



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

Mehrnoosh Malekjafarian¹, Behrooz Mahmoodzadeh Vaziri^{2,3}, Rahele Zhiani⁴, Alireza Motavalizadeh Kakhky⁴, Malihe Sadat Hosseiny⁴

1. Department of Chemical Engineering, Ne.C., Islamic Azad University, Neyshabur, Iran

2. Department of Chemical Engineering, Ma.C., Islamic Azad University, Mashhad, Iran

3. Department of Chemical Engineering, Qu.C., Islamic Azad University, Quchan, Iran

4. Department Of Chemistry, Ne.C., Islamic Azad University, Neyshabur, Iran

behrooz.vaziri@iau.ac.ir

DOI: 10.22078/pr.2026.5742.3554

Received: August 28, 2025

Modify Date: December 21, 2025

Accepted: February 21, 2026

Introduction

The combustion of fossil fuels containing organosulfur compounds leads to the emission of toxic gases such as SO_x, which contribute to environmental issues like acid rain, photochemical smog, equipment corrosion, and reduced fuel quality [1]. The most straightforward approach to mitigate these problems is to reduce the sulfur content in fuels. Among the most resistant sulfur compounds are thiophenic structures such as dibenzothiophene (DBT) [2]. Among the various desulfurization methods, biodesulfurization (BDS) is of particular interest due to its environmental compatibility. In this process, microorganisms utilize sulfur from organosulfur compounds for growth through a specific 4S pathway, converting DBT into 2-hydroxybiphenyl (2-HBP) and sulfite [1, 2]. Numerous bacterial strains have been studied for their BDS potential, and recent research has reported diverse findings [3]. This study focuses on modeling and simulation of the biodesulfurization process to quantitatively analyze key parameters such as biomass concentration, substrate consumption, and product formation.

Materials and Models

Modeling and Simulation of the Biodesulfurization Process

Experimental investigation of the biodesulfurization (BDS) process is often associated with high cost,

extended duration, and significant uncertainty. Accordingly, the development of accurate, dynamic, and physically meaningful models serves as an effective strategy for performance analysis, process design, optimization, and control [4]. In this study, a comprehensive modeling framework was established to describe the kinetics of biomass growth, sulfur substrate consumption, and product formation.

Bacterial growth was modeled using both exponential and logistic formulations to capture the dynamic behavior across the growth and death phases. To estimate the specific growth rate (μ), ten well-known substrate-dependent kinetic models—such as Monod, Haldane, Aiba, Andrews, and others—were employed to represent the relationship between μ and substrate concentration accurately. Substrate consumption was modeled based on the Luedeking-Piret equation, accounting for biomass synthesis, maintenance, and product formation. Product formation kinetics were also formulated using a modified Luedeking-Piret model that incorporates a product inhibition term to account for the self-limiting effect of 2-HBP accumulation during the process.

Two separate simulation packages were developed, each consisting of ten scenarios corresponding to the different μ models. Each scenario comprised a set of ordinary differential equations, which were solved using the fourth-order Runge-Kutta method (ode45) in MATLAB R2024b. Model performance was validated

using experimental data reported by Chen et al. [5], in which *Mycobacterium* was cultivated on DBT, and 2-HBP production was monitored over 85 hours. Model parameters were estimated through nonlinear fitting to experimental data, and the predictive accuracy of each scenario was quantitatively assessed.

Results and Discussion

All exponential model scenarios successfully captured the overall process trends; however, the Edward and Blackman models showed lower predictive performance than the other models. This underperformance may be attributed to the linear structure of the Blackman model and the purely exponential formulation of the specific growth rate in the Edward model. Moreover, the other nonlinear models demonstrated satisfactory predictive accuracy. For a more precise comparison, the SSE was calculated for the biomass, product, and substrate concentrations in each scenario. Based on the SSE values, the models were ranked in terms of accuracy as follows: Webb > Aiba > Andrews > Monod > Yano > Haldane > Moser > Hinshelwood > Edward > Blackman.

Overall, the exponential simulation package outperformed the logistic simulation package, with the Webb model identified as the optimal choice for modeling the process. This model effectively captures variations in substrate concentration and the inhibitory effects of the substrate on bacterial growth and death. Although the simulations were based on a specific bacterium and substrate, the framework can be extended to other biodegradation processes involving different microorganisms and substrates.

Conclusions

Biodesulfurization is an efficient, cost-effective, and environmentally friendly method for removing thermally resistant sulfur contaminants. Modeling serves as an essential tool for evaluating key process parameters such as biomass growth, pollutant degradation, and product formation. The results demonstrated that all proposed models effectively predicted the overall process trends; however, exponential models exhibited higher accuracy

compared to logistic models. Among the exponential models, the specific growth rate model by Webb showed the best performance with the lowest error. These findings provide valuable insights for the design and optimization of both laboratory-scale and industrial biodesulfurization processes.

Nomenclatures

DBT: Dibenzothiophene

BDS: Biodesulfurization

References

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. doi.org/10.1016/j.arabjc.2023.105182
2. 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
3. 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. doi.org/10.1080/01490451.2023.2245378
4. 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. doi.org/10.3846/16486897.2016.1142446
5. 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. doi.org/10.1016/j.biortech.2008.10.010

مدل‌سازی سینتیکی فرآیند گوگردزدایی زیستی از سوخت‌های فسیلی با سویه باکتریایی

مهرنوش ملک جعفریان^۱، بهروز محمودزاده وزیری^{۲*}، راحله ژبانی^۳، علیرضا متولی‌زاده کاخکی^۴ و 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

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۶/۰۶ تاریخ تغییر: ۱۴۰۴/۰۹/۳۰ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۱۲/۰۲

چکیده

گوگردزدایی زیستی یکی از روش‌های نوین و کارآمد جهت حذف ترکیبات گوگردی مقاوم موجود در سوخت‌های فسیلی با استفاده از میکروارگانیسم‌های خاص می‌باشد. در پژوهش حاضر به مدل‌سازی و شبیه‌سازی قسمت‌های کلیدی فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر روندهای رشد و مرگ باکتریایی، نرخ مصرف سوبسترا و نرخ تولید محصول پرداخته شده است. در این راستا از مدل‌های سینتیکی نمایی و لجستیک به همراه ده مدل سرعت رشد ویژه باکتریایی (مدل‌های مونود، هالدان، آيبا، هینشلوود، ادوارد، یانو، بلک من، اندریوس، موزر و وب)، برای توصیف رشد و مرگ توده زیستی استفاده گردید. همچنین برای توصیف نرخ مصرف سوبسترا و نرخ تولید محصول ایجاد شده در فرآیند، از مدل لودکینگ-پیرت استفاده شد. بر این مبنا، بیست سناریو مختلف مدل‌سازی که شامل ترکیبی از مدل‌های سینتیک رشد و مرگ باکتریایی، سرعت رشد ویژه، نرخ مصرف سوبسترا و نرخ تولید محصول می‌باشد پیاده‌سازی گردید. این سناریوها با داده‌های آزمایشگاهی موجود در مقالات برای تجزیه دی‌بنزوتیوفن (DBT) به عنوان سوبسترا توسط سویه مایکوباکتریوم، که منجر به تولید ۲-هیدروکسی‌بی‌فیل (2-HBP) به عنوان محصول نهایی می‌شود، ارزیابی و اعتبارسنجی شدند تحلیل آماری نشان می‌دهد که پیش‌بینی‌های بسته نمایی بر مبنای مدل وب با $SSE_{total} = 0/087$ ، $RMSE_{total} = 0/16$ و $R^2_{mean} = 0/976$ از بهترین انطباق با کمترین میزان خطا نسبت به داده‌های آزمایشگاهی برخوردار است. از سناریوی مذکور می‌توان برای طراحی و راه‌اندازی واحدهای تجزیه زیستی ترکیبات گوگردی مقاوم از سوخت‌های فسیلی استفاده نمود.

