

مدلسازی سینتیکی فرآیند گوگردزدایی زیستی از سوخت های فسیلی با سویه باکتریایی

مهرنوش ملک جعفریان^۱، بهروز محمودزاده وزیری^{۲*}، راحله ژبانی^۳، علیرضا متولی زاده کاخکی^۴، ملیحه
سادات حسینی^۴

۱ گروه مهندسی شیمی، واحد نیشابور، دانشگاه آزاد اسلامی، نیشابور، ایران
۲ گروه مهندسی شیمی، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران
۳ گروه مهندسی شیمی، واحد قوچان، دانشگاه آزاد اسلامی، قوچان، ایران
۴ گروه شیمی، واحد نیشابور، دانشگاه آزاد اسلامی، نیشابور، ایران

behrooz.vaziri@iaiu.ac.ir

چکیده

گوگردزدایی زیستی یکی از روش های نوین و کارآمد جهت حذف ترکیبات گوگردی مقاوم موجود در سوخت های فسیلی با استفاده از میکروارگانیسم های خاص می باشد. در پژوهش حاضر به مدلسازی و شبیه سازی قسمت های کلیدی فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر روندهای رشد و مرگ باکتریایی، نرخ مصرف سوپسترا و نرخ تولید محصول پرداخته شده است. در این راستا از مدل های سینتیکی نمایی و لجستیک به همراه ده مدل سرعت رشد ویژه باکتریایی (مدل های مونود، هالدان، آبی، هینشلوود، ادوارد، یانو، بلک من، اندریوس، موزر و وب)، برای توصیف رشد و مرگ توده زیستی استفاده گردید. همچنین برای توصیف نرخ مصرف سوپسترا و نرخ تولید محصول ایجاد شده در فرآیند، از مدل لودکینگ-پیرت استفاده شد. بر این مبنای بیست سناریو مختلف مدلسازی که شامل ترکیبی از مدل های سینتیک رشد و مرگ باکتریایی، سرعت رشد ویژه، نرخ مصرف سوپسترا و نرخ تولید محصول می باشد پیاده سازی گردید. این سناریوها با داده های آزمایشگاهی موجود در مقالات برای تجزیه دی بنزوتیوفن (DBT) به عنوان سوپسترا توسط سویه مایکوباکتریوم، که منجر به تولید ۲-هیدروکسی بی فنیل (2-HBP) به عنوان محصول نهایی می شود، ارزیابی و اعتبارسنجی شدند تحلیل آماری نشان می دهد که پیش بینی های بسته نمایی بر مبنای مدل وب با $SSE_{total} = 0/087$ ، $RMSE_{total} = 0/16$ و $R2_{mean} = 0/976$ از بهترین انطباق با کمترین میزان خطا نسبت به داده های آزمایشگاهی برخوردار است. از سناریوی مذکور می توان برای طراحی و راه اندازی واحدهای تجزیه زیستی ترکیبات گوگردی مقاوم از سوخت های فسیلی استفاده نمود.

واژگان کلیدی: گوگردزدایی زیستی، مدلسازی و شبیه سازی، سرعت رشد ویژه، دی بنزوتیوفن، سویه مایکوباکتریوم

۱. مقدمه

با احتراق سوخت های فسیلی حاوی ترکیبات آلی گوگرد دار گازهای سمی SO_x ساطع می گردند که تهدید جدی زیست محیطی به حساب می آیند. این گازهای سمی علاوه بر ایجاد مه دود فتوشیمیایی، مولد بارش باران های اسیدی نیز می باشند [۲۱]. از سوی دیگر ترکیبات آلی گوگرد دار موجود در سوخت های فسیلی باعث خوردگی تجهیزات و همچنین تأثیرات منفی بر فرآیند پالایش و کیفیت نهایی سوخت می شوند. از این رو ساده ترین راه برای غلبه بر معضلات ذکر شده، نظارت بر کیفیت سوخت از طریق کاهش دادن میزان ترکیبات گوگردی موجود در آن است [۴۳]. از مهمترین ترکیبات آلی گوگرد دار موجود در سوخت های فسیلی نظیر بنزین و گازوییل می توان به دی سولفیدها، مرکاپتان ها، تیول ها، سولفون ها، تیوفن ها و تیواترها اشاره داشت. از این میان، تیوفن ها که شامل تیوفن، بنزوتیوفن (BT)، دی بنزوتیوفن (DBT) و مشتقات آنها هستند از مقاوم ترین ترکیبات گوگردی در برابر تجزیه طی فرایندهای حرارتی تلقی می شوند [۵].

امروزه از روش های گوگردزدایی مختلفی نظیر هیدروژنی (HDS)، اکسایشی (ODS)، جذب سطحی (ADS)، استخراجی (EDS)، زیستی (BDS) برای حذف ترکیبات مقاوم گوگردی از سوخت های فسیلی بهره گرفته شده است [۶ و ۷ و ۸ و ۹]. از میان تمامی روش های مذکور تنها روش گوگردزدایی زیستی، کاملا سازگار با محیط زیست می باشد. در این روش میکروارگانیسم ها نقش اصلی را در تخریب آلاینده های آلی گوگرد دار ایفا می کنند. آنها برای رشد و فعالیتهای بیولوژیکی خود به گوگرد (برای تولید انرژی و یا استفاده در ساختارهای درون سلولی) نیاز دارند [۱۰]. در این فرایند، حذف اختصاصی گوگرد از ترکیبات تیوفنی مانند DBT از طریق یک مسیر بیوکاتالیستی به نام مسیر "4S" پیش می رود که طی آن DBT در نهایت، به ۲-هیدروکسی بای فنیل (2-HBP) و سولفیت تبدیل می شود [۱۱ و ۱۲ و ۱۳ و ۱۴].

تا به امروز از گونه های باکتریایی مختلف نظیر باسیلوس (Bacillus) [۱۵ و ۱۶]، پانتوتا (Pantoea)، آگروباکتریوم (Agrobacterium) [۱۰]، بورخولدریا (Burkholderia)، آرتروباکتر (Arthrobacter) [۱۲]، اسفینگوموناس (Sphingomonas)، استنوتروفوموناس (Stenotrophomonas) [۱۶ و ۱۰]، میکروباکتریوم (Microbacterium)، آمیکولاتوپسیس (Amycolatopsis)، آسینتوباکتر (Acinetobacter)، کانینگهاملا (Cunninghamella) [۱۷]، گوردونیا (Gordonia) [۱۳ و ۱۷ و ۱۸ و ۱۵]، پseudوموناس (Pseudomonas) [۱۷ و ۱۶ و ۱۰]، گوردونا (Gordonia)، کوریباکتریوم (Crynebacterium) [۱۹]، مایکوباکتریوم (Mycobacterium)، رودوکوکوس (Rhodococcus) [۱۰ و ۱۳ و ۱۵ و ۱۶ و ۱۷ و ۱۹]، به دلیل توانایی در حذف ترکیبات آلی گوگردار در گوگردزدایی زیستی استفاده شده است. میکروارگانیسم Rhodococcus به عنوان نخستین میکروارگانیسم معرفی شد که توانایی حذف انتخابی گوگرد و تولید محصولی عاری از گوگرد را بدون ایجاد آسیب در ساختار DBT دارا می باشد. در ایران نیز سویه هایی از جنس Gordonia توسط گروه بیوتکنولوژی پژوهشگاه صنعت نفت جداسازی و شناسایی شده اند که قادر به حذف اختصاصی گوگرد از DBT هستند. همچنین، باکتری Bacillus سویه EAMYO که از مناطق جنوبی و آلوده به نفت کشور و پس از انجام مراحل غنی سازی و غربالگری جداسازی گردیده است، توانایی مصرف DBT را طی رشد هوازی خود در دمای ۵۵°C نشان می دهد [۱۵]. با تثبیت سلول های باکتری Pseudomonas sp. سویه KWN5، پایداری سلولی افزایش یافته و عملکرد فرآیند گوگردزدایی بهبود می یابد. این روش همچنین امکان استفاده چند باره از سلول ها را فراهم می آورد و به افزایش کارایی باکتری در فرایند BDS کمک می نماید [۱۶]. باکتری Acidithiobacillus ferrooxidans در محیط های اسیدی نظیر معادن و محلول های فلزی یافت می شود و توانایی بالایی در اکسیداسیون فلزات و ترکیبات گوگردار دارد. این باکتری کاربرد گسترده ای در فرآیند BDS و بازیافت فلزات داشته و از ویژگی های مهم آن می توان به

انعطاف‌پذیری بالا در شرایط مختلف غلظت DBT اشاره کرد [۱۷]. *Gordonia alkanivorans* RIPI90A به عنوان کاندیدای مناسبی برای استفاده در فرآیندهای صنعتی پاکسازی نفت و کاهش گوگرد سوخت‌ها مطرح شده است. این سویه دارای ویژگی‌های سطحی خاصی است که منجر به بهبود تماس با سوخت‌های هیدروکربنی می‌شود و حتی با بهره‌گیری از تکنیک‌های مهندسی ژنتیک می‌توان عملکرد آن را فراتر از سویه طبیعی افزایش داد [۱۸]. باکتری *Mycobacterium phlei* WU-F1 یک سویه میان‌گرمدوست با توانایی بالا در گوگردزدایی ترکیبات نفتی از طریق شکستن انتخابی پیوند C-S بوده و قادر است در بازه دمایی وسیعی، حتی در دماهای نسبتاً بالا تا ۵۰°C فعالیت موثری از خود نشان دهد [۱۹].

تحقیقات متعددی در ارتباط با جنبه‌های مختلف فرایند گوگردزدایی زیستی انجام شده است که در ادامه به برخی از مهمترین آنها اشاره گردیده است.

در سال ۲۰۱۷ مارتینز و همکاران [۲۰] از باکتریهای گرم منفی (باکتری‌های نو ترکیب پseudomonas) که دارای خواصی نظیر تطبیق پذیری گسترده متابولیک و دستکاری آسان ژنتیکی هستند برای غلبه بر محدودیت‌های فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر کندی و سرعت پایین فرایند استفاده نمودند. آنها نشان دادند تولید محصولات با ارزش افزوده بالا با کمک این سویه‌ها یک فرایند اقتصادی با دوام است.

در سال ۲۰۱۸ بهانجادیو و همکاران [۲۱] توانایی گونه‌های رودوکوکوس (*Rhodococcus*) در حذف DBT را مورد بررسی قرار دادند. تمام گونه‌ها، علی‌رغم اختلاف‌های جزئی، نشان دادند که قادر به حذف ۹۹٪ DBT طی ۱۰ روز می‌باشند. در سال ۲۰۱۹ کیراگوسیان و همکاران [۲۲] به ارزیابی عملکرد فرآیند گوگردزدایی زیستی از گاز ترش (گاز حاوی سولفید هیدروژن) پرداختند. آنها از باکتری‌های اکسیدکننده گوگرد (SOB) برای تبدیل سولفید هیدروژن به گوگرد و سولفات استفاده نمودند. در کار آنها یک مدل سینتیکی جدید برای ارزیابی عملکرد فرآیند، توسعه داده شد. آزمایش‌های آنها نشان دادند که بیشترین تولید گوگرد در مقادیر پایین این نسبت رخ می‌دهد.

