= \frac{dN_1}{dt} + \mu_1 \frac{N_1}{K_{N_1} + N_1} B_1, \\ \Delta N_2 &= \frac{dN_2}{dt} - \frac{\mu_1}{Y_1} \frac{N_1}{K_{N_1} + N_1} B_1 + \frac{\mu_2}{Y_2} \frac{N_2}{K_{N_2} + N_2} B_2, \\ \Delta N_3 &= \frac{dN_3}{dt} - \frac{\mu_2}{Y_2} \frac{N_2}{K_{N_2} + N_2} B_2, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Delta B_1 &= \frac{dB_1}{dt} - \mu_1 \frac{N_1 B_1}{K_{N_1} + N_1} + k_{d_1} B_1, \\ \Delta B_2 &= \frac{dB_2}{dt} - \mu_2 \frac{N_2 B_2}{K_{N_2} + N_2} + k_{d_2} B_2, \\ Z_i &= \delta N_1^2 + \delta N_2^2 + \delta N_3^2 + \delta B_1^2 + \delta B_2^2, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \delta N_1 &= N_1(tg_i) - N_{1_i}, \\ \delta N_2 &= N_2(tg_i) - N_{2_i}, \\ \delta N_3 &= N_3(tg_i) - N_{3_i}, \\ \delta B_1 &= B_1(tg_i) - B_{1_i}, \\ \delta B_2 &= B_2(tg_i) - B_{2_i}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$W_i = wN_1^2 + wN_2^2 + wN_3^2 + wB_1^2 + wB_2^2, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} wN_1 &= \min[N_1(t_i), 0], \\ wN_2 &= \min[N_2(t_i), 0], \\ wN_3 &= \min[N_3(t_i), 0], \\ wB_1 &= \min[B_1(t_i), 0], \\ wB_2 &= \min[B_2(t_i), 0]. \end{aligned} \quad (10)$$

В соотношениях (8), (10) t_i — пробные точки, которые регенерируются каждые 3–5 шагов обучения как случайные равномерно распределенные на интервале от 0 до t_{end} , на котором строится модель (этот интервал не меняется во время построения модели), tg_i — точки измерений, $N_{i,i}$, $B_{i,i}$ — данные измерений, n — число нейронов. В связи со случайной регенерацией тестовых точек новая их выборка, сгенерированная на очередном шаге, может рассматриваться как тестовая для дифференциальных уравнений задачи. Такой подход позволяет предотвратить переобучение модели.

В связи с тем, что соотношения точностей дифференциальной модели (3) и измерений неизвестны, мы не можем выбрать значение весового множителя Ag до начала обучения. Исходя из этого, мы рассматриваем задачу как многокритериальную, рассматривая $\sum_{i=1}^m P_i$ и $\sum_{i=1}^{m1} Z_i$ как отдельные критерии, обеспечивающие приближение к фронту Парето и осуществляющие выбор оптимального решения из дополнительных соображений. Множитель Ar выбирается минимальным, при котором концентрации бактерий, аммония, нитритов и нитратов остаются положительными.

Третий этап состоит в выборе и реализации алгоритмов подбора структуры и весов нейронных сетей, описывающих концентрации бактерий, аммония, нитритов и нитратов. Для исследования влияния архитектуры нейронной сети на качество идентификации было реализовано три подхода. Первый подход использует одинаковое фиксированное число нейронов в скрытых слоях для аппроксимации каждого из пяти уравнений системы. Это наиболее простой вариант, который легко реализовать, однако он не учитывает возможную разницу в сложности поведения разных компонентов (например, аммоний может меняться плавно, а концентрация нитритов — иметь более резкие перепады). Второй подход предполагает различное постоянное число нейронов. Это позволяет подобрать архитектуру более гибко, выделяя больше вычислительных ресурсов на аппроксимацию тех переменных, динамика которых сложнее. Третий подход использует архитектуру с растущим в процессе обучения числом нейронов. На начальных этапах, когда ошибка велика, достаточно грубой аппроксимации, но по мере приближения к точному решению и уменьшению погрешности может потребоваться более высокая емкость сети для финальной «доводки» результатов. Во всех вариантах подбор весов сетей осуществляется с помощью минимизации функции потерь $E(N, B)$ с помощью метода RProp [Riedmiller, Braun, 1993].

4. Результаты исследования

В ходе исследования, посвященного нейросетевому решению системы дифференциальных уравнений с идентификацией параметров, была проведена оптимизация основных характеристик вычислительного алгоритма. Ключевая задача состояла в нахождении оптимальных значений двух критически важных параметров: количества нейронов в скрытых слоях сети и весового коэффициента Ag , регулирующего вклад различных составляющих в функцию потерь. Оптимальные значения определялись по двум независимым критериям: точности соответствия экспериментальным данным и точности выполнения дифференциальных уравнений. Параметр n задавал количество нейронов в скрытом слое, определяя емкость и вычислительные возможности сети,

а параметр Ag выступал в роли весового коэффициента, балансирующего влияние двух указанных ошибок в процессе обучения. Поиск оптимальных значений этих параметров осуществлялся методами многокритериальной оптимизации, а именно с помощью построения и анализа фронта Парето. Данный подход позволил одновременно минимизировать обе ошибки. Реализация построения фронта Парето, например, для весового коэффициента происходит следующим образом. Задается диапазон возможных значений весовых коэффициентов и для каждого набора весов проводится обучение PINN с одновременной идентификацией параметров. По окончании обучения фиксируются достигнутые значения ошибки на уравнениях и ошибки на данных. После перебора всех вариантов получается облако точек в пространстве двух критериев. Затем из этого облака выделяются те точки, которые не доминируются другими (то есть не существует точки, у которой обе ошибки были бы меньше). Эти точки и формируют фронт Парето. Анализ формы фронта позволяет принять итоговое решение: например, выбрать точку с минимальной ошибкой на данных (если приоритет — точность соответствия замерам) или точку, где ошибки сбалансированы (компромиссный вариант).