کلمات کلیدی: گوگردزدایی زیستی، مدل‌سازی و شبیه‌سازی، سرعت رشد ویژه، دی‌بنزوتیوفن، سویه مایکوباکتریوم.

*مسئول مکاتبات

آدرس الکترونیکی behrooz.vaziri@iau.ac.ir

شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2026.5742.3554)

مقدمه

با احتراق سوخت‌های فسیلی حاوی ترکیبات آلی گوگرددار گازهای سمی SO_x منتشر می‌گردند که تهدید جدی زیست‌محیطی به حساب می‌آیند. این گازهای سمی علاوه بر ایجاد مه‌دود فتوشیمیایی، مولد بارش باران‌های اسیدی نیز می‌باشند [۱ و ۲]. از سوی دیگر، ترکیبات آلی گوگرددار موجود در سوخت‌های فسیلی باعث خوردگی تجهیزات و همچنین تأثیرات منفی بر فرآیند پالایش و کیفیت نهایی سوخت می‌شوند. از این رو ساده‌ترین راه برای غلبه بر معضلات ذکر شده، نظارت بر کیفیت سوخت از طریق کاهش دادن میزان ترکیبات گوگردی موجود در آن است [۳ و ۴]. از مهم‌ترین ترکیبات آلی گوگرددار موجود در سوخت‌های فسیلی نظیر بنزین و گازوئیل می‌توان به دی‌سولفیدها، مرکاپتان‌ها، تیول‌ها، سولفون‌ها، تیوفن‌ها و تیواترها اشاره داشت. از این میان، تیوفن‌ها که شامل تیوفن، بنزوتیوفن (BT)، دی‌بنزوتیوفن (DBT) و مشتقات آن‌ها هستند از مقاوم‌ترین ترکیبات گوگردی در برابر تجزیه طی فرآیندهای حرارتی تلقی می‌شوند [۵]. امروزه از روش‌های گوگردزدایی مختلفی نظیر هیدروژنی (HDS)، اکسایشی (ODS)، جذب سطحی (ADS)، استخراجی (EDS)، زیستی (BDS) برای حذف ترکیبات مقاوم گوگردی از سوخت‌های فسیلی بهره‌گرفته شده است [۶-۹]. از میان تمامی روش‌های مذکور تنها روش گوگردزدایی زیستی، کاملاً سازگار با محیط زیست می‌باشد. در این روش میکروارگانیسم‌ها نقش اصلی را در تخریب آلاینده‌های آلی گوگرددار ایفا می‌کنند. آنها برای رشد و فعالیتهای بیولوژیکی خود به گوگرد (برای تولید انرژی و یا استفاده در ساختارهای درون سلولی) نیاز دارند [۱۰]. در این فرآیند، حذف اختصاصی گوگرد از ترکیبات تیوفنی مانند DBT از طریق یک مسیر بیوکاتالستی به نام مسیر «4S» پیش می‌رود که طی آن DBT در نهایت، به ۲-هیدروکسی‌بایفیل (2-HBP) و سولفیت تبدیل می‌شود [۱ و ۵ و ۱۰-۱۴].

تا به امروز از گونه‌های باکتریایی مختلف نظیر باسیلوس (Bacillus) [۱۰ و ۱۵]، پانتوئا (Pantoea)، آگروباکتریوم (Agrobacterium) [۱۰]، بورخولدیریا (Burkholderia)، آرتروباکتر (Arthrobacter) [۱۲]، اسفینگوموناس (Sphingomonas)، استنوتروفوموناس (Stenotrophomonas) [۱۰ و ۱۶]، میکروباکتریوم (Mycobacterium)، آمیکولاتوپسیس (Amycolatopsis)، آسینتوباکتر (Acinetobacter)، کانینگهاملا (Cunninghamella) [۱۷]، گوردونیا (Gordonia) [۱۳ و ۱۵ و ۱۷ و ۱۸]، پseudوموناس (Pseudomonas) [۱۰، ۱۶ و ۱۷]، گوردونا (Gordonia)، کوریباکتریوم (Corynebacterium) [۱۹]، مایکوباکتریوم (Mycobacterium)، رودوکوکوس (Rhodococcus) [۱۰، ۱۳، ۱۵-۱۷ و ۱۹]، به دلیل توانایی در حذف ترکیبات آلی گوگرددار 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 می‌باشد. در ایران نیز سویه‌هایی از جنس Gordonia توسط گروه بیوتکنولوژی پژوهشگاه صنعت نفت جداسازی و شناسایی شده‌اند 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 غنی‌سازی و غربالگری جداسازی گردیده است، توانایی مصرف DBT را طی رشد هوازی خود در دمای $55^{\circ}C$ نشان می‌دهد [۱۵]. با تثبیت سلول‌های باکتری Pseudomonas sp. سویه KWN5، پایداری سلولی افزایش یافته و عملکرد فرآیند گوگردزدایی بهبود می‌یابد. این روش همچنین امکان استفاده چندباره از سلول‌ها را فراهم می‌آورد و به افزایش کارایی باکتری در فرآیند BDS کمک می‌نماید [۱۶]. باکتری Acidithiobacillus ferrooxidans در محیط‌های اسیدی نظیر معادن و محلول‌های فلزی یافت می‌شود و توانایی بالایی در اکسیداسیون فلزات و ترکیبات گوگرددار دارد. این باکتری کاربرد گسترده‌ای در فرآیند BDS و بازیافت فلزات داشته و

از ویژگی‌های مهم آن می‌توان به انعطاف‌پذیری بالا در شرایط مختلف غلظت DBT اشاره کرد [۱۷]. سویه *Gordonia alkanivorans* RIPI90A به‌عنوان کاندیدای مناسبی برای استفاده در فرآیندهای صنعتی پاکسازی نفت و کاهش گوگرد سوخت‌ها مطرح شده‌است. این سویه دارای ویژگی‌های سطحی خاصی است که منجر به بهبود تماس با سوخت‌های هیدروکربنی می‌شود و حتی با بهره‌گیری از روش‌های مهندسی ژنتیک می‌توان عملکرد آن را فراتر از سویه طبیعی افزایش داد [۱۸]. باکتری *Mycobacterium phlei* WU یک سویه میان‌گرمادوست 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 فرآیند گوگردزدایی زیستی انجام شده‌است که در ادامه به برخی از مهم‌ترین آن‌ها اشاره گردیده‌است.

مارتینز و همکاران [۲۰] از باکتری‌های گرم منفی (باکتری‌های نو ترکیب *Pseudomonas* -nas) که دارای خواص نظیر تطبیق‌پذیری گسترده متابولیک و دستکاری آسان ژنتیکی هستند برای غلبه بر محدودیت‌های فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر کندی و سرعت پایین فرآیند استفاده نمودند. آن‌ها نشان دادند تولید محصولات با ارزش افزوده بالا با کمک این سویه‌ها یک فرآیند اقتصادی بادوام است. بهنجادیو و همکاران [۲۱] توانایی گونه‌های *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. 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 داده‌شد. آزمایش‌های آن‌ها نشان دادند که بیشترین تولید گوگرد در مقادیر پایین این نسبت رخ می‌دهد. 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*)، *Pseudomonas*، ردوکوکوس (*Rhodococcus*) و اسفینگوموناس (*Sphingomonas*) نقش پررنگ‌تری در گوگردزدایی داشتند. درحالی‌که در محیط‌هایی که ۴ و ۶-دی‌متیل‌دی‌بنزوتیوفن (4,6-DMDBT) به‌عنوان تنها منبع گوگردی استفاده‌شد، گونه‌های کلبسیلا و سودوموناس بیشترین سهم در گوگردزدایی را داشتند. علاوه‌بر 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. هیرشلا و همکاران [۲۳] با بهره‌گیری از روش‌های مبتنی بر سطح عملکرد پروتئین‌ها و خروجی نهایی متابولیسم، نخستین مدل تجربی سوخت‌وساز 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. کومار و همکاران [۲۴] از سه سویه *Pseudoxanthomonas*، *Ralstonia* و ردوکوکوس (*Rhodococcus*) برای گوگردزدایی از DBT استفاده کردند. در این میان فقط سویه ردوکوکوس توانایی بالقوه‌ای در تبدیل DBT به 2-HBP داشت و توانست پیوند C-S را بدون ایجاد اختلال در ساختار هتروسیکلیک حلقه DBT بشکند.

