



An Overview of Microbial Fuel Cell Modeling

M. Esfandyari^{1*}, S. Sobhani², D. Jafari³

1- Associate Professor of Chemical Engineering, University of Bojnord

2- M. Sc. in Chemical Engineering, University of Bojnord

3- Ph. D. Student of Civil and Environmental Engineering, University of Nebraska-Lincoln

E-mail: M.esfandyari@ub.ac.ir

Abstract

Microbial fuel cell are modeled using various mathematical and computational methods in order to better understand the complex behavior of these cells and optimize their performance. In the modeling process, various effects including biological effects, mass transfer, energy and charge in anode and cathode are considered. These models cover a wide range of processes by considering different material phases, boundary conditions, microbial growth, reaction kinetics at anode and cathode and electrochemical behavior of the system. The power of a model lies in the ability to predict and the balance between computing time and the accuracy of its results. The aim of these models is to provide a comprehensive understanding of the phenomena occurring in the microbial fuel cell, which includes a wide range of processes. In addition, the models consider the effects of environmental changes on microbial growth, flow hydrodynamics, and electron transfer from the microbial surface to the anode. These models are essential to identify the key factors that affect the overall system and improve the power output of microbial fuel cells.

Received: 25 December 2023

Accepted: 3 April 2024

Page Number: 133-147

Keywords:

Microbial Fuel Cell,
Modeling,
Substrate,
Anode,
Cathode

Please Cite this Article Using:

Esfandyari, M., Sobhani, S., & Jafari, D. (2025). An Overview of Microbial Fuel Cell Modeling. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 23(137), 133-147, [In Persian].



مروری بر مدل‌سازی پیل سوختی میکروبی

مرتضی اسفندیاری^{۱*}، سمیه سبحانی^۲، داریوش جعفری^۳

۱- دانشیار گروه مهندسی شیمی، دانشگاه بجنورد

۲- کارشناس ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه بجنورد

۳- دانشجوی دکتری مهندسی محیط زیست و عمران، دانشگاه نبراسکا- لینکلن

پیام نگار: M.esfandyari@ub.ac.ir

چکیده

پیل سوختی میکروبی با استفاده از روش‌های ریاضی و محاسباتی متنوع، به منظور درک بهتر رفتار پیچیده و بهینه‌سازی عمل‌کرد، مدل‌سازی می‌شود. در فرایند مدل‌سازی، تأثیرات مختلفی از جمله تأثیرات بیولوژیکی، انتقال جرم، انرژی و بار در آند و کاتد مد نظر قرار می‌گیرد. این مدل‌ها با در نظر گرفتن مراحل مختلف ماده، شرایط مرزی، رشد میکروبی، سینتیک واکنش در آند و کاتد، رفتار الکتروشیمیایی سامانه، طیف گسترده‌ای از فرایندها را دربر می‌گیرد. قدرت یک مدل در توانایی پیش‌بینی و تعادل میان زمان محاسباتی و دقت نتایج آن نهفته است. هدف این مدل‌ها ارائه یک درک جامع از پدیده‌های رخ داده در پیل سوختی میکروبی است که شامل طیف وسیعی از فرایندها است. علاوه بر این، مدل‌ها تأثیرات تغییرات محیطی بر رشد میکروبی، هیدرودینامیک جریان و انتقال الکترون از سطح میکروبی به آند را در نظر می‌گیرد. این مدل‌ها برای شناسایی عوامل کلیدی که بر سامانه کلی تأثیر می‌گذارد و بهبود توان خروجی پیل‌های سوختی میکروبی، ضروری است.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۰/۰۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۱/۱۵

شماره صفحات: ۱۳۳ تا ۱۴۷

کلیدواژه‌ها:

پیل سوختی میکروبی،

مدل‌سازی،

سابسریت،

آند و کاتد

* بجنورد، دانشگاه بجنورد، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی شیمی

استناد به مقاله:

اسفندیاری، مرتضی، سبحانی، سمیه، و جعفری، داریوش. (۱۴۰۳). مروری بر مدل‌سازی پیل سوختی میکروبی، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۳(۱۳۷)، ۱۳۳-۱۴۷.

۱. مقدمه

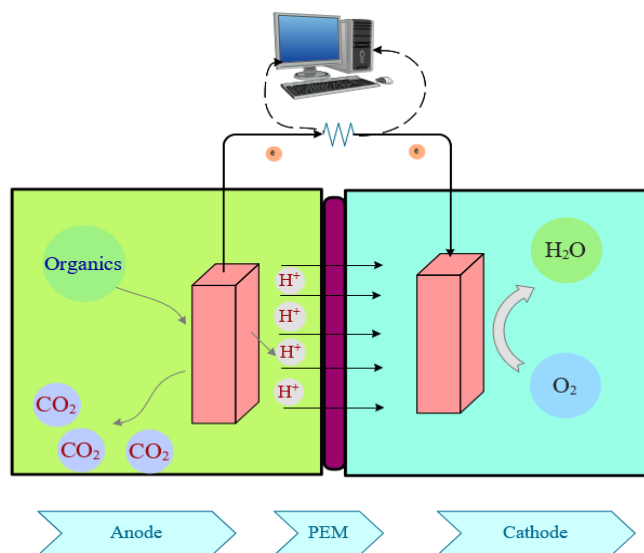
استفاده از پساب به‌عنوان یک منبع در سامانه‌های بیوالکتروشیمیایی فرصتی برای رسیدگی به بحران فعلی آب و تضمین امنیت منابع آینده است. یکی از انواع سامانه‌های بیوالکتروشیمیایی، پیل سوختی میکروبی (MFC) است [۱]. فرایند پیل سوختی میکروبی در دو دهه اخیر بسیار توجه‌برانگیز شده است. در این فرایند، مواد آلی موجود در پساب‌ها و یا زیست‌توده‌ها اکسید می‌شود و به‌طور هم‌زمان با حذف از پساب‌ها، انرژی تولید می‌کند. پیل سوختی میکروبی یک دستگاه الکتروشیمیایی است که انرژی حاصل از یک واکنش بیوشیمیایی را به انرژی الکتریکی مفید تبدیل می‌کند. این پیل سوختی به‌صورت مستقیم انرژی شیمیایی را به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند و عملکرد آن شبیه به باتری نیست که انرژی را ذخیره کند، بلکه انرژی به‌حالت دیگری تبدیل می‌شود [۲-۴]. پیل سوختی میکروبی دارای برتری‌ها و کاربردهای مختلفی است که عبارت‌اند از:

- MFC دارای راندمان بالاتری نسبت به سوخت‌های فسیلی معمول مانند نفت و گاز هستند.
- MFC با حذف آلودگی ناشی از سوزاندن سوخت‌های فسیلی، تنها آب را به‌عنوان محصول جانبی تولید می‌کند.
- بیشتر MFCها در مقایسه با موتورهای معمول بسیار بی‌صدا هستند.

• زمان عملکرد MFC نسبت به باتری‌های معمولی بسیار طولانی‌تر است.

• قابلیت استفاده و کاربرد MFC در سامانه‌های ترکیبی بسیار متنوع است.

یکی از چالش‌های اساسی در راستای تجاری‌سازی پیل سوختی میکروبی، هزینه نسبتاً بالای آن است. از این‌رو، به‌منظور کاهش هزینه و بهبود شرایط کارکرد، ضروری است که شرایط بهینه برای کارکرد و طراحی اجزای پیل سوختی مشخص شود. این اهداف تنها با انجام تحقیقات گسترده بر روی مشخصه‌های کارکردی پیل سوختی و اجزای تشکیل‌دهنده آن قابل دستیابی است. یک پیل سوختی میکروبی عمدتاً از دو محفظه شامل آنود و کاتد تشکیل شده است که با یک غشای تبادل‌کننده پروتون از هم جدا می‌شوند. در محفظه آنود، باکتری‌ها به‌عنوان بیوکاتالیست به‌کار می‌روند و سوبسترا (سوخت) را اکسید و الکترون و پروتون تولید می‌کنند. الکترون‌ها از راه یک مدار خارجی به کاتد منتقل می‌شوند. در همین حین، با حضور پروتون‌هایی که از راه غشا به محفظه کاتد منتقل شده‌اند، اکسیژن حاضر احیا شده، آب تولید می‌شود. باکتری‌های حاضر در محفظه آنود قادر به اکسید کردن سوبستراهای پیچیده مانند گلوکز، اسید لاکتیک، نشاسته و پروتئین‌ها هستند. شکل (۱)، ساختار و عملکرد یک MFC را به‌صورت طرحواره نمایش می‌دهد [۵-۷].



شکل ۱. طرحواره ساختار و عملکرد پیل سوختی میکروبی.

Figure 1. Schematic of the structure and function of the microbial fuel cell.

