

**CAGsoft**

**Anwender - Informationen**

**Ausgabe 1/06**

Datum: 11.01.2006

Hydrogeologisches Büro Christian A. Gillbricht  
Kieler Straße 421 - 22525 Hamburg  
Tel.: 040 / 54 76 82 76  
Fax: 040 / 54 76 82 84

## 1. 12 Jahre MRQWIN – Rückblick und strategische Überlegungen

Das Konzept und der rechnende Kern von MRQWIN stammen aus dem Jahr 1989/1990. Im **November 1993** habe ich die kommerzielle Urversion von MRQWIN unter dem Namen **MRQPUMP** für das Betriebssystem DOS fertig gestellt. Zu dieser Zeit gab es eine ganze Reihe brauchbarer Pumpversuchsauswertungsprogramme unterschiedlichen Zuschnitts auf dem Markt (LINNENBERG, 1995). In der Zwischenzeit hat sich der Markt auf wenige leistungsfähige Produkte reduziert. Die Mehrzahl der früheren Anbieter hat aufgegeben. Dafür sind zahlreiche neue Programme von durchaus fragwürdiger Qualität aufgetaucht und haben einen mehr oder weniger großen Einfluss gewonnen. Maßgeblich für diese Entwicklung war meines Erachtens, neben den begrenzten ökonomischen Möglichkeiten in diesem Marktsegment, der Übergang von der DOS-Ebene auf das **Microsoft Windows™-System**. Dieses bedingt einen unverhältnismäßig angestiegenen Programmieraufwand, der ausschließlich den Benutzeroberflächen und der Systemkompatibilität dient, aber nicht den Auswertungsmöglichkeiten, d. h. dem rechnenden Kern der Programme. Trotzdem habe ich **1997** den Schritt zur Windows™-Version **MRQWIN** vollzogen und von dort bis zur aktuellen Version 1.3 weiter entwickelt. Wenn ich von „fragwürdiger Qualität“ vieler heutiger Programme spreche, so meine ich damit Programme, die sich zum Teil sehr elegant in die Windows™-Umgebung einfügen und hübsche Bilder produzieren, jedoch im rechnenden Kern einem Level entsprechen, das schon um 1980 erreicht (oder überholt) war. Von dieser Kollegenschelte ausnehmen möchte ich ausdrücklich Glenn Duffield (Aqtesolv™) und mit Einschränkungen das Team der ESI (AquiferWin32™).

Welches waren und sind nun die Leitlinien unserer Programmentwicklung? Im Zentrum unserer Bemühungen steht der **Anwender**; denn MRQWIN wurde zuerst für meine eigenen Praxisbedürfnisse entwickelt, für die Auswertung von Pumpversuchen unter Realweltverhältnissen. Außerdem fließen ständig Anregungen von anderen Anwendern in die Weiterentwicklung von MRQWIN ein. Hieraus ergaben sich einige Anforderungen, die zum Beginn der Entwicklung und teilweise auch heute von anderen kommerziell verfügbaren Programmen nicht oder nur unzureichend erfüllt werden.

Die **Benutzeroberfläche** soll mehrere Anforderungen erfüllen:

1. **Stabilität:** Es ist nicht nur meiner Faulheit geschuldet, dass sich die Benutzeroberfläche von MRQWIN in 12 Jahren nur wenig verändert hat. MRQWIN ist ein Programm, das von den meisten Anwendern nur selten oder gelegentlich eingesetzt wird. Der typische Arbeitsablauf stellt sich so dar, dass nach monate-, wenn nicht jahrelanger Pause das Programm in Betrieb genommen werden soll. Zu diesem Zweck wird zuerst das aktuelle Update von unserer Website geladen. Was nun, wenn diese Update völlig neue Funktionalitäten und andere Arbeitsabläufe vorsieht? Egal ob objektive Verbesserungen vorliegen, der Anwender fühlt sich (zu Recht) im Augenblick behindert. Deshalb werden bei mir Änderungen in der Benutzeroberfläche nur sehr zögerlich und schrittweise eingeführt. Im Grundsatz sollte auch ein Nutzer der ersten Generation sich in der aktuellen Version innerhalb einer Stunde wieder zu Hause fühlen können.
2. **Einfachheit:** Arbeitsabläufe sollen in geordnete Bahnen gelenkt werden. Windows™-Programme bieten im Grundsatz die Möglichkeit, ständig auf alle Funktionalitäten eines Programms zuzugreifen. Es ist daher sinnvoll, bestimmte Zugriffe zeitweilig zu verweigern und manche Arbeitsabläufe in eine vorgegebene Reihenfolge zu bringen („Batch-Betrieb“). Dies führt im Einzelfall

