

## مدل سازی معکوس حرکت باکتری اشریشیاکولی در خاک بوسیله مدل HYDRUS-1D با کاربرد معادله‌های تعادلی و غیر تعادلی حرکت املاح

مریم منیشداوی<sup>۱</sup>، علیرضا جعفرنژادی<sup>۲\*</sup>، غلامعباس صیاد<sup>۳</sup> و حسین شیرانی<sup>۴</sup>

۱- دانش آموخته کارشناسی ارشد خاک‌شناسی

۲- نویسنده مسئول، عضو هیئت علمی بخش تحقیقات خاک و آب مرکز تحقیقات و آموزش کشاورزی و منابع طبیعی خوزستان  
arjafarnejady@gmail.com

۳- عضو هیئت علمی گروه خاک‌شناسی دانشگاه شهید چمران اهواز

۴- عضو هیئت علمی گروه خاک‌شناسی دانشگاه ولی عصر رفسنجان

تاریخ پذیرش: ۹۳/۷/۲۹

تاریخ دریافت: ۹۲/۸/۳

### چکیده

به منظور برآورد میزان آلاینده‌گی باکتریایی در خاک (لوم رسی سیلتی) تیمار شده با کود مرغی، شبیه‌سازی حرکت (انتقال) باکتری اشریشیاکولی با استفاده از مدل‌سازی معکوس انجام گردید. در این پژوهش باکتری اشریشیاکولی به عنوان باکتری بیماری‌زا موجود در کود مرغی انتخاب گردید. برای این منظور، دو معادله تعادلی و غیر تعادلی با استفاده از مدل هایدروس یک بعدی به صورت عددی حل و واسنجی با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی به صورت معکوس انجام شد. نتایج نشان داد، در مراحل شبیه‌سازی و واسنجی، معادله غیر تعادلی، حرکت باکتری اشریشیاکولی در خاک را با دقت بیشتری نسبت به معادله تعادلی پیش‌بینی نمود. ضریب تعیین در مرحله واسنجی برای معادله‌های غیر تعادلی و تعادلی به ترتیب  $0.99$  و  $0.91$ ، و در مرحله اعتبار سنجی به ترتیب  $0.97$  و  $0.98$  بود. بنابراین معادله غیر تعادلی با کاربرد مدل‌سازی معکوس دارای دقت و توانایی بیشتر و بالاتری برای شبیه‌سازی حرکت باکتری اشریشیاکولی در خاک مورد مطالعه تعیین شد.

**کلید واژه‌ها:** انتقال باکتری اشریشیاکولی، شبیه‌سازی، کود مرغی، مدل هایدروس یک بعدی.

### Inverse Modeling of *E.coli* Mobility Through The Soil by HYDRUS-1D Code Using Equilibrium and Non-Equilibrium Equations

M. Maneshdavi<sup>1</sup>, A. Jafarnejadi<sup>2\*</sup>, Gh. Sayyad<sup>3</sup> and H. Shirani<sup>4</sup>.

1- Graduate Master of Soil Science

2\* - Scientific Member of Soil and Water Research Department Agricultural and Natural Resources Research Center of Khuzestan, Iran.

3- Scientific Member Department of Soil Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Khuzestan, Iran

4- Scientific Member Department of Soil Science, Vail-E-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Iran.

Received: 25 October 2013

Accepted: 21 October 2014

### Abstract

In order to estimate the amount of bacterial contamination in a soil (silty clay loam) treated with poultry manure, the mobility of *E.coli* bacteria was simulated using inverse modeling. The *E.coli* was selected for this study since it presents as a pathogenic bacteria in poultry manure. For this purpose,

two equilibrium (CDE) and non-equilibrium equations (NECDE) were numerically solved using HYDRUS-1D code and inversely calibrated with a laboratory experiment data. The NECDE equation could predict *E.Coli* mobility through the soil with more accuracy both in calibration and testing steps than CDE equation. The coefficient of determinations for NECDE and CDE equations were 0.99 and 0.91 for calibration step, and 0.97 and 0.98 for validating step, respectively. Therefore, NECDE equation with using inverse modeling could be a reliable equation for simulating *E.Coli* transport through the soil.

**Keywords:** Escherichia coli (E.coli) mobility, Simulation, poultry manure, HYDRUS-1D model.

#### مقدمه

این بخش را مشکل می‌سازد (فوپن و اسچیجون<sup>۳</sup>، ۲۰۰۶). آلودگی میکروبی در بیش از نیمی از چاه‌های آب آشامیدنی کشور ایالات متحده گزارش شده است. بر این اساس حدود ۷۵۰,۰۰۰ تا ۵/۹ میلیون مورد بیماری و ۱۴۰۰ تا ۹۴۰۰ مرگ و میر در سال در این کشور در نتیجه مصرف آب آلوده زیرزمینی است (ماسلر و مرکل<sup>۴</sup>، ۲۰۰۰). امروزه با پیشرفت دانش بشر و توسعه برنامه‌های نرم‌افزاری، پیش‌بینی، مدیریت رفتار و سرنوشت آلاینده‌ها در خاک از جایگاه و اهمیت خاصی برخوردار گردیده و مدل‌های کامپیوتری بسیاری در این زمینه ارائه گردیده است (زارع و همکاران، ۱۳۸۹). مدل هایدروس یک بعدی یکی از مدل‌های پیشرفته در ارتباط با حرکت یک بعدی آب، املاح و گرما در خاک می‌باشد. این مدل توسط سیمونک و همکاران<sup>۵</sup> (۱۹۹۸) در آزمایشگاه شوری خاک آمریکا بسط داده شده است. صیاد و همکاران (۱۳۸۷) در بررسی شبیه‌سازی حرکت برخی فلزات سنگین در حضور دو نوع سیستم ریشه‌ای (گلرنگ-گندم) با استفاده از مدل هایدروس یک بعدی گزارش کردند که مدل مذکور برآورد خوبی از روند حرکت فلزات سنگین در خاک را انجام می‌دهد ولی مقادیر پارامترهای جذبی بهینه شده توسط آن، از میزان تعیین شده در آزمایش بسیار کمتر است. فونتز و همکاران<sup>۶</sup> (۲۰۰۸) کاربرد مدل هایدروس یک بعدی را بر حرکت نیترات در خاک آتشفشانی متأثر از پسماند فاضلاب و خاکستر آن، بررسی کردند. نتایج نشان داد که خاک‌های آتشفشانی می‌توانند نیترات را در خود نگه‌دارند یا به صورت تدریجی آزاد کنند. مرادزاده و همکاران (۱۳۹۱) با استفاده از مدل هایدروس یک بعدی توانایی معادله‌های جابجایی - انتشار و دو ناحیه‌ای یا مدل روان - ساکن را در برآورد حرکت یون آمونیوم در ستون‌های یک خاک لوم شنی تیمار شده با زئولیت بررسی کردند، و نتیجه گرفتند که مدل جابجایی - انتشار در خاک‌های دست‌خورده نسبت به مدل روان - ساکن آشوبی یون آمونیوم را بهتر برآورد می‌کند. جلالی و همکاران (۲۰۱۰) برای