یکی از چالش‌های اصلی در حوزه پیل سوختی میکروبی، ارتقای توان خروجی و بهبود کارایی آن برای استفاده اقتصادی در مقیاس بزرگ است. هم‌چنین، توسعه مواد اقتصادی و پایدار برای ساخت و تجاری‌سازی پیل سوختی میکروبی بسیار حائز اهمیت است. یکی دیگر از چالش‌های MFC بهینه‌سازی، طراحی و عملکرد MFC به‌منظور تضمین عملکرد پایدار و ثابت در طولانی‌مدت است. هم‌چنین، بررسی محدودیت‌های فعلی MFC از جهت تولید، حمل و نقل و رشد میکروبی برای بقای تجاری آن ضروری است. به‌طور کلی، مدل‌سازی MFC راهی برای بهبود این محدودیت‌ها است و می‌تواند باعث بهینه‌سازی MFC شود [۹، ۱۰].

هدف اصلی از مدل‌سازی MFC، درک تعاملات پیچیده بین ریزاندامگان و تبدیل مواد آلی به الکتریسیته است. با استفاده از این مدل‌سازی، می‌توان به سازوکارهای دخیل در انتقال الکترون، تشکیل بیوفیلم و کارایی کلی سامانه MFC پرداخت. با توسعه مدل‌های دقیق، محققان قادر خواهند بود تا طراحی و عملکرد MFCها را بهبود بخشند و برای کاربردهای مختلف از جمله تصفیه پساب، تولید انرژی زیستی و نظارت بر محیط زیست بهینه‌سازی کنند.

۲. مدل‌سازی پیل‌های سوختی میکروبی

مدل‌های ریاضی برای درک عملکرد سامانه‌های تولید برق با استفاده از MFCها به‌عنوان یک جای‌گزین کارآمد در تشخیص و بهبود تنگناهای اصلی محل توجه قرار می‌گیرند [۱۰]. این مدل‌ها عموماً بر اساس قوانین و معادلات فیزیکی و شیمیایی موجود در این فرایندها توصیف می‌شوند؛ اما پیچیدگی این مدل‌ها به عوامل مختلفی مانند بعد مدل، فرضیات ساخته‌شده و سطح جزئیات مورد استفاده برای توصیف فرایندها بستگی دارد.

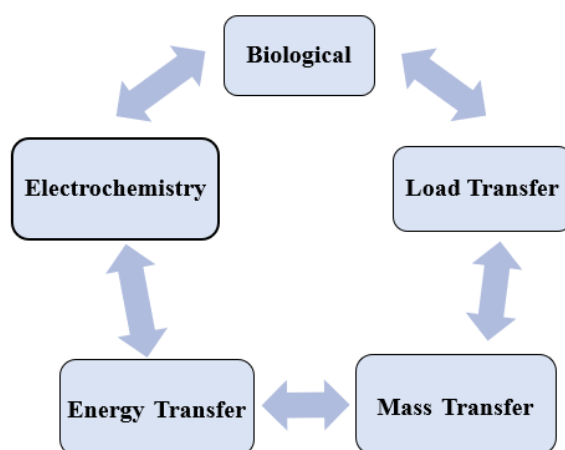
برای مطالعه پدیده‌هایی که در یک MFC رخ می‌دهند، انواع مختلفی از فرایندها مد نظر قرار می‌گیرند که شامل انتقال جرم از راه سلول، فازهای ماده، شرایط مرزی، رشد میکروبی، سینتیک واکنش‌های آند و کاتد و رفتار الکتروشیمیایی سامانه است. از این رو، مدل‌های ریاضی باید قادر باشند تا این پدیده‌ها را با دقت توصیف کنند. استحکام یک مدل ریاضی با قدرت پیش‌بینی آن، به معنای توانایی مدل در پیش‌بینی و روشن‌شدن رفتارهای آینده سامانه

فناوری MFC یکرست انرژی شیمیایی را از مواد زائد به جریان الکتریکی - با استفاده از میکروب‌ها به‌عنوان کاتالیزور زیستی - تبدیل می‌کند. با این حال، کاربرد عملی MFCها به دلیل عدم درک عوامل متعددی که بر عملکرد آن‌ها تأثیر می‌گذارد با چالش‌هایی مواجه است. این عوامل شامل خواص مواد الکتروود، ویژگی‌های بستر، خواص تلقیح، شرایط عملیاتی و محدودیت‌های طراحی است. بهینه‌سازی این شرایط عملیاتی بسیار مهم است و باید محدودیت‌های مربوط به فرایندهای بیوالکتروشیمیایی، اقتصاد، طراحی مهندسی و علم مواد در مرکز توجه قرار گیرند. برای کاهش این چالش‌ها، می‌توان از نمونه‌های اولیه پیچیده و مدل‌سازی سامانه برای بهینه‌سازی MFC برای کاربردهای میدانی استفاده کرد. سامانه‌های مدل‌سازی شده مهندسی شده در برخورد با رفتار پویا و تنوع در فعالیت‌های موجودات بیولوژیکی نویدبخش است. جامعه پژوهشی روی کردهای مدل‌سازی و شگردهای تحلیلی مختلفی را برای بهینه‌سازی MFCها اعمال کرده است؛ از جمله اندازه الکتروود، حجم محفظه آندی، سازوکار انتقال الکترون، فعالیت‌های ردوکس کاتالیزور، دینامیک سیالات، تلفات بیش‌از حد پتانسیل و کاربردهای افزایش مقیاس.

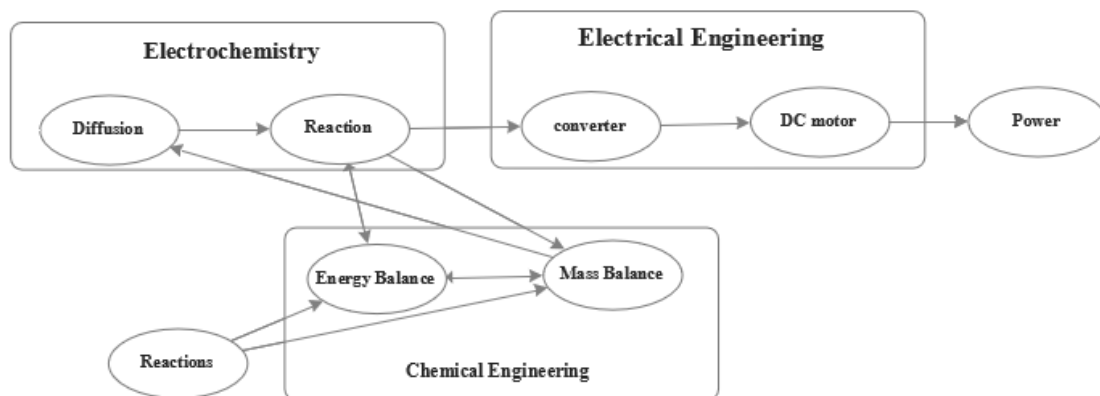
برخلاف پیل‌های سوختی معمولی، رفتار ولتاژ- جریان MFCها به دلیل تلفات بیش‌از حد پتانسیل مرتبط با موجودات بیولوژیکی خطی نیست؛ بنابراین، مدل‌سازی MFCها پیچیده می‌شود. سامانه‌های MFC چندفازی، چندبعدی و چندگونه‌ای هستند که شامل موازنه جرم و انرژی و هم‌چنین فرایندهای بیوالکتروشیمیایی می‌شوند. درک و پیش‌بینی رفتار دینامیکی سامانه‌های MFC برای توسعه بیشتر و کاربردهای میدانی آن‌ها بسیار مهم است. مفاهیم و رویکردهای مدل‌سازی متفاوتی برای سامانه‌های MFC پیشنهاد شده است که هر کدام برتری‌ها و محدودیت‌های خاص خود را دارند. افزایش مقیاس MFCها نیازمند دیدگاه‌های مهندسی برای تعیین شرایط عملیاتی بهینه برای عملکرد بالاتر و بازیابی انرژی است. این مقاله مروری بر رویکردهای مدل‌سازی و شگردهای تجربی مورد استفاده برای نظارت بر سامانه‌های MFC، از جمله مدل‌های جعبه سیاه، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، منطق فازی، و ابزارهای محاسباتی پیشرفته مانند دینامیک سیالات محاسباتی و مدل‌های سه‌بعدی را ارائه می‌کند [۸، ۱۱].

مدل‌سازی پیل‌های سوختی میکروبی شامل اثرات بیولوژیکی، انتقال جرم، انرژی و بار در سمت آند و کاتد است که در شکل‌های (۲) و (۳) رابطه بین قسمت‌های مختلف نشان داده شده است. مدل‌های ریاضی نه تنها می‌توانند به درک تأثیر مشخصه‌های مختلف عملیاتی، طراحی و بیولوژیکی مؤثر بر عملکرد MFC کمک کنند، بلکه به بهینه‌سازی، پیکربندی‌های راکتور جدید و کمک به ارتقای فناوری کمک می‌کنند. علاوه بر این مدل‌سازی منجر به طراحی، افزایش مقیاس و کنترل بهتر MFCها می‌شود [۱۲].

