



ΝΑΜΑ
ΕΜΠ
ΔΕΥΑΚ
ΑΕΙΦΟΡΙΚΗ
ΜΔΣ



**Γ' Κοινοτικό Πλαίσιο Στήριξης 2000-2006
Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Ανταγωνιστικότητα**

**ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΣΕ
ΣΥΖΕΥΞΗ ΜΕ ΕΞΕΛΙΓΜΕΝΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ**

ΟΔΥΣΣΕΥΣ

Τεύχος 4β

**Θεωρητική τεκμηρίωση μοντέλου ανάλυσης
παράκτιων υδροφορέων**

**Αθήνα
Ιούνιος 2005**

Α. Μαντόγλου, Γ. Κουράκος

Συνεργαζόμενοι φορείς



NAMA Σύμβουλοι Μηχανικοί και Μελετητές Α.Ε.



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Τομέας Υδατικών Πόρων
Υδραυλικών και Θαλάσσιων Έργων



Δημοτική Επιχείρηση Ύδρευσης και Αποχέτευσης
Καρδίτσας

ΑΕΙΦΟΡΙΚΗ

Αειφορική Δωδεκανήσου Α.Ε.

MDS

Αδωνις Κοντός και ΣΙΑ Ε.Ε. (Marathon Data Systems)

Ενότητα Εργασίας 4

Ανάπτυξη μοντέλου λειτουργικής προσομοίωσης και
βελτιστοποίησης της διαχείρισης υδατικών
συστημάτων

Τεύχος 4β

Θεωρητική τεκμηρίωση μοντέλου ανάλυσης
παράκτιων υδροφορέων

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το μοντέλο ανάλυσης παράκτιων υδροφορέων (ΑΛΣ) αποτελεί μέρος του εξελιγμένου υπολογιστικού συστήματος «ΟΔΥΣΣΕΥΣ», για την ολοκληρωμένη διαχείριση υδατικών συστημάτων. Ο κύριος στόχος του μοντέλου είναι η βέλτιστη διαχείριση παράκτιων υπόγειων υδροφορέων. Για το σκοπό αυτό αναπτύχθηκε ένα μαθηματικό μοντέλο προσομοίωσης της κίνησης των υπόγειων νερών ικανό να προεκτιμά το πεδίο υδραυλικού φορτίου για διάφορα σενάρια επιφανειακής τροφοδοσίας, σε συνδυασμό με σενάρια άντλησεων πηγαδιών, και να υπολογίζει με ακρίβεια την θέση της αλάτινης σφήνας. Σε συνδυασμό με το μαθηματικό μοντέλο προσομοίωσης υλοποιήθηκε ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης βασισμένος σε ακολουθιακό τετραγωνικό προγραμματισμό (S.Q.P.) ο οποίος για κάθε σενάριο επιφανειακής τροφοδοσίας υπολογίζει τις μέγιστες επιτρεπόμενες τιμές άντλησης από τα ενεργά πηγάδια του υδροφορέα έτσι ώστε τα πηγάδια να μην έρθουν σε επαφή με την αλάτινη σφήνα. Το μοντέλο είναι σχεδιασμένο ώστε να αντλεί τα δεδομένα αυτόματα από ένα σύστημα γεωγραφικών πληροφοριών. Επιπλέον υπάρχει δυνατότητα είτε να λειτουργεί αυτόνομα, είτε να συνδυάζεται εύκολα με οποιαδήποτε μοντέλο διαχείρισης υδατικού δυναμικού.

ABSTRACT

The coastal aquifer model (ALS) is a part of the advanced computer system "ODYSSEYS", developed for water resources management. The purpose of this model is optimum management of coastal aquifers. A mathematical model of flow simulation is first developed in order to calculate the hydraulic head field, for given recharge and stress rates. Adopting the sharp interface approximation, the toe of seawater intrusion lens is calculated dependent on the solution of the hydraulic head field. Along with the mathematical simulation model an optimization procedure was developed based on Sequential Quadratic Programming. The integration of the simulation model and the optimization method resulted in a tool, capable of finding the optimum pumping rates of several wells subject to constraints, whose objective is to protect the wells from seawater intrusion. This model is designed so as to receive inputs from a Geographic Information System without requiring advanced knowledge of the underlying model details from the users.