در سال ۲۰۲۰ آواده و همکاران [۱۳] با بهره‌گیری از یک کنسرسیوم باکتریایی، موفق به کاهش ۲۵ درصدی محتوای گوگرد در دیزل شدند. بررسی‌های آنها نشان داد که ترکیب غالب گونه‌های باکتریایی در این کنسرسیوم جهت گوگردزدایی به نوع منبع گوگردی موجود در محیط کشت وابسته است. به‌طور خاص، در محیط حاوی DBT، گونه‌های کلبسیلا (*Klebsiella*)، پseudomonas، ردوکوکوس (*Rhodococcus*) و اسفینگوموناس (*Sphingomonas*) نقش پررنگ‌تری در گوگردزدایی داشتند. در حالی که در محیط‌هایی که ۶۴-دی متیل دی بنزوتیوفن (4,6-DMDBT) به‌عنوان تنها منبع گوگردی استفاده شد، گونه‌های کلبسیلا و سودوموناس بیشترین سهم در گوگردزدایی را داشتند. علاوه بر این، در محیط کشت حاوی BT، گونه ردوکوکوس به‌عنوان گونه کلیدی در گوگردزدایی شناسایی شد. این نتایج نشان‌دهنده انعطاف‌پذیری عملکرد کنسرسیوم باکتریایی در سازگاری با منابع مختلف گوگرد است.

در سال ۲۰۲۱ هیرشلر و همکاران [۲۳] با بهره‌گیری از روش‌های مبتنی بر سطح عملکرد پروتئین‌ها و خروجی نهایی متابولیسم، نخستین مدل تجربی سوخت و ساز گوگردی توسط سویه *Rhodococcus qingshengii* IGTS8 را بنا نهادند. نتایج این پژوهش نشان داد که استفاده از DBT به‌عنوان تنها منبع گوگرد، می‌تواند باعث تغییر مسیر متابولیسمی میکروارگانیسم‌ها در مقایسه با گوگرد عنصری گردد.

در سال ۲۰۲۲ کومار و همکاران [۲۴] از سه سویه پseudoxanthomons (*Pseudoxanthomons*)، رالستونیا (*Ralstonia*) و ردوکوکوس (*Rhodococcus*) برای گوگردزدایی از DBT استفاده کردند. در این میان فقط سویه ردوکوکوس توانایی بالقوه

ای در تبدیل DBT به 2-HBP داشت و توانست پیوند C-S را بدون ایجاد اختلال در ساختار هتروسیکلیک حلقه DBT بشکند.

در سال ۲۰۲۳ کاشف و همکاران [۲۵] پژوهشی جامع با استفاده از سویه دریایی *Bacillus aryabhatai* NM1-A2 بر روی فرآیند BDS انجام دادند. آنها با بهره‌گیری از توالی‌یابی کل ژنوم نشان دادند که این سویه قادر است DBT را با راندمان تقریباً ۹۵٪ تجزیه کند.

در سال ۲۰۲۴، سیلوا و همکاران [۲۶] به بررسی عملکرد و توان بالقوه *Gordonia* (در فرآیند گوگردزدایی زیستی از ترکیب سوخت مصنوعی (n-heptane+DBT) پرداختند. در ادامه، آنها این سویه را در گوگردزدایی زیستی از سوخت‌های واقعی، بکار بردند و کارایی سیستم زیستی مذکور و امکان تسریع انتقال آن به مقیاس صنعتی را به‌طور مؤثری نشان دادند. در سال ۲۰۲۴ انور و همکاران [۱۴] با مطالعه بر روی ۴ گونه باکتریایی براساس ترکیبات بیوشیمیایی و ویژگی‌های منحصر به فرد آن‌ها، استراتژی‌های گوگردزدایی زیستی را بهبود بخشیدند.

در سال ۲۰۲۴ ساداره و همکاران [۲۷] عملکرد *Pseudomonas aeruginosa* را در آزمایشگاه برای انجام فرآیند BDS روی دیزل آفریقای جنوبی بررسی کردند. نتایج نشان داد که این روش ۷۰/۵۴٪ از DBT را به ترکیب کم‌خطر 2-HBP تبدیل می‌کند. آنها تنها از دو مدل سینتیک ساده Michaelis-Menten و First-order Kinetic Model برای ارزیابی و توصیف کمی رشد باکتری‌ها برای تخریب DBT و نیز تطابق با داده‌های تجربی استفاده کردند.

در سال ۲۰۲۵ تاکور و همکاران [۲۸] در مطالعه‌ای به بررسی پتانسیل کنسرسیوم‌های میکروبی برای حذف زیستی DBT از ترکیبات نفتی پرداختند. با استفاده از تکنیک‌های کشت سریال و محیط‌های اختصاصی، کنسرسیوم‌های میکروبی از خاک‌های آلوده به نفت جداسازی شدند. سپس توانایی آنها در تجزیه DBT با روش‌های کروماتوگرافی گازی (GC)، طیف‌سنجی جذب اتمی (AAS)، کمی‌سازی تعداد میکروب‌های زنده (MPN) و سنجش غیر مستقیم رشد و فعالیت میکروبی (OD) مورد ارزیابی قرار گرفتند. نتایج نشان داد که کنسرسیوم‌های میکروبی نسبت به سویه‌های منفرد کارایی بالاتری در حذف گوگرد دارند. کارایی حذف به زمان واکنش، دما و غلظت بیوکاتالیست وابسته است.

در سال ۲۰۲۵ آکیم بک و همکاران [۲۹] نفت میدان Karazhanbas با محتوای گوگرد ۱/۶ تا ۲/۲٪ را به عنوان نمونه مورد بررسی انتخاب کردند. آنها با بهره‌گیری از باکتری‌های بومی و حلال‌های یوتکتیک عمیق (DES)، نرخ حذف گوگرد را تا حدود ۹۶٪ در شرایط آزمایشگاهی محقق ساختند. سویه‌هایی مانند *R. erythropolis* AC 1039، *B. thuringiensis* SFN-3 و *P. aeruginosa* B-5807 عملکرد برجسته‌ای از خود نشان داده‌اند و DES‌ها به‌طور قابل‌توجهی رشد و کارایی میکروبی را ارتقا بخشیدند.

در سال ۲۰۲۵ نائینجی و همکاران [۳۰] با بررسی کامل ژنوم سویه *Exophiala spinifera* strain FM و شناسایی تمامی ژن‌ها و مسیرهای متابولیک مرتبط با BDS از DBT، اولین مدل متابولیک در مقیاس ژنوم (GSMM) به نام iEsp1694 را برای این ارگانیزم توسعه دادند. مدل ارائه شده مسیرهای متابولیکی مرتبط با حذف DBT را شناسایی و با استفاده از شبیه‌سازی، رفتار زیستی سویه مورد نظر را تحلیل کرده است.

بر اساس آنچه که بیان شد، اکثر پژوهش‌های انجام شده بر روی فرآیند گوگردزدایی زیستی متمرکز بر کارهای آزمایشگاهی است. طبیعتاً، انجام این‌گونه پژوهش‌ها به منظور ارزیابی پارامترهای موثر بر فرایند، نیازمند صرف هزینه و وقت زیادی می‌باشد. در این راستا، استفاده از مدل‌های کارآمد و شبیه‌سازی فرایند می‌تواند استراتژی مناسب جهت کاهش و رفع معضلات تحقیقات آزمایشگاهی باشد. بنابراین تمرکز اصلی مقاله حاضر بکارگیری و ارزیابی مدل‌های تحلیلی و کاربردی برای توصیف جنبه‌های کلیدی فرایند گوگردزدایی زیستی نظیر غلظت توده زیستی، ثابت سرعت رشد ویژه باکتریایی، نرخ مصرف سوسترای گوگردی و نرخ میزان محصول تولیدی و شبیه‌سازی فرایند است. بر مبنای دانش ما تاکنون پژوهشی در

زمینه بررسی پتانسیل مدل های زیستی دینامیک در پیش بینی متغیرهای حیاتی فرایند گوگردزایی زیستی انجام نگرفته است.

۲. مدلسازی فرآیند

ارزیابی آزمایشگاهی جنبه های مختلف فرایند BDS بسیار وقتگیر، هزینه بر و توام با ریسک پذیری زیاد است، بنابراین بکارگیری مدل های دقیق، کاربردی و مطابق با فیزیک فرایند می تواند راه حلی مناسب برای ارزیابی صحیح فرایند و غلبه بر چالش های موجود در بررسی های آزمایشگاهی باشد. از سوی دیگر مدلسازی ابزاری موثر در طراحی، افزایش مقیاس و کنترل فرایند است و می تواند باعث پیاده سازی استراتژی های مناسب و حذف رویکردهای نامطلوب شود [۳۱]. مدلسازی BDS، برای تخمین دقیق مقدار حذف سوبسترای گوگردی و میزان تولید محصول بی ضرر، امری بسیار ضروری است و می تواند اطلاعات مفیدی از شدت اثر متغیرهای مختلف بر خروجی فرایند فراهم آورد.

طی فرایند BDS، حذف سوبسترا بطور همزمان با رشد باکتری های گوگردزدا و تولید محصول در یک فرایند ناپیوسته صورت می پذیرد. بنابراین، پیش بینی صحیح سینتیک های دینامیک فرایند نظیر سنتیک های رشد توده زیستی، نرخ مصرف سوبسترا و تولید محصول از اهمیت بسزایی برخوردار است. این سنتیک ها بازگو کننده عملکرد فرایند و راندمان حذف ترکیبات گوگردی است. در این راستا برپایی یک چارچوب دقیق مدلسازی نقش تعیین کننده ای در اجرای عملیاتی فرایند خواهد داشت.

۱.۲. مدلسازی سینتیک رشد باکتریایی

در این پژوهش به منظور پیش بینی روند رشد و مرگ باکتریایی از دو مدل سینتیکی استفاده گردید که در جدول ۱ آورده شده است. مدل اول یک الگوی نمایی است و روند رشد باکتریایی را به صورت یک تابع نمایی توصیف می کند. معادله دوم به مدل لجستیک شهرت دارد و اغلب زمانی که ازدیاد جمعیت میکروبی، مانع رشد خود می شود، مورد استفاده قرار می گیرد.

جدول ۱. مدل های بکار برده شده برای پیش بینی روند رشد و مرگ باکتریایی

تعریف مدل	نام مدل
$\frac{dC_x}{dt} = \mu C_x - K_d C_x$	نمایی
$\frac{dC_x}{dt} = \mu C_x \left(1 - \frac{C_x}{C_{xm}}\right) - K_d C_x$	لجستیک

در مدل های رشد نمایی و لجستیک فرض شده است که محیط کشت یکنواخت و ثابت بوده و تغییری نمی کند. همچنین از تفاوت های سنی و فیزیولوژیکی میان سلول های باکتریایی چشم پوشی شده و کل جمعیت زیستی به صورت یک توده یکنواخت در نظر گرفته شده است. علاوه بر این، رقابت بین سلول ها برای دستیابی به سوبسترا و مواد مغذی یکسان لحاظ گردیده است. از آنجایی که زیست توده در ابتدا با فراوانی سوبسترای گوگردی مواجه بوده و با مصرف آن رشد پیدا می کند و در ادامه به دلیل عدم غلظت کافی سوبسترا و تغییر شرایط محیطی وارد فاز مرگ می شود، در نتیجه در مدل های مذکور، ترم های مرتبط با رشد (ترم اول سمت راست) و مرگ (ترم دوم سمت راست) باکتریایی در نظر گرفته شده است.