امروزه یکی از بحران‌ها و نابسامانی‌های موجود در سطح جهان، آلودگی منابع آبی و خاکی است. بنابراین ضرورت توجه و کنترل این آلودگی‌ها، در مدیریت منابع آب و خاک اهمیت ویژه‌ای دارد. اطلاع از وضعیت تحرک و تجمع آلاینده‌ها در خاک و پیامد انتقال آن به منابع آب‌های زیرزمینی و چرخه غذایی انسان، از جمله مسائل مهمی است که پژوهش‌های زیادی را در دهه اخیر متوجه خود ساخته است (زارع و همکاران، ۱۳۸۹). امروزه افزایش قیمت کودهای شیمیایی، آلودگی منابع آب و خاک ناشی از مصرف کودهای شیمیایی، عدم تعادل عناصر غذایی خاک و به خطر افتادن سلامت انسان باعث استفاده از کودهای دامی جهت حاصلخیزی خاک شده است. کود دامی دارای مزایای مثبت و منفی اکولوژیکی و محیطی بوده و کاربرد عمده آن به صورت زراعی است (فلاح و همکاران، ۱۳۸۷). در فضولات دامی انواع مختلف گازهای سمی، ترکیبات محلول و جهش‌زا، ریزجانداران بیماری‌زا، باکتری‌های مقاوم به دارو، پروتوزوا و ویروس‌ها وجود دارند. به عنوان مثال از باکتری‌های بیماری‌زای موجود در فضولات دامی می‌توان به کلی‌فرم‌های مدفوعی نظیر سالمونلا، شیگلا و اشریشیاکولی و پروتوزوئرها خطرناکی همچون کریپتوسپورییدیوم و ژیاودییا اشاره کرد (یونک و گوس<sup>۱</sup>، ۲۰۰۳). پس از پخش کود دامی در سطح خاک، باکتری‌های بیماری‌زا از سطح ذرات کود آزاد شده، همراه با آب آبیاری و بارندگی در خاک نفوذ و در نهایت به آب‌های زیر زمینی وارد می‌شوند. کاربرد گسترده این کودها در اراضی کشاورزی به منظور بهبود ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک نگرانی آلودگی منابع آب را افزایش داده است (جربا و اسمیت<sup>۲</sup>، ۲۰۰۵). در واقع بخش غیراشباع خاک اولین بخشی است که در نتیجه فعالیت‌های انسان در معرض آلودگی میکروبی قرار دارد. این بخش می‌تواند نقش مهمی در به تأخیر انداختن زمان رسیدن میکروب‌های بیماری‌زا به منابع آب و در نتیجه حذف آن‌ها داشته باشد. انتقال باکتری در بخش غیراشباع خاک تحت تأثیر فرآیندها و فعل و انفعالات بسیار پیچیده بوده و پیش‌بینی رفتار میکروب‌ها در

3- Foppen and Schijven

4- Macler and Merkle

5- Simunek *et al.*

6- Fuentes *et al.*

1- Unc and Goss

2- Gerba and Smith

جلوگیری از آلوده شدن خاک‌ها و آب‌های سطحی و زیر زمینی توسط کودها، از اهداف مهم انجام این پژوهش می‌باشد.

### توصیف مدل هایدروس یک بعدی

این مدل شامل حل عددی معادله ریچاردز برای بررسی حرکت آب در خاک و معادله‌های انتقال - انتشار برای بررسی حرکت املاح و گرما در خاک است. در مدل هایدروس یک بعدی حرکت یک بعدی آب در خاک با استفاده از حل عددی رابطه ریچاردز به صورت ذیل بیان می‌شود:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\theta) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (2)$$

که در آن  $\theta$ : رطوبت حجمی  $[L^{-3}L^{-3}]$ ،  $t$ : زمان  $[T]$ ،  $K$ : هدایت آبی غیراشباع  $[LT^{-1}]$ ،  $h$ : مکش ماتریک  $[L]$ ، و  $z$ : فاصله  $[L]$  می‌باشد.

در این پژوهش از مدل انتقال سینتیک دو مکانی (مدل جذب و واجذب دو مکانی) و از شرایط مرزی انتقال املاح (آلاینده‌ها) نوع دوم (کوشی<sup>۱</sup>) استفاده شده است. شرایط مرزی کوشی، برای شدت غلظت املاح در امتداد مرز مورد نظر استفاده می‌شود:

$$x=0 \quad \text{یا} \quad x=L \quad -\theta D \frac{\partial c}{\partial x} + qc = q_0 c_0 \quad (3)$$

که در آن،  $q$  شدت جریان و  $c_0$  غلظت مایع ورودی به خاک می‌باشند. این نوع شرایط مرزی با شرایط واقعی همخوانی بیشتری دارد.

در این مدل برای توصیف مشخصات هیدرولیکی خاک نظیر منحنی رطوبتی و هدایت آبی غیراشباع روابط متعددی تعریف شده است. معمول‌ترین آن‌ها رابطه وان گنوختن - معلم (۱۹۸۰) (معادله ۴) به شرح ذیل است:

$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) / [1 + (ch)^n]^m \quad (4)$$

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad n > 1$$

$$K(h) = K_s S_e^l [l - (l - S_e^{l/m})^m]^2 \quad (5)$$

ارزیابی خطر استفاده از فاضلاب در تغذیه آب‌های زیرزمینی، جذب آمونیم را در نمونه‌های خاک با استفاده از آزمایش‌های ستون خاک مورد مطالعه قرار دادند. پس از آن از نرم‌افزار هایدروس یک بعدی برای حل معکوس و شبیه‌سازی حرکت آمونیم در خاک استفاده شد. آنان به این نتیجه رسیدند که استفاده از نرم‌افزار هایدروس یک بعدی ابزار بسیار خوبی برای شبیه‌سازی حرکت آمونیم در ستون‌های خاک آزمایشی است.

نتایج حاصل از مدل‌های انتقال باکتری و همچنین اطلاعات به دست آمده از شبیه‌سازی به مدیریت بهتر کاربری اراضی و ارزیابی خطر آلودگی منابع آب و خاک کمک می‌نماید.