Πίνακας περιεχομένων

Πίνακας περιεχομένων.....	1
Πίνακας Σχημάτων	1
1 Εισαγωγή	2
2 Περιγραφή μαθηματικού μοντέλου προσομοίωσης	3
2.1 Γενικά – Το πρόβλημα της υφαλμύρωσης	3
2.2 Μαθηματική προσομοίωση	3
3 Βελτιστοποίηση με γραμμικό προγραμματισμό	7
3.1 Αλγόριθμος υπολογισμού απόστασης	8
3.2 Παράμετροι αλγόριθμου βελτιστοποίησης.....	12
Αναφορές – βιβλιογραφία	14
4 Παράρτημα	15

Πίνακας Σχημάτων

Σχήμα 2.1 Τομή παράκτιου φρεάτιου υδροφορέα με ένα πηγάδι	4
Σχήμα 3.1 Υπολογισμός απόστασης με βάση γραμμή αναφοράς.....	9
Σχήμα 3.2 Παραδείγματα Υδροφορέων. α) Υδροφορέας με 3 ακτογραμμές, β)Υδροφορέας με μια ακτογραμμή.....	10
Σχήμα 3.3 Περιγραφή αλγόριθμου υπολογισμού απόστασης.....	11
Σχήμα 3.4 Υπολογισμός απόστασης υφαλμύρωσης	12

1 Εισαγωγή

Το παρόν τεύχος περιγράφει το μοντέλο ΑΛΣ που αφορά την προσομοίωση και βελτιστοποίηση αντλήσεων παρακτίων υδροφορέων. Το μοντέλο αυτό συμβάλει στην εκτίμηση των υδατικών αναγκών υπολογίζοντας την μέγιστη επιτρεπόμενη άντληση από τα ενεργά φρεάτια ενός υπόγειου υδροφορέα έτσι ώστε να προστατεύεται από την υπαλμύρωση και να εμποδίζεται η υποβάθμιση της ποιότητας του αντλούμενου νερού. Το μοντέλο είναι σχεδιασμένο να λειτουργεί σε συνδυασμό με σύστημα γεωγραφικών πληροφοριών, (ΣΓΠ) όπου τα δεδομένα εισόδου του μοντέλου αντλούνται αυτόματα από ένα ΣΓΠ, και υποστηρίζει το μοντέλο διαχείρισης «Υδρονομέας». Επιπλέον έχει ληφθεί ειδική μέριμνα ώστε το μοντέλο να μπορεί να λειτουργεί αυτόνομα, είτε να συνδυάζεται εύκολα με οποιοδήποτε μοντέλο διαχείρισης υδατικού δυναμικού.

Κατά τον σχεδιασμό έγινε κάθε δυνατή προσπάθεια ώστε το μοντέλο να είναι ταυτόχρονα απλό άλλα και λειτουργικό. Η απλότητα του μοντέλου εξασφαλίζει ότι δεν απαιτείται εξειδικευμένη γνώση από τον χρήστη, ενώ η λειτουργικότητα του διασφαλίζει ότι το μοντέλο θα μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιαδήποτε εφαρμογή ανεξαρτήτως ειδικών οριακών συνθηκών.

2 Περιγραφή μαθηματικού μοντέλου προσομοίωσης

2.1 Γενικά – Το πρόβλημα της υφαλμύρωσης

Ως υφαλμύρωση ενός υπόγειου υδροφορέα ορίζεται η εισροή θαλασσινού νερού σε αυτόν με αποτέλεσμα την υποβάθμιση της ποιότητας του, γεγονός που έχει ως άμεσες συνέπειες την ποιοτική καταστροφή των γεωτρήσεων και τη διατάραξη του οικοσυστήματος.

Το φαινόμενο παρατηρείται σε παράκτιους υδροφορείς, οι οποίοι χρησιμοποιούνται εντατικά για την κάλυψη των αναγκών σε νερό σε περιοχές όπου το αξιοποιήσιμο επιφανειακό δυναμικό δεν επαρκεί. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν τα νησιά του Αιγαίου, όπου η αυξημένη τουριστική ανάπτυξη σε συνδυασμό με την ανεπάρκεια υδατικών πόρων καθιστούν αναγκαία την αξιοποίηση του υπόγειου δυναμικού.

