Een snelle benadering van de formule van Hantush

- Kees Maas KWR en TU Delft, Sectie Waterhuishouding
- Ed Veling TU Delft, Sectie Waterhuishouding

Samenvatting

De formule van Hantush voor het interpreteren van tijdsafhankelijke pompproeven in semi-spanningswater is één van de beroemdste formules uit de geohydrologie. Het is echter een lastige wiskundige uitdrukking. In de loop der jaren zijn er vaak methoden voorgesteld om de formule te evalueren. Voor toepassing in een programma voor tijdreeksanalyse, dat de formule soms vele honderden keren aanroept, liepen we toch nog tegen beperkingen van de bestaande methoden aan. We hebben een zeer snelle en robuuste benaderende methode ontwikkeld, die ook voor praktisch gebruik buiten onze toepassing handig kan zijn. Voor wie hem zou willen gebruiken presenteren we in dit artikel een compacte Matlab-code. Voor wiskundig geïnteresseerde lezers geven we vervolgens de afleiding.

Inleiding

In 1955 leidde Hantush een formule af voor het interpreteren van pompproeven in zogenaamde half afgesloten aquifers die sindsdien onder geohydrologen onverminderd populair is (Hantush en Jacob, 1955). De zoektermen 'Hantush' en 'groundwater' leverden ons onlangs 11.600 hits op in Google. In zekere zin is dat verbazingwekkend, want het gaat om een tamelijk beroerde uitdrukking in de vorm van een onbepaalde integraal, waarvoor zeker in het begin geen handige oplosmethoden bestonden. Dit is hem:

$$W\left(\frac{r^2 S}{4kDt}, \frac{r}{\lambda}\right) = \int_{\frac{r^2 S}{4kDt}}^{\infty} \frac{1}{u} \exp\left(-u - \frac{r^2}{4\lambda^2 u}\right) du \qquad (1)$$

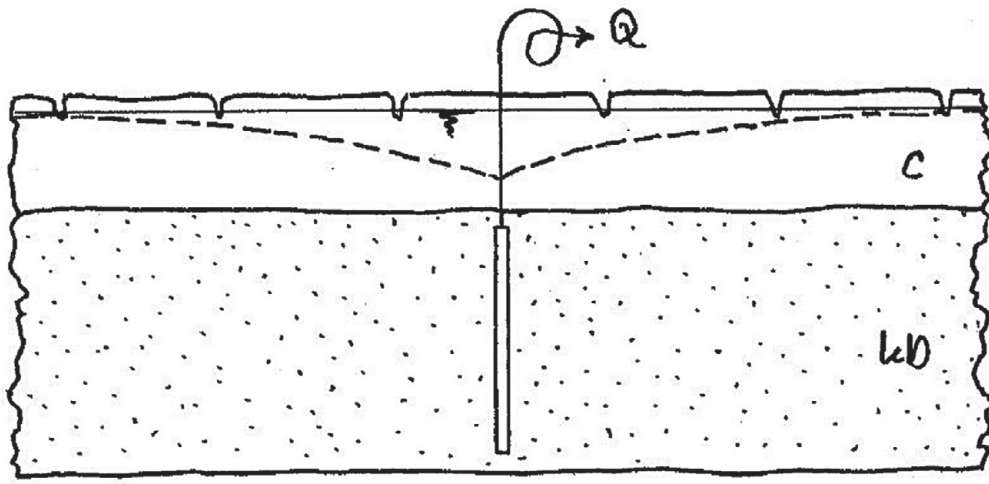
W gebruikelijke benaming van de well function (in de literatuur ook wel gebruikt voor andere putformules)
r afstand tot de put (m)
S elastische bergingscoëfficiënt (-)
kD doorlaatvermogen van de aquifer (m^2/d)
t tijd (d)
λ spreidingslengte (m), $\lambda = \sqrt{kDc}$
c weerstand van de afdekkende laag (d)
u integratievariabele

De verlaging van de stijghoogte van het grondwater tijdens een pompproef wordt uitgerekend met:

$$\varphi(r,t) = \frac{Q}{4\pi kD} W\left(\frac{r^2 S}{4kDt}, \frac{r}{\lambda}\right) \qquad (2)$$

φ verlaging (m)
Q debiet van de pompput (m3/d)
De formule geldt voor een half-afgesloten aquifer (figuur 1). De grondwaterstand bovenin

de afdekkende slecht doorlatende laag wordt vastgehouden, bijvoorbeeld door een dicht netwerk van sloten.