زمان واکنش، دما و غلظت بیوکاتالیست وابسته است. 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 B. thuringiensis SFN-3، R. erythropolis AC 1039 و P. aeruginosa B-5807 عملکرد برجسته‌ای از خود نشان داده‌اند و DES‌ها به‌طور قابل توجهی رشد و کارایی میکروبی را ارتقا بخشیدند. 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 ارگانیسم 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 کرده‌است. براساس آن چه که بیان شد، اکثر پژوهش‌های انجام شده بر روی فرآیند گوگردزدایی زیستی متمرکز بر کارهای آزمایشگاهی است. طبیعتاً، انجام این گونه پژوهش‌ها به منظور ارزیابی پارامترهای موثر بر فرآیند، نیازمند صرف هزینه و وقت زیادی می‌باشد. در این راستا، استفاده از مدل‌های کارآمد و شبیه‌سازی فرآیند می‌تواند استراتژی مناسب جهت کاهش و رفع معضلات تحقیقات آزمایشگاهی باشد. بنابراین تمرکز اصلی مقاله حاضر به کارگیری و ارزیابی مدل‌های تحلیلی و کاربردی برای توصیف جنبه‌های کلیدی فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر غلظت توده زیستی، ثابت سرعت رشد ویژه باکتریایی، نرخ مصرف سوبسترای گوگردی و نرخ میزان محصول تولیدی و شبیه‌سازی فرآیند است. بر مبنای دانش ما تاکنون پژوهشی در زمینه بررسی پتانسیل مدل‌های زیستی دینامیک در پیش‌بینی متغیرهای حیاتی فرآیند گوگردزدایی زیستی انجام نگرفته‌است.

کاشف و همکاران [۲۵] پژوهشی جامع با استفاده از سویه دریایی Bacillus aryabhattai 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. سیلوا و همکاران [۲۶] به بررسی عملکرد و توان بالقوه گوردونیا (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، به کاربردند و کارایی سیستم زیستی مذکور و امکان تسریع انتقال آن به مقیاس صنعتی را به‌طور مؤثری نشان دادند.

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. ساداره و همکاران [۲۷] عم 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 سینتیکی 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. تاکور و همکاران [۲۸] در مطالعه‌ای به بررسی پتانسیل کنسرسیوم‌های میکروبی برای حذف زیستی DBT از ترکیبات نفتی پرداختند. با استفاده از روش‌های 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 غیرمستقیم 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

مدل‌سازی فرآیند

نمایی و لجستیک فرض شده‌است که محیط کشت یکنواخت و ثابت بوده و تغییری نمی‌کند. همچنین از تفاوت‌های سنی و فیزیولوژیکی میان سلول‌های باکتریایی چشم‌پوشی شده و کل جمعیت زیستی به‌صورت یک توده یکنواخت در نظر گرفته شده است. علاوه‌براین، رقابت بین سلول‌ها برای دستیابی به سوپسترا و مواد مغذی یکسان لحاظ گردیده‌است. از آنجایی‌که زیست‌توده در ابتدا با فراوانی سوپسترای گوگردی مواجه‌بوده و با مصرف آن رشد پیدا می‌کند و در ادامه به دلیل عدم غلظت کافی سوپسترا و تغییر شرایط محیط وارد فاز مرگ می‌شود، در نتیجه در مدل‌های مذکور، ترم‌های مرتبط با رشد (ترم اول سمت راست) و مرگ (ترم دوم سمت راست) باکتریایی در نظر گرفته شده‌است. در روابط سینتیکی ارائه شده در **جدول ۱**، C_x نشان‌دهنده غلظت زیست‌توده باکتریایی، t معرف زمان، μ بیانگر سرعت رشد ویژه باکتریایی، K_d ثابت مرگ یا کاهش زیست‌توده در طول فرآیند BDS و C_{xm} حداکثر غلظت قابل دستیابی زیست‌توده در شرایط محیطی مورد بررسی می‌باشد.

Table 1. Models employed for predicting bacterial growth and death trends

جدول ۱ مدل‌های به‌کار برده شده برای پیش‌بینی روند رشد و مرگ باکتریایی

Model Description	Model Name
$\frac{dC_x}{dt} = \mu C_x - K_d C_x$	Exponential
$\frac{dC_x}{dt} = \mu C_x \left(1 - \frac{C_x}{C_{xm}}\right) - K_d C_x$	Logistic

مدل‌سازی سرعت رشد ویژه باکتریایی (μ)

سرعت رشد ویژه یک ثابت در فاز نمایی رشد باکتریایی است که اشاره‌دارد سرعت رشد سلول متناسب با جمعیت توده زیستی زنده که همه آن‌ها پتانسیل یکسانی برای رشد دارند، است.

ارزیابی آزمایشگاهی جنبه‌های مختلف فرآیند BDS بسیار وقت‌گیر، هزینه‌بر و توأم با ریسک‌پذیری زیاد است، بنابراین به‌کارگیری مدل‌های دقیق، کاربردی و مطابق با فیزیک فرآیند می‌تواند راه‌حلی مناسب برای ارزیابی صحیح فرآیند و غلبه بر چالش‌های موجود در بررسی‌های آزمایشگاهی باشد. از سوی دیگر مدل‌سازی ابزار مؤثر در طراحی، افزایش مقیاس و کنترل فرآیند است و می‌تواند باعث پیاده‌سازی استراتژی‌های مناسب و حذف رویکردهای نامطلوب شود [۳۱]. مدل‌سازی BDS، برای تخمین دقیق مقدار حذف سوپسترای گوگردی و میزان تولید محصول بی‌ضرر، امری بسیار ضروری است و می‌تواند اطلاعات مفیدی از شدت اثر متغیرهای مختلف بر خروجی فرآیند فراهم‌آورد. طی فرآیند BDS، حذف سوپسترا به‌طور همزمان با رشد باکتری‌های گوگردزدا و تولید محصول در یک فرآیند ناپیوسته صورت می‌پذیرد. بنابراین، پیش‌بینی صحیح سینتیک‌های دینامیک فرآیند نظیر سینتیک‌های رشد توده‌زیستی، نرخ مصرف سوپسترا و تولید محصول از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. این سینتیک‌ها بازگوکننده عملکرد فرآیند و راندمان حذف ترکیبات گوگردی است. در این راستا برپایی یک چارچوب دقیق مدل‌سازی نقش تعیین‌کننده‌ای در اجرای عملیاتی فرآیند خواهد داشت.

مدل‌سازی سینتیک رشد باکتریایی

در این پژوهش به‌منظور پیش‌بینی روند رشد و مرگ باکتریایی از دو مدل سینتیکی استفاده گردید که در **جدول ۱** آورده شده‌است. مدل اول یک الگوی نمایی است و روند رشد باکتریایی را به صورت یک تابع نمایی توصیف می‌کند. رابطه دوم به مدل لجستیک شهرت دارد و اغلب زمانی‌که ازدیاد جمعیت میکروبی، مانع رشد خود می‌شود، مورد استفاده قرار می‌گیرد. در مدل‌های رشد

مدل سازی نرخ مصرف سوبسترا

مصرف سوبسترا در فرآیندهای زیستی به سه منظور سنتز توده زیستی، تولید محصول و حفظ* میکروارگانیسم‌ها صورت می‌پذیرد [۳۲] در مقاله حاضر از رابطه لودکینگ-پیرت که شامل سه ترم ذکر شده در بالاست، برای پیش‌بینی روند مصرف سوبسترا استفاده گردید. مدل لودکینگ-پیرت یک مدل تجربی است که به سادگی مشاهدات آزمایشگاهی را بازگو می‌کند.