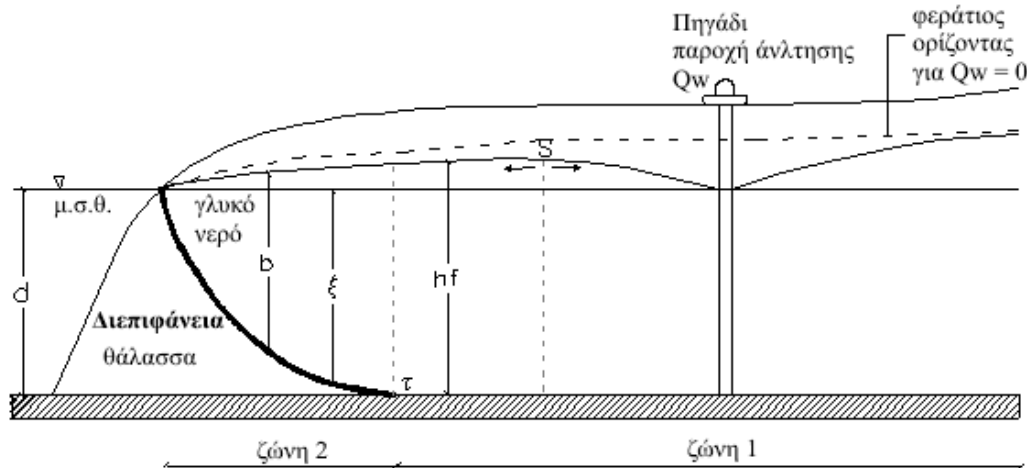
Στην επαφή αλμυρού και γλυκού νερού δημιουργείται μια μεταβατική ζώνη μεταβαλλόμενης πυκνότητας και ορισμένου πάχους γνωστή ως διεπιφάνεια. Πάνω από αυτή κινείται το ελαφρύτερο γλυκό νερό (ειδικό βάρος περίπου $1.000\text{cm}^3/\text{gr}$) που εξέρχεται προς τη θάλασσα ενώ από κάτω συναντάται το αλμυρό νερό (ειδικό βάρος περίπου $1.025\text{cm}^3/\text{gr}$). Οι υδραυλικές παράμετροι και τα χαρακτηριστικά της υπόγειας ροής στη ζώνη αυτή μεταβάλλονται καθώς αλλάζει η πυκνότητα εξαιτίας της μεταβολής της συγκέντρωσης άλατος. Οι Das and Data (1999) μελέτησαν τη «μικτή» αυτή ροή στη ζώνη μεταβαλλόμενης πυκνότητας μέσω κατάλληλου μοντέλου.

2.2 Μαθηματική προσομοίωση

Γενικά υπάρχουν 2 κατηγορίες μοντέλων προσομοίωσης παράκτιων υδροφορέων με διαφορετικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα η κάθε μια. Η μια κατηγορία βασίζεται στην θεώρηση διεπιφάνειας πεπερασμένου πάχους, λόγω υδροδυναμικής διασποράς, όπου θεωρείται ότι υπάρχουν δύο αναμίξιμα υγρά, το αλμυρό νερό της θάλασσας και το καθαρό νερό του υδροφορέα. Σε αυτήν την κατηγορία οι διαφορικές εξισώσεις που χρησιμοποιούνται είναι πολύπλοκες και η επίλυση τους είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα. Επίσης απαιτούνται παράμετροι διασποράς του άλατος που λόγω της πολυπλοκότητας των υδροφορέων είναι συχνά δύσκολο να εκτιμηθούν. Η άλλη κατηγορία βασίζεται στην θεώρηση απότομης διεπιφάνειας, όπου γίνεται η παραδοχή ότι συνυπάρχουν δύο μη αναμίξιμα υγρά και οι εξισώσεις απλοποιούνται με αποτέλεσμα σημαντική οικονομία χρόνου, με κόστος βέβαια στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Σε πολλές περιπτώσεις όμως η προσέγγιση της απότομης διεπιφάνειας δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα, όπως σε περιοχές όπου το πραγματικό πάχος της διεπιφάνειας είναι μικρό σε σχέση με το πάχος του υδροφορέα.

Σε κατάσταση φυσικής ισορροπίας (απουσία άντλησης) η διεπιφάνεια παραμένει ακίνητη. Η αυξημένη όμως άντληση - σε τέτοιο βαθμό ώστε η φυσική επαναπλήρωση να μην οδηγεί στην αποκατάστασή του υδροφορέα - έχει ως αποτέλεσμα την πτώση του πιεζομετρικού φορτίου και την κίνηση της διεπιφάνειας προς το εσωτερικό μέχρι την επίτευξη νέας κατάστασης ισορροπίας. Η ποσότητα του γλυκού νερού που εξέρχεται στη θάλασσα και του αλμυρού νερού που εισέρχεται στον υδροφορέα καθορίζεται από τις τιμές του πιεζομετρικού φορτίου, το οποίο σχετίζεται άμεσα με τις οριακές συνθήκες, την επιφανειακή τροφοδοσία και την άντληση. Με βάση την παραδοχή της απότομης επιφάνειας και σε συνθήκες μόνιμης ροής, η θέση της διεπιφάνειας μπορεί να προσδιοριστεί