- dazu, dass man sich in einer Einbahnstraße befindet, in der man gerne umkehren würde. Das ist aber allemal besser als sie von vornherein in die falsche Richtung zu befahren.
3. **Intuitive Bedienung:** Es gibt keine intuitive Bedienung von EDV-Programmen. Bei allen derartigen Behauptungen handelt es sich nur um eine typische Werbebotschaft von Herstellern. Tatsächlich gibt es nur Bedienungselemente, die uns vertraut erscheinen, weil wir schon Erfahrungen mit anderen Programmen gesammelt haben. Welche Programme aber dürfen wir bei den Anwendern von MRQWIN als allgemein vertraut voraussetzen? Ich denke, viel mehr als die typischen Office-Programme (Microsoft Office™ oder Klone), gängige (einfache) Zeichenprogramme und Golden Software Surfer™ darf man nicht erwarten. Im Übrigen kann ich nicht verleugnen, dass ich nach über 30 Jahren Programmierpraxis zu eher konservativen Designs neige. Viele Funktionen sind daher eher auf Tastatur- als auf Mausbedienung ausgelegt, was nach einer Einarbeitung deutlich schneller ist.
  4. **Verzicht auf obsoletere Lösungen:** Die konsequente Anwendung der rechen-technischen Möglichkeiten heute verfügbarer PC hat viele ältere bzw. ungenaue / fehlerhafte Verfahren überflüssig gemacht. Grundsätzlich ist es möglich, die Zahl der Lösungen (Brunnenfunktionen) entsprechend der Literaturlage nach über 100 Jahren ingenieurtechnischer Pumpversuchspraxis zu inflationieren. Tatsächlich sind aber auch mathematisch durchaus richtige Lösungen der Vergangenheit eben einfach überholt. Ein typisches Beispiel ist das in der manuellen Auswertung zu Recht immer noch eingesetzte **Gradlinienverfahren** nach Cooper/Jacob. Im Kontext von MRQWIN macht es keinen Sinn. Zum Vergleich wird in dem Programm Aqtesolv™ unter dem Mäntelchen Cooper/Jacob keine Gradlinienlösung, sondern eine (ungenaue) nicht lineare Optimierung praktiziert (Testen Sie die Demoversion!). Diese Form des Entgegenkommens gegenüber Anwendergewohnheiten widerspricht dem Konzept von MRQWIN. Wer etwas haben möchte, das nach Cooper/Jacob aussieht, kann nach einer (genauen) Auswertung nach Theis eine grafische Darstellung in halblogarithmischer Skalierung wählen. Ähnlich verhält es sich mit der Lösung für **hydraulische Ränder** nach Stallman (FERRIS et al., 1962), die in Deutschland vor allem durch ihre Darstellung in LANGGUTH & VOGT (1980) unangemessen weite Bekanntheit gewonnen hat (und in der Neuauflage des Buches von 2004 immer noch erwähnt wird). Diese Lösung ist durch das universelle Verfahren der Spiegelbrunnen (KRUSEMAN & DE RIDDER, 1990) unter Anwendung des Superpositionsverfahrens (BOHLING & McELWEE, 1992) erledigt. Ebenso werden spezielle Lösungen für die Berücksichtigung von **Brunneneffekten** (Brunneneintrittsverluste, Brunnenspeicherung) durch universelle Lösungen, die für alle Aquifermodelle gelten, ersetzt (Brunneneintrittsverluste: RAMEY, 1982; Brunnenspeicherung: eigenes teilnumerisches Verfahren in MRQWIN, Anwender-Information 1/00).
  5. **Offene Datenstruktur:** Ganz bewusst verwendet MRQWIN den „primitiven“ Datenstandard ASCII sequenziell. Für komprimierte binäre Datenstandards, wie sie heute allgemein üblich sind, sprächen folgende Argumente: kleinere Dateien, schnellerer Datenzugriff, ggf. unmittelbare Kompatibilität mit anderen Programmsystemen, insbesondere Datenbanken. Bei der Größe und Leistungsfähigkeit der heute üblichen Laufwerke sind die ersten beiden Argumente bei den kleinen MRQWIN-Datensätzen sicherlich nicht mehr relevant. Eine unmittelbare Kompatibilität zu anderen Programmsystemen (besonders „beliebt“ Microsoft Access™) lehne ich aus ideologischen wie praktischen Gründen ab. Eine Bindung an fremde herstellergebundene Datenstandards ist