است. نیز، تعادل بین زمان محاسبات مورد نیاز و دقت نتایج بسیار مهم است. از آنجایی که مدل‌های پیچیده معمولاً زمان بیشتری برای محاسبه می‌طلبند، توانایی تولید نتایج دقیق در زمان مناسب، نقطه مهمی برای ارزیابی این مدل‌ها است. بنابراین، توسعه مدل‌های ریاضی که هم‌چنین قادر به پیش‌بینی دقیق رفتارهای سامانه در زمان مناسب هستند، بسیار مهم است. این مدل‌ها می‌توانند به پژوهشگران کمک کنند تا عملکرد MFC را بهبود دهند و به راه‌حل‌های بهینه برای تنظیم مشخصه‌های مختلف و بهبود کارایی این سامانه‌ها دست پیدا کنند [۱۱].



شکل ۲. ارتباط بین فرایندهای مختلف در مدل‌سازی پیل سوختی میکروبی.
Figure 2. Relationship between different processes in microbial fuel cell modeling.



شکل ۳. اثرات تقابل مشخصه‌های مختلف در پیل سوختی میکروبی.
Figure 3. Interaction effects of different parameters in microbial fuel cell.

۲-۱ انتخاب ساختار مدل

به دست آمده از نتایج آزمایشگاهی با نتایج مدل ارائه شده مقایسه می‌شود. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل چقدر موفق بوده است و چه میزان قادر به توصیف و پیش‌بینی رفتار سامانه در شرایط واقعی است.

در صورتی که مدل بتواند نتایج آزمایشگاهی را با دقت و صحیح پیش‌بینی کند، می‌توان از صحت و قابلیت اعتماد آن در شرایط واقعی اطمینان حاصل کرد. اگرچه همواره ممکن است مدل‌ها نیاز به بهبود داشته باشند؛ اما ارزیابی دقیق و صحیح مدل‌ها بسیار مهم است.

در انتخاب ساختار مدل، اولین گام حل معادلات ریاضی برای توصیف روند مدل‌سازی است. برای یک پیل سوختی میکروبی باید موازنه جرم و انرژی از سامانه، سینتیک واکنش و واکنش الکتروشیمیایی در نظر گرفته شود. این معادلات می‌توانند براساس اطلاعات جمع‌آوری شده از مقالات یا فرضیات ساده شده از نتایج آزمایشگاهی تعیین شوند، در نتیجه انتخاب ساختار مدل به پیچیدگی مدل وابسته است.

۲-۲ تخمین مشخصه‌ها

هنگامی که ساختار برای مدل‌سازی انتخاب می‌شود که معمولاً تعدادی از مشخصه‌ها نامشخص هستند که مرحله بعدی مدل‌سازی، شناسایی و تخمین مشخصه‌ها است. تخمین مشخصه‌ها مشتمل بر تخمین مقادیر مشخصه‌های مدل براساس داده‌های اندازه‌گیری یا تجربی است. در بیشتر موارد، تخمین مشخصه‌ها دارای یک راه‌حل منحصر به فرد به دلیل عدم اطمینان از داده‌های آزمایشگاهی یا تجربی نیست؛ در نتیجه تخمین مشخصه‌ها همشبه به فاصله اطمینانی بیان می‌شود.

۲-۴ اهداف مدل‌سازی

از مهم‌ترین اهداف مدل‌سازی در MFCها می‌توان موارد را برشمرد [۱۴-۱۲]:

ابزاری مهم برای پیش‌بینی رفتار متغیرهای سامانه

طراحی و بهینه‌سازی

کاهش زمان

صرفه‌جویی در هزینه‌ها

اهداف کنترلی

۲-۳ ارزیابی و صحت‌سنجی مدل

صحت‌سنجی مدل‌های ریاضی برای سامانه‌های MFC یک مرحله بسیار ضروری است که برای اعتماد به دقت و قابلیت اعمال آن‌ها در شرایط واقعی ضروری است. این مرحله معمولاً شامل چندین گام به شرح زیر است:

ارزیابی مدل: در این مرحله، مدل ریاضی برای توصیف عملکرد سامانه MFC ارزیابی می‌شود. این ارزیابی شامل بررسی دقت و کارایی مدل در پیش‌بینی و شبیه‌سازی نتایج تجربی و نتایج واقعی از سامانه مورد بررسی است.

ارزیابی حل عددی: در مدل‌های ریاضی معمولاً برای حل معادلات و توصیف رفتار سامانه از روش‌های عددی استفاده می‌شود. در این مرحله، دقت و صحت روش‌های عددی مورد استفاده در مدل بررسی می‌شود که شامل بررسی دقت حل عددی معادلات و استفاده از روش‌های مناسب برای تضمین دقت نتایج است.

مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی: در مرحله آخر، داده‌های

۳. مدل‌های ارائه شده برای پیل سوختی میکروبی

بیشتر تحقیقات انجام شده در زمینه MFC تاکنون به صورت آزمایشگاهی بوده‌اند. تعداد مدل‌ها و شبیه‌سازی‌های مرتبط با MFCها محدود هستند. یکی از نخستین مدل‌های ساخته شده در این زمینه به دست ژانگ و هالم در سال ۱۹۹۵ بود؛ این مدل، یک مدل تک‌بعدی و متغیر با زمان بوده و برای انتقال الکترون از واسطه خارجی استفاده کرده است. تأثیرات واسطه خارجی بر روی توان MFC نیز در این مدل مورد بررسی قرار گرفته است. این مدل بیشتر برای اهداف کنترلی، مانیتورینگ، پیش‌بینی تغییرات جریان یا توان، غلظت واسطه خارجی و سایر مشخصه‌های اصلی طراحی شده است. با توجه به این‌که MFCهای مدرن از واسطه خارجی استفاده نمی‌کنند، مدل‌سازی این نوع سامانه زیاد استفاده نمی‌شود. در نتیجه، بیشتر تحقیقات اخیر بر روی مدل‌سازی MFCهای بدون واسطه تمرکز داشته‌اند [۱۵].

مارکوس و همکارانش یک مدل دینامیکی تک‌بعدی را برای یک

مواد واسطه مدلسازی کرده است [۱۹]. هم‌چنین، گروه دیگری به نام ون و همکارانش، یک مدل الکتروشیمیایی پایه براساس منحنی قطبش پیل سوختی میکروبی توسعه داده‌اند. این مدل قابل استفاده برای تجزیه و تحلیل افت‌های تغییرات ولتاژ در شرایط عملیاتی مختلف است [۲۰]. هم‌چنین، در سال ۲۰۱۰ زنگ^۲ و همکارانش مدلی ارائه کردند که از یک پیل دومحفظه‌ای و با سوبسترا استات بهره‌مند است. این مدل با توجه به شباهت MFCها با پیل‌های سوختی شیمیایی مرسوم براساس مدل‌های موجود برای پیل‌های سوختی شیمیایی ارائه شده است [۲۱].

پیکرنیو و همکاران نیز در سال ۲۰۱۰ مدلی ساده‌تر را معرفی کردند که رفتار MFCها با پیل‌های معلق و انتقال الکترون از پیل‌های میکروبی به آند با واسطه‌های قابل انتشار را مدلسازی می‌کند. این مدل براساس موازنه جرم برای چندگونه شیمیایی حل شده در آب به‌عنوان سوبسترا و اکسیدشده و کاهش واسطه ساخته شده است [۱۹].

هم‌چنین، پینتو و همکاران در سال ۲۰۱۰ یک مدل با در نظر گرفتن دو گونه میکروبی آندوفیلیک^۳ و متانوژنیک^۴ ارائه کردند. این مدل، نسخه ساده‌تر مدل پیکرنیو و همکاران (۲۰۰۷) است که در آن اثر مقاومت خارجی و بارگذاری آلی بر توان خروجی پیل و کارکرد درازمدت آن بررسی شده است [۲۲ و ۲۳].

در سال ۲۰۱۳، فنگ^۵ و همکاران با استفاده از شبکه‌های عصبی، مدلسازی غیرخطی پیل‌های سوختی میکروبی را انجام دادند که نتایج آن با نتایج آزمایشگاهی تطابق خوبی دارد. این نتایج نشان می‌دهد که مدل black-box برای مدلسازی MFCها قابل استفاده است [۲۴].

در سال ۲۰۱۶، شیکی او^۶ و همکاران با اجرای آزمایش‌ها و استفاده از شبیه‌سازی‌های محاسباتی، عملکرد MFCها را در یک محفظه کاتد هوا و باتوجه به محدودیت‌های موجود در محفظه کاتد، درزمینه‌های تولید جریان، توان خروجی، انتقال جرم، رقابت زیست‌توده و رشد بیوفیلم تجزیه و تحلیل کردند. هدف آن‌ها از مدلسازی و آزمایش‌های مرتبط، توصیف و تحلیل ارتباط بین چندین عامل بود و شناسایی عوامل اساسی که بر کاهش تقاضای اکسیژن شیمیایی و

MFC با در نظر گرفتن واکنش بیوالکتروشیمیایی ارائه دادند. این مدل بر پایه انتقال جرم، قانون اهم و مدل نرست-مونود برای بیان سینتیک واکنش ساخته شده است. در این مدل، برخلاف بسیاری از تحقیقات دیگر سازوکار هدایت مستقیم الکترون در بیوفیلم تحت تأثیر میدان پتانسیل الکتریکی مدنظر قرار گرفته است. قانون اهم و ضریب هدایت الکتریکی بیوفیلم به‌عنوان عوامل تعیین‌کننده برای رسانایی آن مدلسازی شده‌اند [۱۶].