شبیه‌سازی حرکت و انتقال باکتری‌ها توسط مدل هایدروس یک بعدی بر اساس دو معادله تعادلی و غیرتعادلی استوار است. در مدل غیرتعادلی دو محل - دو ناحیه‌ای از توسعه مدل جابجایی - انتشار برای در نظر گرفتن شرایط مزرعه ایجاد شده است. در مدل جابجایی - انتشار فرض بر این است که جذب سطحی کاتیون‌ها به صورت تعادلی آبی و مستقل از زمان است. در معادله غیرتعادلی آب خاک به دو بخش متحرک و ساکن تقسیم شده که در بخش متحرک، فرآیند انتقال عمدتاً در اثر جریان روان - پراکنش صورت می‌گیرد ولی در بخش ساکن فرآیند انتقال عمدتاً در اثر پخشیدگی انجام می‌شود. انتقال املاح در مدل هایدروس یک بعدی، به طور کامل شامل پخشیدگی مولکولی<sup>۲</sup>، پراکنش هیدرودینامیکی<sup>۳</sup> و جذب تعادلی<sup>۴</sup> خطی یا غیرخطی مطابق معادله (۱) می‌باشد که به معادله جابجایی - انتشار معروف است:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \theta D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - J_w \frac{\partial C}{\partial z} + U \quad (1)$$

که در آن:

$S$ : میزان جذب املاح (آلاینده) به وسیله ذرات خاک  $[MM^{-1}]$ ،  
 $C$ : غلظت املاح (آلاینده) در محلول خاک  $[ML^{-3}]$ ،  $t$ : زمان  $[T]$ ،  $z$ : فاصله  $[L]$ ،  $\rho$ : جرم مخصوص ظاهری  $[ML^{-3}]$ ،  
 $D$ : ضریب پراکنش  $[L^2T^{-1}]$ ،  $J_w$ : شدت جریان آب  $[LT^{-1}]$ ،  
 $U$ : عبارت تولید یا مصرف  $[ML^{-3}T^{-1}]$  و  $\theta$ : میزان رطوبت خاک  $[L^3L^{-3}]$  است.

شبیه‌سازی حرکت باکتری‌ها و آلودگی باکتریایی ناشی از کاربرد کودهای حیوانی که آلوده به انواع متفاوتی از پاتوژن‌ها می‌باشند و ارائه راهکارهایی به منظور استفاده صحیح از کودهای حیوانی،

سپس محیط کشت از انکوباتور خارج و تعداد کلونی‌های باکتری به روش شمارش کلونی شمارش گردید (نوروزی، ۱۳۸۲). ساده‌ترین روش شمارش باکتری، روش شمارش پلیت است که هر یاخته بر روی محیط کشت کلونی مجزایی پدید می‌آورد که با چشم غیر مسلح دیده می‌شود. در این روش می‌توان تعداد کلونی‌های پدید آمده بر روی محیط کشت را پس از ۲۴ ساعت نگهداری در انکوباتور شمرد. در این مطالعه برای شمارش باکتری از روش شمارش زنده استفاده شده. نتایج در جدول (۲) ارائه شده است.

در روش مدل‌سازی معکوس با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری شده تعداد باکتری در زه‌آب خروجی، ویژگی‌های معادله غیر تعادلی حرکت املاح (آلاینده‌ها) شامل ضرایب جذب و واجذب باکتری (جدول ۳) به صورتی بهینه گردید (با روش آزمون مقایر مختلف) که مقدار خطا بین پیش‌بینی غلظت برآوردی مدل و مقادیر واقعی، حداقل گردد.

شبیه‌سازی حرکت باکتری‌ها توسط مدل هایدروس یک بعدی بر اساس دو معادله تعادلی و غیرتعادلی استوار است. در واقع روش مدل‌سازی معکوس، یکی از روش‌های غیر مستقیم برای تخمین ویژگی‌های خاک است. در این روش، ویژگی‌های هیدرولیکی خاک شامل رطوبت باقی مانده، رطوبت اشباع و هدایت هیدرولیکی اشباع در شرایط واقعی برآورد می‌شوند (جدول ۴).

ورودی‌های اصلی موردنیاز مدل برای شبیه‌سازی شامل اطلاعات مربوط به زمان، خصوصیات هیدرولیکی خاک، معرفی و انتخاب نوع معادله (تعادلی/غیرتعادلی) به منظور مدل‌سازی حرکت باکتری و شرایط مرزی برای انتقال املاح بود.

در مرحله اعتبارسنجی بر اساس سیستم مرجع (داده‌های اندازه‌گیری شده) اندازه‌های متناظر با متغیرها و پارامترهای ساختاری تعیین شده در مرحله قبل تهیه و به عنوان داده‌های ورودی به مدل ریاضی که در برگزیده روابط حاکم بر عملکرد سیستم است، داده می‌شود. سپس تلاش می‌شود با تغییر در پارامترهای سیستم و احیاناً در فرضیه‌ها و داده‌های مربوط به شرایط مرزی، اختلاف بین جواب‌های محاسباتی مدل و اطلاعات مشاهده شده به حداقل ممکن و حد قابل قبول برسد (میراب‌زاده و قبادی‌نیا، ۱۳۸۴). نتایج اعتبارسنجی در شکل‌های (۳) و (۴) نشان داده شده است. در این شکل‌ها منظور از منحنی سیستم مرجع، منحنی حاصل از داده‌های اندازه‌گیری شده است که با منحنی حاصل از آزمون اعتبارسنجی مقایسه گردیده است.

که در آن  $\theta_r$ : رطوبت باقیمانده،  $\theta_s$ : رطوبت اشباع،  $\alpha$ ،  $n$ ،  $m$  و  $l$ : پارامترهای تجربی،  $K_s$ : هدایت آبی اشباع و  $S_e$ : اشباع نسبی است.

ضرایب و پارامترهای مدل وان گنوختن با توجه به نوع بافت خاک (سیلتی، شنی، رسی، لومی و ...) که در این پژوهش لوم رسی سیلتی می‌باشد توسط مدل هایدروس یک بعدی تعیین گردیدند.

این پژوهش با هدف شبیه‌سازی حرکت باکتری اشریشیا کولی با کاربرد دو معادله تعادلی و غیرتعادلی به روش معکوس انجام شد.