immer problematisch, insbesondere wenn man auf die Fortentwicklung dieser Standards und ihrer Kompatibilität keinen Einfluss nehmen kann. Last not least ermöglicht die einfache Datenstruktur beim Auftreten von Problemen auch den einfachen Einblick in den Datensatz und ggf. die Korrektur mit Hilfe eines beliebigen Texteditors.

Der **rechnende Kern** soll folgenden Anforderungen genügen:

1. **Universalität:** MRQWIN soll alle praktisch auftretenden Randbedingungen von Pumpversuchen (in **Porengrundwasserleitern**) abdecken. Dies schließt insbesondere Pumpversuche mit gestörtem Ablauf (Pumpenausfall) oder planmäßig mehrstufige Versuchsdurchführung, die Beeinflussung durch mehrere Brunnen oder hydraulische Ränder (virtuelle bzw. Spiegelbrunnen) sowie Brunneneffekte ein. Diese Universalität auf der Grundlage weniger grundlegender mathematischer Lösungen (Brunnenfunktionen) wird mit dem Verfahren der Superposition (BOHLING & McELWEE, 1992) erreicht.
2. **Effizienz:** Die Berechnung der analytischen Lösungen mit numerischen Mitteln ist zum Teil relativ aufwändig. Es können daher neben den besten (genauesten) verfügbaren Lösungsalgorithmen auch vereinfachte Algorithmen zur Beschleunigung der Bearbeitung verwendet werden. Für viele praktische Belange sind die Ergebnisse dieser beschleunigten Berechnung vollkommen ausreichend.

Zum Schluss noch ein paar Worte zum integrierten **analytischen Grundwassermodell**. Dieses Programm wurde ursprünglich als kleines Spielzeug entwickelt und diente als Werbegeschenk für Neukunden. Entsprechend spartanisch war seine Gestaltung. Bei einer Umfrage unter Anwendern im Sommer 2005 hat es sich gezeigt, dass ein erheblicher Anteil dieses Modell nutzt, zum Teil auch vollkommen unabhängig von Pumpversuchen. Dieser pragmatische Umgang mit dem Modellwerkzeug ist zu begrüßen, solange die immanenten Beschränkungen des Modellansatzes berücksichtigt werden (SPITZ & MORENO, 1996). Das Interesse der Anwender werde ich bei der weiteren Entwicklung berücksichtigen.