4.1. Одинаковое постоянное число нейронов

Определение оптимального числа нейронов n будем производить исходя из принципа оптимальности Парето для количества нейронов n в зависимости от относительной среднеквадратичной ошибки удовлетворения экспериментальным данным (горизонтальная ось) и среднеквадратичной ошибки удовлетворения уравнениям (вертикальная ось).

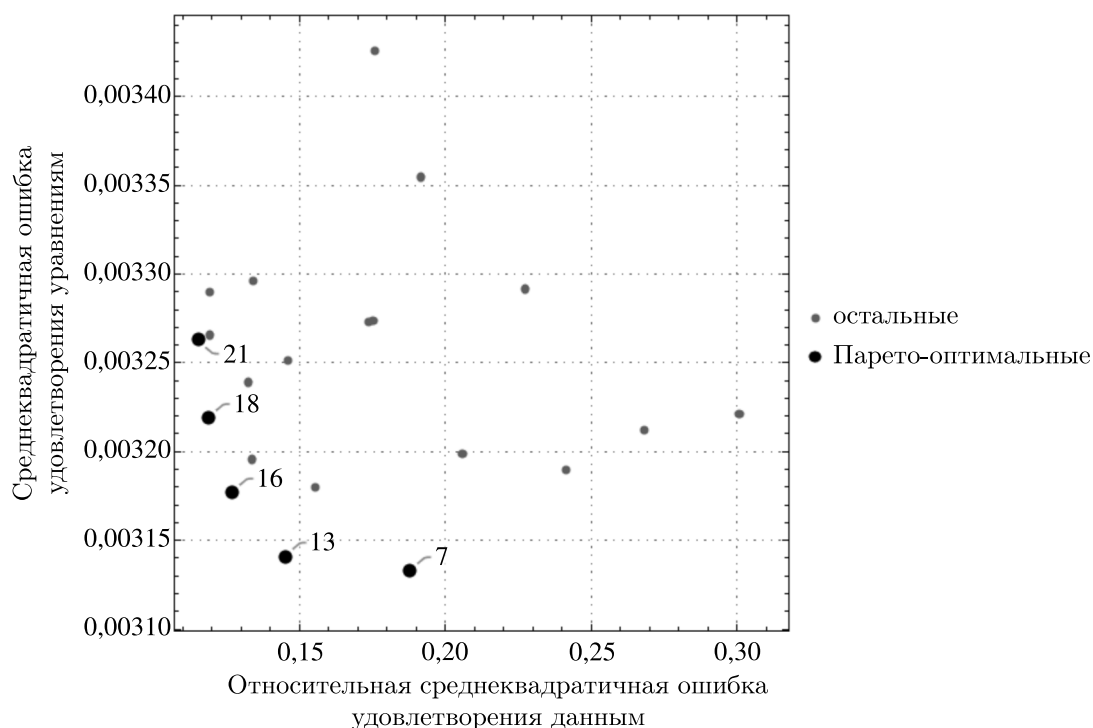


Рис. 4. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

Как видно из рис. 4, на котором представлен фронт Парето для различных значений числа нейронов, точки $n = 16, 22, 25, 27$ и 30 являются Парето-оптимальными, то есть кандидатами на главный оптимум. Эти точки не доминируются другими: для них невозможно одновременно улучшить обе ошибки. Анализ показывает, что при увеличении числа нейронов от 16 до 30 наблюдается снижение относительной среднеквадратичной ошибки удовлетворения эксперимен-

тальным данным, в то время как среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям возрастает незначительно. Например, при переходе от $n = 27$ к $n = 30$ ошибка по данным заметно уменьшается, тогда как ошибка по уравнениям изменяется незначительно. В качестве оптимального числа нейронов целесообразно выбрать $n = 30$ (точка 21), так как переход к точкам 7, 16, 18, 21 приводит к резкому увеличению ошибки удовлетворения данным при незначительном уменьшении ошибки удовлетворения уравнениям. В таблице 4 представлены данные, на основе которых строился данный фронт Парето.

Таблица 4. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

N	n	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	10	0,300682	0,00322135
2	11	0,267989	0,0032119
3	12	0,24128	0,00318944
4	13	0,227203	0,00329171
5	14	0,205711	0,00319891
6	15	0,175722	0,00342552
7	16	0,187829	0,00313262
8	17	0,175058	0,00327373
9	18	0,173721	0,00327303
10	19	0,191521	0,00335471
11	20	0,155316	0,00317993
12	21	0,145997	0,00325129
13	22	0,145094	0,00314084
14	23	0,133992	0,00329605
15	24	0,133683	0,00319567
16	25	0,126908	0,00317691
17	26	0,132395	0,00323909
18	27	0,118829	0,0032189
19	28	0,119216	0,00326571
20	29	0,11918	0,00328978
21	30	0,115157	0,00326297

Как можно видеть из таблицы 4, поведение среднеквадратичных ошибок по данным и по уравнениям в зависимости от числа нейронов показывает, что с ростом числа нейронов относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным уменьшается практически монотонно, принимая наименьшее значение в точке с номером 21 при соответствующем значении числа нейронов $n = 30$. Поведение среднеквадратичной ошибки удовлетворения уравнениям не является монотонным, и при существенной волатильности данного показателя максимальное отклонение от его среднего значения составляет 5,3 %. При наличии почти нулевого тренда поведение этого показателя имеет признаки случайной величины. Очевидно, что полученные результаты подтверждают выбор оптимального значения числа нейронов в пользу последней точки с номером 21, и, соответственно, число нейронов $n = 30$.