FIGUUR 1: REKENSCHEMA VOOR DE FORMULE VAN HANTUSH

De uitdrukking voor de eindverlaging, die ook door Hantush en Jacob gepresenteerd werd, was hier te lande al veel eerder bekend als 'formule van De Glee' (Kooper, 1914, De Glee, 1930):

$$\varphi\left(r,\infty\right)=\frac{Q}{2\pi kD}K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \qquad (3)$$

Hoe de Besselfunctie K_0 moet worden uitgerekend is tegenwoordig wel gemeengoed, maar in de vakliteratuur duiken nu al ruim een halve eeuw met enige regelmaat artikelen op die de evaluatie van (2) steeds opnieuw behandelen. Voor een deel betreft het verbeterde wiskundige inzichten, maar een belangrijker reden is dat steeds geavanceerdere wiskundige software binnen ieders handbereik komt. Ingewikkelde transcendente functies waar praktiserende hydrologen vroeger met een boog omheen liepen zijn inmiddels met een druk op de knop beschikbaar.

Hoewel er dus een keur aan benaderende en zelfs exacte methoden voorhanden is, kunnen er bij toepassingen die een zeer veelvuldige evaluatie van de formule van Hantush vergen voor soms extreme parameterwaarden toch nog weleens problemen optreden ten aanzien van de robuustheid en de nauwkeurigheid. Dit kan zich bijvoorbeeld voordoen bij het automatisch interpreteren van pompproeven. Wij liepen er tegen aan met Menyanthes, een programma voor het analyseren van tijdreeksen van de grondwaterstand (www.menyanthes.nl). Een review van de literatuur mondde uit in een speurtocht waarover we elders verslag uitbrengen (Veling en Maas, 2010). Er blijken in de loop van de tijd veel vergissingen te zijn binnengeslopen. Behalve tot een nieuwe exacte methode en een verbeterde evaluatie van een bestaande exacte methode inspireerde de zoektocht ons ook tot een snelle benaderende methode voor praktisch gebruik, die interessant kan zijn voor lezers die over Matlab beschikken. De methode maakt gebruik van geavanceerde wiskundige functies, die echter in Matlab beschikbaar zijn.

Hier is de code:

```
function h = Hantush(kD,c,S,r,t,Q)
rho = r/sqrt(kD*c);
tau = log(2/rho*t/(c*S));
h = Q/(4*pi*kD)*F(rho,tau);

function h = F(rho,tau)
tau = tau(:);
tau(find(tau>100)) = 100;
h_inf = besselk(0,rho);
w = (expint(rho)-h_inf)/(expint(rho)-expint(rho/2));
I = h_inf - w*expint(rho/2*exp(abs(tau))) + (w-1)*expint(rho*cosh(tau));
h = h_inf + sign(tau).*I;
```

De tweede functie is onze benadering van Hantush's 'well function' (1). Hij wordt aangeroepen door de eerste, waarmee de verlaging uitgerekend wordt; zie (2). De eerste functie accepteert de tijd t als vector; de overige parameters zijn scalair verondersteld. De benadering is continu en heeft continue eerste afgeleiden naar zijn parameters, wat van belang is voor toepassing in optimalisatie-algoritmen.

De rest van dit artikel is voor mensen die nieuwsgierig zijn hoe we erbij komen.