## مواد و روش‌ها

این پژوهش به صورت طرح کاملاً تصادفی با تیمار کود مرغی در سه تکرار انجام گردید. برای انجام این پژوهش از خاکی با شوری مناسب (کمتر  $0/5 dSm^{-1}$ ) نمونه‌برداری شد. پس از خشک کردن در هوا و عبور از الک، برخی از خصوصیات فیزیکی و شیمیایی خاک از جمله بافت به روش هیدرومتری (گی و بادر<sup>۱</sup>، ۱۹۸۶)، جرم مخصوص ظاهری به روش استوانه‌های نمونه‌بردار (بلک<sup>۲</sup>، ۱۹۸۶)، ظرفیت تبادل کاتیونی (چاپمن<sup>۳</sup>، ۱۹۶۵)، درصد کربن آلی به روش جکسون<sup>۴</sup>، ۱۹۷۵)، قابلیت هدایت الکتریکی در عصاره اشباع به وسیله هدایت سنج الکتریکی (رودز<sup>۵</sup>، ۱۹۹۶) و اسیدیته (pH) به وسیله دستگاه pH متر در گل اشباع (ریچاردز<sup>۶</sup>، ۱۹۵۴) تعیین گردید. جدول (۱) برخی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک مورد مطالعه را بیان می‌کند.

نمونه خاک‌های مورد مطالعه در ستون‌هایی از جنس پی وی سی به ارتفاع ۳۵ و قطر ۱۰/۵ سانتی‌متر قرار داده شدند. سپس مقادیر محاسبه شده کود مرغی بر اساس میزان موادآلی خاک تعیین و برای هر ستون (۱۰ تن در هکتار) اضافه و با پنج سانتی‌متری خاک سطحی و قبل از انجام آبیاری مخلوط گردید. سپس به مدت پنج روز متوالی و در زمان معین ستون‌های مورد مطالعه با حجم معینی از آب (۱۹۰۰ سانتی‌متر مکعب) آبیاری گردید (شیروانی، ۱۳۸۷). در این پژوهش برای آبیاری پنج سانتی‌متر آب روی سطح خاک قرار گرفت. پس از هر بار آبیاری، زه‌آب‌های خارج شده از ستون‌های خاک در ظرف‌های عاری از میکروب جمع‌آوری گردید. سپس حجم مشخصی از زه‌آب‌ها بر روی محیط آئوزین متیلن بلو کشت و به مدت ۱۸ تا ۲۴ ساعت به منظور رشد باکتری در انکوباتور (۳۷ درجه سانتی‌گراد) قرار گرفت.

- 1- Gee and Bauder
- 2- Black
- 3- Chapman
- 4- Jackson
- 5- Rhoades
- 6- Richards

علوم و مهندسی آبیاری (مجله‌ی علمی کشاورزی)، جلد ۳۸، شماره‌ی ۳ پاییز ۹۴

### جدول ۱- ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک منطقه مورد مطالعه

بافت	شن (%)	سیلت (%)	رس (%)	EC (dS/m)	ظرفیت تبادل کاتیونی (meq/100gsoil)	وزن مخصوص ظاهری (cm <sup>3</sup> )	pH گل اشباع	کربن آلی (%)
لوم رسی سیلتی	۱۴/۸	۵۰/۲	۳۵	۰/۵۱	۲۲/۱	۱/۶۸	۷/۱	۰/۷۵

### جدول ۲- زمان‌های اندازه‌گیری تعداد باکتری‌ها و میزان حجم ورودی آب و میزان حجم خروجی زه‌آب

زمان (روز)	حجم ورودی آب (cm/day)	حجم خروجی زه‌آب (cm/day)	تعداد باکتری (CFU)
۱	۱۹۰۰	۱۸۸۳	۳۸۶۷
۲	۱۹۰۰	۱۸۵۷	۷۱۴۰۰
۳	۱۹۰۰	۱۸۳۷	۹۴۰۰۰
۴	۱۹۰۰	۱۸۷۰	۹۵۰۰۰
۵	۱۹۰۰	۱۸۵۷	۸۱۰۰۰

Colony Form in Unit(CFU): واحد تشکیل کلونی

### جدول ۳- پارامترهای مربوط به جذب و باز جذب باکتری

ویژگی	ضریب جذب مکان ۱	ضریب واجذب مکان ۱	ضریب جذب مکان ۲	ضریب واجذب مکان ۲
برآورد اولیه	۰/۰۰۸	۰	۰/۰۳۳	۰/۰۰۲
حداقل	۰/۰۰۶۴	۰	۰/۰۲۶	۰/۰۰۱۶
حداکثر	۰/۰۰۹۶	۰	۰/۰۳۹	۰/۰۰۲۴

### جدول ۴- ویژگی‌های هیدرولیکی خاک حاصله از نرم افزار هایدروس یک بعدی

ویژگی	$\theta_r$	$\theta_s$	$\alpha$	n	$K_s$ (cm h <sup>-1</sup> )
برآورد اولیه	۰/۰۸۹	۰/۴۳	۰/۰۱	۱/۲۳	۱/۶۸
حداقل	۰/۰۷۱	۰/۳۴	۰/۰۰۸	۰/۹۸	۱/۳
حداکثر	۰/۱	۰/۵۱	۰/۰۱	۱/۴	۲/۰۱

$$Md = \Sigma(data_{sim} - data_{obs}) / n_{obs} \quad (۶)$$

که در آن:  $data_{sim}$ : داده پیش‌بینی شده توسط مدل،  
 $data_{obs}$ : داده اندازه‌گیری شده در طی دوره آزمایش و  $n_{obs}$ :  
 تعداد مشاهده‌ها می‌باشد (ادیسکات و وایت مور، ۱۹۸۷).  
 اگر Md صفر و یا نزدیک صفر باشد بیانگر پیش‌بینی خوب مدل  
 است و اگر این مقدار بالای صفر باشد نشان‌دهنده بیش برآوردی و  
 زیر صفر نشان‌دهنده کم برآوردی مدل می‌باشد.

### بررسی و مقایسه داده‌های شبیه‌سازی مدل با داده‌های اندازه‌گیری شده

برای تعیین کارایی و دقت یک مدل معمولاً مقایسه داده‌های  
اندازه‌گیری و شبیه‌سازی شده انجام می‌شود که شامل آزمون‌های  
میانگین‌ها و واریانس‌ها است (بهمنی و همکاران، ۱۳۸۸). در این  
پژوهش از برخی معیارهای آماری برای ارزیابی دقت مدل استفاده  
گردید. این آماره‌ها عبارتند از:  
 - میانگین انحراف مقادیر پیش‌بینی شده از مقادیر اندازه‌گیری شده  
 (Md)<sup>۱</sup>

2- Addiscott and Whitmore

1- Mean of Deviation

منیشداوی و همکاران: مدل سازی معکوس حرکت باکتری اشریشیاکولی در...