Определение оптимального весового коэффициента A_g

Для определения оптимального весового коэффициента A_g вновь воспользуемся диаграммой построения фронта Парето для A_g в пространстве двух параметров: относительной среднеквадратичной ошибки удовлетворения данным и расчетной относительной среднеквадратичной ошибки удовлетворения уравнениям.

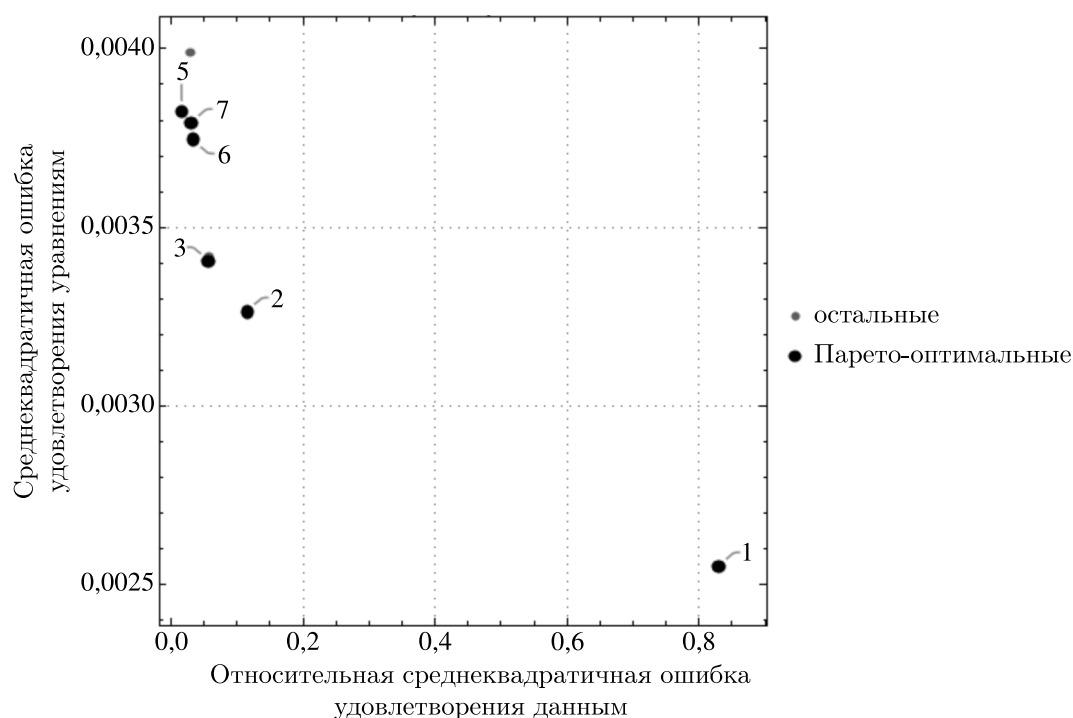


Рис. 5. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента

На рис. 5 представлен фронт Парето для различных значений весового коэффициента Ag . Парето-оптимальными являются точки с номерами $N = 1, 2, 3, 5, 6, 7$. Эти точки выделены на графике.

Таблица 5. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента

N	Ag	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	0,01	0,829972	0,00254898
2	0,1	0,115157	0,00326297
3	0,25	0,0564825	0,00340426
4	0,5	0,0573629	0,00341866
5	2	0,0156388	0,00382482
6	4	0,0335303	0,00374614
7	10	0,0303518	0,00379133
8	50	0,0291033	0,00399084

Обратимся к таблице 5. Минимальная ошибка на данных достигается при $Ag = 2$ и составляет 0,0156388, при этом ошибка по уравнениям равна 0,00382482. Для сравнения: при $Ag = 0,1$ ошибка на данных выше (0,115157), но ошибка по уравнениям ниже (0,00326297), а при $Ag = 0,01$ ошибка по уравнениям минимальна (0,00254898), однако ошибка на данных максимальна (0,829972). В качестве оптимального числа Ag целесообразно выбрать $Ag = 0,25$ (точка 3), так как переход от нее к точкам 2 и 1 приводит к резкому увеличению ошибки удовлетворения данным при незначительном уменьшении ошибки удовлетворения уравнениям, а переход к точкам 5, 6, 7 приводит к существенному росту ошибки удовлетворения уравнениям при незначительном уменьшении ошибки удовлетворения данным.

Также для иллюстрации работы нейронной сети ниже представлены графики выхода нейронной сети с экспериментальными значениями для постоянного числа нейронов $n = 30$ с весовым коэффициентом $Ag = 2$.