در معادلات سینتیکی ارائه شده در **جدول ۱**، C_x نشان‌دهنده غلظت زیست توده باکتریایی، t معرف زمان، μ بیانگر سرعت رشد ویژه باکتریایی، K_d ثابت مرگ یا کاهش زیست توده در طول فرآیند BDS و C_{xm} حداکثر غلظت قابل دستیابی زیست توده در شرایط محیطی مورد بررسی می‌باشد.

۱.۱.۲. مدلسازی سرعت رشد ویژه باکتریایی (μ)

سرعت رشد ویژه یک ثابت در فاز نمایی رشد باکتریایی است که اشاره دارد سرعت رشد سلول متناسب با جمعیت توده زیستی زنده که همه آنها پتانسیل یکسانی برای رشد دارند، است. همچنین این پارامتر مرتبط با تناوب تولید باکتری‌های جدید توسط آنهاست که هم اکنون در محیط حضور دارند [۳۲]. زمانی که رشد و نمو باکتریایی در یک محیط کشت متأثر از غلظت سوبسترا است، در نتیجه نمی‌توان مقداری ثابتی برای μ در نظر گرفت و باید تابعیت آن با مقدار سوبسترای موجود را تعیین نمود. از آنجایی که در فرآیند گوگردزایی زیستی چنین شرایطی حاکم است، در نتیجه برای تقریب مقدار μ از مدل‌هایی استفاده شد که قادر به توصیف وابستگی مقدار μ به غلظت سوبسترا باشند. در این راستا ده مدل کارآمد برای تقریب مقدار μ در نظر گرفته شد که در **جدول ۲** آورده شده است.

جدول ۲. مدل‌های در نظر گرفته شده برای تقریب مقدار μ

تعریف مدل	نام مدل
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s}{K_s + C_s}$	مونود (Monod)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s}{C_s + K_s + \frac{C_s^2}{K_i}}$	هالدان (Haldane)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s \exp\left[-\frac{C_s}{K_i}\right]}{K_s + C_s}$	آیبا (Aiba)
$\mu = \left(\frac{\mu_{max} C_s}{C_s + K_s}\right) (1 - K_p C_p)$	هینشلوود (Hinshelwood)
$\mu = \mu_{max} C_s \left[\exp\left(-\frac{C_s}{K_i}\right) - \exp\left(-\frac{C_s}{K_s}\right) \right]$	ادوارد (Edward)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s}{K_s + C_s + \left(\frac{C_s^2}{K_i}\right) \left[1 + \left(\frac{C_s}{K}\right)\right]}$	یانو (Yano)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s}{K_s}$	بلک من (Blackman)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s^n}{K_s + C_s^n}$	موزر (Moser)
$\mu = \frac{\mu_{max} C_s}{(K_s + C_s) \left(1 + \left(\frac{C_s}{K_i}\right)\right)}$	آندریوس (Andrews)

وب (Webb)

$$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s \left(1 + \frac{C_s}{K_i}\right)}{C_s + K_s + \left(\frac{C_s^2}{K_i}\right)}$$

در تمامی مدل های ارائه شده در **جدول ۲**، مقدار μ تنها به صورت تابعی از غلظت سوبسترا (DBT) و اثر مهارکنندگی آن بر فرایند رشد و مرگ باکتریایی در نظر گرفته شده است. در این مدل ها مقدار μ مستقل از پارامترهایی نظیر دما، pH، غلظت اکسیژن و تنش های محیطی (مانند اثر اختلاط) فرض گردیده است. در کارهای آتی اثر پارامترهای مذکور روی مقدار μ مورد بررسی قرار خواهند گرفت.

در مدل های ارائه شده در **جدول ۲**، μ_{\max} حداکثر سرعت رشد ویژه باکتریای تحت شرایط بهینه، C_s غلظت سوبسترا، K_s ثابت نیمه اشباعیت سوبسترا (غلظتی که در آن سرعت رشد ویژه نصف حداکثر مقدار خود است)، K_i ثابت مهارکنندگی سوبسترا (غلظتی از سوبسترا که اثر مهارتی بر رشد باکتری یا تولید محصول دارد)، K_p ثابت مهارکنندگی محصول (غلظتی از محصول که اثر مهارتی بر رشد باکتری یا تولید محصول دارد)، C_p غلظت محصول، K پارامتر اصلاحی در مدل یانو (که به منظور بهبود تقریب سرعت رشد ویژه باکتریایی به کار می رود) و n ثابت تجربی مدل موزر (یک متغیر قابل تنظیم و انعطاف پذیر که امکان برازش دقیق مدل با داده های تجربی را فراهم می سازد) است.

۲.۲. مدل سازی نرخ مصرف سوبسترا

مصرف سوبسترا در فرایندهای زیستی به سه منظور سنتز توده زیستی، تولید محصول و حفظ* میکروارگانیسم ها صورت می پذیرد [۳۲] در مقاله حاضر از معادله لودکینگ-پیرت که شامل سه ترم ذکر شده در بالاست، برای پیش بینی روند مصرف سوبسترا استفاده گردید. مدل لودکینگ-پیرت یک مدل تجربی است که به سادگی مشاهدات آزمایشگاهی را بازگو می کند.

$$-\frac{dC_s}{dt} = \frac{1}{Y_{x/s}} \frac{dC_x}{dt} + mC_x + \frac{1}{Y_{p/s}} \frac{dC_p}{dt} \quad (1)$$

در معادله (۱)، اولین ترم سمت راست مربوط به مصرف سوبسترا برای رشد توده زیستی است، دومین ترم سمت راست مربوط به حفظ باکتری هاست و ترم سوم مربوط به مصرف سوبسترا برای تشکیل محصول می باشد. در معادله (۱)، $Y_{x/s}$ بازده تبدیل سوبسترا به زیست توده (گرم زیست توده تولید شده به ازای هر گرم سوبسترا مصرف شده)، m ضریب نگهداری سلول (میزان مصرف سوبسترا توسط سلول ها برای حفظ فعالیت های متابولیکی و بقای زیست توده و مستقل از رشد) و $Y_{p/s}$ بازده تبدیل سوبسترا به محصول (گرم محصول تولید شده به ازای هر گرم سوبسترای مصرف شده) است.

۳.۲. مدل سازی نرخ تولید محصول

مقدار محصول تولید شده در گوگردزدایی زیستی شاخص مهمی است که نشان دهنده عملکرد فرایند در حذف آلاینده است. بنابراین پیش بینی دقیق مقدار آن می تواند نقش تعیین کننده ای در بهینه سازی و کنترل فرایند ایفا کند. در این پژوهش از مدل لودکینگ-پیرت برای پیش بینی روند تولید محصول استفاده گردید.

$$\frac{dC_p}{dt} = \left(\alpha \frac{dC_x}{dt} + \beta C_x\right) \quad (2)$$

* اصطلاحاً مصرف سوبسترا برای نگهداری میکروارگانیسم های زنده بدون رشد یا تشکیل محصول را "حفظ" گویند.

در معادله (۲)، اولین ترم سمت راست مربوط به بیان تابعیت تشکیل محصول به نرخ رشد باکتریایی است و دومین ترم سمت راست مربوط به بیان وابستگی تشکیل محصول به مقدار توده زیستی لحظه ای (باکتری ها بدون در نظر گرفتن رشد آنها) است. در معادله (۲)، α ضریب بازده تشکیل محصول وابسته به رشد سلول (بیانگر سهم تولید محصولی است که همزمان با رشد باکتری در فرآیند BDS تشکیل می شود) و β ضریب سنتز محصول مستقل از رشد سلول (بیانگر نرخ تولید محصول ناشی از فعالیت های متابولیکی سلول و مستقل از رشد زیست توده می باشد) است.

در اثر تشکیل و تجمع محصول 2-HBP حین فرایند گوگردزدایی، نرخ تولید آن توسط باکتری ها کاهش می یابد. عبارت دیگر، 2-HBP اثر بازدارندگی بر تولید خود دارد. برای توصیف این پدیده فیزیکی، ترم اصلاحی به مدل لودینگ-پیرت افزوده گردید.

$$\frac{dC_p}{dt} = \left(\alpha \frac{dC_x}{dt} + \beta C_x \right) \left(1 - \frac{C_p}{C_{pm}} \right) \quad (3)$$

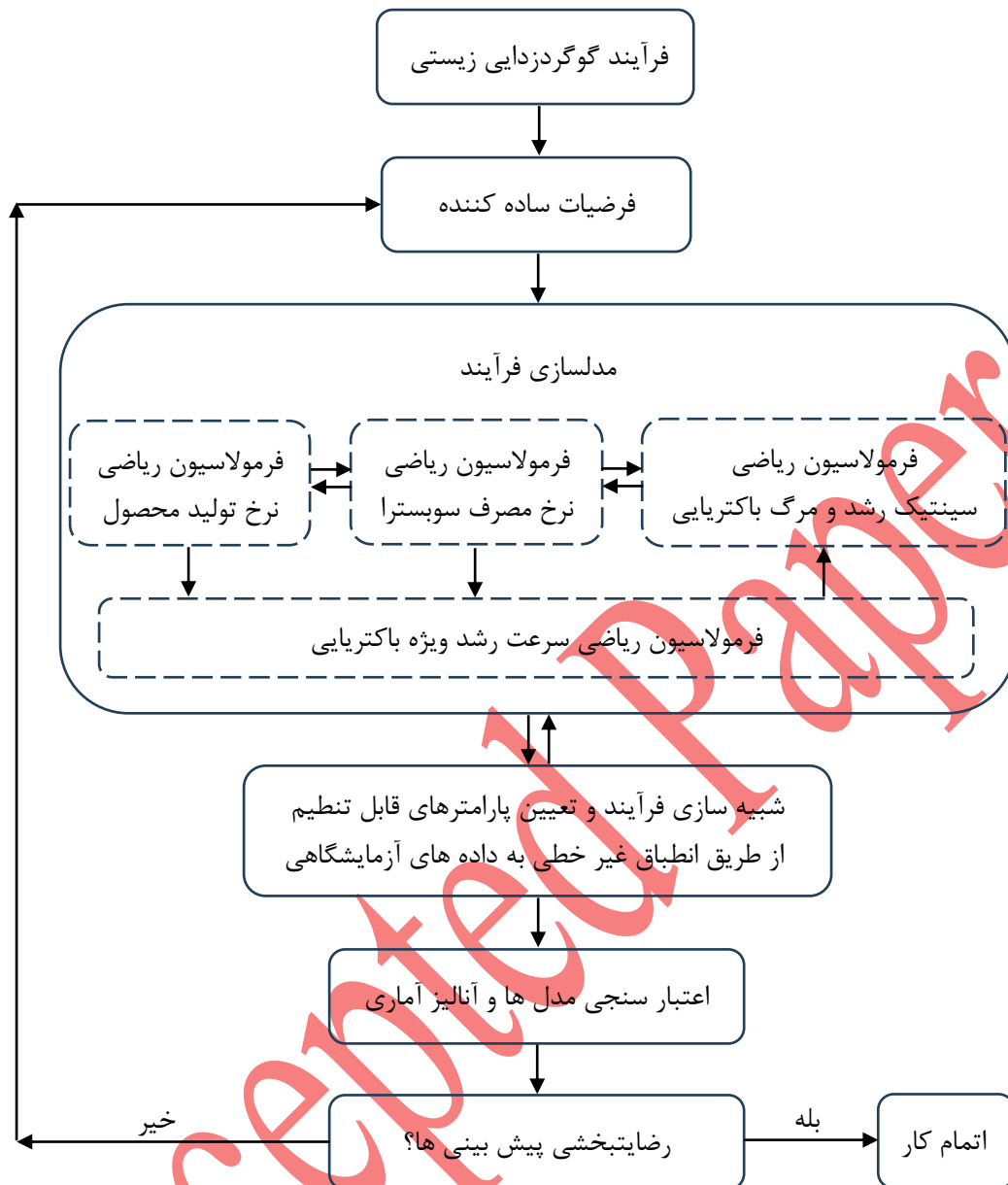
مقدار محصول تولیدی می تواند اثر مهارکنندگی بر نرخ تولید آن داشته باشد. در معادله (۳)، ترم سوم سمت راست بیانگر اثر خود بازدارندگی محصول است. در این معادله، C_{pm} بیشینه غلظت محصول است.