نتایج (جدول ۶) نشان داد که حساس ترین پارامترهای ورودی مدل شامل رطوبت باقی مانده ( $\theta_r$ )، رطوبت اشباع ( $\theta_s$ ) و هدایت هیدرولیکی اشباع ( $k_s$ ) است. در واقع مدل نسبت به تغییرات این پارامترها دارای حساسیت زیاد بوده و تغییر این پارامترها بر فرآیند شبیه سازی تأثیر دارد. پارامتر عکس پتانسیل ورود هوا به داخل خاک در منحنی رطوبتی ( $\alpha$ ) بدون حساسیت می باشد، یعنی مدل نسبت به تغییرات این پارامتر حساس نبوده و تغییر این پارامتر بر فرآیند شبیه سازی تأثیری ندارد. فاکتور اعوجاج ( $l$ ) دارای حساسیت متوسط بود و تغییر مقادیر این پارامتر تا حد متوسطی بر فرآیند شبیه سازی تأثیر دارد  $l$ : پارامتر تجربی در شکل منحنی رطوبتی که بیانگر اتصال خلل و فرج می باشد).

### نتایج و بحث

نتایج مقادیر شبیه سازی شده با استفاده از معادله غیرتعدالی به روش معکوس<sup>۳</sup> در مقایسه با مقادیر باکتری موجود در زه آب خروجی (بر حسب CFU) در شکل (۱) نشان داده شده است (CFU در واقع واحد تشکیل کلونی می باشد). بر این اساس در شبیه سازی حرکت باکتری در خاک تیمار شده با کود مرغی، معادله غیرتعدالی با استفاده از روش معکوس و لحاظ نمودن ضرایب جذب و واجذب مربوط به مکان های جذبی اول و دوم و سایر ورودی های مدل آزمون شد. همان طور که در شکل (۱) نشان داده شده است. ضریب تعیین پیش بینی شده در روش معکوس تحت کاربرد معادله غیر تعدالی ۰/۹۹ می باشد که بیانگر دقت بالای این روش در شبیه سازی حرکت اشریشیاکولی در خاک تحت تیمار کود مرغی است. در روش مذکور، مقادیر شبیه سازی شده با مقادیر اندازه گیری شده هم پوشانی بسیار بالایی دارند.

شکل (۲) بیانگر نتایج حاصل از مقادیر شبیه سازی شده با استفاده از معادله تعدالی به روش معکوس در مقایسه با مقادیر باکتری موجود در زه آب خروجی است. ضریب تعیین ۰/۹۱ بیانگر هم پوشانی بالا بین داده های اندازه گیری شده و شبیه سازی شده در هنگام کاربرد این معادله به روش معکوس بود. مقایسه این نتایج با شکل (۱) نشان داد، روش معکوس با کاربرد معادله غیر تعدالی، شبیه سازی را با دقت بالاتری نسبت به روش معکوس با کاربرد معادله تعدالی انجام داده است. مقایسه میان منحنی های حاصل از مقادیر اندازه گیری شده در زه آب خروجی با مقادیر شبیه سازی شده و مقایسه ضرایب تعیین نشان داد، روش معکوس با کاربرد معادله غیرتعدالی نسبت به روش معکوس با کاربرد معادله تعدالی دقت و کارایی بالایی در شبیه سازی

- آماره دیگری که به کار می رود ریشه دوم میانگین مربعات خطای نرمال شده (RMSEN)<sup>۱</sup> است (معادله ۷)، که نشان دهنده پراکندگی داده ها است. هر چه مقدار این آماره کوچک و به صفر نزدیک تر باشد بیانگر کارایی خوب مدل است:

$$RMSEN = \left[ \left( \frac{\sum (data_{sim} - data_{obs})^2}{n_{obs}} \right) * \left( \frac{100}{data_{obs}} \right) \right] \quad (7)$$

که در آن  $data_{obs}$ : متوسط داده های مشاهده شده می باشد.

### تعیین و تحلیل حساسیت مدل

بررسی میزان اثرگذاری تغییرات داده های ورودی بر خروجی به عنوان تحلیل حساسیت شناخته شده است. در تحلیل حساسیت مدل، ابتدا با استفاده از داده های ورودی، مدل اجرا شده و نتایج خروجی به عنوان داده های خروجی پایه در نظر گرفته می شود، سپس در مراحل بعدی در هر بار اجرای مدل یکی از داده های ورودی مدل را تغییر داده و سایر داده ها ثابت نگه داشته می شوند و مدل اجرا می گردد. نتایج حاصل با نتایج پایه مقایسه و ضریب حساسیت محاسبه می شود. بر این اساس ضریب حساسیت مدل مورد مطالعه، از روش لیو و همکاران<sup>۲</sup> (۲۰۰۷) استفاده شد:

$$S_c = \frac{\frac{\Delta W}{W}}{\frac{\Delta P}{P}} \quad (8)$$

که در آن  $S_c$ : ضریب حساسیت،  $\Delta W$ : اختلاف مقدار پارامتر خروجی قبل و بعد از تغییر داده ورودی،  $\bar{W}$ : متوسط پارامتر خروجی قبل و بعد از تغییر داده ورودی،  $\Delta P$ : اختلاف مقدار ورودی یک پارامتر به مدل و  $\bar{P}$ : متوسط مقدار ورودی یک پارامتر به مدل می باشد.

پس از محاسبه، ضریب حساسیت مقادیر به دست آمده با دامنه تعریف شده توسط لیو و همکاران (۲۰۰۷) (جدول ۵) مقایسه گردید. مقادیر ضریب حساسیت محاسبه شده برای پارامترهای ورودی مدل شامل رطوبت باقی مانده ( $\theta_r$ )، رطوبت اشباع ( $\theta_s$ )، هدایت هیدرولیکی اشباع ( $k_s$ )، مقادیر عکس پتانسیل ورود هوا به داخل خاک در منحنی رطوبتی ( $\alpha$ ) و فاکتور اعوجاج ( $l$ ) در جدول (۶) ارائه شده است.

3- Invers method (Invers model)

4- Colony Forming Unit

1 - Root Mean Square Error Normalised

2- Liu et al.

با استفاده از دامنه‌های تعریف شده در مدل در طی روند شبیه‌سازی می‌باشد. در واقع معادله غیرتعدالی به دلیل در نظر گرفتن شرایط طبیعی‌تر همچون خصوصیات دقیق‌تر و توصیف ویژگی‌های جذب و واجذب باکتری در سطح کلونیدهای خاک در طول این روند، شبیه‌سازی باکتری در خاک را دقیق‌تر از معادله تعادلی توصیف می‌نماید.