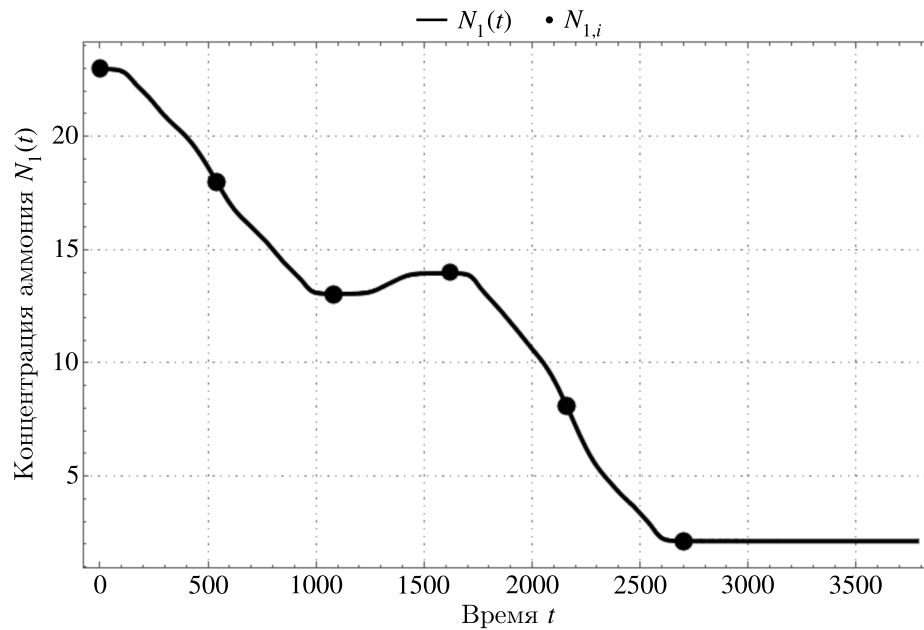


Рис. 6. График зависимости концентрации аммония от времени. Решение нейросети

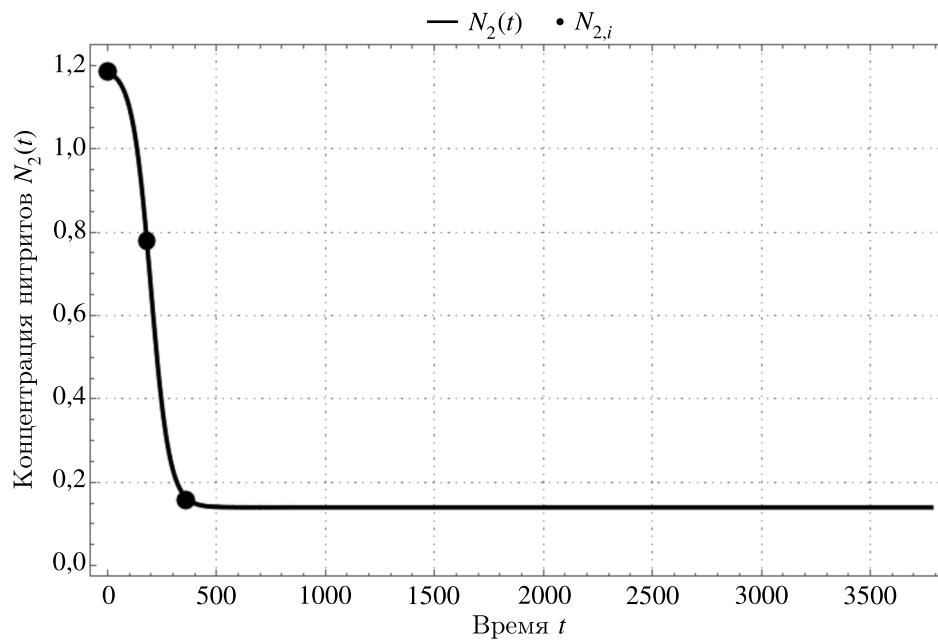


Рис. 7. График зависимости концентрации нитрита от времени. Решение нейросети

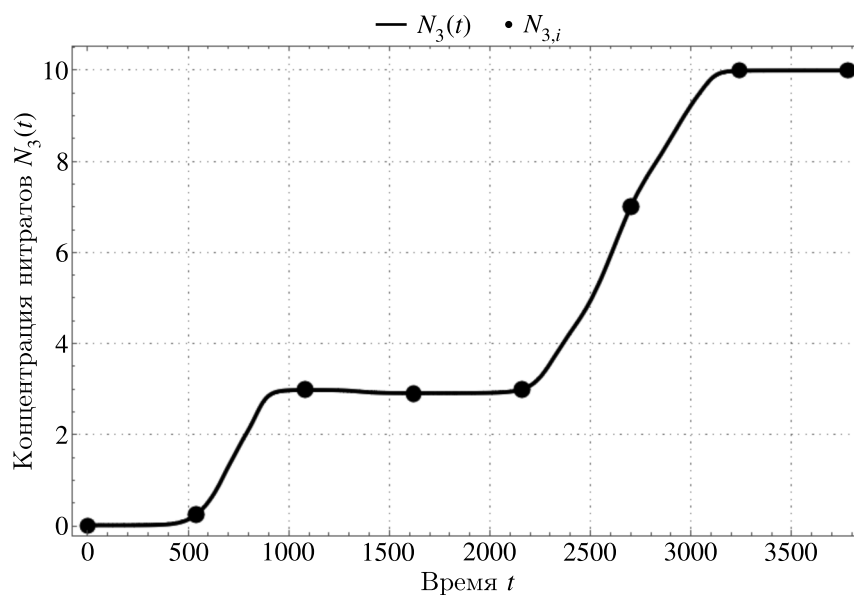


Рис. 8. График зависимости концентрации нитрата от времени. Решение нейросети

4.2. Разное постоянное число нейронов

В этом разделе рассмотрим алгоритм определения оптимального числа нейронов n при различных значениях числа нейронов в скрытых слоях сети n_1 и n_2 . На рис. 9 представлен фронт Парето, построенный для различных комбинаций n_1 и n_2 .