***

Methode

Om de notatie overzichtelijk te houden schrijven we (1) als:

$$I = \int_0^t \frac{1}{t'} e^{-bt' - \frac{a}{t'}} dt' \qquad (4)$$

I staat voor *integraal* en de betekenis van en volgt uit een vergelijking van (4) met (1). Dat het bereik van de integraal (0,t) is in plaats van (u,∞) , zoals in (1), komt doordat we overgegaan zijn van u op 1/u . De integrand heeft een singulariteit op t'=0 , die verwijderd kan worden door over te gaan van t' op τ'=lnt' :

$$I = \int_{\tau'=-\infty}^{\tau'=\ln t} e^{-be^{\tau'} - ae^{-\tau'}} d\tau' \qquad (5)$$

De nieuwe integrand is een regelmatige functie van τ . Hij is bovendien symmetrisch ten aanzien van $\tau' = \ln\sqrt{a/b}$, wat ingezien kan worden door hem te verschuiven volgens $\tau = \tau' - \ln\sqrt{a/b}$. Het resultaat is:

$$I = \int_{\tau=-\infty}^{\tau=\ln t-\ln\sqrt{\frac{a}{b}}} e^{-\sqrt{ab}e^{\tau}-\sqrt{ab}e^{-\tau}}\, d\tau \qquad (6)$$

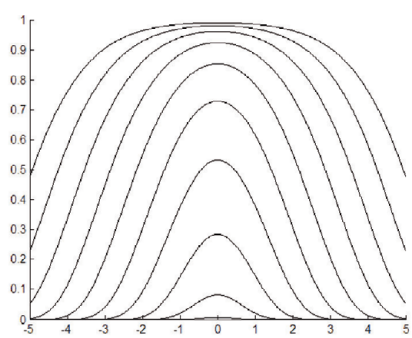
wat ook geschreven kan worden als:

$$I = \int_{\tau=-\infty}^{\tau=\ln t-\ln\sqrt{\frac{a}{b}}} e^{-\rho\cosh\tau}\, d\tau \qquad (7)$$

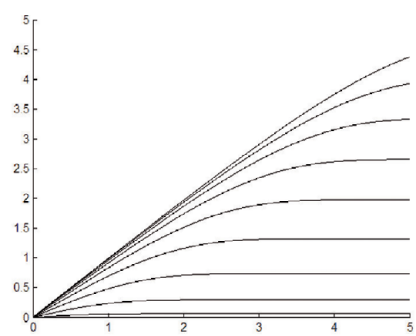
Hierin is $\rho = 2\sqrt{ab}$. De functie cosh(τ)is symmetrisch ten aanzien van $\tau = 0$, dus de hele integrand is dat ook. Om gevoel te krijgen voor de numerieke waarden die ρ kan aannemen tijdens een tijdreeksanalyse van de grondwaterstand merken we op dat:

$$\rho = 2\sqrt{ab} = \frac{r}{\lambda} \qquad (8)$$

Dit is afgeleid door (1) en (4) te vergelijken; λ is de spreidingslengte: $\lambda = \sqrt{kDc}$. Als $r/\lambda > 5$ hoeven we geen noemenswaardige invloed meer te verwachten van een onttrekking, dus is een aannemelijke indicatie voor een bovengrens van ρ . Voor pompproeven kan de ondergrens tot nul naderen, maar voor het doel van tijdreeksanalyse lijkt ρ = 0.001 al tamelijk klein. Figuur 2 toont een paar voorbeelden van het verloop van de integrand voor verschillende waarden van ρ .



FIGUUR 2: INTEGRAND $e^{-\rho\cosh\tau}$ VAN (7) VOOR (VAN BOVEN NAAR BENEDEN) $\rho = 10^{-2},\ldots,10^{0.7}$ (10 STAPPEN, LOGARITMISCH GESPREID). VERTICAAL STAAT DE WAARDE VAN DE INTEGRAND; HORIZONTAAL STAAT DE WAARDE VAN τ



FIGUUR 3: INTEGRALEN VAN DE KROMMEN UIT FIGUUR 2 OVER HET INTERVAL [0,5]. VERTICAAL STAAT DE WAARDE VAN DE INTEGRAAL; HORIZONTAAL STAAT DE WAARDE VAN τ

Dankzij de symmetrie kunnen we ons beperken tot het positieve bereik van τ , dus van nu af aan beschouwen we:

of:
$$\tilde{I} = \int_0^{\tau} e^{-\rho \cosh\tau'} d\tau' \tag{9}$$

waarin:
$$\tilde{I} = K_0(\rho) - \int_{\tau}^{\infty} e^{-\rho \cosh\tau'} d\tau' \tag{10}$$

$$\tau = \ln t - \ln\sqrt{\frac{a}{b}} \tag{11}$$

terwijl K_0 de gemodificeerde Besselfunctie van de tweede soort, orde nul is. Dat de integraal van 0 tot ∞ een Besselfunctie moet opleveren weten we omdat de eindverlaging door de formule van De Glee (3) wordt beschreven.