χρησιμοποιώντας την παραδοχή Ghyben – Herzberg, θεωρώντας ότι η ροή του γλυκού νερού είναι οριζόντια, και το γλυκό νερό επιπλέει πάνω από το ακίνητο θαλασσινό νερό. Σε συνθήκες μη μόνιμης ροής, η θέση της διεπιφάνειας εξαρτάται από την ποσότητα τόσο του γλυκού όσο και του θαλασσινού νερού που εισέρχεται ή εξέρχεται στον υδροφορέα. Η προσέγγιση της απότομης διεπιφάνειας είναι κατάλληλη μόνο για προσομοίωση μακροχρόνιων ενώ είναι δυνατή η προσομοίωση μικρής χρονικά κλίμακας όταν η κίνηση της διεπιφάνειας πραγματοποιείται με ευκολία.



Σχήμα 2.1 Τομή παράκτιου φρεάτιου υδροφορέα με ένα πηγάδι

Στην εικόνα 2.1 φαίνεται μια κάθετη τομή ενός φρεάτιου υδροφορέα όπου η απότομη διεπιφάνεια διαχωρίζει το γλυκό από το θαλασσινό νερό. Θεωρείται ότι η διεπιφάνεια είναι πρακτικά σταθερή, το θαλασσινό νερό είναι στάσιμο ενώ η ροή του γλυκού νερού είναι μόνιμη και οριζόντια. Έστω ότι τ αντιπροσωπεύει το σημείο όπου η διεπιφάνεια τέμνει τον οριζόντιο πυθμένα του υδροφορέα, το οποίο έχει επικρατήσει να ονομάζεται ως «πόδας» της αλάτινης σφήνας. Επιπλέον ορίζεται ως S το σημείο που αντιστοιχεί σε κλίση υδραυλικού φορτίου ίση με μηδέν, και πρακτικά καθορίζει την περιοχή στην οποία το νερό κινείται προς το πηγάδι με παροχή άντλησης Q_w . Όπως φαίνεται και από την εικόνα 2.1, υπάρχουν 2 ζώνες με διαφορετικά χαρακτηριστικά. Στην ζώνη 1 ισχύουν οι εξισώσεις που θα ίσχυαν σε έναν φρεάτιο υδροφορέα, ενώ στην ζώνη 2 υπάρχει εισροή θαλασσινού νερού με αποτέλεσμα το γλυκό νερό να επιπλέει πάνω από το πιο πυκνό θαλασσινό. Στο σχήμα 2.1 η μεταβλητή d αντιπροσωπεύει το βάθος του υδροφορέα από τον πυθμένα έως την μέση στάθμη θάλασσάς (μ.σ.θ), το b είναι το συνολικό βάθος του γλυκού νερού στη ζώνη 2, το ξ είναι το βάθος του γλυκού νερού μετρημένο από την μ.σ.θ. πάλι στη ζώνη 2, ενώ το h_f είναι το υδραυλικό φορτίο μετρημένο από τον πυθμένα του υδροφορέα. Σύμφωνα με την παραδοχή Ghyben – Herzberg το υδραυλικό φορτίο h_f και το βάθος ξ στη ζώνη 2 συνδέονται με την ακόλουθη σχέση:

$$h_f - d = \delta \cdot \xi \quad (2.1)$$

όπου $\delta = (\rho_s - \rho_f) / \rho_f$, ρ_s είναι η πυκνότητα του θαλασσινού νερού και ρ_f η πυκνότητα του γλυκού νερού. Η παράμετρος δ θεωρείται σταθερή.