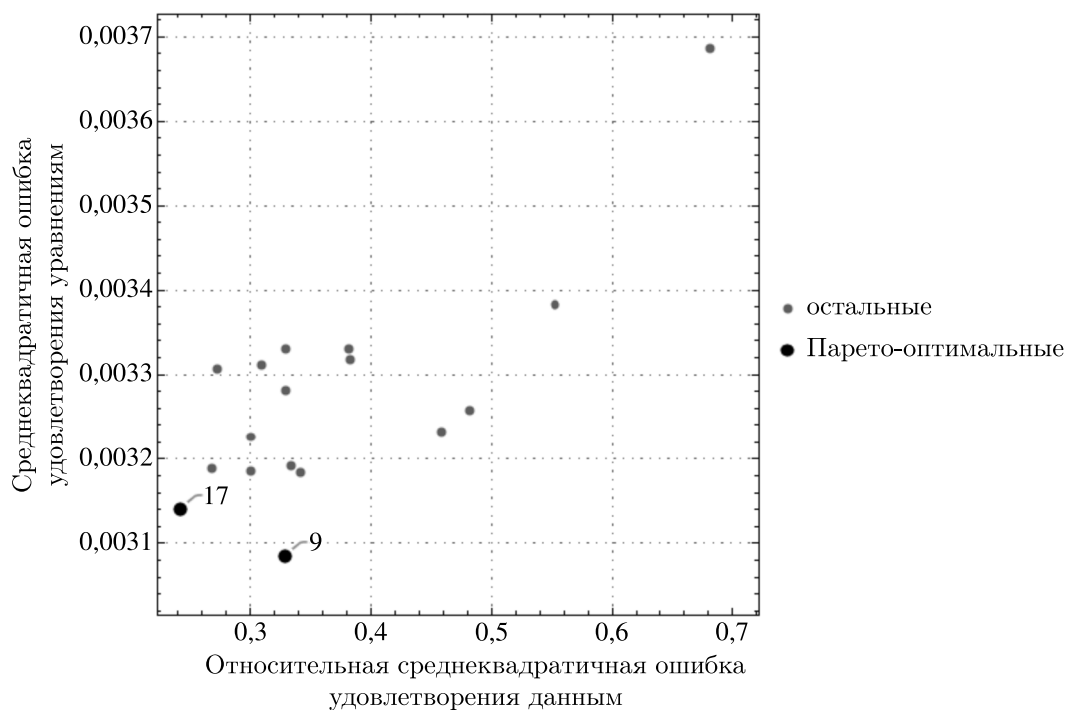


Рис. 9. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

Множество Парето-оптимальных решений, для которых невозможно одновременно улучшить обе ошибки, включает две точки, соответствующие номерам 9 и 17.

Таблица 6. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

N	n_1	n_2	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	4	3	0,681568	0,00368625
2	5	3	0,55267	0,00338251
3	6	3	0,481741	0,00325731
4	7	3	0,381537	0,00333014
5	8	3	0,341656	0,00318395
6	9	3	0,333487	0,00319199
7	10	3	0,329272	0,00328161
8	10	4	0,329367	0,00332972
9	10	5	0,328825	0,00308434
10	10	6	0,272621	0,0033062
11	10	8	0,300657	0,00318538
12	10	9	0,300424	0,00322608
13	7	6	0,458279	0,00323158
14	8	6	0,382756	0,00331801
15	9	6	0,309354	0,00331089
16	11	6	0,267675	0,00318917
17	12	6	0,241774	0,00313978

Обратимся к анализу данных, представленных в таблице 6. Минимальная ошибка на данных достигается в строке 17 при $n_1 = 12$, $n_2 = 6$ (0,241774), однако ошибка по уравнениям при этом составляет 0,00313978. В строке 9 ($n_1 = 10$, $n_2 = 5$) ошибка на данных существенно выше (0,328825), но ошибка по уравнениям немного ниже и составляет 0,003084344. В связи с этим в качестве оптимальной выбрана архитектура с $n_1 = 12$ и $n_2 = 6$ (точка 17), что представляет компромисс по фронту Парето. Данное решение обеспечивает наилучшее соответствие данным при допустимой невязке уравнений.

Определение оптимального весового коэффициента Ag

На рис. 10 представлен фронт Парето, построенный для различных значений весового коэффициента Ag . Парето-оптимальными являются точки с номерами $N = 1, 2, 5$. Эти точки выделены на графике и образуют границу компромисса между точностью аппроксимации экспериментальных данных и выполнением дифференциальных уравнений.

Обратимся к анализу данных, представленных в таблице 7. Минимальная относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным достигается при $Ag = 20$ и составляет 0,00258753, однако ошибка по уравнениям при этом равна 0,0048992. При $Ag = 2,5$ ошибка на данных значительно выше (0,0646676), но ошибка по уравнениям немного ниже (0,0038098). Точка $Ag = 0,1$ также демонстрирует намного более высокую ошибку на данных (0,241245) при несколько более низкой ошибке по уравнениям 0,00315976. В связи с этим в качестве оптимального может быть выбран весовой коэффициент $Ag = 20$.

4.3. Растущее число нейронов

Определение оптимального числа нейронов n в условиях растущего числа n в скрытых слоях

На рис. 11 представлен фронт Парето для различных возрастающих значений числа нейронов n . Парето-оптимальными точками являются $n = 19$ и $n = 25$. Для выбора оптимального значения обратимся к таблице 8. Анализ таблицы показывает, что минимальная ошибка на данных достигается при $n = 25$ (0,0717541) (точка 8) с ошибкой по уравнениям 0,00327518. Точка 6