Helaas bleek Mathematica's Online Integrator uitdrukking (10) niet te kennen. De website (http://integrals.wolfram.com/index.jsp) suggereert dat er voor de integraal dan ook wel geen gesloten uitdrukking zal bestaan, maar dat klopt niet. Wij kennen er sowieso al drie (Veling en Maas, 2010). Maar zoals we in de inleiding aangaven namen die te veel tijd in beslag voor ons doel. We konden ze wel gebruiken om figuur 3 te produceren. Die geeft de integralen van de krommen in figuur 2, maar dan gerekend vanaf $\tau = 0$.

De volgende stap was om dan maar een benadering te zoeken. Omdat de formule in een optimalistatieproces gebruikt moest gaan worden was het belangrijk om een continue benaderende functie te vinden, die ook continu is in zijn afgeleiden naar de parameters a en b. Onze tactiek is geweest om twee uitdrukkingen te zoeken, waarvan er één de krommen in figuur 3 van de onderkant af benadert, terwijl de ander de krommen juist van de bovenkant af benadert, en om van deze twee benaderingen een gewogen gemiddelde te nemen.

Benadering van onderaf

De cosh-functie kan per definitie geschreven worden als $\cosh(\tau') = \frac{1}{2}\left(e^{\tau'} + e^{-\tau'}\right)$. Door hem te vervangen door $\frac{1}{2}e^{\tau'}$ vinden we een benadering van $\tilde{I}$ van onderaf:

$$\tilde{I}_{\uparrow} = K_0(\rho) - \int_{\tau}^{\infty} e^{-\frac{\rho}{2}e^{\tau'}}\, d\tau' = K_0(\rho) - E_1\left(\frac{\rho}{2}e^{\tau}\right) \qquad (12)$$

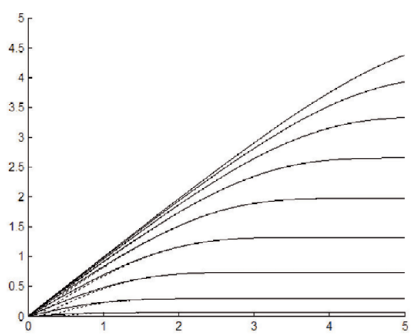
Deze integraal kende Mathematica's Online Integrator wel. Zoals in figuur 4 te zien is, nadert deze functie tot $\tilde{I}$ als $\tau \gg \infty$. is the exponentiële integraal, die in Matlab, Maple and Mathematica beschikbaar is, en waarschijnlijk in elk wiskundeprogramma. Geohydrologen kennen hem uit de formule van Theis (1935).

Benadering van bovenaf

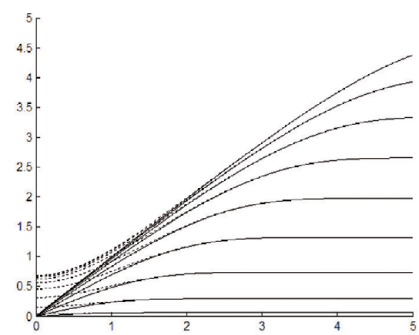
Om een benadering van bovenaf te vinden vermenigvuldigen we de integrand met (τ') . Dit is een functie die op 0 begint en op een monotone manier al gauw naar l toegaat. Ook deze integraal werd herkend door Mathematica's Online Integrator:

$$\tilde{I}_{\downarrow} = K_0(\rho) - \int_{\tau}^{\infty} e^{-\rho\cosh\tau'} \tanh\tau'\, d\tau' = K_0(\rho) - E_1(\rho\cosh\tau) \qquad (13)$$

De exponentiële integraal verschijnt hier nogmaals, maar nu met een ander argument. Figuur 5 laat zien dat de benadering weer naar toegaat als .