#### Literatur:

- BOHLING, G.C. & McELWEE, C.D. (1992): SUPRPUMP: An interactive program for well test analysis and design.- *Ground Water*, 30: 262 - 268; Dublin, OH
- FERRIS, J.G.; KNOWLES, D.B.; BROWN, R.H. & STALLMAN, R.W. (1962): Theory of aquifer tests.- U.S. Geological Survey Water-Supply Paper, 1536-E: 69 - 174; Washington, D.C.
- KRUSEMAN, G.P. & DE RIDDER, N.A. (1990): Analysis and evaluation of pumping test data.- ILRI Publication, 47: 375 S.; Wageningen
- LANGGUTH, H.-R. & VOIGT, R. (1980): Hydrogeologische Methoden.- Springer: XI + 486 S.; Berlin
- LINNENBERG, W. (Hrsg.) (1995): EDV-gestützte Darstellung und Auswertung von Pumpversuchen.- Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe, 39: X + 193 S.; Karlsruhe
- RAMEY, H.J. (1982): Well-loss function and the skin effect: a review.- Geological Society of America Special Paper, 189: 265 - 271; Boulder, CO

SPITZ, K. & MORENO, J. (1996): A practical guide to groundwater and solute transport modeling.- Wiley-Interscience: XVII + 461 S.; New York

## 2. Artesische Brunnen

Pumpversuche an artesischen Brunnen erfolgen nicht in jedem Fall mit konstanter oder schrittweise abgestufter Förderrate, sondern teilweise mit freiem Auslauf und Aufzeichnung der kontinuierlich abnehmenden Ablaufrate als Funktion der Zeit  $Q(t)$ . Für die Planung von Grundwassersanierungen und Baugrubenwasserhaltungen werden entsprechende Versuche mit konstanter Absenkung auch unter gepumpten Bedingungen (und entsprechender Pumpensteuerung) vorgeschlagen (RICE, 1998). MRQWIN ist zur Zeit nur bedingt auf die Auswertung derartiger Versuche anzuwenden. Die Anzahl der Pumpstufen (= Messwerte der Förderrate) ist auf 99 begrenzt. Die Auswertung nur für den fördernden Brunnen ist problematisch, da bei tatsächlich konstanter Absenkung die Parameteroptimierung hohe Unsicherheiten aufweist.

Für ideal gespannte Verhältnisse und vernachlässigbares Brunnenvolumen (Annahmen nach Theis) wurde schon frühzeitig eine Brunnenfunktion hergeleitet (JACOB & LOHMAN, 1952):

$$Q(t) = 2 * \pi * T * s_w * G(\alpha)$$

mit  $Q(t)$ : zeitabhängige Förderrate ( $m^3/s$ )  
 $t$ : Zeit (s)  
 $T$ : Transmissivität ( $m^2/s$ )  
 $s_w$ : Absenkung im Förderbrunnen (m)  
 $G(\alpha)$ : Brunnenfunktion nach JACOB & LOHMAN (1952)