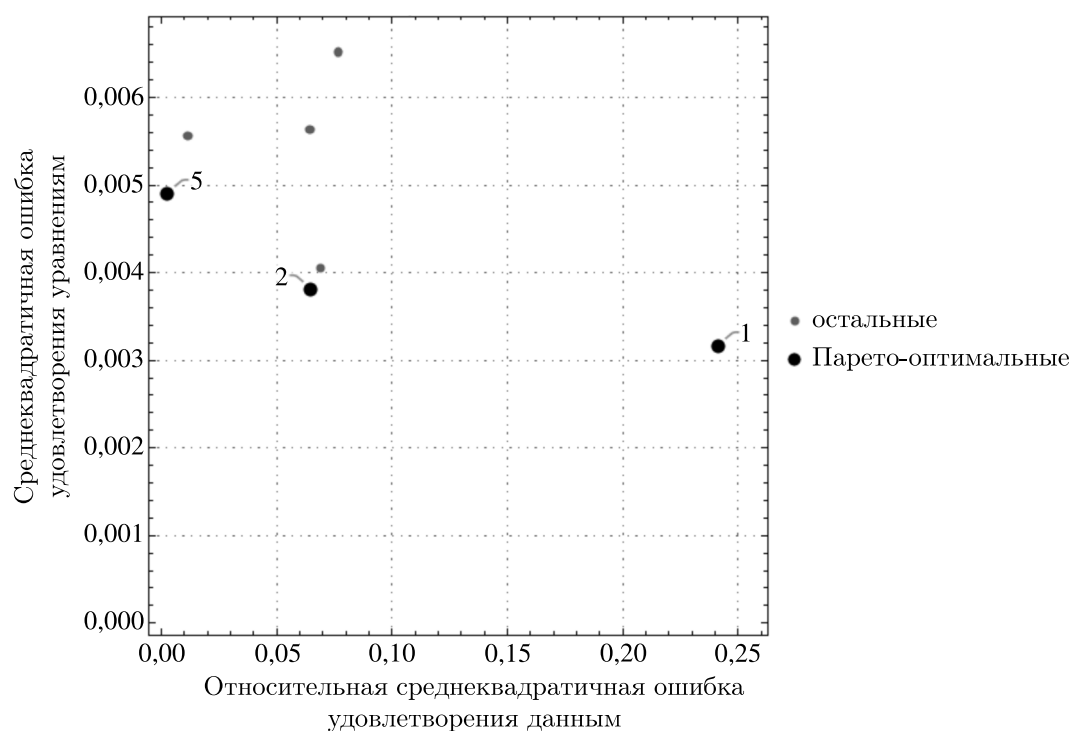
Рис. 10. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента A_g

Таблица 7. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента

N	A_g	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	0,1	0,241245	0,00315976
2	2,5	0,0646676	0,0038098
3	5	0,0689175	0,00405668
4	10	0,0643679	0,00562928
5	20	0,00258753	0,0048992
6	40	0,0764929	0,00651748
7	100	0,0114252	0,00556303

Таблица 8. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

N	n	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	14	0,085378	0,00345191
2	15	0,0811903	0,00338992
3	16	0,0804336	0,00333726
4	17	0,085322	0,00331819
5	18	0,0731786	0,0033346
6	19	0,0790658	0,00326814
7	20	0,0744874	0,00341401
8	25	0,0717541	0,00327518

отличается существенно большей ошибкой по данным при практически такой же ошибке по уравнениям, поэтому оптимальной должна быть выбрана архитектура с $n = 25$.