به منظور کاهش پیچیدگی، ضرایب موجود در معادلات (۱) تا (۳)، مانند $Y_{p/s}$ ، $Y_{x/s}$ ، m و α و β مستقل از تغییرات شرایط محیطی و فیزیولوژیکی سلول ها در نظر گرفته شده اند.

۳. شبیه سازی فرآیند

در بخش قبلی، مدل سازی جامعی روی قسمت های کلیدی فرایند گوگردزدایی زیستی انجام گرفت. در این قسمت بر مبنای مدل های تعریف شده، دو بسته شبیه سازی مجزا (نمایی و لجستیک) تعریف گردید. هر بسته شامل ده سناریو (به دلیل وجود ده مدل تعریف شده برای پیش بینی مقدار μ) می باشد. لازم به ذکر است که هر سناریو شامل یک مدل سینتیک رشد و مرگ باکتریایی، یک مدل سرعت رشد ویژه باکتریایی (μ)، مدل نرخ مصرف سوبسترا و مدل نرخ تولید محصول می باشد. بنابراین هر سناریو شامل مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل معمولی است. برای حل دسته معادلات دیفرانسیل در هر سناریو از تکنیک حل همزمان به روش رانژ-کاتا مرتبه ۴ با اندازه گام زمانی متغیر با استفاده از تابع "ode45" در محیط نرم افزار متلب (نسخه R2024b) استفاده گردید. در شکل ۱ دیاگرام شماتیکی از روند مدل سازی و شبیه سازی فرآیند BDS ترسیم شده است.





شکل ۱. دیاگرام شماتیک روند مدلسازی و شبیه سازی فرآیند BDS

به منظور اعتبار سنجی و ارزیابی کارایی مدل های مذکور، از داده های آزمایشگاهی چن و همکاران [۳۳] استفاده گردید. آنها گونه مایکوباکتریوم را بروی سوپسترای DBT رشد دادند و تولید محصول 2-HBP را اندازه گیری کردند. در آزمایشات آنها فرآیند گوگردزدایی ۸۵ hr به طول انجامید و DBT با غلظت اولیه ۰/۴ mM و مایکوباکتریوم با غلظت اولیه ۰/۵ g/L بکار برده شد. مقدار عددی پارامترهای قابل تنظیم مدل های موجود در هر سناریو از طریق انطباق غیر خطی به داده های آزمایشگاهی چن و همکاران [۳۳] تعیین شدند. این انطباق بر مبنای الگوریتم حداقل مربعات غیر خطی[†] و به صورت تکراری در محیط نرم افزار متلب (نسخه R2024b) انجام پذیرفت. مقادیر پارامترهای مذکور در جدول ۳ آورده شده است.

[†] Non-linear least square algorithm

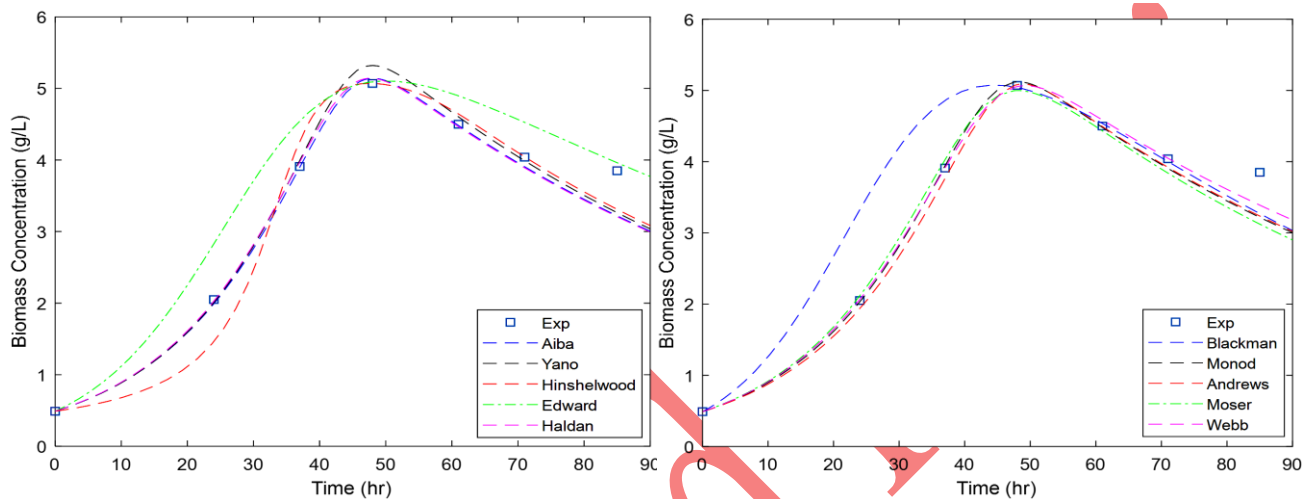
جدول ۳. مقادیر پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی بسته های نمایی (S1) و لجستیک (S2)

پارامترها	مونود		هالدان		آیبا		هینشلوود		ادوارد		یانو		بلک من		موزر		اندریوس		وب		واحد
	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	
μ_m	۰/۰۸۵	۰/۰۹	۰/۰۸۷	۰/۱۲۵	۰/۰۸۶	۰/۱۵	۰/۰۹	۰/۱۱	۰/۲۶	۰/۴۵	۰/۰۸۸	۰/۱۵	۰/۱۶	۰/۰۰۹	۰/۰۹	۰/۱	۰/۰۸۴۵	۰/۱۵	۰/۰۸۳	۰/۰۸	h^{-1}
K_s	۰/۰۸	۰/۰۲۵	۰/۰۷۸	۰/۰۴۵	۰/۰۷۵	۰/۰۷۵	۰/۰۷۵	۰/۰۶۸	۰/۰۵۵	۰/۰۷۵	۰/۰۷۵	۰/۰۵۵	۰/۶	۰/۰۲۵	۰/۰۹۵	۰/۰۱۹۹	۰/۰۷۵	۰/۰۷۵	۰/۱	۰/۰۱۵	gL^{-1}
α	۰/۰۷۹	۰/۱۱۳	۰/۰۸	۰/۱۱۳	۰/۰۸	۰/۱۱۳	۰/۰۷۸	۰/۱۱	۰/۰۸۲	۰/۱۰۶	۰/۰۷۸	۰/۱۱۲	۰/۰۷۳۵	۰/۰۷	۰/۰۸	۰/۱۱۳	۰/۰۸	۰/۱۱۳	۰/۰۷۵	۰/۱۱۳	h^{-1}
β	1×10^{-4}	8×10^{-5}	1×10^{-4}	8×10^{-5}	1×10^{-4}	8×10^{-5}	1×10^{-4}	8×10^{-5}	1×10^{-5}	8×10^{-5}	1×10^{-4}	1×10^{-4}	9×10^{-5}	6×10^{-4}	1×10^{-4}	4×10^{-5}	1×10^{-4}	8×10^{-5}	1×10^{-5}	8×10^{-5}	h^{-1}
$Y_{x/s}$	۷۷	۶۰	۸۰	۶۰	۸۰	۶۰	۸۰	۶۰	۹۵	۹۰	۷۷	۶۵	۱۰۰	۶۰	۸۵	۵۷	۷۷	۶۰	۶۰	۶۵	gg^{-1}
$Y_{p/s}$	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۵۵	۲/۰۱	۱/۹۵	۱/۶۶	۱/۶	۱/۶	۱/۵۹	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	۱/۶	gg^{-1}
m	8×10^{-4}	9×10^{-4}	8×10^{-4}	9×10^{-4}	8×10^{-4}	9×10^{-4}	8×10^{-4}	$8/9 \times 10^{-4}$	7×10^{-4}	$8/7 \times 10^{-4}$	8×10^{-4}	9×10^{-4}	$8/5 \times 10^{-4}$	9×10^{-4}	$8/5 \times 10^{-4}$	9×10^{-4}	8×10^{-4}	9×10^{-4}	8×10^{-4}	9×10^{-4}	h^{-1}
K_i	-	-	۹/۸	۰/۹	۹/۸	۰/۹	-	-	۵	۰/۶۵	۷/۲	۰/۷	-	-	-	-	۹/۸	۰/۹	۹/۸	۰/۸	gL^{-1}
K_d	۰/۰۱	۰/۰۰۵	۰/۰۱	۰/۰۰۴۵	۰/۰۱	۰/۰۰۵	۰/۰۱	۰/۰۰۲۵	۰/۰۱	۰/۰۰۵۵	۰/۰۱	۰/۰۰۵۵	۰/۰۰۶۳	۰/۰۰۸۵	۰/۰۰۸۵	۰/۰۰۵	۰/۰۱	۰/۰۰۵	۰/۰۰۸	۰/۰۰۵	day^{-1}
K_p	-	-	-	-	-	-	۲/۵	۲/۱	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	gL^{-1}
K	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	۰/۹	۲	-	-	-	-	-	-	-	-	gL^{-1}
C_{x_m}	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	-	۵/۰۷	gL^{-1}
C_{p_m}	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	-	۰/۳۸	mM
n	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	۱/۰۷۷	۱/۰۷۷	-	-	-	-	-