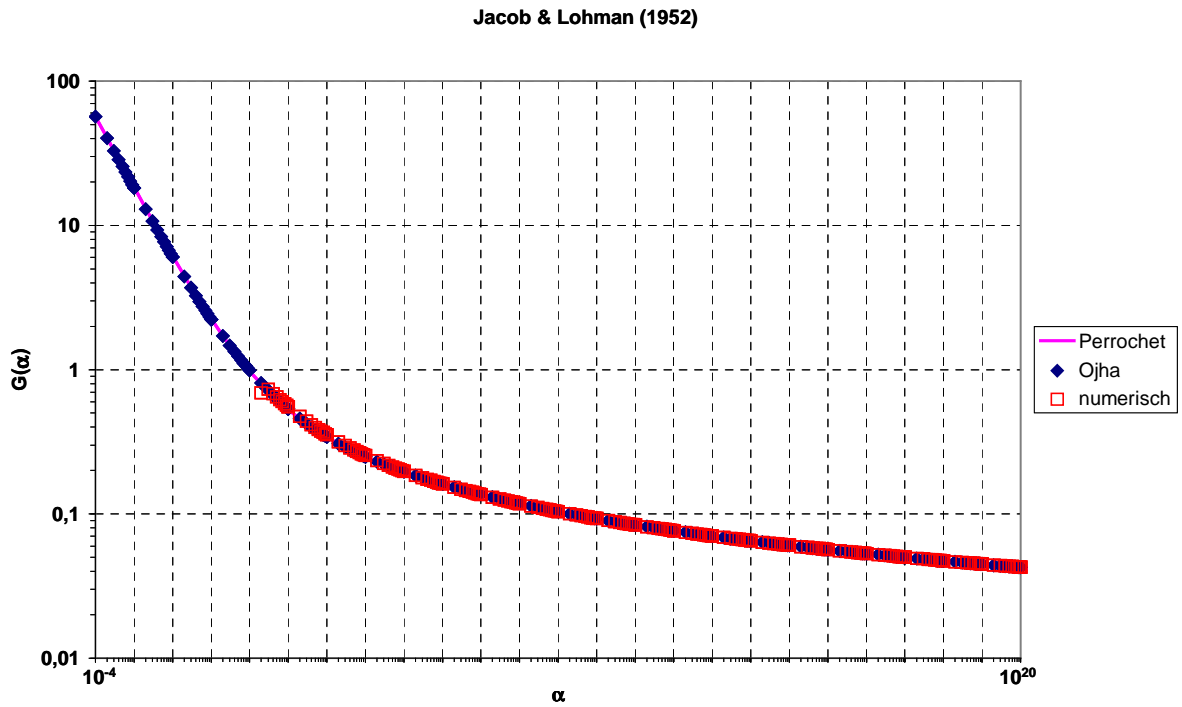
$$\text{mit } \alpha = \frac{T * t}{S * r_w^2}$$

mit  $S$ : Speicherkoeffizient (-)  
 $r_w$ : Brunnenradius (m)

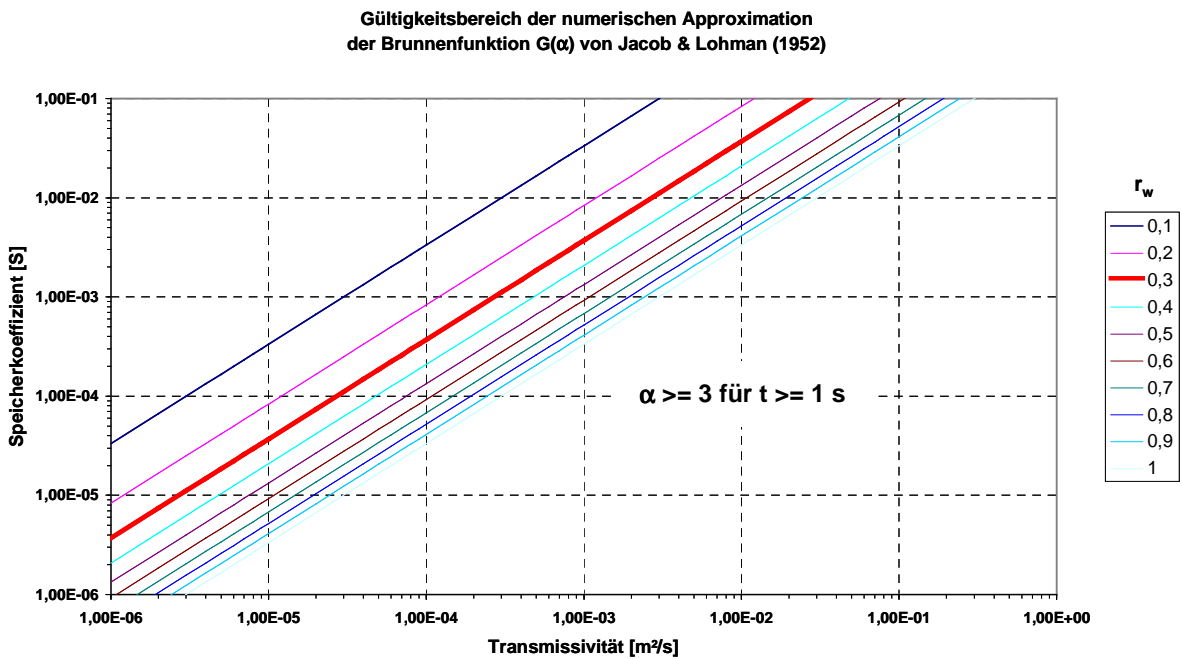
Die Brunnenfunktion  $G(\alpha)$  ist numerisch verhältnismäßig schwierig zu behandeln. In neuester Zeit sind unabhängig voneinander zwei stark vereinfachte Lösungsalgorithmen zur Berechnung der Brunnenfunktion  $G(\alpha)$  innerhalb des relevanten Wertebereichs  $\alpha = 10^{-4} \dots 10^{20}$  veröffentlicht worden (OJHA, 2004; PERROCHET, 2005).