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

در رابطه ۱، اولین ترم سمت راست مربوط به مصرف سوبسترا برای رشد توده زیستی است، دومین ترم سمت راست مربوط به حفظ باکتری‌هاست و ترم سوم مربوط به مصرف سوبسترا برای تشکیل محصول می‌باشد. در رابطه (۱)، $Y_{x/s}$ بازده تبدیل سوبسترا به زیست‌توده (گرم زیست‌توده تولید شده به ازای هر گرم سوبسترا مصرف‌شده)، m ضریب نگهداری سلول (میزان مصرف سوبسترا توسط سلول‌ها برای حفظ فعالیت‌های متابولیکی و بقای زیست‌توده و مستقل از رشد) و $Y_{p/s}$ بازده تبدیل سوبسترا به محصول (گرم محصول تولید شده به ازای هر گرم سوبسترای مصرف‌شده) است.

مدل سازی نرخ تولید محصول

مقدار محصول تولیدشده در گوگردزدایی زیستی شاخص مهمی است که نشان‌دهنده عملکرد فرآیند در حذف آلاینده است. بنابراین پیش‌بینی دقیق مقدار آن می‌تواند نقش تعیین‌کننده‌ای در بهینه‌سازی و کنترل فرآیند ایفا کند. در این پژوهش از مدل لودکینگ-پیرت برای پیش‌بینی 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 میکروارگانیسم‌های زنده بدون رشد یا تشکیل محصول را "حفظ" گویند.

همچنین این پارامتر مرتبط با تناوب تولید باکتری‌های جدید توسط آن‌هایی است که هم‌اکنون در محیط حضور دارند [۳۲]. زمانی که رشد و نمو باکتریایی در یک محیط کشت متاثر 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 گوگردزدایی 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.

در تمامی مدل‌های ارائه‌شده در **جدول ۲**، مقدار μ تنها به صورت تابعی از غلظت سوبسترا (DBT) و اثر مهارکنندگی آن بر فرآیند رشد و مرگ باکتریایی در نظر گرفته شده است. در این مدل‌ها مقدار μ مستقل از پارامترهایی نظیر دما، pH، غلظت اکسیژن و تنش‌های محیطی (مانند اثر اختلاط) فرض گردیده است. در کارهای آتی اثر پارامترهای مذکور روی مقدار μ مورد بررسی قرار خواهند گرفت. در مدل‌های ارائه‌شده در **جدول ۲**، μ_{max} حداکثر سرعت رشد ویژه باکتریایی 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 مهاری بر رشد باکتری یا تولید محصول دارد)، K_p ثابت مهارکنندگی محصول (غلظتی از محصول که اثر مهاری 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 می‌رود) و n ثابت تجربی مدل موزر (یک متغیر قابل تنظیم و انعطاف‌پذیر که امکان برازش دقیق مدل با داده‌های تجربی را فراهم می‌سازد) است.

جدول ۲ مدل‌های در نظر گرفته شده برای تقریب مقدار μ Table 2 Models considered for estimating the value of μ

Model Name	Model Description
Monod	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s}{K_s + C_s}$
Haldane	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s}{C_s + K_s + \frac{C_s^2}{K_i}}$
Aiba	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s \exp\left[\frac{-C_s}{K_i}\right]}{K_s + C_s}$
Hinshelwood	$\mu = \left(\frac{\mu_{\max} C_s}{C_s + K_s}\right) (1 - K_p C_p)$
Edward	$\mu = \mu_{\max} C_s \left[\exp\left(-\frac{C_s}{K_i}\right) - \exp\left(-\frac{C_s}{K_s}\right) \right]$
Yano	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s}{K_s + C_s + \left(\frac{C_s^2}{K_i}\right) \left[1 + \left(\frac{C_s}{K}\right) \right]}$
Blackman	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s}{K_s}$
Moser	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s^n}{K_s + C_s^n}$
Andrews	$\mu = \frac{\mu_{\max} C_s}{(K_s + C_s) \left(1 + \left(\frac{C_s}{K_i}\right) \right)}$
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 رابطه ۲، α ضریب بازده تشکیل محصول وابسته به رشد سلول (بیانگر سهم تولید محصولی است که هم‌زمان با رشد باکتری در فرآیند BDS تشکیل می‌شود) و β ضریب سنتز محصول مستقل از رشد سلول (بیانگر نرخ تولید محصول ناشی از فعالیت‌های

در رابطه 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 لحظه‌ای (باکتری‌ها بدون در نظر گرفتن رشد آن‌ها) است.

BDS ترسیم شده است. به منظور اعتبارسنجی و ارزیابی کارایی مدل های مذکور، از داده های آزمایشگاهی چن و همکاران [۳۳] استفاده گردید. آن ها گونه مایکوباکتریوم را بر روی سوبسترای DBT رشد دادند و تولید محصول 2-HBP را اندازه گیری کردند. در آزمایشات آن ها فرآیند گوگردزایی ۸۵ h به طول انجامید و DBT با غلظت اولیه ۰/۵ g/L و مایکوباکتریوم با غلظت اولیه ۰/۴ mM به کار 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^۱ و به صورت تکراری در محیط نرم افزار متلب (نسخه R2024b) انجام پذیرفت. مقادیر پارامترهای مذکور در **جدول ۳** آورده شده است.

نتایج و بحث

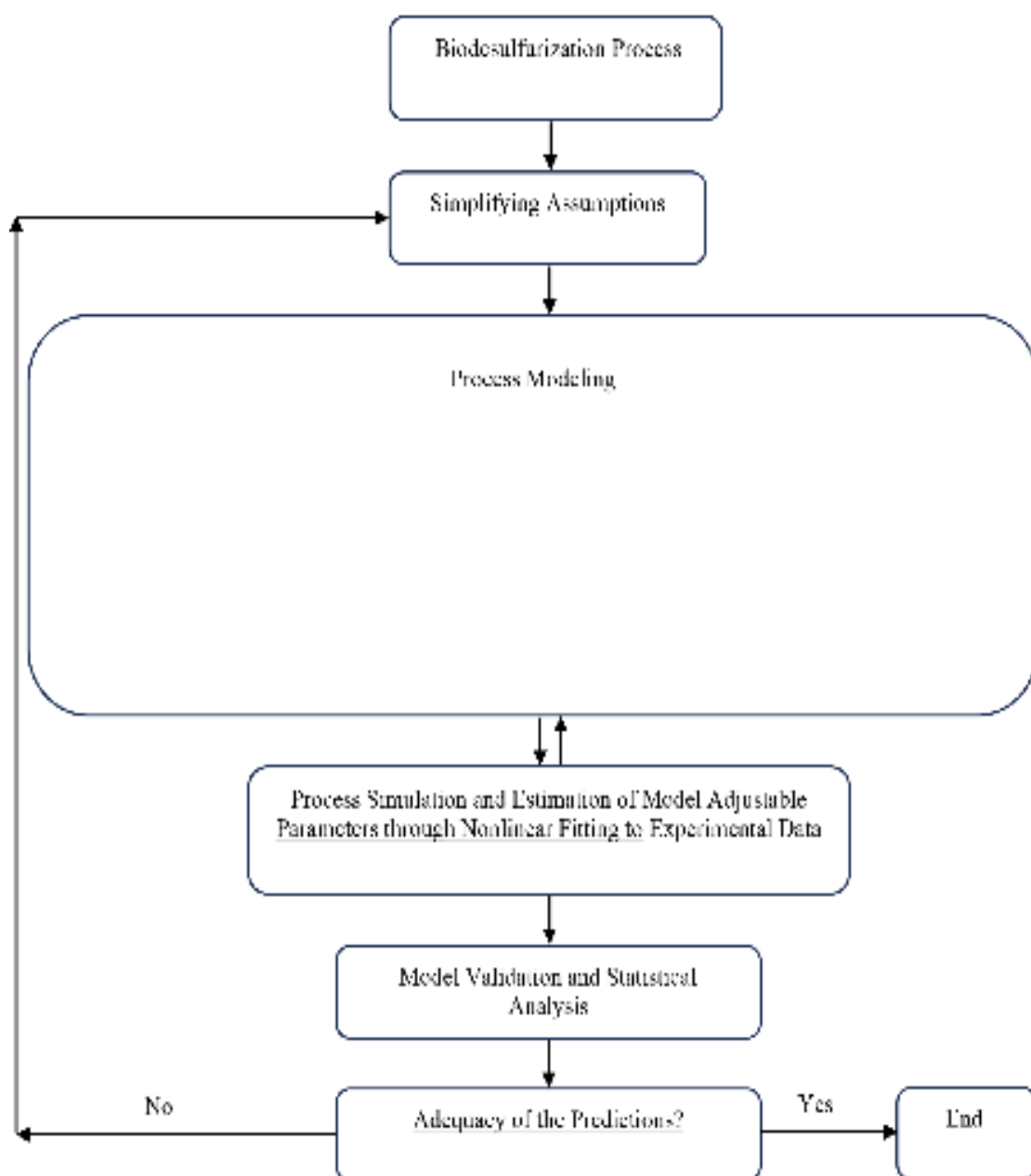
در این بخش پیش بینی های حاصل از هریک از سناریوهای شبیه سازی آورده شده و جهت اعتبارسنجی با داده های آزمایشگاهی مورد مقایسه قرار گرفته است. در **شکل های ۲ تا ۷** به ترتیب پیش بینی های به دست آمده از روند تغییرات غلظت زیست توده، غلظت محصول 2-HBP و غلظت DBT (سوبسترا) با زمان براساس بیست سناریوی موجود در بسته شبیه سازی نمایی و لجستیک آورده شده و با داده های آزمایشگاهی برگرفته از کار چن و همکاران [۳۳] قیاس گردیده است. همان گونه که در **شکل های ۲-۷** دیده می شود تا حدود ۵۰ h پس از آغاز فرآیند، غلظت توده زیستی و به تبع آن تولید محصول (2-HBP) افزایش یافته و سپس مقدار آن ها کاهش می یابد. دلیل این امر این است که تا ۵۰ h 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.