در سال ۲۰۰۷، پیکرنیو و همکاران یک مدل جدید برای MFCها ارائه دادند که این مدل بسیار جامع و کامل است [۱۷]. این مدل به گونه‌های مختلف میکروبی معلق^۱ و چسبیده به سطح آند در مختصات تک‌بعدی، دوبعدی و سه‌بعدی توجه کرده است. هم‌چنین، این مدل امکان استفاده از چندین گونه میکروبی را به‌صورت معلق و بیوفیلم فراهم می‌کند. در آن تعداد گونه‌های شیمیایی محلول، تحت نیاز هیچ محدودیتی نیست و واکنش‌های زیست‌شناختی، شیمیایی و الکتروشیمیایی در حجم مایع آنولیت، بیوفیلم و سطح الکتروود انجام می‌شود. این پژوهش نیز از فرض انتقال الکترون به‌وسیله مواد واسطه استفاده کرده است [۱۷].

در سال ۲۰۱۰، پیکرنیو و همکاران دو مطالعه دیگر را ارائه دادند که هر دو برپایه انتقال الکترون به‌وسیله مواد واسطه انجام شده‌اند [۱۸ و ۱۹]. آنان با ارائه یک مدل دوبعدی و تنها با در نظر گرفتن گروه‌های میکروبی معلق، مشخصه‌های MFC را براساس نمودارهای قطبش و توان-جریان و تغییرات زمانی در غلظت سوبسترا و مواد واسطه بررسی کردند. این مطالعه نیز رفتار MFC را در مقادیر مختلف مقاومت الکتریکی، مقاومت انتقال جرم، غلظت سوبسترا و مواد واسطه تعیین شده بررسی کرد و روندهای اولیه جریان تولیدی به‌وسیله حالت‌های مختلف اکسایش ماده واسطه را مشخص کرد. در این پژوهش از گلوکز به‌عنوان سوبسترا و از فریسانید به‌عنوان الکترون گیرنده نهایی استفاده شده است [۱۸].

در سال ۲۰۱۰، این گروه پژوهشی مدل دیگری را ارائه کرد که برای اولین بار از ترکیب معادلات و روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی، موازنه بار و جرم، معادله نرست-پلانک، سازوکار جابه‌جایی و الکترون‌خنشایی، تأثیر تغییرات pH در بیوفیلم و هیدرودینامیک جریان استفاده کرد. این مدل نیز مانند مدل‌های قبلی، انتقال الکترون از سطح میکروب‌ها به سطح آند را با استفاده از

2. Zeng
 3. Anodophilic
 4. Methanogenic
 5. Feng
 6. Shiqi

1. Suspended

توان خروجی تأثیر می‌گذارند، با هدف به‌دست‌آوردن حداکثر توان برای طراحی بهبودیافته MFCها بود. این مدل به تحلیل رفتار کاتد در حالت‌های پایدار و گذرا، به‌ویژه تأثیر انتقال جرم بر عملکرد MFC و رشد میکروبی تمرکز داشت [۲۵]. در این مدل، کاتد از لایه‌های متعدد تشکیل شده بود، هر کدام دارای خواص فیزیکی منحصربه‌فرد بودند و مرزهای گسسته بین لایه‌ها را در نظر گرفتند. این فرض به‌منظور ساده‌تر کردن روابط کمتر تعریف‌شده بین لایه‌های کاتد در یک MFC واقعی به‌کار رفت. همچنین فرض شد که تمام واکنش‌های کاتدی در لایه کاتالیزور یا بیوفیلیم اتفاق می‌افتد. باتوجه‌به وجود زیست‌توده هوازی اتوتروف در بیوفیلیم کاتدی و همچنین یک کاتالیزور فلزی، توزیع الکترون بین دو سینک را در مدل قرار دادند. واکنش کاهش اکسیژن در لایه کاتالیزور به‌طور کاملاً الکتروشیمیایی بود و فرض شد که هیچ کاتیون آزادی در واکنش کاهش اکسیژن^۱ شرکت نکرده است. همچنین، واکنش‌دهنده‌ای برای باکتری‌های اتوتروف هوازی^۲ مشخص نکردند، باکتری‌های اتوتروف هوازی به‌عنوان یک بیوکاتالیست در نظر گرفته شد و با کاتالیزور فلزی برای پذیرش الکترون‌ها رقابت می‌کرد. با این حال، مصرف الکترون باکتری‌های اتوتروف هوازی کمتر از ۱۰ درصد نرخ کاتالیزور فلزی بود. در مدل گذرا درصد اولیه غلظت باکتری‌های اتوتروف هوازی به‌عنوان ۱۵ درصد در نظر گرفته و بدان اجازه داده شد تا با رشد بیوفیلیم تغییر کند. انتقال الکترون در بیوفیلیم را به‌طور گسترده بررسی کردند و چندین نظریه برای توصیف سازوکارهایی که الکترون‌ها از میکروب‌ها به یک الکتروود منتقل می‌شوند، ارائه کردند که شامل شاتل‌های شیمیایی تولیدشده ریزاندامگان، نانوسیم‌های پروتئینی و آنزیم‌های ردوکس فعال شیمیایی بودند که از یک منبع خارجی اضافه می‌شدند. مدل تک‌بعدی چندگونه‌ای حالت پایدار را برای بررسی رابطه بین چگالی توان و پتانسیل‌های الکتروشیمیایی ارائه کردند که نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی تطابق داشتند که نشان می‌دهد مازاد پتانسیل‌های غالب از بخش کاتدی به‌جای بخش آندی در MFC هستند. علاوه‌بر مدل حالت پایدار، یک مدل تک‌بعدی چندگونه‌ای گذرا برای مدل‌سازی مایع توده‌ای کاتد فرموله شد. مقدار سهم حذف اکسیژن و مصرف استات زیست‌توده کاتدی و زیست‌توده

معلق قادر به مقایسه کمی با مدل گذرا بود. اسفندیاری و همکاران^۳ در سال ۲۰۱۷، یک MFC با گونه میکروبی خاص و سوبسترا لاکتات مدل‌سازی کرده‌اند که MFC شامل سه بخش توده مایع در محفظه آند، بیوفیلیم متصل به الکتروود آند و توده مایع در محفظه کاتد، در نظر گرفته‌اند. همچنین، pH در توده مایع محفظه‌های کاتد و آند و همچنین دمای کل سامانه را ۳۰ درجه سلسیوس ثابت فرض کردند. در MFC الکترون‌دهنده (سوبسترا) و گیرنده الکترون (بیوفیلیم رسانا) تأثیر قابل‌توجهی در مصرف سوبسترا و سرعت تولید الکترون دارند. بر این اساس، با ترکیب معادلات نرنست و مونود، میزان مصرف سوبسترا را به‌دست آوردند. در بیوفیلیم فرض بر این بود که سوبسترا از توده مایع به بیوفیلیم، پخش و سپس به‌وسیله زیست‌توده فعال، اکسید می‌شود و CO₂ و H⁺ تولیدشده به توده مایع پخش می‌شود، بنابراین موازنه جرم در بیوفیلیم را به پنج صورت: زیست‌توده فعال، زیست‌توده غیرفعال، سوبسترا، CO₂ و H⁺ ارائه کردند. همچنین باتوجه‌به این که تغییرات pH در محفظه کاتد ثابت است، بنابراین، تنها تغییر گونه در محفظه کاتد اکسیژن محلول است؛ موازنه جرمی اکسیژن محلول در محفظه کاتد را نیز ارائه کردند. آنان برای تأیید پیش‌بینی‌های مدل پیشنهادی، ولتاژ و جریان MFC با زمان را اندازه‌گیری می‌کردند. این معادلات را با استفاده از حل‌کننده Ode23 در متلب نسخه ۲۰۱۴ حل کردند. باتوجه‌به نتایجی که مشاهده کردند تطابق بسیار خوبی بین مقادیر پیش‌بینی‌شده و آزمایشگاهی وجود داشت [۱۳]. همچنین، اسفندیاری و همکاران در سال ۲۰۱۷، مدل ریاضی ارائه‌شده را برای یک MFC دومحفظه دسته‌ای با کشت خالص شوانلا^۴ به عملیات پیوسته گسترش دادند. در MFC پیوسته‌ای که انتخاب کردند لاکتات به‌عنوان سوبسترا، شوانلا به‌عنوان عامل میکروبی و اکسیژن هوا به‌عنوان گیرنده الکترون نهایی در محفظه کاتد استفاده شد، که تطابق خوبی بین داده‌های پیش‌بینی‌شده و تجربی جریان و ولتاژ تولیدشده با MFC و همچنین سطح زیرلایه و غلظت دی‌اکسید کربن در حجم مایع محفظه آند MFC مشاهده کردند [۱۲].