FIGUUR 4: BENADERING VAN ONDERAF (STIPPELLIJNEN)



FIGUUR 5: BENADERING VAN BOVENAF (STIPPELLIJNEN)

Combinatie van de twee benaderingen

De volgende uitdrukking is een lineaire combinatie van de twee benaderingen die er in elk geval voor zorgt dat het gewenste gedrag voor $\tau \to \infty$ behouden blijft:

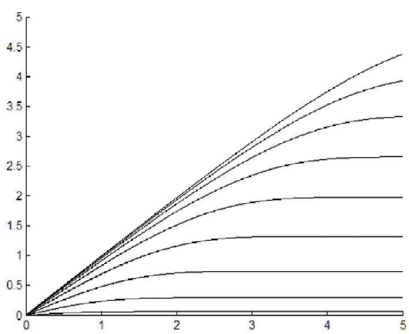
$$\tilde{I}_{\updownarrow} = K_0(\rho) - wE_1\left(\frac{\rho}{2}e^{\tau}\right) + (w-1)E_1(\rho\cosh\tau) \tag{14}$$

Om ervoor te zorgen dat de benadering continu is eisen we dat $\tilde{I}_{\updownarrow}(0) = 0$:

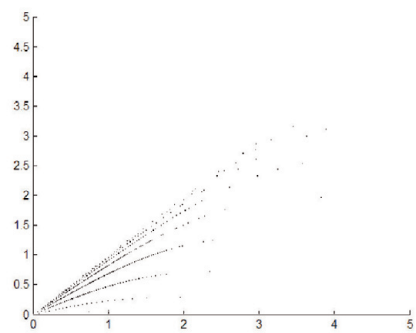
$$0 = K_0(\rho) - wE_1\left(\frac{\rho}{2}\right) + (w-1)E_1(\rho) \tag{15}$$

zodat:

$$w = \frac{E_1 - K_0(\rho)}{E_1(\rho) - E_1\left(\frac{\rho}{2}\right)} \tag{16}$$



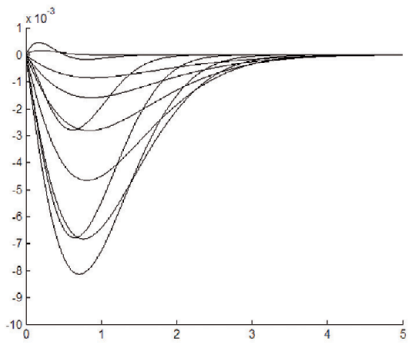
FIGUUR 6: BENADERING DOOR EEN LINEAIRE COMBINATIE VAN DE BENADERING VAN ONDERAF EN EEN BENADERING VAN BOVENAF (STIPPELLIJNEN).



FIGUUR 7: ZELFDE ALS FIGUUR 6, MAAR DE GETROKKEN LIJNEN ZIJN NU IN WIT AFGEDRUKT. ZE BEDEKKEN DE STIPPELLIJNEN GEDEELTELIJK.

Figuur 6 toont het resultaat. De nieuwe benadering is zo dichtbij dat de stippellijnen haast niet te zien zijn. Daarom hebben we in figuur 7 de getrokken lijnen in wit afgedrukt. De stippellijnen zijn nog een beetje te zien op plaatsen waar ze niet door de getrokken lijnen bedekt worden.

Figuur 8 laat het verschil tussen de benadering en het exacte verloop in meer detail zien. De verschillen hangen sterk af van ρ . Volgens deze figuur is de grootste fout ongeveer 3‰ van de (geschaalde) eindverlaging, wat voor ingenieurstoepassingen wel goed genoeg is. Hij treedt op voor $\rho = 0.3$. Uit een vergelijking met de exacte oplossing blijkt dat de grootste relatieve fout 3.3‰ bedraagt.