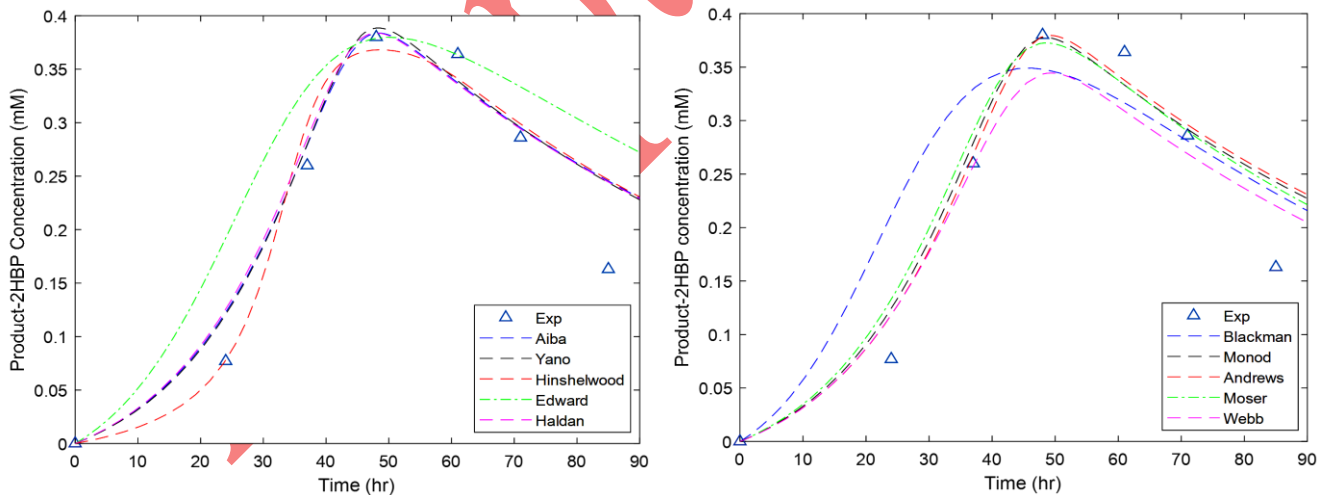
ACCEPTED

۳. نتایج و بحث

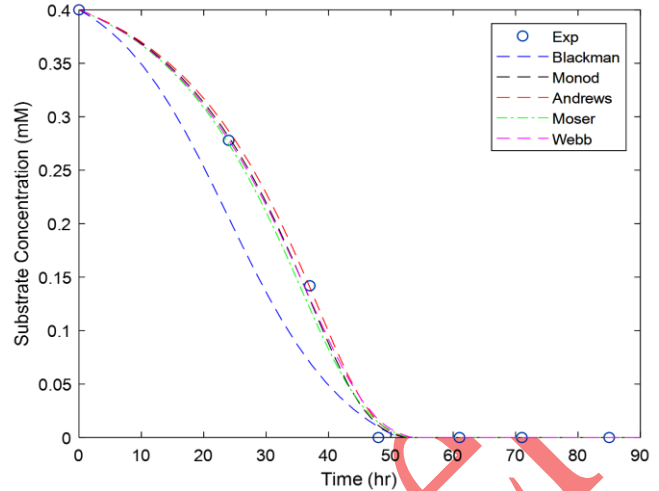
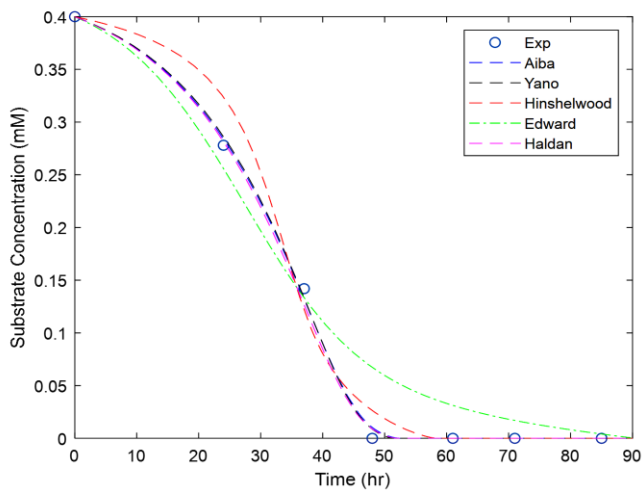
در این بخش پیش بینی های حاصل از هر یک از سناریوهای شبیه سازی آورده شده و جهت اعتبارسنجی با داده های آزمایشگاهی مورد مقایسه قرار گرفته است. در شکل های ۲ تا ۷ به ترتیب پیش بینی های بدست آمده از روند تغییرات غلظت زیست توده، غلظت محصول 2-HBP و غلظت DBT (سوبسترا) با زمان بر اساس بیست سناریوی موجود در بسته شبیه سازی نمایی و لجستیک آورده شده و با داده های آزمایشگاهی برگرفته از کار چن و همکاران [۳۳] قیاس گردیده است.



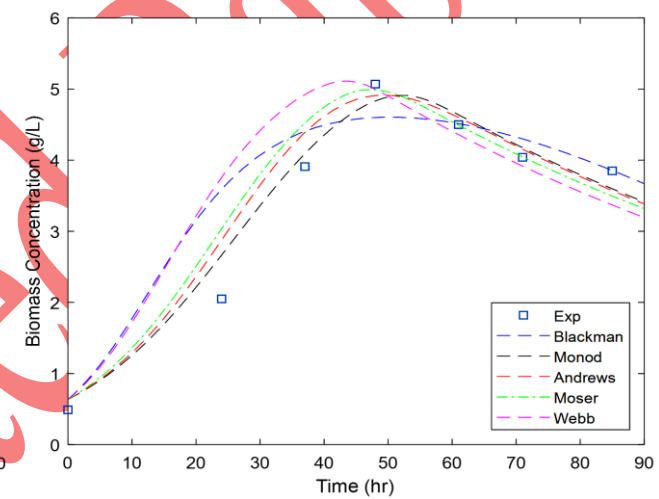
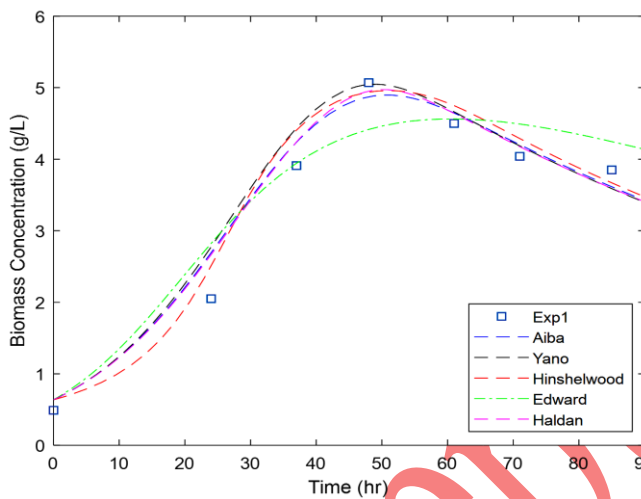
شکل ۲. تغییرات غلظت زیست توده با زمان. پیش بینی های بسته نمایی شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/اموزر/وب به همراه داده های آزمایشگاهی (□) برگرفته از [۳۳].



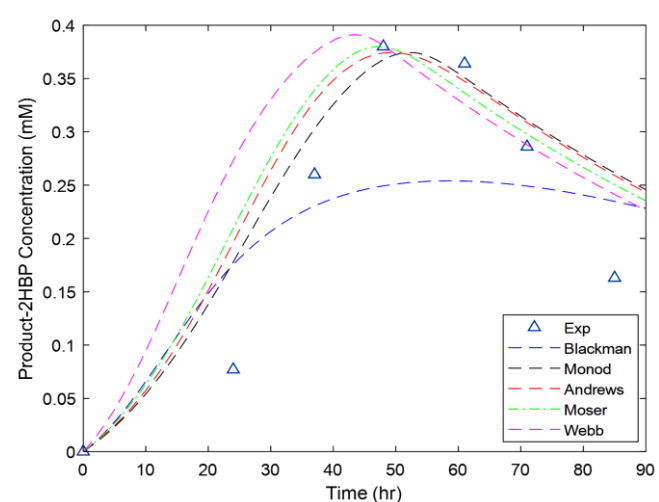
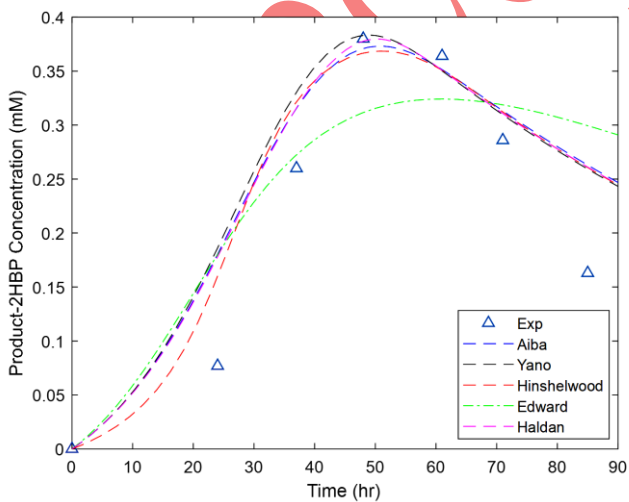
شکل ۳. تغییرات غلظت محصول 2-HBP با زمان. پیش بینی های بسته نمایی شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/اموزر/وب به همراه داده های آزمایشگاهی (Δ) برگرفته از [۳۳].



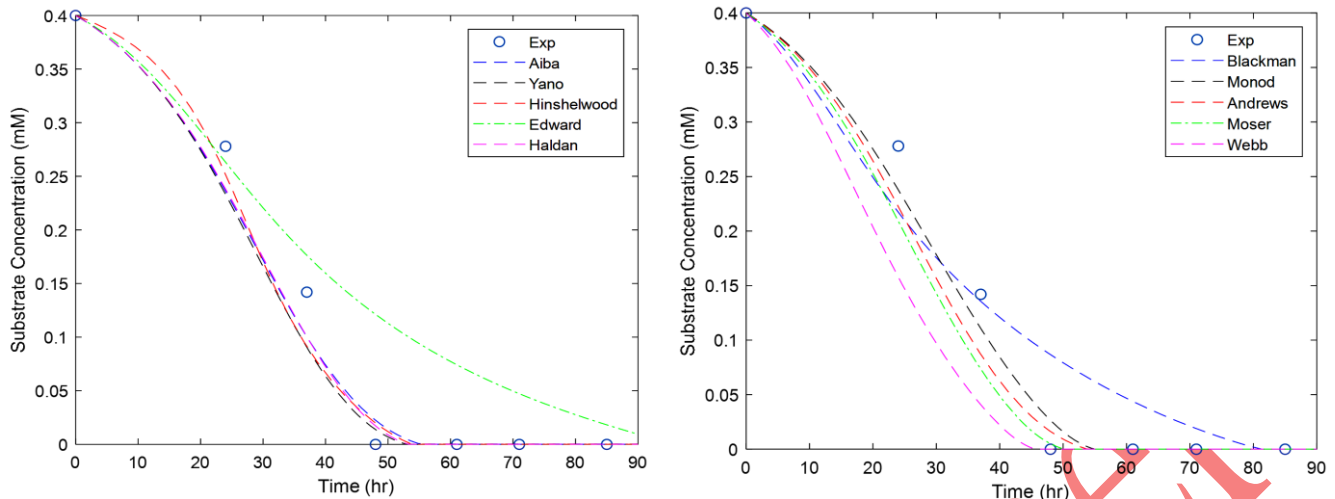
شکل ۴. تغییرات غلظت DBT (سوبسترا) با زمان. پیش بینی های بسته نمایی شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/موزر/وب به همراه داده های آزمایشگاهی (O) برگرفته از [۳۳].



شکل ۵. تغییرات غلظت زیست توده با زمان. پیش بینی های بسته لجستیک شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/موزر/وب به همراه داده های آزمایشگاهی (□) برگرفته از [۳۳].