کاپوداگلیو^۵ در سال ۲۰۱۷، یک مدل ریاضی یکپارچه را معرفی می‌کند که به چالش‌های مربوط به کاربرد MFC در تصفیه پساب می‌پردازد. این مدل پیکربندی راکتور، طرح‌های عملیاتی، مشخصات

3. Esfandiyari
4. Shewenella
5. Capodaglio

1. Oxygen Reduction Reaction (ORR)
2. Autotrophic Aerobic Biomass (AAB)

بهینه‌سازی طراحی‌های MFC برای کاربردهای حسگر زیستی تقویت می‌کند [۲۷ و ۲۸].

در سال ۲۰۱۸، لین و همکارانش مدل ریاضی نوآورانه‌ای را برای MFCها با کاتد هوا معرفی کردند. هدف از این مدل، پیش‌بینی دقیق جریان الکتریکی، تولید برق و کارایی انرژی در زیرمجموعه‌ای از شرایط عملیاتی است. مدل پیشنهادی براساس مدل فرتر تعدیل‌شده‌ای است که با معادله باتلر-ولمر ادغام شده تا عملکرد الکتروشیمیایی MFCها را با دقت بیشتری توصیف کند. این مدل دربرگیرنده استفاده از مواد مغذی، غلظت‌های زیستی معلق و متصل و همچنین تولید برق در شرایط عملیاتی هم‌دستی و هم‌مدام است [۲۹].

در سال ۲۰۱۹، سیدارت گادکاری^۴ و همکاران، یک مدل ریاضی دوبعدی را برای توصیف و پیش‌بینی عملکرد دینامیکی MFC کاتد هوا با برس فیبر گرافیتی - که به‌عنوان آند استفاده می‌شود - توسعه دادند. این مدل شامل ترکیب موازنه بار یونی و الکترونیکی و سینتیک انتقال بار در آند و کاتد بود. راکتور در حالت تغذیه دسته‌ای کار می‌کرد و آند برس با تخلخل بالا (۹۵ درصد تخلخل) و سطح بزرگ به‌عنوان یک ماتریس متخلخل مدل‌سازی شد. در این مدل آنولیت به ماتریکس متخلخل نفوذ می‌کرد و بیوفیلم روی الیاف قلم‌موی بستر را اکسید می‌کرد. این مدل برپایه فرضیاتی توسعه یافت که شامل تغییرات ناچیز دما و pH، باقی‌ماندن دی‌اکسید کربن آزادشده در طی اکسایش بستر آند در محلول توده حل‌شده، پخش‌نشدن استات و CO₂ در محفظه آند و O₂ در مجموعه هوا-کاتد، استات تنها بستردهنده الکترون در آنولیت، تغییر نکردن تخلخل مؤثر برس آند با تغییر غلظت باکتری یا بستر، واکنش‌های اکسایش و کاهش ناچیز به ترتیب در سوپسترا در آند و اکسیژن در کاتد بود. این مدل‌سازی از معادلات قانون اهم برای انتقال الکترون‌ها در فاز جامد و انتقال یون‌ها در فاز الکترولیت، مقادیر مؤثر رسانایی برای دو فاز با معادله بروگمن و چگالی جریان در آند برس متخلخل با فرض سینتیک مونود برای رشد باکتری را از معادله باتلر-ولمر به‌دست آورد. این مدل تعادل جرم سوپسترا (استات) و ریزاندامگان در آند برس را نیز مدل‌کرد و انتقال جرم هوا را (متشکل از اکسیژن، نیتروژن و آب) از راه الکتروود انتشار گاز (کاتد) با استفاده از مدل انتشار متوسط مخلوط بیان کرد. این مدل سینتیک انتقال بار و

الکتروشیمیایی و میکروبیولوژیکی، روش‌های بهینه‌سازی و استراتژی‌های مدل‌سازی را در نظر می‌گیرد. هدف آن ارائه یک روی‌کرد چندرشته‌ای و چنددیدگاه برای شبیه‌سازی جمعیت میکروبیولوژیکی پیچیده و بسترهای واقعی است که به یک سامانه MFC تغذیه می‌دهند. این مدل اجزای مدل ASM2d را که سامانه‌های تصفیه بیولوژیکی تغذیه‌شده با بسترهای پیچیده را نشان می‌دهد و مدل پینتو^۱ که به‌طور خاص برای MFCهای تغذیه‌شده با استات توسعه داده شده است، ادغام می‌کند. نویسندگان این مدل را برای شبیه‌سازی رفتار ریزاندامگان، تجزیه مواد آلی، جریان و تولید متان در یک سامانه آزمایشگاهی MFC با استفاده از مشاهدات تجربی برای کالیبره کردن (واسنجی) و مقایسه به‌کار بردند. نتایج، نشان می‌دهد که مدل یکپارچه نشان‌دهنده گامی روبه‌جلو در توسعه یک مدل شبیه‌سازی MFC جامع‌تر است. با این حال، نویسندگان نیاز به اعتبارسنجی بیشتری را از سامانه‌های MFC مشابهی که با بسترهای آلی مختلف تغذیه می‌شوند، تأیید می‌کنند. به‌طور خلاصه، این مقاله نتایج ارزشمندی را در مورد چالش‌ها، برتری‌های بالقوه و توسعه یک مدل ریاضی یکپارچه برای شبیه‌سازی فرایندهای MFC در تصفیه پساب ارائه می‌کند که یک راه امیدوارکننده برای تولید انرژی پایدار و اصلاح محیط زیست است [۲۶].

در مطالعه ماساگلیا^۲ در سال ۲۰۱۷، تأکید ویژه‌ای بر اهمیت شبیه‌سازی دینامیک سیالات در فرایند بهینه‌سازی ساختارهای MFC برای کاربردهای حسگری زیستی شده است. این مقاله نشان می‌دهد که چگونه توزیع سیالات در دستگاه با عملکرد و حساسیت آن ارتباط دارد و بر این اساس، پتانسیل MFCهای قطره‌ای را به‌عنوان حسگرهای زیستی کارآمد، شناسایی می‌کند. همچنین، این مطالعه به بررسی چگونگی تأثیر تغییرات غلظت استات سدیم بر پاسخ‌های چگالی جریان است. این بررسی نتایج جدیدی را در مورد حساسیت MFها ارائه و تأثیر قابل توجه دینامیک سیالات را بر عملکرد دستگاه مشخص می‌کند [۲۷]. افزون بر این، اکتشافات مربوط به طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی^۳، داده‌های ارزشمندی در مورد مقاومت داخلی و سازوکارهای انتقال بار در داخل MFCها فراهم می‌آورد. این اطلاعات نقش کلیدی دینامیک سیالات را در

1. Pinto
2. Massaglia
3. EIS

4. Siddharth Gadkari

موازنه جرم را در هر دو محفظه آند و کاتد حساب کرد و به‌طور مؤثر عملکرد سامانه را از نظر تولید برق، راندمان کولمبی و نرخ حذف بستر پیش‌بینی کرد. همچنین، تأثیر دو مشخصه طراحی (فاصله الکترود و اندازه آند) و یک مشخصه عملیاتی (غلظت اولیه سوبسترا) بر عملکرد سامانه بررسی و مشخص شد که چگالی توان MFC به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. همچنین نشان داد که تعادل بیش‌ازحد پتانسیل محلی و چگالی جریان، به حفظ نرخ واکنش ثابت حتی پس‌از کاهش اندازه آند کمک می‌کند [۳۰].