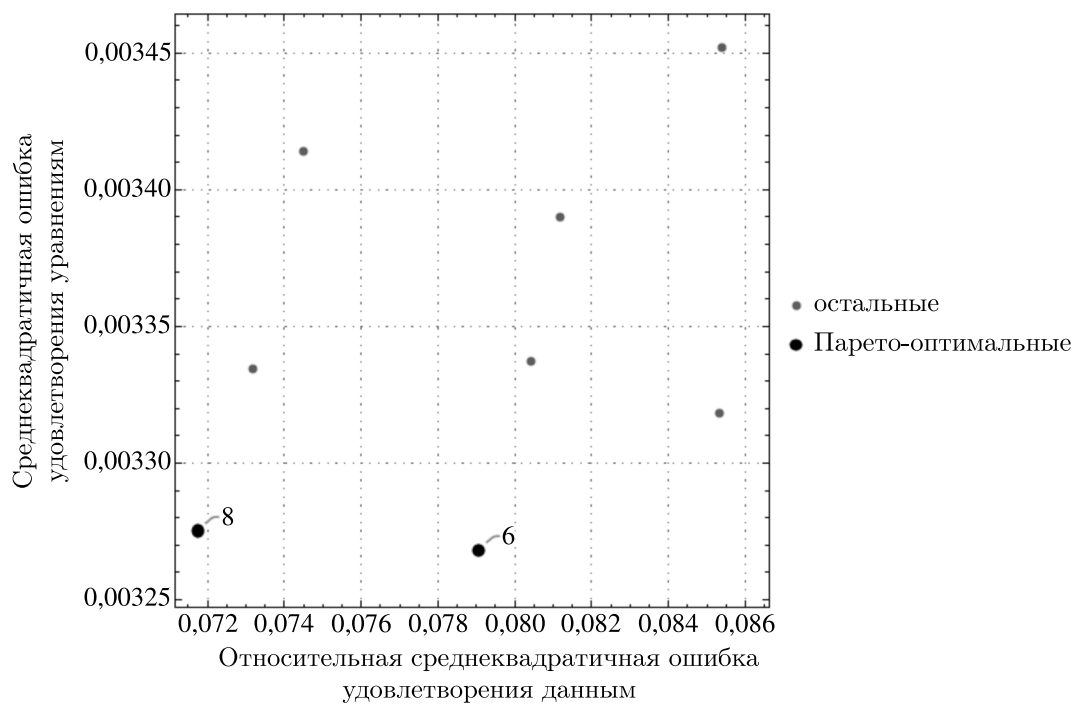
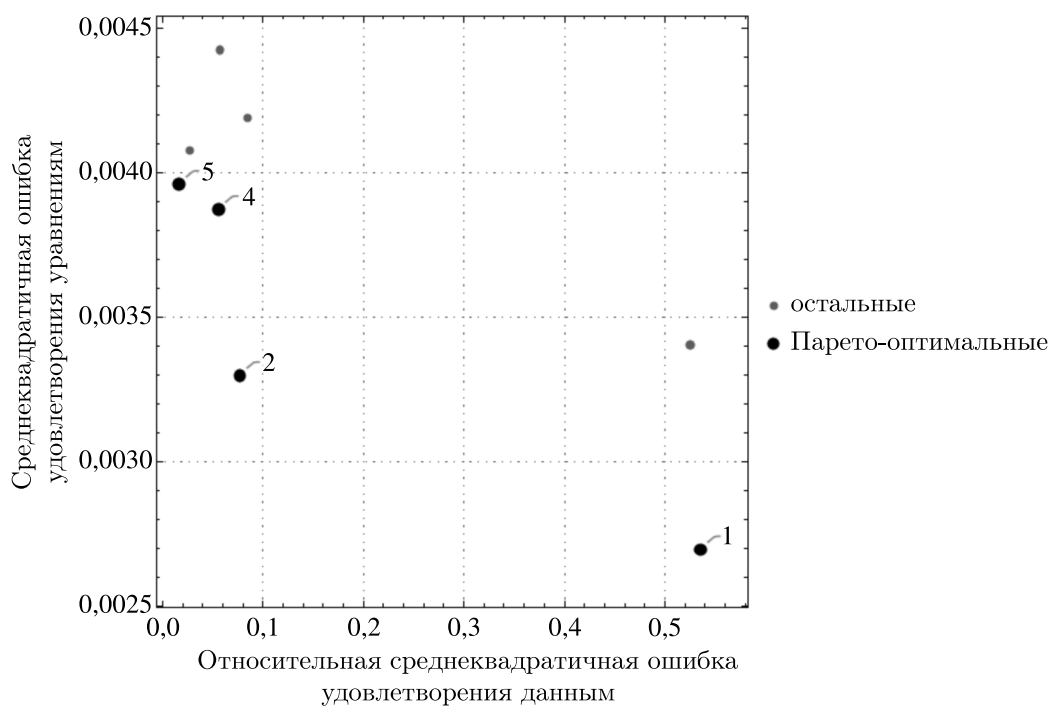


Рис. 11. Фронт Парето для определения оптимального числа нейронов

Определение оптимального весового коэффициента A_g

Рис. 12. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента A_g

На рис. 12 представлен фронт Парето, построенный для различных значений весового коэффициента A_g . Парето-оптимальными являются точки с номерами $N = 1, 2, 4, 5$.

Обратимся к анализу данных, представленных в таблице 9. Минимальная относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным достигается при $Ag = 1$ и составляет 0,0162576, однако ошибка по уравнениям при этом равна 0,00396046. При $Ag = 0,1$ ошибка на данных намного выше, составляет 0,0767028, но ошибка по уравнениям немного ниже — 0,00329827. Точка $Ag = 0,01$ демонстрирует наименьшую ошибку по уравнениям (0,0026946) при намного большей ошибке на данных (0,535356). Точка $Ag = 0,5$ занимает промежуточное положение.

Таблица 9. Фронт Парето для определения оптимального весового коэффициента

N	Ag	Относительная среднеквадратичная ошибка удовлетворения данным	Среднеквадратичная ошибка удовлетворения уравнениям
1	0,01	0,535356	0,0026946
2	0,1	0,0767028	0,00329827
3	0,25	0,525387	0,00340382
4	0,5	0,0553949	0,00387314
5	1	0,0162576	0,00396046
6	1,5	0,0849343	0,004189
7	2	0,0267285	0,00407792

В качестве оптимального может быть выбран весовой коэффициент $Ag = 1$, обеспечивающий наилучшее соответствие данным при приемлемом уровне невязки уравнений.

Наблюдаемый широкий диапазон оптимальных весовых коэффициентов Ag (от 1 до 20) для различных архитектур нейронных сетей объясняется, во-первых, разной аппроксимирующей способностью сетей: более сложные архитектуры (с большим числом нейронов или с растущей структурой) могут точнее удовлетворять дифференциальным уравнениям даже при малых значениях весового коэффициента, тогда как простые сети требуют большего веса невязки для достаточно точного удовлетворения экспериментальным данным. Во-вторых, причинами высокой чувствительности к параметру Ag являются различие в численных масштабах членов функции потерь, а также случайная смена пробных точек в процессе обучения.

5. Заключение

В работе исследовано применение физически информированных нейронных сетей (PINN) для моделирования процесса нитрификации при очистке сточных вод. Предложенный подход позволяет одновременно решать систему дифференциальных уравнений и идентифицировать ее неизвестные параметры, что является преимуществом перед традиционными двухэтапными методами.

Проведен сравнительный анализ трех архитектур сетей с оптимизацией гиперпараметров методом построения фронта Парето. Установлено, что архитектура с различным фиксированным числом нейронов обеспечивает наилучшее соответствие экспериментальным данным, а архитектура с растущим числом нейронов также показала высокую точность, что делает ее перспективной для дальнейшего развития. Полученные результаты подтверждают эффективность физически информированных нейронных сетей для задач мониторинга и управления процессами биологической очистки.