شکل ۶. تغییرات غلظت محصول 2-HBP با زمان. پیش بینی های بسته لجستیک شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/موزر/وب به همراه داده های آزمایشگاهی (Δ) برگرفته از [۳۳].



شکل ۷. تغییرات غلظت DBT (سوبسترا) با زمان. پیش بینی های بسته لجستیک شامل ده سناریوی مختلف بر پایه مدل های مونود/هالدان/آیبا/هینشلوود/ادوارد/یانو/بلک من/اندریوس/موزر/وب بهمراه داده های آزمایشگاهی (O) برگرفته از [۳۳].

همانگونه که در شکل های ۲ تا ۷ دیده می شود تا حدود ۵۰ ساعت پس از آغاز فرایند، غلظت توده زیستی و به تبع آن تولید محصول (2-HBP) افزایش یافته و سپس مقدار آنها کاهش می یابد. دلیل این امر این است که تا ۵۰ ساعت اولیه، سوبسترا (DBT) در محیط مهیا و در دسترس توده زیستی (مایکوباکتریوم) بوده و شرایط بهینه رشد از نظر دما و pH فراهم می باشد. از این زمان به بعد بدلیل فقدان مقدار سوبسترای کافی و ایجاد شرایط نامناسب برای رشد، مایکوباکتریوم وارد فاز مرگ شده و به تبع آن میزان محصول تولیدی سیر نزولی پیش می گیرد. نکته جالب توجه اینجاست که با گذشت ۵۰ ساعت از شروع فرایند اگر چه غلظت DBT تقریباً به صفر نزدیک می شود، اما رشد توده زیستی و غلظت 2-HBP نه تنها کاهش نمی یابد بلکه به حداکثر مقدار خود می رسد. دلیل این امر این است که رفتار باکتری ها بعنوان موجودات زنده تنها وابسته به شرایط فعلی حاکم بر محیط نیست بلکه متاثر از شرایطی که قبلاً نیز تجربه کرده است می باشد [۳۴].

از نتایج بدست آمده از شبیه سازی ها کاملاً مشخص است که تقریباً تمامی سناریوهای بیست گانه تعریف شده قادر به پیش بینی روند کلی این تحولات با زمان در فرایند گوگردزایی زیستی می باشند. به منظور مقایسه دقیقتر، مجموع مربعات خطا (SSE)، ریشه متوسط مربعات خطا (RMSE) و مجذور ضریب همبستگی (R^2) ناشی از پیش بینی بسته مدل های موجود برای غلظت های توده زیستی (R^2_X و $RMSE_X$ ، SSE_X)، محصول (R^2_P و $RMSE_P$ ، SSE_P) و سوبسترا (R^2_S و $RMSE_S$ ، SSE_S)، در هر سناریوی شبیه سازی محاسبه و در جدول ۴ گزارش شد. با توجه به مقادیر مجموع مربعات خطای کل (SSE_{total})، ریشه متوسط مربعات خطای کل ($RMSE_{total}$) و میانگین مجذور ضریب همبستگی (R^2_{mean}) برای هر سناریو، می توان به ارزیابی و مقایسه دقت و قدرت انطباق بیست سناریوی تعریف شده پرداخت.

در بسته شبیه سازی نمایی (S1)، ترتیب دقت عملکرد و انطباق سناریوها در پیش بینی فرایند به صورت زیر می باشد:

وب < آیبا < اندریوس < مونود < یانو < هالدان < موزر < هینشلوود < ادوارد < بلک من

همانگونه که ملاحظه می گردد، سناریوی بر پایه مدل وب با $SSE_{total} = 0/087$ ، $RMSE_{total} = 0/16$ و $R^2_{mean} = 0/976$ دارای کمترین میزان خطا و بیشترین انطباق به داده های آزمایشگاهی می باشد. همچنین، ضعیف ترین عملکردها متعلق به سناریوهای بر پایه مدل های ادوارد و بلک من به ترتیب با SSE_{total} برابر با $0/358$ و $0/503$ ، $RMSE_{total}$ برابر با $0/359$ و $0/445$ و R^2_{mean} برابر با $0/931$ و $0/862$ می باشد.

جدول ۴. مقادیر SSE، RMSE و R² در بسته های شبیه سازی نمایی (S1) و لجستیک (S2) برای غلظت های توده زیستی،

محصول و سوبسترا

مدل			آبیا						ادوارد					
سناریو شاخصه آماری			S1			S2			S1			S2		
			SSE _X	RMSE _X	R ² _X	SSE _P	RMSE _P	R ² _P	SSE _S	RMSE _S	R ² _S	SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}
SSE _X	RMSE _X	R ² _X	۰/۰۲۴	۰/۰۵۸	۰/۹۷۸	۰/۰۴۲	۰/۰۷۸	۰/۹۶۷	۰/۰۶۴	۰/۰۹۶	۰/۹۶۴	۰/۱۵	۰/۱۴۶	۰/۹۲۴
SSE _P	RMSE _P	R ² _P	۰/۰۶۷	۰/۰۹۳	۰/۹۴۹	۰/۱۹۵	۰/۱۶۷	۰/۸۸۲	۰/۲۵۸	۰/۱۹۲	۰/۸۵۴	۰/۴۵	۰/۲۵۴	۰/۷۴۲
SSE _S	RMSE _S	R ² _S	۰/۰۰۱	۰/۰۱۵	۰/۹۹۸	۰/۰۲۵	۰/۰۶	۰/۹۸	۰/۰۳۶	۰/۰۷۱	۰/۹۷۵	۰/۱۰۶	۰/۱۲۳	۰/۹۴
SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}	۰/۰۹۲	۰/۱۶۶	۰/۹۷۵	۰/۲۶۴	۰/۳۰۵	۰/۹۴۳	۰/۳۵۸	۰/۳۵۹	۰/۹۳۱	۰/۷۰۶	۰/۵۲۳	۰/۸۶۹
مدل			هالدان						هینشلود					
سناریو شاخصه آماری			S1			S2			S1			S2		
			SSE _X	RMSE _X	R ² _X	SSE _P	RMSE _P	R ² _P	SSE _S	RMSE _S	R ² _S	SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}
SSE _X	RMSE _X	R ² _X	۰/۰۱۹	۰/۰۵۲	۰/۹۸۲	۰/۰۳۲	۰/۰۶۸	۰/۹۷	۰/۰۳۷	۰/۰۷۲	۰/۹۶۲	۰/۰۳۹	۰/۰۷۴	۰/۹۷۳
SSE _P	RMSE _P	R ² _P	۰/۰۷۸	۰/۱۰۵	۰/۹۳۲	۰/۱۷	۰/۱۵۶	۰/۸۹۱	۰/۰۷۹	۰/۱۰۶	۰/۹۳۷	۰/۱۸۱	۰/۱۶۱	۰/۸۹۷
SSE _S	RMSE _S	R ² _S	۰/۰۰۲	۰/۰۱۷	۰/۹۹۸	۰/۰۲۳	۰/۰۵۷	۰/۹۸۳	۰/۰۱۹	۰/۰۵۲	۰/۹۸۵	۰/۲۷	۰/۱۹۶	۰/۷۵۲
SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}	۰/۰۹۹	۰/۱۷۴	۰/۹۷۱	۰/۲۲۵	۰/۲۸۱	۰/۹۴۸	۰/۱۳۵	۰/۲۳	۰/۹۶۱	۰/۴۹	۰/۴۳۱	۰/۸۷۴
مدل			مونود						بلک من					
سناریو شاخصه آماری			S1			S2			S1			S2		
			SSE _X	RMSE _X	R ² _X	SSE _P	RMSE _P	R ² _P	SSE _S	RMSE _S	R ² _S	SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}
SSE _X	RMSE _X	R ² _X	۰/۰۲۳	۰/۰۵۷	۰/۹۷۷	۰/۰۳۸	۰/۰۷۴	۰/۹۷	۰/۱۴	۰/۱۴۲	۰/۸۳۹	۰/۲۴۴	۰/۱۸۷	۰/۸۴۶
SSE _P	RMSE _P	R ² _P	۰/۰۷۱	۰/۱۰۱	۰/۹۴	۰/۱۸۷	۰/۱۶۴	۰/۸۸۷	۰/۲۹۶	۰/۲۰۶	۰/۷۹۵	۰/۵۹۲	۰/۲۹۱	۰/۶۸۴
SSE _S	RMSE _S	R ² _S	۰/۰۰۲	۰/۰۱۶	۰/۹۹۸	۰/۰۲۱	۰/۰۵۴	۰/۹۸۴	۰/۰۶۷	۰/۰۹۷	۰/۹۵۲	۰/۰۸۳	۰/۱۰۹	۰/۹۳۴
SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}	۰/۰۹۵	۰/۱۷۴	۰/۹۷۲	۰/۲۴۶	۰/۲۹۲	۰/۹۴۷	۰/۵۰۳	۰/۴۴۵	۰/۸۶۲	۰/۹۲	۰/۵۸۷	۰/۸۲۱
مدل			موزر						اندریوس					
سناریو شاخصه آماری			S1			S2			S1			S2		
			SSE _X	RMSE _X	R ² _X	SSE _P	RMSE _P	R ² _P	SSE _S	RMSE _S	R ² _S	SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}
SSE _X	RMSE _X	R ² _X	۰/۰۲۵	۰/۰۶	۰/۹۶۸	۰/۰۷۲	۰/۱۰۱	۰/۹۱۸	۰/۰۲۱	۰/۰۵۴	۰/۹۸۱	۰/۰۵۸	۰/۰۹۱	۰/۹۴۶
SSE _P	RMSE _P	R ² _P	۰/۰۸۱	۰/۱۰۸	۰/۹۳۸	۰/۲۲۵	۰/۱۷۹	۰/۸۳۲	۰/۰۶۷	۰/۰۹۸	۰/۹۴۱	۰/۲۱۸	۰/۱۷۶	۰/۸۶
SSE _S	RMSE _S	R ² _S	۰/۰۰۴	۰/۰۲۴	۰/۹۹۶	۰/۰۶	۰/۰۹۳	۰/۹۵۸	۰/۰۰۲	۰/۰۱۶	۰/۹۹۹	۰/۰۴۱	۰/۰۷۶	۰/۹۷
SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}	۰/۱۱	۰/۱۹۲	۰/۹۶۷	۰/۳۵۷	۰/۳۷۳	۰/۹۰۳	۰/۰۹	۰/۱۶۸	۰/۹۷۴	۰/۳۱۷	۰/۳۴۳	۰/۹۲۲
مدل			وب						یانو					
سناریو شاخصه آماری			S1			S2			S1			S2		
			SSE _X	RMSE _X	R ² _X	SSE _P	RMSE _P	R ² _P	SSE _S	RMSE _S	R ² _S	SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}
SSE _X	RMSE _X	R ² _X	۰/۰۱	۰/۰۳۸	۰/۹۸۷	۰/۱۷۳	۰/۱۵۷	۰/۸۱۳	۰/۰۳۵	۰/۰۷۱	۰/۹۶۹	۰/۰۴	۰/۰۷۶	۰/۹۵۸
SSE _P	RMSE _P	R ² _P	۰/۰۷۴	۰/۱۰۳	۰/۹۴۲	۰/۳۶۵	۰/۲۲۸	۰/۶۹۷	۰/۰۵۷	۰/۰۹	۰/۹۴۸	۰/۱۷۹	۰/۱۶	۰/۸۸
SSE _S	RMSE _S	R ² _S	۰/۰۰۲	۰/۰۱۹	۰/۹۹۸	۰/۱۲۸	۰/۱۳۵	۰/۹۱	۰/۰۰۱	۰/۰۱۴	۰/۹۹۹	۰/۰۳۱	۰/۰۶۶	۰/۹۷۷
SSE _{total}	RMSE _{total}	R ² _{mean}	۰/۰۸۷	۰/۱۶	۰/۹۷۶	۰/۶۶۶	۰/۵۲	۰/۸۱۷	۰/۰۹۴	۰/۱۷۵	۰/۹۷۲	۰/۲۵	۰/۳۰۲	۰/۹۳۸