متابولیسم سلول و مستقل از رشد زیست توده می باشد) است. در اثر تشکیل و تجمع محصول 2-HBP حین فرآیند گوگردزایی، نرخ تولید آن توسط باکتری ها کاهش می یابد. به عبارت دیگر، 2-HBP اثر بازدارندگی بر تولید خود دارد. برای توصیف این پدیده فیزیکی، ترم اصلاحی به مدل لودینگ-پیرت افزوده گردید.

(۳)
$$\frac{dC_p}{dt} = \left(\alpha \frac{dC_x}{dt} + \beta C_x \right) \left(1 - \frac{C_p}{C_{pm}} \right)$$
 مقدار محصول تولیدی می تواند اثر مهارکنندگی بر نرخ تولید آن داشته باشد. در رابطه ۳، ترم سوم سمت راست بیانگر اثر خود بازدارندگی محصول است. در این رابطه، C_{pm} بیشینه غلظت محصول است. به منظور کاهش پیچیدگی، ضرایب موجود در روابط ۱ تا ۳، مانند α ، m ، α ، $Y_{p/s}$ ، $Y_{x/s}$ و β مستقل از تغییرات شرایط محیطی و فیزیولوژیکی سلول ها در نظر گرفته شده اند.

شبیه سازی فرآیند

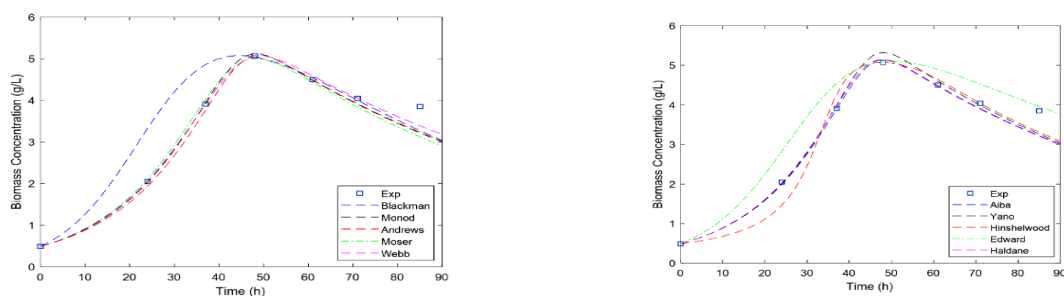
در بخش قبلی، مدل سازی جامعی روی قسمت های کلیدی فرآیند گوگردزایی زیستی انجام گرفت. در این قسمت بر مبنای مدل های تعریف شده، دو بسته شبیه سازی مجزا (نمایی و لجستیک) تعریف گردید. هر بسته شامل ده سناریو (به دلیل وجود ده مدل تعریف شده برای پیش بینی مقدار μ) می باشد. لازم به ذکر است که هر سناریو شامل یک مدل 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 روابط دیفرانسیل معمولی است. برای حل دسته روابط دیفرانسیل در هر سناریو از روش 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



شکل ۱ دیاگرام شماتیک چهارچوب مدل سازی و شبیه سازی فرآیند BDS
 Fig. 1 Schematic diagram of the BDS process modeling and simulation framework

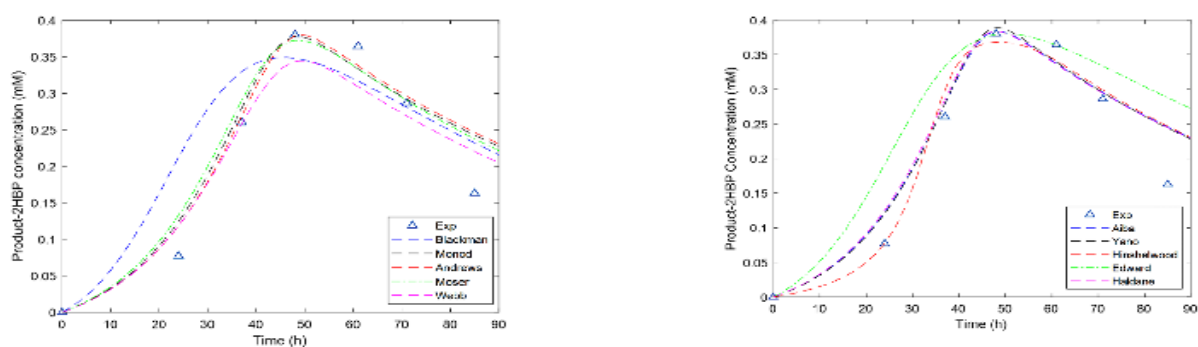
جدول ۳ مقادیر پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی بسته های نمایی (S1) و لجستیک (S2)
Table 3 Values of the parameters used in the simulation of the exponential (S1) and logistic (S2) packages

Parameters	Monod		Haldane		Aiba		Hinshelwood		Edward		Yano		Blackman		Moser		Andrews		Webb		Unit
	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2	
μ_m	0.085	0.09	0.087	0.125	0.086	0.15	0.09	0.11	0.26	0.45	0.088	0.15	0.16	0.009	0.09	0.1	0.0845	0.15	0.083	0.08	h ⁻¹
K_s	0.08	0.025	0.078	0.045	0.075	0.075	0.075	0.068	0.055	0.075	0.075	0.055	0.6	0.025	0.095	0.0199	0.075	0.075	0.1	0.015	gL ⁻¹
α	0.079	0.113	0.08	0.113	0.08	0.113	0.078	0.11	0.082	0.106	0.078	0.112	0.0735	0.07	0.08	0.113	0.08	0.113	0.075	0.113	h ⁻¹
β	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-5} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 9$	$10^{-4} \times 6$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 4$	$10^{-4} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	$10^{-5} \times 1$	$10^{-5} \times 8$	h ⁻¹
$Y_{x/s}$	77	60	80	60	80	60	60	60	95	90	77	65	100	60	85	57	77	60	60	65	gg ⁻¹
$Y_{p/s}$	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.55	1.55	2.01	1.59	1.66	1.6	1.6	1.59	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	gg ⁻¹
m	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 8.9$	$10^{-4} \times 7$	$10^{-4} \times 8.7$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8.5$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8.5$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	$10^{-4} \times 8$	$10^{-4} \times 9$	h ⁻¹
K_i	-	-	9.8	0.9	9.8	0.9	-	-	5	0.65	7.2	0.7	-	-	-	-	9.8	0.9	9.8	0.8	gL ⁻¹
K_d	0.01	0.005	0.01	0.0045	0.01	0.005	0.01	0.0025	0.01	0.0055	0.01	0.0055	0.0063	0.0085	0.0085	0.005	0.01	0.005	0.008	0.005	day ⁻²
K_p	-	-	-	-	-	-	2.5	2.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	gL ⁻¹
K	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9	2	-	-	-	-	-	-	-	-	gL ⁻¹
Cx_m	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	-	5.07	gL ⁻¹
Cp_m	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	-	0.38	mM
n	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.077	1.077	-	-	-	-	-