در سال ۲۰۱۹، آشیش یواله^۱ و همکاران به تحلیل دینامیکی و کنترل مدل چندگانه MFC پیوسته پرداختند. آن‌ها مدل ریاضی ارائه‌شده اسفندیاری و همکاران را برای در نظر گرفتن پدیده‌های اضافی مانند انتقال پروتون‌ها از بیوفیلیم به توده و انتشار بعدی آن‌ها به محفظه کاتد به‌روزرسانی کردند. مدل شامل واکنش‌های اکسایش و کاهش در الکترودهای آند و کاتد، انتقال سوبسترا، پروتون‌ها و گونه‌های CO₂ بین بیوفیلیم و بخش توده مایع، و انتقال الکترون‌ها به محفظه کاتد بود. برای توسعه این مدل، فرضیاتی گرفته شد که شامل منبع کربن به‌خوبی مخلوط‌شده در توده آندی، حضور فقط فاز مایع در محفظه آند، زیست‌توده در محفظه آندی در یک‌لایه انباشته‌شده در اطراف الکترود آند، حمل‌ونقل پروتون‌ها فقط با غشا، دمای پیل ثابت (۲۹۸ کلوین)، و تأثیر تغییرات pH محفظه آندی نادیده گرفته شد. همچنین، تجزیه و تحلیل دینامیکی برای دو متغیر سرعت جریان سوبسترای ورودی و غلظت اولیه سوبسترا انجام و مشخص شد که برای کنترل سامانه با تعدد ورودی، یک طراحی کنترل غیرخطی قوی نیاز است [۳۱]. سِرا^۲ و همکاران در سال ۲۰۱۹، توسعه مدل الکتریکی پایدار را برای MFC‌ها و کاربردهای آن در تولید برق برای مناطق روستایی و دورافتاده، به‌ویژه در تصفیه پساب بررسی کردند. هدف اصلی این پژوهش ارائه یک روش برای یافتن مدل مناسب MFC برای تحقیقات ردیابی نقطه حداکثر توان و اطمینان از عملکرد بهینه آن به‌عنوان منبع انرژی است. مطالعه شامل تجزیه و تحلیل منحنی‌های پلاریزاسیون و توسعه یک مدل ریاضی برای تفکیک عملکرد MFC در تولید انرژی است. همچنین به کاربردهای این فناوری برای تأمین انرژی حسگرهای بسیار کم‌توان و کم‌توان برای نظارت و کنترل آب می‌پردازد و پتانسیل

افزایش در دسترسی به انرژی و امکانات اطمینان‌پذیر را در تنظیمات از راه دور برجسته می‌کند [۳۲].

در سال ۲۰۲۲ تیانچنگ اویانگ^۳ و همکاران، یک حالت خاص از MFC را که پیل سوختی میکروبی میکروسیال^۴ (MMFC) کاتدی دو جمعیتی بود، با استفاده از مدل‌سازی ریاضی، بررسی و عملکرد آن را ارزیابی کردند. این مدل با روش اجزای محدود ساخته شده بود و رشد ریزاندامگان دو جمعیتی (اگزوالکتروژن‌ها و باکتری‌های بی‌هوازی اختیاری) در سینتیک واکنش بیوالکتروشیمیایی جفت شد. آن‌ها یک مدل عددی دوبعدی از MMFC دو جمعیتی کاتدی ایجاد کردند تا تأثیرات عوامل حیاتی مانند pH، تخلخل الکترود و اکسیژن محلول بر عملکرد MMFC بررسی شود. با توجه به اهمیت برخی از مشخصه‌ها در مدل‌سازی، فرضیاتی برای صرفه‌جویی در هزینه‌ها در مدل خود ارائه کردند. این فرضیات شامل ثابت ماندن دما، استفاده از اسات به‌عنوان منبع کربنی، عدم پخش هوا به آند، اتصال باکتری‌ها به‌داخل الکترودها و عدم تأثیر توزیع باکتری بر تخلخل آند و کاتد بودند. آن‌ها از معادلات ناویر استوکس برای توصیف جریان سیال و معادله برینکمن^۵ برای انتقال جرم استفاده کردند. همچنین از قانون اهم برای توصیف انتقال یون‌ها و الکترون‌ها استفاده و از معادله همرفت-انتشار و نظریه ماکسول-استفان برای توصیف انتقال جرم استفاده شد. با استفاده از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics، مدل MMFC با روش اجزای محدود ساخته شد. نتایج اصلی این مطالعه شامل تجمع یون‌های هیدروژن و هیدروکسید، تأثیر pH بر عملکرد آند MMFC کاتد هوا، تأثیر تخلخل الکترود بر روی MMFC، و تأثیر تنظیم سریع عوامل محیطی بر شرایط بهینه برای تکثیر میکروبی بود [۳۳].

جی ویلاس بواس^۶ و همکاران در سال ۲۰۲۲، یک مدل یک‌بعدی برای پیل سوختی میکروبی تک‌محفظه^۷ (SCMFC) در حالت دسته‌ای را توسعه دادند. این مدل ساده و آسان بود و با استفاده از ابزارهای عددی مانند Excel و Matlab پیاده‌سازی شد. آنان از فرضیاتی برای ساده‌سازی استفاده و مدل را برای تخمین سریع عملکرد الکتروشیمیایی SCMFC و تجزیه و تحلیل عملکرد آن در شرایط عملیاتی مختلف استفاده کردند. این مدل توانایی پیش‌بینی

3. Tiancheng Ouyang

4. Microfluidic Microbial Fuel Cell (MMFC)

5. Brinkman Number

6. J. Vilas Boas

7. Single Chamber Microbial Fuel Cell (SCMFC)

1. Ashish Yewale

2. Serra

مخمر و فاضلاب طراحی کرد. اهداف آن شامل ایجاد مدل دقیق از MFC مبتنی بر ریزجلبک با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی، شناسایی مشخصه‌های بهینه MFC مبتنی بر ریزجلبک با استفاده از یک الگوریتم تحقیقات مبتنی بر پزشکی و بهبود عملکرد MFC مبتنی بر ریزجلبک بود. پس از مقایسه مشخصه‌های بهینه و عملکرد بهتر با روش سطح پاسخ و داده‌های اندازه‌گیری، عملکرد MMFC با ادغام ANN و FBI به طور قابل توجهی افزایش یافت و از عملکرد بهینه‌شده استفاده شد [۳۵].

در نهایت به طور خلاصه در جدول (۱) برخی از معادله‌های پرکاربرد در مدل‌سازی ریاضی که بر روی پیل‌های سوختی میکروبی استفاده شده، نشان داده شده است.

میانگین غلظت سوبسترا در بیوفیلم را نشان داد و ابزار مفیدی برای ارزیابی تأثیر شرایط عملیاتی و طراحی بر عملکرد سلول SCMFC عرضه کرد [۳۴].

انس طه سید^۱ در سال ۲۰۲۴، به مدل‌سازی و بهینه‌سازی MFC ریزجلبک با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی^۲ پرداخت و از رویکرد MFC مبتنی بر ریزجلبک استفاده کرد که با ترکیب فتوسنتز و MFC، انرژی پایدار و اقتصادی را استخراج می‌کند. همچنین، از هوش مصنوعی برای شناسایی بهترین عوامل عملیاتی در MFC ریزجلبک بهره برد. این پژوهش الگوریتم‌های مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی و تحقیقات مبتنی بر پزشکی را ترکیب کرد و مدل ANN را برای شبیه‌سازی چگالی توان و حذف COD از غلظت

جدول ۱. معادلات مهم در مدل‌سازی پیل سوختی میکروبی.

Table 1. Important equations in MFC models.

Equations	Type of Equation	Reference		
$I = \sigma \nabla \phi$	Current density equation	[30,33]	Load Balance	
$i = \nabla I$	current equation			
$i_s = \nabla I_s = \nabla(\sigma_{s,eff} \nabla \phi_s)$	Electrode current equation			
$i_l = \nabla I_l = \nabla(\sigma_{l,eff} \nabla \phi_l)$	Electrolyte current equation			
$i = i_{0,ref} \left[\exp\left(\frac{2.303}{b} \eta_{act}\right) - \exp\left(-\frac{2.303}{b} \eta_{act}\right) \right]$	current equation	[19]		
$I = \left(\int i_{cl} dx + \int i_{bio} dx \right) S_{area}$	Current density equation	[25]		
$E_{output} = E_{thermo} - \eta_{ohm} - \eta_{con} - \eta_{act}$ Or $V_{cell} = (E_c^0 - \eta_{c,act} - \eta_{c,con}) - (E_A^0 - \eta_{A,act} - \eta_{A,con}) - \eta_{ohm} $ Or $U_{cell} = E_{cell} - I_{cell} R_{cell} - \eta_{con} - \eta_{act}$	Output voltage equation	[12,13,25]		
$E_{output} = E_{thermo} - \frac{b}{2.303} \sinh^{-1} \left[\frac{I}{2I_{0,ref}} \right] - \left(\frac{d_m}{k_m} + \frac{d_{cell}}{k_{aq}} \right) I - \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{\frac{nFD_s D_{bk,s}}{L_l}}{\frac{nFD_s D_{bk,s}}{L_l} - I} \right)$	Output voltage equation	[31]		
$r_s = \mu \left(\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-F}{RT} \eta_{act}\right)} \right) \phi_a$	Substrate consumption rate equation (Nernst-Monod)	[12,13,31]		Kinetic equations
$q_m = q_{maxm} \frac{C_s}{C_s + K_{sm}}$	Monod kinetic equation	[30,33]		
$\mu = \mu_{max} \left(1 - e^{-\frac{C_s}{K_s}} \right)$	Tessier model	[13]		
$\mu = \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s}$	Monod model	[12,13,31,34]		
$\mu = \mu_{max} \frac{C_s}{2K_s}$	Blackman model	[13]		