در بسته شبیه سازی لجستیک (S2)، ترتیب دقت عملکرد و انطباق سناریوها در پیش بینی فرایند به صورت زیر می باشد:

هالدان < مونود < یانو < آبیا < اندریوس < موزر < هینشلود < وب < ادوارد < بلک من

همانطوری که دیده می شود، سناریوی بر پایه مدل هالدان با $SSE_{total} = ۰/۲۲۵$ ، $RMSE_{total} = ۰/۲۸۱$ و $R^2_{mean} = ۰/۹۴۸$

از پایین ترین میزان خطا و بالاترین انطباق به داده های آزمایشگاهی برخوردار است. به طور مشابه با بسته شبیه سازی

نمایی، در اینجا نیز ضعیف ترین عملکردها متعلق به سناریوهای بر پایه مدل های ادوارد و بلک من به ترتیب با SSE_{total} برابر با ۰/۷۰۶ و ۰/۹۲، $RMSE_{total}$ برابر با ۰/۵۲۳ و ۰/۵۸۷ و R^2_{mean} برابر با ۰/۸۶۹ و ۰/۸۲۱ می باشد.

کاملاً واضح است که سناریوهای متشکل از مدل های ادوارد و بلک من (در هر دو بسته شبیه سازی نمایی و لجستیک) نسبت به سایر سناریوها از توانایی کمتری در پیش بینی فرآیند برخوردارند. این امر در مدل بلک من می تواند ناشی از ماهیت خطی این مدل و ارتباط مستقیم μ با غلظت سوبسترا در این مدل باشد و در مدل ادوارد می تواند بخاطر ماهیت کاملاً نمایی این مدل در پیش بینی مقدار سرعت رشد ویژه باشد. بر این اساس می توان نتیجه گرفت مدل هایی که دارای چنین ساختاری هستند برای پیش بینی رفتار فرآیند گوگردزایی نامناسب اند، اما سایر مدل های غیر خطی از عملکرد قابل قبولی برخوردارند.

با توجه به نتایج ارائه شده در **جدول ۴**، پیش بینی سناریوهای بسته نمایی از دقت و انطباق بالاتری نسبت به سناریوهای بسته لجستیک برخوردار است. همانطور که در بالا اشاره گردید، از میان سناریوهای بسته نمایی نیز سناریوی بر پایه مدل وب از بالاترین پتانسیل و قدرت تخمین نسبت به سایرین برخوردار است و می توان آنرا به عنوان سناریوی مدلسازی منتخب برای فرآیند گوگردزایی زیستی معرفی نمود. مدل وب یک مدل غیرساختاریافته است که اثر مهارکنندگی سوبسترا بر فرآیند رشد و مرگ میکروارگانیسمها را به صورت صریح در ساختار معادله سینتیکی رشد لحاظ می کند. این مدل به عنوان نسخه ای اصلاح شده مدل هالدان شناخته می شود. در این مدل، μ تنها به عنوان تابعی از غلظت سوبسترا توصیف می شود، اما با برخورداری از ترم مهارکنندگی سوبسترا $(1 + \frac{C_S}{K_I})$ ، رفتار واقعی تر سیستم های زیستی در غلظت های مختلف سوبسترا را بازگو می نماید. مزیت اصلی مدل وب نسبت به سایر مدل ها در این است که قادر به توصیف برهم کنش همزمان پدیده های اشباعیت و مهارکنندگی سوبسترا با انعطاف پذیری بالا می باشد. برتری مکانیستی مدل وب نه در پیچیدگی ساختاری، بلکه در نحوه لحاظ کردن قدرت مهارکنندگی سوبسترا به صورت اصلاح شده نسبت به سایر مدل ها نهفته است. بر پایه دانش ما، از این مدل بیشتر در توصیف رشد میکروبی در حضور سوبستراهای غیرسمی بهره گرفته شده است. موفقیت مدل مذکور در حضور سوبسترای سمی (DBT) مورد استفاده در این پژوهش نشان می دهد که مدل وب از نظر مکانیستی توانایی مناسبی در بازنمایی اثر مهارکنندگی سوبسترا بر نرخ رشد باکتری ها دارد. لازم به ذکر است که اگر چه سناریوهای پیاده سازی شده بر اساس باکتری و سوبسترای خاصی شبیه سازی شدند اما این الگو را می توان برای سایر فرآیندهای تخریب زیستی که درگیر سایر باکتری ها و سوبستراها هستند بکار برد.

از آنجایی که برخی از عوامل مؤثر بر فرآیند گوگردزایی زیستی، از جمله دما، pH، سطح اکسیژن و شدت همزدن محیط کشت می تواند تاثیر ویژه ای روی روند رشد و مرگ باکتری ها داشته باشد، می توان مدل های ارائه شده در این مطالعه را با لحاظ کردن اثر تغییرات زمانی و مکانی این عوامل توسعه داد. همچنین می توان اثرات ناشی از تفاوت های سنی و فیزیولوژیکی میان سلول های باکتریایی را در فرآیند مدلسازی لحاظ نمود. علاوه بر این پیشنهاد می شود اثر غلظت های اولیه DBT بالاتر یعنی شرایط نزدیک تر به مقیاس صنعتی مورد ارزیابی قرار گرفته و عملکرد مدل های پیشنهاد شده در این شرایط را بررسی نمود. استفاده از مدل های چندمقیاسی شامل مدل های اتصال دهنده انتقال جرم-سینتیک، مدل های ساختاری و رویکردهای مبتنی بر یادگیری ماشین، می تواند راهکارهای آتی دیگری در پیش بینی رفتار گوگردزایی زیستی باشند. در نهایت، با بهره گیری از چارچوب ارائه شده در این پژوهش، می توان به بررسی روند حذف سایر ترکیبات گوگردی مقاوم با اندازه های مولکولی مختلف نظیر تیوفن، بنزوتیوفن و ۴-دی-متیل دی بنزوتیوفن از سوخت های فسیلی پرداخت.

۴. نتیجه گیری

گوگردزدایی زیستی یک روش موثر، اقتصادی و سازگار با محیط زیست برای حذف آلاینده های گوگردی مقاوم به تجزیه حرارتی توسط میکروارگانیسم ها از سوخت های فسیلی است. مدل سازی و شبیه سازی جهت ارزیابی جنبه های مهم فرآیند گوگردزدایی زیستی، از جمله میزان رشد زیست توده، مقدار تخریب آلودگی و ظرفیت محصولات تولیدی می تواند نقش موثری ایفا کند. تمامی بسته ها و سناریوهای شبیه سازی ارائه شده بر اساس مدل های پیشنهادی در این پژوهش، قادر به پیش بینی روند کلی عوامل کلیدی فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر غلظت های توده زیستی، سوبسترا و محصول تولیدی بودند. در این راستا، از میان تمامی سناریوهای موجود در بسته مدلسازی نمایی، سناریوی بر پایه مدل وب با $SSE_{total} = 0/087$ ، $RMSE_{total} = 0/16$ و $R^2_{mean} = 0/976$ دارای کمترین خطا و بیشترین انطباق به داده های آزمایشگاهی بود. در همین چهارچوب، از میان تمامی سناریوهای تعریف شده در بسته مدلسازی لجستیک، سناریوی بر پایه هالدان با $SSE_{total} = 0/225$ ، $RMSE_{total} = 0/281$ و $R^2_{mean} = 0/948$ از کمترین خطا و بیشترین انطباق به داده های آزمایشگاهی برخوردار بود. بر اساس نتایج بدست آمده مشخص گردید پیش بینی های بسته مدل نمایی از دقت و انطباق نسبی بالاتری نسبت به پیش بینی های بسته مدل لجستیک برخوردار است. در نهایت، از بین بیست حالت مدلسازی موجود، سناریوی نمایی بر مبنای مدل وب با توصیف برهم کنش هم زمان پدیده های اشباعیت و مهارکنندگی سوبسترا، توانایی مناسبی در پیش بینی فرآیند BDS دارد. از این سناریو می توان جهت طراحی، بهینه سازی و کنترل پایلوت های آزمایشگاهی و صنعتی تخریب زیستی DBT از سوخت های فسیلی بهره برد.

فهرست علائم

C_p	غلظت محصول (mM)
C_{pm}	حداکثر غلظت محصول (mM)
C_s	غلظت سوبسترا (mM)
C_{sm}	حداکثر غلظت سوبسترا (mM)
C_x	غلظت زیست توده (g/L)
C_{xm}	حداکثر غلظت زیست توده (g/L)
K	ثابت Yano (g/L)
K_d	ثابت مرگ باکتریایی (day^{-2})
K_i	ثابت بازدارندگی سوبسترا برای تشکیل توده زیستی (g/L)
K_p	ثابت ممانعت تشکیل محصول (g/L)
K_s	ثابت نیمه اشباعیت (g/L)
m	ضریب نگهداری سلول (h^{-1})
n	ثابت تجربی
$Y_{P/S}$	ضریب بازده محصول (g/g)
$Y_{X/S}$	ضریب بازده باکتریایی (g/g)
α	ضریب بازده تشکیل محصول ناشی از رشد باکتریایی (h^{-1})
β	ضریب سنتز محصول وابسته به باکتریها بدون رشد (h^{-1})
μ	ثابت سرعت رشد ویژه باکتریایی (h^{-1})
μ_{max}	حداکثر نرخ رشد ویژه (h^{-1})