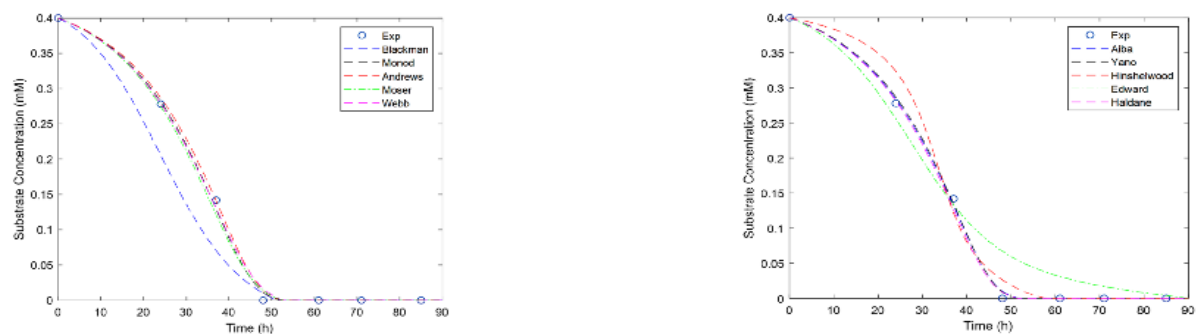
شکل ۲ تغییرات غلظت زیست توده با زمان بر مبنای پیش بینی های بسته نمایی

Fig. 2 Variations of the biomass concentration over time based on the predictions of the exponential package.



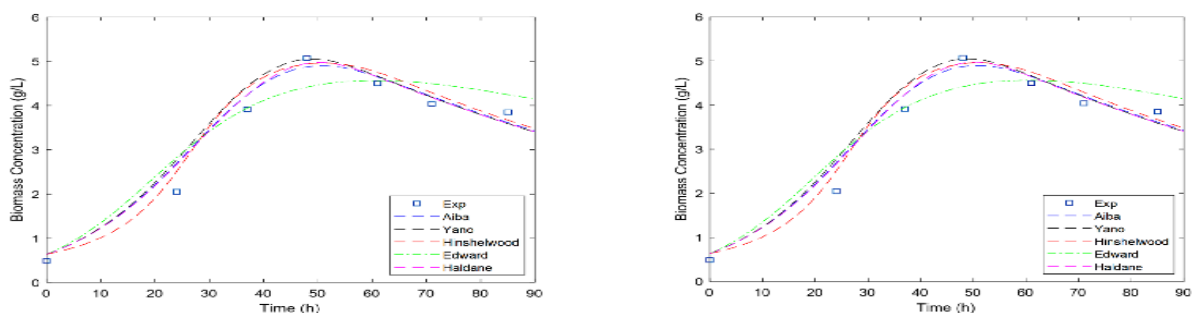
شکل ۳ تغییرات غلظت محصول 2-HBP با زمان بر مبنای پیش بینی های بسته نمایی

Fig. 3 Variations of the 2-HBP product concentration over time based on the predictions of the exponential package.



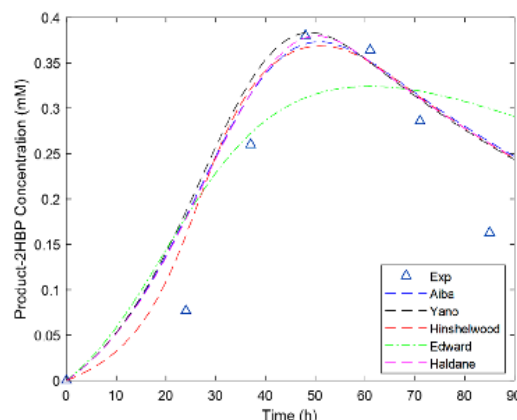
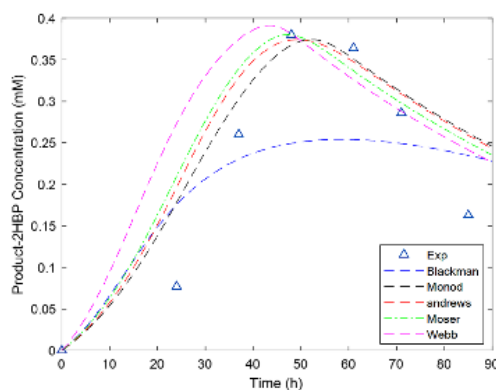
شکل ۴ تغییرات غلظت DBT (سوبسترا) با زمان بر مبنای پیش بینی های بسته نمایی

Fig. 4 Variations of the DBT (substrate) concentration over time based on the predictions of the exponential package.



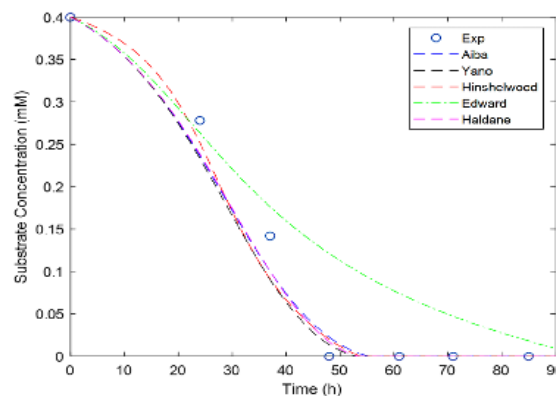
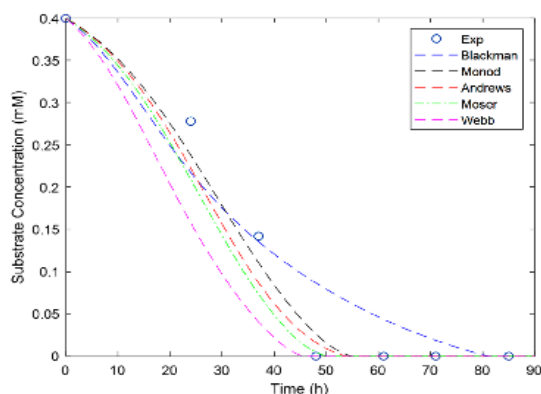
شکل ۵ تغییرات غلظت زیست توده با زمان بر مبنای پیش بینی های بسته لجستیک

Fig. 5 Variations of the biomass concentration over time based on the predictions of the logistic package.



شکل ۶ تغییرات غلظت محصول 2-HBP با زمان بر مبنای پیش‌بینی‌های بسته لجستیک

Fig. 6 Variations of the 2-HBP product concentration over time based on the predictions of the logistic package.



شکل ۷ تغییرات غلظت DBT (سوبسترا) با زمان بر مبنای پیش‌بینی‌های بسته لجستیک

Fig.7 Variations of the DBT (substrate) concentration over time based on the predictions of the logistic package.