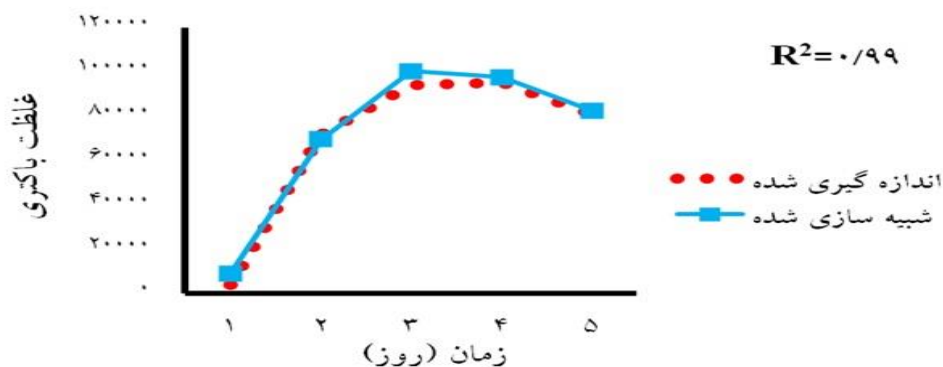
باکتری در خاک دارد. بر این اساس می‌توان چنین نتیجه‌گیری نمود، بهترین برآورد مدل هایدروس یک بعدی برای حرکت باکتری در خاک، انتخاب معادله غیرتعدالی با استفاده از روش معکوس است (شکل ۱). به این دلیل که روش معکوس با کاربرد معادله غیر تعادلی قادر به تخمین ویژگی‌های هیدرولیکی و خصوصیات جذب آلاینده‌ها

جدول ۵- دامنه تغییرات ضریب حساسیت (لیو و همکاران، ۲۰۰۷)

دامنه تغییرات	$S_c=0$	$0 < S_c < 0.3$	$0.3 < S_c < 1/5$	$1/5 < S_c$
شدت حساسیت	بدون حساسیت	حساسیت کم	حساسیت متوسط	حساسیت زیاد

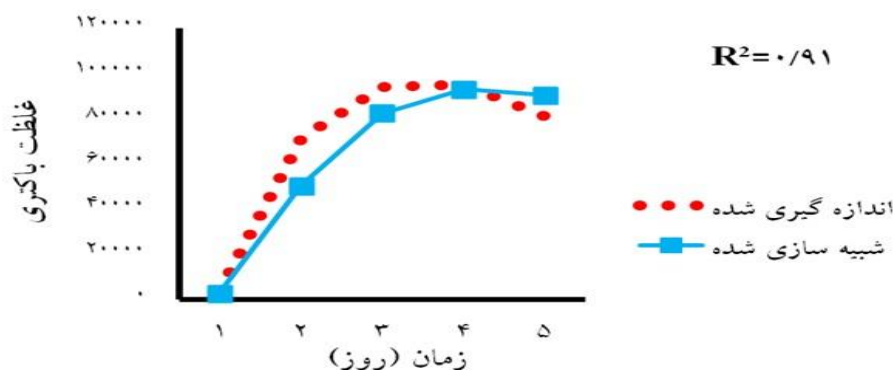
جدول ۶- میزان ضریب حساسیت پارامترهای ورودی

پارامترهای ورودی مدل	ضریب حساسیت ( $S_c$ )	شدت حساسیت
$\theta_r$	۱/۷	زیاد
$\theta_s$	۲/۲	زیاد
$k_s$	۱/۹	زیاد
$\alpha$	۰	بدون حساسیت
l	۰/۵	متوسط



شکل ۱- نتایج شبیه‌سازی حرکت باکتری با استفاده از روش مدل سازی معکوس و کاربرد معادله غیر تعادلی حرکت املاح تحت تیمار کود مرغی در مقایسه با مقادیر اندازه‌گیری شده

منیشداوی و همکاران: مدل سازی معکوس حرکت باکتری اشریشیاکولی در...



شکل ۲- نتایج شبیه سازی حرکت باکتری با استفاده از روش مدل سازی معکوس و کاربرد معادله تعادلی حرکت املاح تحت تیمار کود مرغی در مقایسه با مقادیر اندازه گیری شده

اندازه گیری شده بود. همچنین مقادیر کمتر آماره ریشه دوم میانگین مربعات خطای نرمال شده در مقایسه با مقادیر بیشتر، نشانه دقت بیشتر مقادیر برآوردی است. در جدول (۷) مقدار ریشه دوم میانگین مربعات خطای نرمال شده در معادله غیرتعادلی به روش معکوس در مقایسه با کاربرد معادله تعادلی روش معکوس کمتر است، که این موضوع بیانگر دقت بیشتر معادله غیرتعادلی نسبت به معادله تعادلی است. میزان ضریب تعیین نیز برای معادله غیر تعادلی با کاربرد روش معکوس مقدار بیشتری را در مقایسه با معادله تعادلی دارا است. این موضوع بیانگر دقت و کارآمدی معادله غیرتعادلی به روش معکوس نسبت به معادله تعادلی به روش معکوس است.

برای اطمینان از عملکرد مدل و برای پی بردن به این مسئله که آیا نرم افزار این قابلیت را دارد که در موارد مشابه به کار برده شود، آزمون اعتبارسنجی بر روی آن صورت گرفت که نتایج حاصل در شکل های (۳) و (۴) نشان داده شده است.

مقدار ضریب تعیین حاصل از اجرای این آزمون برای معادله غیرتعادلی برابر با ۰/۹۷ و برای معادله تعادلی برابر با ۰/۹۸ می باشد که بیانگر دقت و صحت اجرای مدل می باشد.

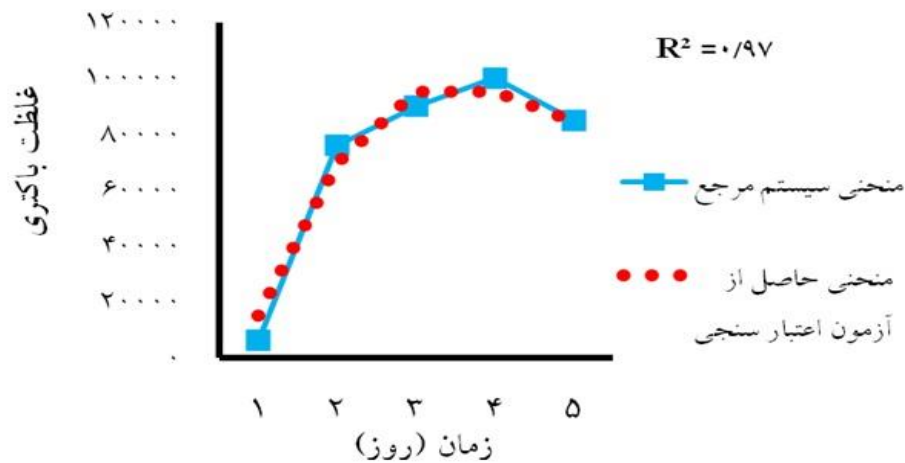
همچنین، برای ارزیابی دقت مدل، شاخص های آماری نتایج حاصل از شبیه سازی توسط مدل هایدروس یک بعدی تحت تیمار کود مرغی در مقایسه با داده های اندازه گیری شده انجام و نتایج در جدول (۷) نشان داده شده است.