منابع

1. Azeez, M. O., & Ganiyu, S. A. (2023). Review of biomass derived-activated carbon for production of clean fuels by adsorptive desulfurization: Insights into processes, modifications, properties, and performances. *Arabian Journal of Chemistry*, 16(10), 105182. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2023.105182>
2. معصومی, & محمد یاسر. (۲۰۲۳). بررسی رفتار جذبی نانو صفحات چارچوب فلز-آلی بر پایه کبالت در گوگردزدایی از مدل نفتی. *پژوهش نفت*, ۳۳(۴-۱۴۰۲), ۱۲۳-۱۳۶. DOI:10.22078/pr.2023.4983.3222
3. Humadi, J. I., Shihab, M. A., Ahmed, G. S., Ahmed, M. A., Abdullah, Z. A., & Sehgal, S. (2024). Process modeling and kinetic estimation for desulfurization of diesel fuel using nano-ZnO/Al₂O₃. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 30(2), 151-159. <https://doi.org/10.2298/ciceq230208020h>
4. نادری خمارتاجی, مصیب, دهقانی, & بنی شریف دهکردی. (۲۰۱۸). گوگردزدایی اکسایشی ترکیبات تیوفنی با کاتالیست پایه دار پلی‌اگزومتال دووسون. *پژوهش نفت*, ۲۶(۶-۹۵), ۵۷-۶۵.
5. Ahmad, A., Zamzami, M. A., Ahmad, V., Al-Thawadi, S., Akhtar, M. S., & Khan, M. J. (2023). Bacterial biological factories intended for the desulfurization of petroleum products in refineries. *Fermentation*, 9(3), 211. <https://doi.org/10.3390/fermentation9030211>
6. Sadare, O. O., & Daramola, M. O. (2023). Bio-catalytic degradation of dibenzothiophene (DBT) in petroleum distillate (diesel) by *Pseudomonas spp.* *Sci Rep* 13: 6020. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-31951-8>
7. Yaseen, M., Ullah, S., Ahmad, W., Subhan, S., & Subhan, F. (2021). Fabrication of Zn and Mn loaded activated carbon derived from corn cobs for the adsorptive desulfurization of model and real fuel oils. *Fuel*, 284, 119102. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119102>
8. اللهیاری, راحمی, مهرابی, & تدین. (۲۰۱۹). گوگردزدایی اکسایشی DBT با استفاده از نانو کاتالیست‌های سه فلزی Ni-Mo-W بر پایه زئولیت‌های طبیعی مختلف: موردنیت, فرریت و کلینوپتیلولیت. *پژوهش نفت*, ۲۹(۴-۹۸), ۸۹-۹۸.
9. جلالی محمدرضا, & ثباتی محمدمامین. (۲۰۱۸). بررسی اثر کشش سطحی بین دو فاز در فرآیند گوگردزدایی اکسایشی به کمک امواج مافوق صوت. DOI:10.22078/pr.2017.2732.2260
10. Seo, J. S. (2012). Multiple pathways in the degradation of dibenzothiophene by *Mycobacterium aromativorans* strain JS19b1T. *Journal of the Korean Society for Applied Biological Chemistry*, 55(5), 613-618. <https://doi.org/10.1007/s13765-012-2106-5>
11. Koyunoğlu, C., & Karaca, H. (2023). Microbial desulphurisation of coal: a review. *International Journal of Sustainable Energy*, 42(1), 1-24. <https://doi.org/10.1080/14786451.2023.2167998>
12. Akhtar, N., Ghauri, M. A., & Akhtar, K. (2016). Dibenzothiophene desulfurization capability and evolutionary divergence of newly isolated bacteria. *Archives of microbiology*, 198(6), 509-519. <https://doi.org/10.1007/s00203-016-1209-5>
13. Awadh, M., Mahmoud, H., Abed, R. M., El Nayal, A. M., Abotalib, N., & Ismail, W. (2020). Diesel-born organosulfur compounds stimulate community re-structuring in a diesel-biodesulfurizing consortium. *Biotechnology Reports*, 28, e00572. <https://doi.org/10.1016/j.btre.2020.e00572>
14. Anwer, A., Shahzadi, A., Nawaz, H., Majeed, M. I., Alshammari, A., Albekairi, N. A., ... & Akhtar, N. (2024). Differentiation of different dibenzothiophene (DBT) desulfurizing bacteria via surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS). *RSC advances*, 14(28), 20290-20299. <https://doi.org/10.1039/d4ra01735h>
15. اعتمادی, اخوان سپهی, محبعلی, قاسمعلی, & یزدیان. (۲۰۱۹). جداسازی باکتری بومی گرمادوست *Bacillus thermoamylovorans* گوگردزدا و بهینه‌سازی محیط کشت. *پژوهش نفت*, ۲۹(۵-۹۸), ۱۱۹-۱۳۱. DOI: 10.22078/pr.2019.3557.2659

16. Gunam, I. B. W., Sitepu, A., Antara, N. S., Triani, I. G. A. L., Arnata, I. W., & Setiyo, Y. (2021). Bacterial desulfurization of dibenzothiophene by *Pseudomonas* sp. strain KWN5 immobilized in alginate beads. *Jurnal Teknologi (Sciences & Engineering)*, 83(2), 107-115. <https://doi.org/10.11113/jurnalteknologi.v83.15080>
17. Rout, P. G., Singh, A., & Behera, S. K. (2024). Insights into the Kinetics of the Microbial Degradation of Dibenzothiophene (DBT) by *Acidithiobacillus ferrooxidans*. *Geomicrobiology Journal*, 41(4), 451-458. <https://doi.org/10.1080/01490451.2023.2245378>
18. Mohebalı, G., Ball, A. S., Rasekh, B., & Kaytash, A. (2007). Biodesulfurization potential of a newly isolated bacterium, *Gordonia alkanivorans* RIPI90A. *Enzyme and Microbial Technology*, 40(4), 578-584. <https://doi.org/10.1016/j.enzmictec.2006.05.012>
19. Furuya, T., Kirimura, K., Kino, K., & Usami, S. (2001). Thermophilic biodesulfurization of dibenzothiophene and its derivatives by *Mycobacterium phlei* WU-F1. *FEMS Microbiology Letters*, 204(1), 129-133. <https://doi.org/10.1111/j.1574-6968.2001.tb10875.x>
20. Martínez, I., Mohamed, M. E. S., Santos, V. E., García, J. L., García-Ochoa, F., & Díaz, E. (2017). Metabolic and process engineering for biodesulfurization in Gram-negative bacteria. *Journal of biotechnology*, 262, 47-55. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2017.09.004>
21. Bhanjadeo, M. M., Rath, K., Gupta, D., Pradhan, N., Biswal, S. K., Mishra, B. K., & Subudhi, U. (2018). Differential desulfurization of dibenzothiophene by newly identified MTCC strains: Influence of Operon Array. *PLoS One*, 13(3), e0192536. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0192536>
22. Kiragosyan, K., Klok, J. B., Keesman, K. J., Roman, P., & Janssen, A. J. (2019). Development and validation of a physiologically based kinetic model for starting up and operation of the biological gas desulfurization process under haloalkaline conditions. *Water Research X*, 4, 100035. <https://doi.org/10.1016/j.wroa.2019.100035>
23. Hirschler, A., Carapito, C., Maurer, L., Zumsteg, J., Villette, C., Heintz, D., ... & Ismail, W. (2021). Biodesulfurization induces reprogramming of sulfur metabolism in *Rhodococcus qingshengii* IGTS8: proteomics and untargeted metabolomics. *Microbiology Spectrum*, 9(2), e00692-21. <https://doi.org/10.1128/Spectrum.00692-21>
24. Kumar, A., Singh, A. L., Kumar, R., Rajak, P. K., & Singh, P. K. (2022). Desulphurization of dibenzothiophene by different bacterial strains: an eco-friendly approach to obtain clean fuel from coal. *Geomicrobiology Journal*, 39(6), 477-486. <https://doi.org/10.1080/01490451.2022.2035020>
25. Kashif, M., Sang, Y., Mo, S., ur Rehman, S., Khan, S., Khan, M. R., ... & Jiang, C. (2023). Deciphering the biodesulfurization pathway employing marine mangrove *Bacillus aryabhatai* strain NM1-A2 according to whole genome sequencing and transcriptome analyses. *Genomics*, 115(3), 110635. <https://doi.org/10.1016/j.ygeno.2023.110635>
26. Silva, T. P., Paixão, S. M., Tavares, J., Paradela, F., Crujeira, T., Roseiro, J. C., & Alves, L. (2024). Streamlining the biodesulfurization process: Development of an integrated continuous system prototype using *Gordonia alkanivorans* strain 1 B. *RSC advances*, 14(1), 725-742. <https://doi.org/10.1039/d3ra07405f>
27. Sadare, O. O., & Daramola, M. O. (2024). Kinetics of biodesulfurization of South African diesel using *Pseudomonas aeruginosa*. *Materials Today: Proceedings*, 105, 213-219. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.08.319>
28. Thakur, K., Patil, S., Praveen, K. R., & Bhardwaj, U. (2025). Exploring the Potential of Microbial Consortia for Biodesulfurization in Petroleum and Fuel Applications. *Natural and Engineering Sciences*, 10(1), 479-489. <https://doi.org/10.28978/nesciences.1660356>
29. Akimbek, A. O., Jamalova, G. A., Yernazarova, A. K., Kaiyrmanova, G. K., Yelikbayev, B. K., Pagano, M. C., ... & Rafikova, K. S. (2025). Biodesulfurization of high-sulfur oil from the Karazhanbas field of Kazakhstan with deep eutectic solvents. *Heliyon*, 11(2). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2025.e41877>

30. Naeij, H. B., Etemadifar, Z., Kilbane, J., Karimi-Jafari, M. H., & Mofidifar, S. (2025). Unraveling the metabolic landscape of *Exophiala spinifera* strain FM: Model reconstruction, insights into biodesulfurization and beyond. *PLoS one*, 20(1), e0317796. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0317796>
31. Khoshdel, A., & Mahmoodzadeh Vaziri, B. (2016). Novel mathematical models for prediction of microbial growth kinetics and contaminant degradation in bioremediation process. *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management*, 24(3), 157-164. <https://doi.org/10.3846/16486897.2016.1142446>
32. Akbari, L., & Vaziri, B. M. (2017). Comprehensive modeling of photo-fermentation process for prediction of hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(21), 14449-14457. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.04.119>
33. Chen, H., Cai, Y. B., Zhang, W. J., & Li, W. (2009). Methoxylation pathway in biodesulfurization of model organosulfur compounds with *Mycobacterium* sp. *Bioresource technology*, 100(6), 2085-2087. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.10.010>
34. Fanaei, M. A., & Vaziri, B. M. (2009). Modeling of temperature gradients in packed-bed solid-state bioreactors. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48(1), 446-451. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2008.06.001>

Kinetic Modeling of the Biodesulfurization Process from Fossil Fuels by a Bacterial Strain

Abstract

Biodesulfurization is an advanced and efficient approach for eliminating resistant sulfur compounds from fossil fuels using specific microorganisms. This study focuses on the modeling and simulation of key aspects of the biodesulfurization process, including bacterial growth and death trends, substrate consumption rate, and product formation rate. To this end, exponential and logistic kinetic models were combined with ten specific bacterial growth rate models (Monod, Haldane, Aiba, Hinshelwood, Edward, Yano, Blackman, Andrews, Moser, and Webb) to characterize the biomass growth and death. The Luedeking-Piret model was utilized to describe substrate consumption and product formation rates. Accordingly, twenty modeling scenarios were developed, including combinations of growth/death kinetics, specific growth rates, substrate consumption, and product formation. These scenarios were evaluated and validated against experimental data from the literature on dibenzothiophene (DBT) degradation (as substrate) by a *Mycobacterium* strain, yielding 2-hydroxybiphenyl (2-HBP) as the final product. Statistical analysis shows that the exponential package predictions based on the Webb model, with $SSE_{total} = 0.087$, $RMSE_{total} = 0.16$, and $R^2_{mean} = 0.976$, provide the best fit and the lowest error when compared to the experimental data. This scenario can be applied to design and operate biodegradation units for resistant sulfur compounds from fossil fuels.

Keywords: Biodesulfurization, Modeling and Simulation, Specific Growth Rate, Dibenzothiophene, *Mycobacterium* Strain.

ACCEPT