قادر به پیش‌بینی روند کلی این تحولات با زمان در فرآیند گوگردزدایی زیستی می‌باشند. به منظور مقایسه دقیق‌تر، مجموع مربعات خطا (SSE)، ریشه متوسط مربعات خطا (RMSE) و مجذور ضریب همبستگی (R^2) ناشی از پیش‌بینی بسته مدل‌های موجود برای غلظت‌های توده‌زیستی (RMSE، SSE، SEX و R^2X)، محصول (SSEP، RMSEP و R^2P) و سوبسترا (RMSES، SSSES و R^2S)، در هر سناریوی شبیه‌سازی محاسبه و در جدول ۴ گزارش شد. با توجه به مقادیر مجموع مربعات خطای کل (RMSE_{total})، ریشه متوسط مربعات خطای کل (RMSE_{total}) و میانگین مجذور ضریب همبستگی (R^2_{mean}) برای هر سناریو، می‌توان به ارزیابی و مقایسه دقت و قدرت انطباق بیست سناریوی تعریف‌شده پرداخت.

از این زمان به بعد به دلیل فقدان مقدار سوبسترای کافی و ایجاد شرایط نامناسب برای رشد، میکوباکتریوم وارد فاز مرگ شده و به تبع آن میزان محصول تولیدی سیر نزولی پیش می‌گیرد. نکته جالب توجه اینجاست که با گذشت ۵۰ h از شروع فرآیند اگر چه غلظت DBT تقریباً به صفر نزدیک می‌شود، اما رشد توده‌زیستی و غلظت 2-HBP نه تنها کاهش نمی‌یابد بلکه به حداکثر مقدار خود می‌رسد. دلیل این امر این است که رفتار باکتری‌ها به عنوان موجودات زنده تنها وابسته به شرایط فعلی حاکم بر محیط نیست بلکه متأثر از شرایطی که قبلاً نیز تجربه کرده است می‌باشد [۳۴]. از نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌ها کاملاً مشخص است که تقریباً تمامی سناریوهای بیست گانه تعریف‌شده

جدول ۴ مقادیر SSE ، $RMSE$ و R^2 در بسته‌های شبیه‌سازی نمایی ($S1$) و لجستیک ($S2$) برای غلظت‌های توده‌زیستی، محصول و سوبسترا

Table 4 SSE , $RMSE$, and R^2 values for biomass, product, and substrate concentrations in the exponential ($S1$) and logistic ($S2$) simulation packages

Model			Aiba						Edward					
Scenario			S1			S2			S1			S2		
Statistical Metric														
SSE_x	$RMSE_x$	R^2_x	0.024	0.085	0.978	0.042	0.078	0.967	0.064	0.096	0.964	0.15	0.146	0.924
SSE_p	$RMSE_p$	R^2_p	0.067	0.093	0.949	0.195	0.167	0.882	0.258	0.192	0.854	0.45	0.254	0.742
SSE_s	$RMSE_s$	R^2_s	0.001/0	0.015	0.998	0.025	0.06	0.98	0.036	0.071	0.975	0.106	0.123	0.94
SSE_{total}	$RMSE_{total}$	R^2_{mean}	0.092	0.166	0.975	0.264	0.305	0.943	0.358	0.359	0.931	0.706	0.523	0.869
Model			Haldane						Hinshelwood					
Scenario			S1			S2			S1			S2		
Statistical Metric														
SSE_x	$RMSE_x$	R^2_x	0.019	0.052	0.982	0.032	0.068	0.97	0.037	0.072	0.962	0.039	0.074	0.973
SSE_p	$RMSE_p$	R^2_p	0.078	0.105	0.932	0.17	0.156	0.891	0.079	0.106	0.937	0.181	0.161	0.897
SSE_s	$RMSE_s$	R^2_s	0.002	0.017	0.998	0.023	0.057	0.983	0.019	0.052	0.985	0.27	0.196	0.752
SSE_{total}	$RMSE_{total}$	R^2_{mean}	0.099	0.174	0.971	0.225	0.281	0.948	0.135	0.23	0.961	0.49	0.431	0.874
Model			Monod						Blackman					
Scenario			S1			S2			S1			S2		
Statistical Metric														
SSE_x	$RMSE_x$	R^2_x	0.023	0.057	0.977	0.038	0.074	0.97	0.14	0.142	0.839	0.244	0.187	0.846
SSE_p	$RMSE_p$	R^2_p	0.071	0.101	0.94	0.187	0.164	0.887	0.296	0.206	0.795	0.592	0.291	0.684
SSE_s	$RMSE_s$	R^2_s	0.002	0.016	0.998	0.021	0.054	0.984	0.067	0.097	0.952	0.083	0.109	0.934
SSE_{total}	$RMSE_{total}$	R^2_{mean}	0.095	0.174	0.972	0.246	0.292	0.947	0.503	0.445	0.862	0.92	0.587	0.821
Model			Moser						Andrews					
Scenario			S1			S2			S1			S2		
Statistical Metric														
SSE_x	$RMSE_x$	R^2_x	0.025	0.06	0.968	0.072	0.101	0.918	0.021	0.054	0.981	0.058	0.091	0.946
SSE_p	$RMSE_p$	R^2_p	0.081	0.108	0.938	0.225	0.179	0.832	0.067	0.098	0.941	0.218	0.176	0.86
SSE_s	$RMSE_s$	R^2_s	0.004	0.024	0.996	0.06	0.093	0.958	0.002	0.016	0.999	0.041	0.076	0.97
SSE_{total}	$RMSE_{total}$	R^2_{mean}	0.11	0.192	0.967	0.357	0.373	0.903	0.09	0.168	0.974	0.317	0.343	0.922
Model			Webb						Yano					
Scenario			S1			S2			S1			S2		
Statistical Metric														
SSE_x	$RMSE_x$	R^2_x	0.01	0.038	0.987	0.173	0.157	0.813	0.035	0.071	0.969	0.04	0.076	0.958
SSE_p	$RMSE_p$	R^2_p	0.074	0.103	0.942	0.365	0.228	0.697	0.057	0.09	0.948	0.179	0.16	0.88
SSE_s	$RMSE_s$	R^2_s	0.002	0.019	0.998	0.128	0.135	0.91	0.001	0.014	0.999	0.031	0.066	0.977
SSE_{total}	$RMSE_{total}$	R^2_{mean}	0.087	0.16	0.976	0.666	0.52	0.817	0.094	0.175	0.972	0.25	0.302	0.938

همان‌گونه که ملاحظه می‌گردد، 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 داده‌های آزمایشگاهی می‌باشد. همچنین، ضعیف‌ترین عملکردها متعلق به سناریوهای بر پایه

در بسته شبیه‌سازی نمایی ($S1$)، ترتیب دقت عملکرد و انطباق سناریوها در پیش‌بینی فرآیند به‌صورت زیر می‌باشد:
وب < آیبا < اندریوس < مونود < یانو < هالدان < موزر < هینشلوود < ادوارد < بلکمن

مدل های ادوارد و بلکمن به ترتیب با SSE_{total} برابر با ۰/۳۵۸ و ۰/۵۰۳، $RMSE_{total}$ برابر با ۰/۳۵۹ و ۰/۴۴۵ و R^2mean برابر با ۰/۹۳۱ و ۰/۸۶۲ می باشد.

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

هالدان < موند < یانو < آبیلا < اندریوس < موزر < هینشلوود < وب < ادوارد < بلکمن

همان طوری که دیده می شود، سناریوی بر پایه مدل هالدان با $SSE_{total} = ۰/۲۲۵$ ، $RMSE_{total} = ۰/۲۸۱$ و $R^2mean = ۰/۹۴۸$ 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 بلکمن به ترتیب با SSE_{total} برابر با ۰/۷۰۶ و ۰/۹۲، $RMSE_{total}$ برابر با ۰/۵۲۳ و ۰/۵۸۷ و R^2mean برابر با ۰/۸۶۹ و ۰/۸۲۱ می باشد.