1. Enas Taha Sayed

2. Artificial Neural Network (ANN)

Equations	Type of Equation	Reference	Mass Balance
$\varepsilon_{peff} \frac{\partial C_s}{\partial t} + \nabla(-D_{eff,a} \nabla C_s) = \frac{-a_a i_a}{nF} - q_m x_m$ $\frac{dx_a}{dt} = Y_a \frac{a_a i_a}{nF} x_a - K_{da} x_a$ $\frac{dx_m}{dt} = Y_m q_m x_m - K_{dm} x_m$	Mass balance for substrate and microbial population	[31]	
$\varepsilon_{pc} \frac{\partial}{\partial t} (\rho w_i) = \nabla \left(\rho D_i^m \nabla w_i + \rho w_i D_i^m \frac{\nabla M}{M} \right) + R_i$	Mass balance for air cathode	[31]	
$\frac{d}{dt} (\phi_a(t)) = Y_{ac} r_s(t) - b_{ina} \phi_a(t) + \frac{\phi_a(t)}{L(t)} \delta(t) - \frac{\phi_a(t)}{L(t)} \frac{d}{dt} (L(t))$	Active biomass mass balance in biofilm	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (\phi_i(t)) = b_{ina} \phi_a(t) + \delta(t) \frac{\phi_i(t)}{L(t)} - \frac{\phi_i(t)}{L(t)} \frac{d}{dt} (L(t))$	Inactive biomass mass balance in biofilm	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_s(t)) = \frac{D_s}{L_1 L(t)} (C_{sb}(t) - C_s(t)) - \rho r_s(t) - \frac{C_s(t)}{L(t)} \frac{d}{dt} (L(t))$	Substrate mass balance in biofilm	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_{co2}(t)) = \frac{D_{co2}}{L_1 L(t)} (C_{co2b}(t) - C_{co2}(t)) + 4\rho r_s(t) - \frac{C_{co2}(t)}{L(t)} \frac{d}{dt} (L(t))$	Mass balance for dissolved CO ₂ in biofilm	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_H(t)) = \frac{D_H}{L_1 L(t)} (C_{Hb}(t) - C_H(t)) + 12\rho r_s(t) - \frac{C_H(t)}{L(t)} \frac{d}{dt} (L(t))$	Mass balance for hydrogen ion in biofilm	[12,13,31]	
$\frac{dV_l(t)}{dt} = -A_m \frac{dL(t)}{dt}$	Changes in the volume of the liquid mass	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_{sb}(t)) = \frac{1}{V_l(t)} \left(\frac{-A_m}{L_1} D_s (C_{sb}(t) - C_s(t)) \right)$	Substrate mass balance in liquid mass (anolyte)	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_{sb}(t)) = \frac{1}{V_l(t)} \left(Q_a(t) C_{sin}(t) - Q_a(t) C_{sb}(t) - \frac{A_m}{L_1} D_s (C_{sb}(t) - C_s(t)) \right)$	Substrate mass balance in liquid mass (anolyte)	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_{co2b}(t)) = \frac{1}{V_l(t)} \left(\frac{-A_m}{L_1} D_{co2} (C_{co2b}(t) - C_{co2}(t)) \right)$	Mass balance for CO ₂ dissolved in liquid mass (anolyte)	[12,13,31]	
$\frac{d}{dt} (C_{co2b}(t)) = \frac{1}{V_l(t)} \left(Q_a(t) C_{co2in}(t) - Q_a(t) C_{co2b}(t) - \frac{A_m}{L_1} D_{co2} (C_{co2b}(t) - C_{co2}(t)) \right)$	Mass balance for CO ₂ dissolved in liquid mass (anolyte)	[12,13,31]	
$\frac{dC_{o2}}{dt} = k_1 a (C_{o2}^* - C_{o2}) - q_{o2} C_{o2}$	Mass balance for dissolved O ₂ in the cathode Chamber	[12,13,31]	
$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + r_i$	Mass Balance	[25]	
$\frac{dC_x^{AC}}{dt} = \mu C_x^{AC} - K_{dec} C_x^{AC}$	Biomass concentration equation	[34]	
$\frac{dC_s^{AC}}{dt} = \frac{1}{-Y_{x/s}} \frac{dC_x}{dt}$	Substrate concentration equation	[34]	

ORR	Oxygen reduction reaction
COD	Chemical oxygen demand
AAB	Autotrophic aerobic biomass
ASM2D	2D Activated sludge model No.
DO	Dissolved oxygen
MMFC	Microfluidic Microbial Fuel Cell
SCMFC	single chamber microbial fuel Cell (SCMFC)
EIS	Electrochemical Impedance Spectroscopy

جدول علائم

parameter	description
A_m	Contact surface of biofilm and electrode
b_{ina}	Inactivation coefficient
$C_{CO_2_0}$	The initial concentration of carbon dioxide in the bulk liquid
C_{H_0}	The initial concentration of hydrogen in the bulk liquid
$C_{CO_2_b}$	Carbon dioxide concentration in the bulk liquid
C_{S_b}	Substrate concentration in the bulk liquid
$C_{S_{in}}$	Substrate concentration entering the anode chamber
$C_{H_{in}}$	The concentration of carbon dioxide entering the anode chamber
D_{CO_2}	The diffusion coefficient of carbon dioxide in the liquid phase
D_H	The diffusion coefficient of hydrogen in the liquid phase
D_s	Substrate diffusion coefficient (lactate)
d^m	Membrane thickness
d^{cell}	The distance between the anode and cathode electrodes
E^{ka}	saturation potential
k_d	Separation coefficient
k_{1a}	Volume coefficient of total mass transfer of oxygen
L	Biofilm thickness
L_l	The thickness of the laminar sublayer
Q_a	Inlet flow rate to the liquid mass in the anode chamber
q_{O_2}	Oxygen uptake rate
R	Global constant of gases
ϕ_a	Volume fraction of active microbes
ϕ_i	Volume fraction of inactive microbes
η_{act}	Activation polarization
η_{ohm}	Ohmic polarization
η_{conc}	Concentration polarization
I	current density

معادلات ارائه شده در جدول بالا، برای مدل‌سازی MFC بررسی شده است. این معادلات شامل مدل‌های متنوعی برای جریان، ولتاژ، موازنه جرم، سرعت مصرف سوبسترا، تغییرات حجم توده مایع و مدل‌های دینامیک متنوع مرتبط با عملکرد MFC می‌شوند. این معادلات به عنوان ابزارهای قوی برای مدل‌سازی و پیش‌بینی عملکرد MFC می‌توانند به کار گرفته شوند. استفاده از این معادلات می‌تواند به پژوهشگران کمک کند تا با دقت بیشتری عملکرد MFC را بررسی و عوامل مختلفی از جمله جریان، ولتاژ، مصرف سوبسترا و تغییرات حجم توده مایع را بررسی کنند. این معادلات می‌توانند به عنوان ابزارهای حیاتی برای بهبود عملکرد و بهینه‌سازی طراحی MFC به کار گرفته شوند. در کل، این معادلات ابزارهای قدرتمندی برای تجزیه و تحلیل و پیش‌بینی عملکرد MFC به حساب می‌آیند و می‌توانند به عنوان ابزارهای مؤثری برای محققان و مهندسان استفاده شوند. بیشتر مدل‌های ارائه شامل معادلات دیفرانسیل معمولی و پارامترهای هستند که شامل معادلات حاکم بر فرایند MFC از جمله الکتروشیمی، بیولوژیکی و فیزیکی می‌شوند. این معادلات با استفاده از روش‌های مختلف محاسباتی به صورت عددی حل می‌شوند.

۴. نتیجه‌گیری

این مقاله به بررسی مدل‌های ریاضی مختلف برای پیل‌های سوختی میکروبی و ویژگی‌های آن‌ها پرداخته است. این مدل‌ها شامل مدل‌های یک‌بعدی، دو بعدی و سه بعدی برای تجزیه و تحلیل توزیع جمعیت‌های میکروبی ناهمگن در الکتروده‌های پیل‌های سوختی میکروبی، ترکیب معادلات باتلر-ولمر و سینتیک مونود برای محاسبه چگالی جریان‌های آنودی و کاتدی و توسعه مدل‌های الکتروشیمیایی برای تجزیه و تحلیل عملکرد پیل‌های سوختی میکروبی است که از جمله نتایج این مقاله است. هدف این مدل‌ها ارائه بینشی در مورد فعل و انفعالات و فرایندهای پیچیده درون پیل‌های سوختی میکروبی، از جمله پدیده‌های الکتروشیمیایی، بیولوژیکی و فیزیکی است و می‌تواند برای تحلیل و بهینه‌سازی عملکرد پیل‌های سوختی میکروبی استفاده شود.