Diese Brunnenfunktion kann nicht ohne Weiteres in MRQWIN integriert werden. Eine gleichzeitige Auswertung des Pumpbrunnens (Förderrate  $Q(t)$ ) und von Grundwassermessstellen (Absenkung  $s(t)$ ) würde ein uneinheitliches Optimierungskriterium darstellen. Außerdem sollte nach der Ideologie von MRQWIN eine universelle Lösung unabhängig vom Aquifermodell (entsprechend der Lösung für die Brunnenspeicherung) bestehen. Eine einfache teilnumerische Lösung ergibt eine befriedigende Genauigkeit für  $\alpha \geq 3 * 10^0$  (Bild 1). Damit wird ein erheblicher Teil des gängigen Parameterbereichs für Transmissivität und Speicherkoeffizient abgedeckt (Bild 2), insbesondere unter Berücksichtigung von Brunneneffekten (Brunnenspeicherung, Reibungs- und Trägheitsverluste) in der Frühphase von

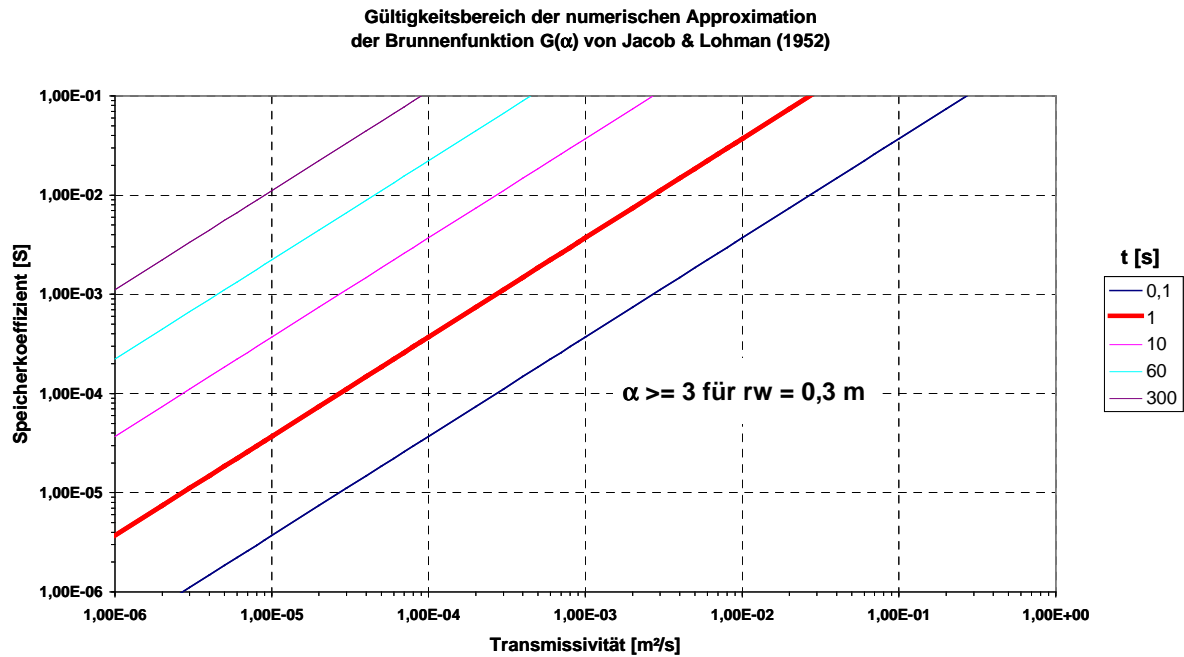
Pumpversuchen. Eine Implementierung dieses neuen Algorithmus' ist erst für den Fall konkreter Anwendungen vorgesehen.