نتایج جدول (۷) نشان می دهد، معادله غیرتعادلی برآورد بهتری از شبیه سازی باکتری در خاک را داشت. مقدار میانگین انحراف مقادیر پیش بینی شده از مقادیر اندازه گیری شده در روش معکوس در معادله تعادلی، منفی و در معادله غیر تعادلی مثبت است. بر طبق نظر ادیسکات و وایت مور (۱۹۸۷) مقدار کم میانگین انحراف مقادیر پیش بینی شده از مقادیر اندازه گیری شده از نظر آماری نشانگر دقت خوب پیش بینی مدل است. علامت میانگین انحراف مقادیر پیش بینی شده از مقادیر اندازه گیری شده بیانگر این نکته است که به طور متوسط مقادیر پیش بینی، بیشتر (+) و یا کمتر (-) از مقادیر اندازه گیری شده می باشند. بنابراین می توان چنین نتیجه گیری نمود، معادله غیرتعادلی با روش معکوس نشان دهنده مقادیر شبیه سازی شده بیشتر در مقایسه با مقادیر اندازه گیری شده است و معادله تعادلی با کاربرد روش معکوس دارای مقادیر شبیه سازی کمتری نسبت به مقادیر

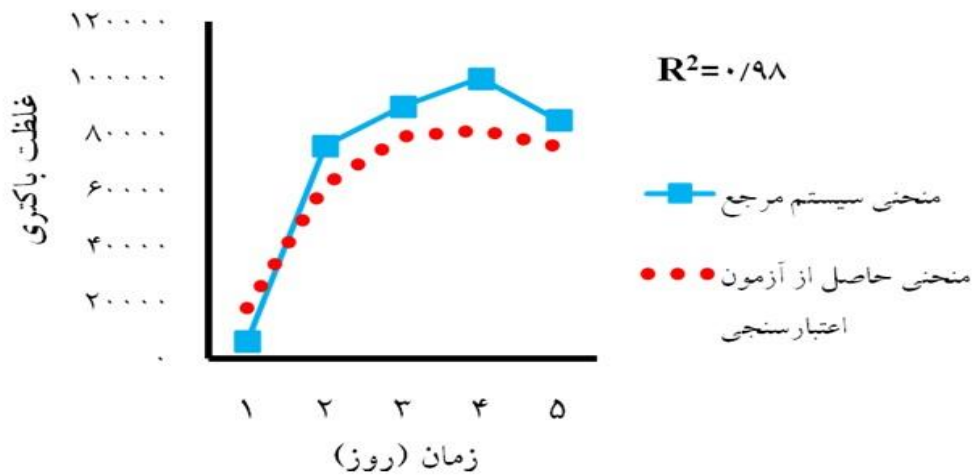
جدول ۷- تجزیه آماری نتایج به منظور ارزیابی دقت مدل

روش معکوس		روش معادله	
ضریب تعیین	ریشه دوم میانگین مربعات خطای نرمال شده (%)	میانگین انحراف مقادیر پیش بینی شده از مقادیر اندازه گیری شده	میانگین انحراف مقادیر پیش بینی شده از مقادیر اندازه گیری شده
۰/۹۹	۵/۶۶	۲۶۹۰	غیرتعادلی
۰/۹۱	۱۶/۸۱	-۵۳۹۰	تعادلی





شکل ۳- اعتبارسنجی معادله غیر تعادلی تحت تیمار کود مرغی



شکل ۴- اعتبارسنجی معادله تعادلی تحت تیمار کود مرغی

از پژوهش‌های کرد و همکاران (۱۳۸۹) و فرخیان فیروزی و همکاران (۱۳۸۹) مطابقت دارد. مطالعات کرد و همکاران (۱۳۸۹) نشان داد، معادله غیر تعادلی در مقایسه با معادله تعادلی پیش‌بینی بهتری از حرکت برمایند در خاک را دارا می‌باشد. همچنین مطالعات فرخیان و همکاران نشان داد که مدل جذب و واجذب سینتیک مدل هایدروس یک بعدی برای پیش‌بینی انتقال و جذب باکتری در ستون خاک، برآورد خوبی از منحنی‌های رخنه باکتری دارد. مدل‌سازی حرکت باکتری در خاک با اعمال تیمار کودهای حیوانی توسط مدل هایدروس یک بعدی با کاربرد معادله غیر تعادلی به روش معکوس نسبت به معادله تعادلی به روش معکوس از نتایج مناسب‌تری برخوردار است.

### نتیجه‌گیری

بر اساس نتایج حاصل از مدل می‌توان چنین نتیجه‌گیری نمود، معادله غیر تعادلی در مقایسه با معادله تعادلی کارآمدتر است. در واقع با کاربرد معادله غیر تعادلی به روش معکوس، ضرایب جذب و واجذب باکتری در سطح کلونیدهای خاک مورد مطالعه در طول روند شبیه‌سازی به مدل وارد می‌شوند و شبیه‌سازی بر مبنای میزان و قدرت جذب و واجذب باکتری انجام می‌پذیرد، در حالی که با به کارگیری معادله تعادلی، ضرایب جذب و واجذب باکتری در نظر گرفته نمی‌شوند و شبیه‌سازی بدون ضرایب مذکور صورت می‌گیرد، به همین دلیل معادله غیر تعادلی شبیه‌سازی باکتری در خاک را دقیق‌تر از معادله تعادلی توصیف می‌نماید. این نتیجه با نتایج حاصل

منیشداوی و همکاران: مدل‌سازی معکوس حرکت باکتری اشریشیاکولی در...