FIGUUR 8: VERSCHIL TUSSEN ONZE BENADERING $\tilde{\phi}_b$ EN DE EXACTE WAARDEN (DIT ZIJN DE GETROKKEN LIJNEN VAN FIGUUR 6, AFGETROKKEN VAN NAUWELIJKS ZICHTBARE STIPPELLIJNEN IN DEZELFDE FIGUUR). VERTICAAL STAAT DE FOUT; HORIZONTAAL STAAT τ

Resultaat voor alle waarden van τ

Wegens symmetrie konden we onze beschouwing beperken tot $\tau \geq 0$. Als we alles bijeenvegen luidt het eindresultaat:

$$F(\rho,\tau) = \begin{cases} wE_1\left(\frac{\rho}{2}e^{-\tau}\right) - (w-1)E_1(\rho\cosh\tau) & \tau \leq 0 \\ 2K_0(\rho) - wE_1\left(\frac{\rho}{2}e^{\tau}\right) + (w-1)E_1(\rho\cosh\tau) & \tau > 0 \end{cases} \qquad (17)$$

$$w = \frac{E_1(\rho) - K_0(\rho)}{E_1(\rho) - E_1\left(\frac{\rho}{2}\right)}$$

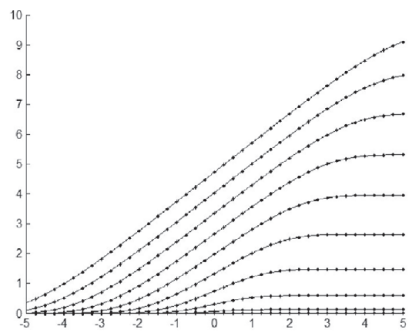
$F(\rho,\tau)$ is een benadering van (7), dus van (4), en dus ook van (1). Figuur 9 laat enkele verlagingskrommen zien voor verschillende waarden van ρ (dus van r/λ). De puntjes zijn exact; ze dienen als referentie. Zoals gezegd is de benadering continu in τ en in zijn eerste afgeleiden naar de parameters, wat van belang kan zijn voor bepaalde toepassingen.

De putformule van Hantush

Omwille van de overzichtelijkheid hebben we gewerkt met een parameter ρ en een geschaalde tijd τ. Als we onze stappen terug volgen vinden we de volgende uitdrukking in termen van de vertrouwde geohydrologische parameters:

$$W(r,t) \approx \frac{Q}{4\pi kD} F(\rho,\tau) = \frac{Q}{4\pi kD} F\left\{\frac{r}{\lambda}, \ln\left(2\frac{\lambda}{r}\frac{t}{cS}\right)\right\} \qquad (18)$$

Q is het debiet (m3/d), kD is het doorlaatvermogen van de aquifer (m^2/d), r is radiale afstand gemeten vanaf de put (m), λ is de spreidingslengte (m), t is de tijd (d), c is de weerstand van de afdekkende laag (d) en S is de elastische bergingscoëficiënt (-). W staat voor de putformule van Hantush en F staat voor onze benadering van de integraal die in de formule van Hantush voorkomt.



FIGUUR 9: BENADERING VAN $\int_{-\infty}^{\tau'} e^{-\rho \cosh\tau'} d\tau'$ DOOR $F(\rho,\tau)$ VOOR $\rho = 10^{-2},\ldots,10^{0.7}$ (10 STAPPEN, LOGARITMISCH GESPREID). DE BOLLETJES ZIJN EXACTE WAARDEN.

Referenties

Glee, G.J. de (1930) Over grondwaterstroomingen bij wateronttrekking door middel van putten; proefschrift, J. Waltman jr., Delft.

Hantush, M.S. en C.E. Jacob (1955) Non-steady Radial Flow in an Infinite Leaky Aquifer; in: Transactions, American Geophysical Union 36, pag 95-100.

Kooper, J. (1914) Verslag omtrent de werkzaamheden van de Centrale Commissie voor de Drinkwatervoorziening en van het Rijksbureau voor Drinkwatervoorziening in het jaar 1913; 's-Gravenhage, ter Algemeene Landsdrukkerij.

Theis, C.V. (1935) The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using ground-water storage; in: American Geophysical Union Transactions, 16th Annual Meeting, vol 16, part 2, pag 519-524.

Veling, E.J.M en C. Maas (2010) Hantush Well Function Revisited; aangeboden aan Journal of Hydrology.