کاملاً واضح است که سناریوهای متشکل از مدل های ادوارد و بلکمن (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 بلکمن می تواند ناشی از ماهیت خطی این مدل و ارتباط مستقیم μ با غلظت سوپسترا در این مدل باشد و در مدل ادوارد می تواند بخاطر ماهیت کاملاً نمایی این مدل در پیش بینی مقدار سرعت رشد ویژه باشد. براین 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. همان طور 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 آن را

به عنوان سناریوی مدل سازی منتخب برای فرآیند گوگردزایی زیستی معرفی نمود. مدل وب یک مدل غیر ساختاریافته است که اثر مهارکنندگی سوپسترا بر فرآیند رشد و مرگ میکروارگانیسم ها را به صورت صریح در ساختار رابطه 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 سوپسترا توصیف می شود، اما با برخورداری از ترم مهارکنندگی سوپسترا $(1 + C s/K_i)$ ، رفتار واقعی تر سیستم های زیستی در غلظت های مختلف سوپسترا را بازگو می نماید. مزیت اصلی مدل وب نسبت به سایر مدل ها در این است که قادر به توصیف برهم کنش هم زمان پدیده های اشباعیت و مهارکنندگی سوپسترا با انعطاف پذیری بالا می باشد. برتری مکانیستی مدل وب نه در پیچیدگی ساختاری، بلکه در نحوه لحاظ کردن قدرت مهارکنندگی سوپسترا 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 سوپستراهای غیرسمی بهره گرفته شده است. موفقیت مدل مذکور در حضور سوپسترای سمی (DBT) مورد استفاده در این پژوهش نشان می دهد که مدل وب از نظر مکانیستی توانایی مناسبی در بازنمایی اثر مهارکنندگی سوپسترا بر نرخ رشد باکتری ها دارد. لازم به ذکر است که اگر چه سناریوهای پیاده سازی شده براساس باکتری و سوپسترای خاصی شبیه سازی شدند اما این الگو را می توان برای سایر فرآیندهای تخریب زیستی که درگیر سایر باکتری ها و سوپستراها هستند به کاربرد. از آن جایی که برخی از عوامل مؤثر بر فرآیند گوگردزایی زیستی، از جمله دما، pH، سطح اکسیژن و شدت هم زدن 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

بر پایه هالدان با $R^2_{\text{mean}} = ۰/۹۴۸$ از کمترین خطا و بیشترین انطباق به داده‌های آزمایشگاهی برخوردار بود. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده مشخص گردید پیش‌بینی‌های بسته مدل نمایی از دقت و انطباق نسبی بالاتری نسبت به پیش‌بینی‌های بسته مدل لجستیک برخوردار است. در نهایت، از بین بیست حالت مدل‌سازی موجود، سناریوی نمایی بر مبنای مدل وب با توصیف برهم‌کنش هم‌زمان پدیده‌های اشباعیت و مهارکنندگی سوپسترا، توانایی مناسبی در پیش‌بینی فرآیند BDS دارد. از این سناریو می‌توان جهت طراحی، بهینه‌سازی و کنترل پیلوت‌های آزمایشگاهی و صنعتی تخریب زیستی DBT از سوخت‌های فسیلی بهره‌برد.

علائم و نشانه‌ها

C_p : غلظت محصول (mM)
 C_{pm} : حداکثر غلظت محصول (mM)
 C_s : غلظت سوپسترا (mM)
 C_{sm} : حداکثر غلظت سوپسترا (mM)
 C_x : غلظت زیست‌توده (g/L)
 C_{xm} : حداکثر غلظت زیست‌توده (g/L)
 K : ثابت Yano (g/L)
 K_d : ثابت مرگ باکتریایی (day⁻²)
 K_i : ثابت بازدارندگی سوپسترا برای تشکیل توده‌زیستی (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)

میان سلول‌های باکتریایی را در فرآیند مدل‌سازی لحاظ نمود. علاوه بر این پیشنهاد می‌شود اثر غلظت‌های اولیه DBT بالاتر یعنی شرایط نزدیک‌تر به مقیاس صنعتی مورد ارزیابی قرار گرفته و عملکرد مدل‌های پیشنهادشده در این شرایط را بررسی نمود. استفاده از مدل‌های چندمقیاسی شامل مدل‌های اتصال‌دهنده انتقال جرم-سینتیک، مدل‌های ساختاری و رویکردهای مبتنی بر یادگیری ماشین، می‌تواند راهکارهای آتی دیگری در پیش‌بینی رفتار گوگردزدایی زیستی باشند. در نهایت، با بهره‌گیری از چارچوب ارائه‌شده در این پژوهش، می‌توان به بررسی روند حذف سایر ترکیبات گوگردی مقاوم با اندازه‌های مولکولی مختلف نظیر تیوفن، بنزوتیوفن و ۶و۴-دی‌متیل‌دی‌بنزوتیوفن از سوخت‌های فسیلی پرداخت.

نتیجه‌گیری

گوگردزدایی زیستی یک روش موثر، اقتصادی و سازگار با محیط‌زیست برای حذف آلاینده‌های گوگردی مقاوم به تجزیه حرارتی توسط میکروارگانیسم‌ها از سوخت‌های فسیلی است. مدل‌سازی و شبیه‌سازی جهت ارزیابی جنبه‌های مهم فرآیند گوگردزدایی زیستی، از جمله میزان رشد زیست‌توده، مقدار تخریب آلودگی و ظرفیت محصولات تولیدی می‌تواند نقش موثری ایفا کند. تمامی بسته‌ها و سناریوهای شبیه‌سازی ارائه‌شده بر اساس مدل‌های پیشنهادی در این پژوهش، قادر به پیش‌بینی روند کلی عوامل کلیدی فرآیند گوگردزدایی زیستی نظیر غلظت‌های توده‌زیستی، سوپسترا و محصول تولیدی بودند. در این راستا، از میان تمامی سناریوهای موجود در بسته مدل‌سازی نمایی، سناریوی بر پایه مدل وب با $R^2_{\text{mean}} = ۰/۹۷۶$ و $RMSE_{\text{total}} = ۰/۱۶$ ، $R^2_{\text{tal}} = ۰/۸۷$ دارای کمترین خطا و بیش‌ترین انطباق به داده‌های آزمایشگاهی بود. در همین چهارچوب، از میان تمامی سناریوهای تعریف‌شده در بسته مدل‌سازی لجستیک، سناریوی

μ_{max} : حداکثر نرخ رشد ویژه (h^{-1})

μ : ثابت سرعت رشد ویژه باکتریایی (h^{-1})

مراجع

- [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]. Masoumi, M. Y. (2023). Investigation of the adsorption behavior of cobalt-based metal-organic framework nanosheets in the desulfurization of model oil. *Petroleum Research*, 33(1402-4), 123–136. <https://doi.org/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]. Naderi Khomartaji, M., Dehghani, M. R., & Banisharif Dehkordi, F. (2017). Oxidative desulfurization of thiophenic compounds with Dawson-type polyoxometalate supported catalyst. *Petroleum Research*, 26(95-6), 57–65. <https://doi.org/10.22078/pr.2017.717>
- [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]. Alahyari, S., Mehrabi, M., Rahemi, N., & Tadayyon, S. (2019). Oxidative desulfurization of DBT using tri-metallic Ni-Mo-W nanocatalysts based on different natural zeolites: Mordenite, ferrierite, and clinoptilolite. *Petroleum Research*, 29(107), 22–24. <https://doi.org/10.22078/pr.2019.3540.2614>
- [9]. Jalali, M. R., & Sobati, M. A. (2018). An investigation of the effect of interfacial tension on the ultrasound assisted oxidative desulfurization (UAOD). *Petroleum Research*, 28(99), 6–9. <https://doi.org/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 Noyal, 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]. Etemadi, N., Akhavan Sepahi, A., Mohebal, G., & Yazdian, F. (2019). The isolation desulfurizing native thermophilic bacteria *Bacillus thermoamylovorance* and optimization culture medium. *Petroleum Research*, 29(98-5), 119–131. <https://doi.org/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]. Mohebal, 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 aryabhattai* 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>