جدول اختصارات

MFC	Microbial fuel cell
ANN	Artificial Neural Network

- [3] Logan, B. E., Hamelers, B., Rozendal, R., Schröder, U., Keller, J., Freguia, S., Aelterman, P., Verstraete, W., & Rabaey, K. (2006). Microbial fuel cells: Methodology and technology. *Environmental Science & Technology*, 40, 5181–5192.
- [4] Nourbakhsh, N., Zulficarzadeh, F., Pazuki, M., & Rezayani, M.J. (2018). Microbial Fuel Cell Technology in the Treatment of Industrial, and Municipal Wastewater, *Iranian Chemical Engineering Journal*. 17(99), 54-73, [In Persian].
- [5] Logan, B. E. (2006). Microbial fuel cells. *John Wiley & Sons*, New York.
- [6] Rabaey, K., & Verstraete, W. (2005). Microbial fuel cells: novel biotechnology for energy generation. *TRENDS Biotechnology*, 23, 291–298.
- [7] Esfandyari, M., Jafari, D., & Azami, H. (2023). Microbial fuel cells for energy production in wastewater treatment plants-a review. *Biofuels*. 1–11.
- [8] Sindhuja, M., Kumar, N. S., Sudha, V., & Harinipriya, S. (2016). Equivalent circuit modeling of microbial fuel cells using impedance spectroscopy. *Journal of Energy Storage*; 7, 136–146.
- [9] Deb, D., Patel, R., & Balas, V. E. (2020). A review of control-oriented bioelectrochemical mathematical models of microbial fuel cells. *Processes*, 8(5), 583.
- [10] Xia, C., Zhang, D., Pedrycz, W., Zhu, Y., & Guo, Y. (2018). Models for microbial fuel cells: a critical review. *Journal of Power Sources*, 373, 119–131.
- [11] Ortiz-Martínez, VM., Salar-García, MJ., De Los Ríos, AP., Hernández-Fernández, FJ., Egea, JA., & Lozano, LJ. (2015). Developments in microbial fuel cell modeling. *Chemical Engineering journal*, 271, 50–60.
- [12] Esfandyari, M., Fanaei, M. A., Gheshlaghi, R., & Mahdavi, M. A. (2017). Dynamic modeling of a continuous two-chamber microbial fuel cell with pure culture of *Shewanella*. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(33), 21198-21202.
- [13] Esfandyari, M., Fanaei, M. A., Gheshlaghi, R., & Mahdavi, M. A. (2017). Mathematical modeling of two-chamber batch microbial fuel cell with pure culture of *Shewanella*. *Chemical Engineering Research and Design*, 117, 34-42.
- [14] Esfandyari, M., Fanaei, M. A., Gheshlaghi, R., & Mahdavi, M. A. (2016). Neural network and neuro-fuzzy modeling to investigate the power density and Columbic efficiency of microbial fuel cell. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 58, 84-91.
- [15] Zhang, X. -C., & Halme, A. (1995). Modelling of a microbial fuel cell process. *Biotechnology Letters*, 17(8), 809–814.
- [16] Kato Marcus, A., Torres, C. I., & Rittmann, B. E. (2007). Conduction-based modeling of the biofilm anode of a microbial fuel cell. *Biotechnology Bioengineering*, 98, 1171–1182.

parameter	description
$\sigma_{l,eff}$	Conduction of the electrolyte phase
C_S	Substrate concentration in biofilm
C_{O_2}	Oxygen concentration
C_{CO_2}	Carbon dioxide concentration in biofilm
$C_{CO_2,a}$	Carbon dioxide concentration in the liquid phase
$C_{CO_2,g}$	Carbon dioxide concentration in the gas phase
$C_{CO_2,in}$	The concentration of carbon dioxide entering the anode chamber
$C_{O_2}^*$	Equilibrium concentration of oxygen in the liquid phase
C_H	Hydrogen concentration in biofilm
$E_{0,anode}$	Anode voltage in standard mode
$E_{0,cathode}$	Cathode voltage in standard mode
F	Faraday's constant
i	Electric current
i_l	Limited current
$i_{0,ref}$	Reference current
H^{cc}	Henry's solubility constant
K^m	Electrical conductivity of the membrane
K^{aq}	Electrical conductivity of anodic solution
K_S	Substrate saturation constant
r_{max}	Reaction rate constant
T	Process temperature
V_l	The volume of the bulk liquid
Y_{ac}	Bacterial efficiency
ρ	biomass density
σ	Conductivity
ϕ	Potential
i	Current
ϕ_s	Electrode phase potential
ϕ_l	Electrolyte phase potential
$\sigma_{s,eff}$	Electrode phase conduction

مراجع

- [1] Jadhav, D. A., Carmona-Martínez, A. A., Chendake, A. D., Pandit, S., & Pant, D. (2021). Modeling and optimization strategies towards performance enhancement of microbial fuel cells. *Bioresource Technology*, 320, 124256.
- [2] Vielstich, W., Lamm, A., & Gasteiger, H. (2003). Handbook of fuel cells. Fundamentals, technology, applications. *John Wiley & Sons*, New York.

- [17] Picioreanu, C., Head, I. M., Katuri, K. P., van Loosdrecht, M. C., & Scott, K. (2007). A computational model for biofilm-based microbial fuel cells. *Water Research*, 41, 2921–2940.
- [18] Picioreanu, C., van Loosdrecht, M. C., Curtis, T. P., & Scott, K. (2010). Model based evaluation of the effect of pH and electrode geometry on microbial fuel cell performance. *Bioelectrochemistry*, 78, 8–24.
- [19] Picioreanu, C., Katuri, K. P., Van Loosdrecht, M. C., Head, I. M., & Scott, K. (2010). Modelling microbial fuel cells with suspended cells and added electron transfer mediator. *Journal of Applied Electrochemistry*, 40, 151–162.
- [20] Wen, Q., Wu, Y., Cao, D., Zhao, L., & Sun, Q. (2009). Electricity generation and modeling of microbial fuel cell from continuous beer brewery wastewater. *Bioresource technology*, 100, 4171–4175.
- [21] Zeng, Y., Choo, Y. F., Kim, B. H., & Wu, P. (2010). Modelling and simulation of two-chamber microbial fuel cell. *Journal of Power Sources*, 195, 79–89.
- [22] Pinto, R. P., Srinivasan, B., Manuel, M. F., & Tartakovsky, B. (2010). A two-population bio-electrochemical model of a microbial fuel cell. *Bioresource technology*, 101, 5256–5265.
- [23] Pinto, R. P., Tartakovsky, B., & Srinivasan, B. (2012). Optimizing energy productivity of microbial electrochemical cells. *Journal of Process Control*, 22, 1079–1086.
- [24] Feng, Y., Kayode, O., & Harper Jr, W. F. (2013). Using microbial fuel cell output metrics and nonlinear modeling techniques for smart biosensing. *Science of The Total Environment*, 449, 223–228.
- [25] Ou, S., Zhao, Y., Aaron, D. S., Regan, J. M., & Mench, M. M. (2016). Modeling and validation of single-chamber microbial fuel cell cathode biofilm growth and response to oxidant gas composition. *Journal of Power Sources*, 328, 385–96.
- [26] Capodaglio, A. G., Ceconet, D., & Molognoni, D. (2017). An integrated mathematical model of microbial fuel cell processes: bioelectrochemical and microbiologic aspects. *Processes*, 5, 73.
- [27] Massaglia, G., Gerosa, M., Agostino, V., Cingolani, A., Sacco, A., Saracco, G., Margaria, G., & Quaglio, M. (2017). Fluid dynamic modeling for microbial fuel cell based biosensor optimization. *Fuel Cells*, 17, 627–634.
- [28] Yousefi, V., Mohebbi-Kalhari, D., & Samimi, A. (2019). Equivalent electrical circuit modeling of ceramic-based microbial fuel cells using the electrochemical impedance spectroscopy (EIS) analysis. *Journal of Renewable Energy and Environment*, 6(1), 21–28.
- [29] Lin, H., Wu, S., & Zhu, J. (2018). Modeling power generation and energy efficiencies in air-cathode microbial fuel cells based on freter equations. *Applied Science*, 8, 1983.
- [30] Gadkari, S., Gu, S., & Sadhukhan, J. (2019). Two-dimensional mathematical model of an air-cathode microbial fuel cell with graphite fiber brush anode. *Journal of Power Sources*, 441, 227145.
- [31] Yewale, A., Methekar, R., & Agrawal, S. (2019). Dynamic analysis and multiple model control of continuous microbial fuel cell (CMFC). *Chemical Engineering Research and Design*, 148, 403–416.
- [32] Serra, P. M. D., Espírito-Santo, A., & Magrinho, M. (2020). A steady-state electrical model of a microbial fuel cell through multiple-cycle polarization curves. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 117, 109439.
- [33] Ouyang, T., Hu, X., Shi, X., Liu, W., Lu, J., & Li, W. (2022). Mathematical modeling and performance evaluation of a cathodic bi-population microfluidic microbial fuel cell. *Energy conversion and management*, 267, 115900.
- [34] Boas, J. V., Oliveira, V. B., Simões, M., & Pinto, A. M. F. R. (2022). A 1D model for a single chamber microbial fuel cell. *Chemical Engineering Research and Design*, 184, 627–636.
- [35] Sayed, E. T., Rezk, H., Abdelkareem, M. A., & Olabi, A. G. (2024). Artificial neural network based modelling and optimization of microalgae microbial fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 52, 1015–1025.