**Bild 1:** Vergleich der verschiedenen Approximationen der Brunnenfunktion  $G(\alpha)$  nach JACOB & LOHMAN (1952)



**Bild 2a:** Gültigkeitsbereich der numerischen Approximation der Brunnenfunktion  $G(\alpha)$  nach JACOB & LOHMAN (1952) in Abhängigkeit vom Brunnenradius  $r_w$



**Bild 2b:** Gültigkeitsbereich der numerischen Approximation der Brunnenfunktion  $G(\alpha)$  nach JACOB & LOHMAN (1952) in Abhängigkeit von der Pumpzeit  $t$

#### Literatur:

JACOB, C.E. & LOHMAN, S.W. (1952): Nonsteady flow to a well of constant drawdown in an extensive aquifer.- American Geophysical Union Transactions, 33: 559 - 569; Washington, D.C.

OJHA, C.S.P. (2004): Aquifer parameters estimation using artesian well test data.- Journal of hydrologic engineering, 9: 64 - 67; New York

PERROCHET, P. (2005): A simple solution to tunnel or well discharge under constant drawdown.- Hydrogeology journal, 13: 886 - 888; Berlin

RICE, J.B. (1998): Constant drawdown aquifer tests: an alternative to traditional constant rate tests.- Ground water monitoring and remediation, 18(2): 76 - 78; Westerville, OH

### 3. Festgesteinsgrundwasserleiter

In der schon oben erwähnten Umfrage unter Anwendern von MRQWIN im Sommer 2005 hat es sich gezeigt, dass das Programm von vielen Anwendern fallweise auch zur Auswertung von Pumpversuchen in Festgesteinsgrundwasserleitern herangezogen wird. Eine diesbezügliche Nachfrage hat gezeigt, dass wie im Fachschrifttum auch von Praktikern die Übertragbarkeit von Modellen für Porengrundwasserleiter auf Festgesteinsgrundwasserleitern kontrovers beurteilt wird. Im eigenen Haus liegen standortbedingt (Hamburg!) keine Erfahrungen vor.

Eine Vielzahl mathematischer Ansätze für die Behandlung von Kluffgrundwasserleitern stammt aus dem Bereich der Erdölförderung (HORNE, 1995; BOURDET, 2002). In diesen Ansätzen sind teilweise Aquifer- und Brunneneigenschaften vermischt, sodass sie sich nicht ohne Weiteres in das Konzept von MRQWIN einfügen würden. Historisch bedingt sind manche Ansätze für Brunneneffekte physikalisch fragwürdig (bis zu sechs „Skin“-Komponenten!).

Im hydrogeologischen Bereich relativ gebräuchliche Ansätze (MOENCH, 1984; BARKER, 1988) beschreiben nur einen Teil der Strömungsphänomene in Kluffsystemen. Der weiter gehende Ansatz einer französischen Arbeitsgruppe (LODS & GOUZE, 2004) ist meines Erachtens noch nicht ausreichend validiert. Mit diesem Modell führe ich zur Zeit numerische Experimente durch, sodass im Verlauf des Jahres 2006 die Anwendbarkeit geklärt sein sollte.

#### Literatur:

BARKER, J.A. (1988): A generalized radial flow model for hydraulic tests in fractured rock.- Water resources research, 24: 1796 - 1804; Washington, D.C.