Список литературы (References)

- Akhtar M., Ahmad M., Raza N., Zhang L.* Use of low-cost adsorbent for waste water treatment: Recent progress, new trend and future perspectives // *Desalination and Water Treatment*. — 2025. — Vol. 321. — P. 100914. — DOI: 10.1016/J.DWT,2024.1000914

- Antonov V., Tarkhov D., Vasilyev A.* Unified approach to constructing the neural network models of real objects. Part 1. Math. methods // Appl. Sci. — 2018. — Vol. 41. — P. 9244–9251. — DOI: 101002/mma.5205
- Chavhan N., Bhattad R., Khot S., Patil S., Pawar A., Pawar T., Gawli P.* APAH: An autonomous IoT driven real-time monitoring system for Industrial wastewater // Digital Chemical Engineering. — 2025. — Vol. 14. — P. 100217. — DOI: 10.1016/j.dche.2025.100217
- Dikmen F., Demir A., Özkaya B., Raza M., Rasheed J., Asuroglu N., Alsubai Sh.* AI-driven wastewater management through comparative analysis of feature selection techniques and predictive models // Scientific Reports. — 2025. — Vol. 15, No. 1. — P. 25347. — DOI: 10.1038/s41598-025-07124-0
- Fan W., Chen X.* Embedding physics into machine learning: a review of physics informed neural networks as partial differential equation forward solvers // Tsinghua Science and Technology. — 2026. — Vol. 31, No. 3. — P. 1326–1364. — DOI: 10.26599/TST.2025.9010157
- Frankel M., Schiassi E., Katz L. T., Kinney K., Werth C. J., Zigler C., Sela L.* Enhancing drinking water quality modeling: leveraging physics informed neural networks for learning with imperfect reaction models and partial data // Environ. Sci.: Water Res. Technol. — 2025. — Vol. 11. — P. 2684–2697. — DOI: 10.1039/D5EW00682A
- Garakani S., Chew J.* Development of physics-informed machine-learning models to enhance understanding and prediction of membrane fouling // Journal of Membrane Science. — 2025. — Vol. 728. — DOI: 10.1016/j.memsci.2025124133
- Helali S., Albalawi Sh., Ali N. D.* Harnessing physics-informed neural networks for performance monitoring in SWRO desalination // Water. — 2025. — Vol. 17. — DOI: 10.3390/w17030297
- Henze M., Mino T., Matsuo T., Wentzel M., Marais G., Van Loosdrecht M.* Activated sludge model No. 2d, ASM 2d // Water Science and Technology. — 1999. — Vol. 39, No 1. — P. 183–193.
- Heyde B. J., Braun M., Leila S., Simens J.* Transition from irrigation with untreated wastewater to treated wastewater and associated benefits and risks // npj Clean Water. — 2025. — Vol. 8, No. 1. — P. 6. — DOI: 10.1038/s41545-025-00438-6
- Koksal E. S., Asrav T., Esebda E., Cosgun A., Kusoglu G., Aydin E.* Physics-informed and data-driven modeling of an industrial wastewater treatment plant with actual validation // Computers & Chemical Engineering. — 2024. — Vol. 189. — P. 108801. — DOI: 10.1016/j.compchemeng.2024.108801
- Kurçin S., Uyğur A.* Simulation and performance evaluation of domestic wastewater treatment in batch bioreactor with ASM1 model // International Journal of Engineering Approaches. — 2025. — Vol. 2, No. 2. — P. 43–53.
- Luo K., Zhao J., Wang Y., Li J., Wen J., Liang J., Soekmadji H., Liao Sh.* Physics-informed neural networks for PDE problems: a comprehensive review // Artif. Intell. Rev. — 2025. — Vol. 58, No. 10. — P. 323. — DOI: 10.1007/s10462-025-11322-7
- Meng C., Griesemer S., Cao D., Seo S., Liu Y.* When physics meets machine learning: a survey of physics-informed machine learning // Mach. Learn. Comput. Sci. Eng. — 2025. — Vol. 1, No. 20. — DOI: 10.1007/s44379-025-00016-0
- Mu T., Duan F., Ning B., Zhou B., Liu J., Huang M.* ST-GPINN: a spatio-temporal graph physics-informed neural network for enhanced water quality prediction in water distribution systems // npj Clean Water. — 2025. — Vol. 8, No. 1. — DOI: 10.1038/s41545-025-00499-7
- Petersen B., Gernaey K., Henze M., Vanrolleghem P.* Evolution of an ASM1 model calibration procedure on a municipal–industrial wastewater treatment plant // Journal of Hydroinformatics. — 2002. — Vol. 4, No. 1. — P. 15–38. — DOI: 10.2166/hydro.2002.0003
- Riedmiller M., Braun H.* A direct adaptive method for faster backpropagation learning: The Rprop algorithm // Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks. — 1993. — P. 586–591.

- Shamshad J., Rehman R.U.* Innovative approaches to sustainable wastewater treatment: a comprehensive exploration of conventional and emerging technologies // *Environmental Science: Advances*. — 2025. — Vol. 4, No. 2. — P. 189–222. — DOI: 10.1039/D4VA00136B
- Sin G., Al R.* Activated sludge models at the crossroad of artificial intelligence — A perspective on advancing process modeling // *npj Clean Water*. — 2021. — Vol. 4. — DOI: 10.1038/s41545-021-00106-5
- Tarkhov D., Vasilyev A.* Semi-empirical neural network modeling and digital twins development. — Cambridge, MA, USA: Academic Press, 2020.
- Vavilin V.A., Vasiliev V.B., Rytov S.V., Ponomarev A.V.* Modeling ammonia and hydrogen sulfide inhibition in anaerobic digestion // *Water Research*. — 1995. — Vol. 29. — P. 827–835.