### منابع

- ۱- بهمنی، ا.، برومندنسب، س.، بهزاد، م. و ع. ع. ناصری. ۱۳۸۸. بررسی میزان تجمع نیترات و آمونیوم در نیمرخ خاک تحت رژیم‌های آبی و کودی مختلف با استفاده از مدل LEACHM. مجله علوم محیطی، ۲: ۹۵-۱۰۸.
- ۲- زارع، م.، افیونی، م.، عباسپور، ک. و غ. ع. صیاد. ۱۳۸۹. تاثیر تغییرپذیری خصوصیات فیزیکی خاک در طی زمان بر مدل سازی حرکت کلراید در خاک. مجموعه مقالات یازدهمین کنگره علوم خاک ایران، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی گرگان، ۱۶۰۳-۱۶۰۱.
- ۳- شیروانی، س. ۱۳۸۷. تاثیر شوری و کود آلی بر حرکت باکتری در ستون‌های خاک دست خورده. پایان‌نامه کارشناسی ارشد، رشته خاک‌شناسی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه ولی‌عصر(عج) رفسنجان.
- ۴- صیاد، غ. ع.، موسوی، س. ف.، عباس‌پور، ک. و م. افیونی. ۱۳۸۷. شبیه‌سازی حرکت کادمیم، مس، سرب و روی در یک خاک دست نخورده آهکی تحت کشت گندم و گلرنگ با استفاده از مدل انتقال املاح HYDRUS-1D. فصلنامه علوم کشاورزی ایران، ۱: ۱۸۷-۲۰۰.
- ۵- فرخیان فیروزی، ا.، همایی، م.، کلومپ، ا.، کستیل، ر. و م. ستاری. ۱۳۸۹. انتقال و نگهداشت باکتری در خاک‌های آهکی تحت شرایط جریان غیراشباع. مجله آب و خاک، ۳: ۴۵۲-۴۳۹.
- ۶- فلاح، س.، قلاوند، ا.، قنبریان، د. و ع. یدوی. ۱۳۸۷. اثر مقدار و نحوه اختلاط کود مرغی با خاک بر برخی خصوصیات خاک و عملکرد گیاه ذرت. مجله (آب و خاک) علوم و صنایع کشاورزی، ۳: ۷۸-۸۷.
- ۷- کرد، م.، شیرانی، ح.، صیاد، غ. ع. و ه. نقوی. ۱۳۸۹. بررسی کارایی نرم‌افزار HYDRUS -1D و توانایی معادلات متداول جریان روان- پخشیدگی CDE و NECDE در برآورد حرکت یون بروماید. مجموعه مقالات یازدهمین کنگره علوم خاک ایران، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی گرگان، ۱۶۱۵-۱۶۱۴.
- ۸- مرادزاده، م.، معاضد، ه. و غ. ع. صیاد. ۱۳۹۱. جذب دینامیک آمونیوم به وسیله یک خاک لوم شنی تیمار شده با زئولیت و ارزیابی معادلات جابجایی- انتشار و رطوبت متحرک- غیر متحرک. مجله علوم و فنون کشاورزی و منابع طبیعی، علوم آب و خاک، ۶۲: ۱۷۵-۱۶۳.
- ۹- میراب‌زاده، و م. قبادی‌نیا. ۱۳۸۴. ساختار مدل‌های ریاضی و کاربرد آن‌ها در سیستم‌های آب زیرزمینی. مجموعه مقالات کارگاه آموزشی مدل‌سازی در آبیاری و زهکشی، کمیته ملی آبیاری و زهکشی ایران، ۲۶-۱۱.
- ۱۰- نوروزی، ج. ۱۳۸۲. روش‌های کاربردی در شناسایی باکتری‌ها. چاپ اول، موسسه انتشاراتی حیان، تهران، ۲۲۰ صفحه.
- 11- Addiscott, T. M. and A. P. Whitmore. 1987. Computer simulation of change in soil mineral nitrogen and crop during autumn, winter and spring: The Journal of Agricultural Science - Cambridge Journals, 109:141-157.
- 12- Black, G. R. 1986. Bulk density. In: Klute, A. Methods of soil analysis. Part I. Physical and mineralogical methods. Soil Science Society of America. Agronomy Monograph, 9, pp. 374-380.
- 13- Chapman, H. D. 1965. cation exchange Capacity. In: Method of soil analysis, part 2. Black, C. A, 891-901. American Society of Agronomy: Madison, WI. U.S.A.
- 14- Foppen, J. W. A. and J. F. Schijven. 2006. Evaluation of data from the literature on the transport and survival of Escherichia coli and thermotolerant coliforms in aquifers under saturated conditions. Water Research, 40: 401-426.
- 15- Fuentes, R., Caceres, L., Molina, M., Iravena, S., Cazanga, M., Calder, R. and M. Escudey. 2008. Use of Hydrus-1D to describe the transport of nitrate in a volcanic soil affected by sewage sludge, sewage sludge ash, and pinus radiata ash amendments. 5th International Symposium ISMOM, November 24-28, Chile.

- 16- Gee, G. W., and J. W. Bauder. 1986. Particle-size analysis, hydrometer method. PP. 404-408. In: A. Klute et al., (Eds). *Methods of Soil Analysis. Part III, 3rd Ed.* American Society of Agronomy, Madison, WI.
- 17- Gerba, C. P. and J. E. Smith. 2005. Sources of pathogenic microorganisms and zone. *Water Air Soil Pollution*, 149:327-337.
- 18- Jackson, M. L. 1975. *Soil chemical analysis, advanced course.* University of Wisconsin–Madison, College of Agricultural, Department of Soil Science.
- 19- Jellali, S., Diamantopoulos, E., Kallali, H., Bennaceur, S., Anane, M. and N. Jedidi. 2010. Dynamic sorption of ammonium by sandy soil in fixed bed columns: Evaluation of equilibrium and non-equilibrium transport processes. *Journal of Environmental Management*, 91: 897–905.
- 20- Liu, H. F, Genard, M., Guichard, S. and N. Bertin. 2007. Model-assisted analysis of tomato fruit growth in relation to carbon and water fluxes. *Journal of Experimental Botany*, 58(13): 3567-3580.
- 21- Macler, B. A. and J. C. Merkle. 2000. Current knowledge on groundwater microbial pathogens and their control. *Hydrogeol. Journal*, 8(1): 29-40.
- 22- Richards, L. A. 1954. *Diagnosis and improvement of saline and alkali soils.* U.S.D.A. Handbook No. 60., Washington, D.C,U.S.A.
- 23- Rhoades, J. D. 1996. Salinity: Electrical conductivity and total dissolved salts. PP. 417-436. In: D. L. Sparks et al., (Eds). *Methods of Soil Analysis. Part III, 3rd Ed.* American Society of Agronomy, Madison, WI.
- 24- Simunek, J., Sejna, M. and M. Th. van Genuchten. 1998. The HYDRUS–1D software package for simulating the one–dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, Version 2.0. IGWMC–TPS– 70. Golden Colorado School of Mines, International Ground Water Modeling Center.
- 25- Unc, A and M. j. Goss. 2003. Movement of faecal bacteria through the vadose zone. *Water Air Soil Pollution*, 149:327-337.
- 26- Van Genuchten, M. Th., 1980. A closed–form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America*, 44(5): 892–898.