BOURDET, D. (2002): Well test analysis: the use of advanced interpretation models.- Handbook of petroleum exploration and production, 3: XII + 426 S.; Amsterdam

HORNE, R.N. (1995): Modern well test analysis. 2nd edition.- Petroway: IV + 257 S.; Palo Alto, CA

LODS, G. & GOUZE, P. (2004): WTFM, software for well test analysis in fractured media combining fractional flow with double porosity and leakance approaches.- Computers and geosciences, 30: 937 - 947; Oxford

MOENCH, A.F. (1984): Double-porosity models for a fissured groundwater reservoir with fracture skin.- Water resources research, 20: 831 - 846; Washington, D.C.

#### 4. Die Calcitlösekapazität – rechtliche Anforderungen und der „Stand der Technik“

Mit dem Inkrafttreten der Neufassung der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) am 01.01.2003 ist ein neuer Parameter installiert worden, die „Calcitlösekapazität“. Diese Größe ist zwar nur für den Ausgang des Wasserwerks im Hinblick auf Korrosion im Rohrleitungsnetz einschließlich der Hausanschlussleitungen mit einem Grenzwert belegt (5 mg/l). Im Rahmen von hydrogeologischen Erschließungsarbeiten kann aber schon frühzeitig die Frage nach den korrosiven Eigenschaften des Grundwassers und den möglicherweise erforderlichen Aufbereitungsmaßnahmen auftreten. Daneben regelt die TrinkwV, dass im Verteilungsnetz gebildete Mischwässer, insbesondere bei verbundenen Versorgungsgebieten mehrerer Wasserwerke, eine Calcitlösekapazität von 10 mg/l nicht überschreiten dürfen.

Die Bestimmung der Calcitlösekapazität mit dem Marmorlöseversuch nach Heyer ist zu ungenau, um im Bereich des geforderten Grenzwertes zuverlässige Messungen zu erlauben. Sie erfolgt daher rechnerisch nach DIN 38404-10 (04/1995). In dieser Norm wird als vollständige Lösung des Problems der Aufbau eines hydrogeochemischen Modellprogramms (Verfahren DIN 38404 – C 10-R 3) beschrieben. Naiven Gemütes könnte man auf die Idee kommen, dass solche Programme schon seit vielen Jahren existieren und international weite Verbreitung und Akzeptanz gefunden haben. Die aktuelle Version 2.12 des Standardprogramms PHREEQC ([http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC\\_coupled/phreeqc/index.html](http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/index.html)) sollte die Berechnungen mit hinreichender Richtigkeit und Genauigkeit erledigen. Ein Vergleich von DIN und PHREEQC zeigt jedoch, dass in der DIN erhebliche Abweichungen hinsichtlich der systembestimmenden Reaktionen und geringere Abweichungen hinsichtlich der thermodynamischen Modellparameter vorliegen. Kurz gesagt: Wir glauben zwar alle, dass man mit PHREEQC Hydrochemie rechnen kann, sind damit aber nicht DIN-konform. Eine Vergleichsrechnung mit den Beispieldaten der DIN zeigt, dass die Abweichungen in einer Größenordnung liegen, die den natürlichen Schwankungen der Wasserqualität bzw. der Mess- und Analysengenauigkeit im Routinebetrieb entspricht, sehr wohl aber zu „falschen“ Aussagen hinsichtlich der Einhaltung des Kriteriums der TrinkwV führen.

Für alle diejenigen, denen der Weltstandard ausreicht, habe ich im Programm WINHYCH eine Schnittstelle zur direkten Berechnung der Calcitlösekapazität bei der Probertemperatur mittels PHREEQC (Batch-Version) implementiert. Für Berechnungen bei anderen Temperaturen oder für Mischwasserbildungen können die Datensätze komfortabel mit der interaktiven PHREEQC-Version für Windows weiter bearbeitet werden.