Σε συνθήκες μόνιμης ροής η διαφορική εξίσωση που περιγράφει την κίνηση του νερού σε φρεάτιο ετερογενή υδροφορέα της ζώνης 1 δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(Kh_f \frac{\partial h_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(Kh_f \frac{\partial h_f}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (2.2)$$

όπου K είναι η υδραυλική αγωγιμότητα, N είναι η επιφανειακή τροφοδοσία, και Q είναι η παροχή άντλησης ή εισπίεσης. Η αντίστοιχη εξίσωση για την ζώνη 2 έχει την εξής μορφή:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(Kb \frac{\partial h_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(Kb \frac{\partial h_f}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (2.3)$$

Όπου $b = h_f - d + \xi$. Οι εξισώσεις (2.2) και (2.3) μπορούν να γραφτούν στην μορφή της εξίσωσης (2.3) και στις δύο ζώνες όπου

$$\left. \begin{aligned} b &= h_f, & \zeta \acute{\omega}\nu\eta 1 \\ b &= h_f - d + \xi, & \zeta \acute{\omega}\nu\eta 2 \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

Ο Strack (1976) εισήγαγε τον όρο δυναμικό Φ και όρισε:

$$\left. \begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2} [h_f^2 - (1 + \delta) \cdot d^2], & \zeta \acute{\omega}\nu\eta 1 \\ \Phi &= \frac{(1 + \delta)}{2\delta} (h_f - d)^2, & \zeta \acute{\omega}\nu\eta 2 \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις και οι πρώτες παράγωγοι αυτών είναι συνεχείς και στις δύο ζώνες. Στον πόδα της υφάλμυρης σφήνας στο σημείο τ το δυναμικό Φ έχει την ίδια τιμή στις ζώνες 1 και 2 και έτσι προκύπτει :

$$\Phi_{\zeta \acute{\omega}\nu\eta 1} = \Phi_{\zeta \acute{\omega}\nu\eta 2} = [\delta(1 + \delta)/2] d^2 \quad (2.6)$$

Από τις εξισώσεις (2.2), (2.3) και (2.5) προκύπτει ότι το δυναμικό ικανοποιεί την ακόλουθη διαφορική εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (2.7)$$

και στις δύο ζώνες 1 και 2. Στην περίπτωση ομογενούς υδροφορέα χωρίς αντλήσεις και τροφοδοσία η εξίσωση (2.7) απλοποιείται στην ακόλουθη λαπλασιανή διαφορική εξίσωση:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.8)$$

Οι εξισώσεις (2.7) και (2.8) μπορούν να λυθούν είτε αναλυτικά, είτε αριθμητικά. Οι Strack (1976) και Cheng & Quazar (1999) έλυσαν τις εξισώσεις και υπολόγισαν το δυναμικό και την θέση του πόδα της υφάλμυρης σφήνας για ομογενή υδροφορέα ημί-άπειρων διαστάσεων χωρίς επιφανειακή τροφοδοσία. Ο Mantoglou (2003) έλυσε αναλυτικά τις εξισώσεις στην πιο γενική περίπτωση ορθογωνικού υδροφορέα με επιφανειακή τροφοδοσία.

Για μη ορθογωνικό υδροφορέα και σε περιπτώσεις όπου τόσο η υδραυλική αγωγιμότητα όσο και η επιφανειακή τροφοδοσία δεν είναι ομοιόμορφα κατανεμημένες, δεν είναι δυνατή η αναλυτική λύση. Σε αυτές τις περιπτώσεις απαιτείται προσομοίωση του υδροφορέα με αριθμητικές μεθόδους. Στις εργασίες Παπαντωνίου (2003) και Mantoglou et al. (2004), εφαρμόστηκε αριθμητική προσομοίωση για τον υπολογισμό του δυναμικού. Πιο συγκεκριμένα χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα MODFLOW (McDonald & Harbaugh, 1988), για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης (2.7) και τον υπολογισμό του δυναμικού, ενσωματώνοντας την μέθοδο σε έναν αλγόριθμο βελτιστοποίησης.

Το μοντέλο που περιγράφεται σε αυτό το τεύχος βασίζεται στην προσέγγιση της απότομης διεπιφάνειας με τα δύο υγρά, το γλυκό και θαλασσινό νερό, να θεωρούνται μη αναμίξιμα. Η εξίσωση (2.7) επιλύεται με το πρόγραμμα MODFLOW το οποίο αποτελεί ένα μοντέλο προσομοίωσης και πρόγνωσης της συμπεριφοράς υπόγειων υδροφορέων που βασίζεται στην αριθμητική μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Σύμφωνα με την μέθοδο αυτή απαιτείται διακριτοποίηση του υδροφορέα σε ένα ορθογωνικό σύστημα με γραμμές και στήλες, και υπολογίζεται η τιμή του δυναμικού σε κάθε κελί, ενώ με γραμμική παρεμβολή υπολογίζονται οι τιμές του δυναμικού σε κάθε άλλο σημείο του υδροφορέα.

Για να είναι εφικτή η επίλυση με το πρόγραμμα Modflow θα πρέπει ο χρήστης να καθορίσει τις οριακές συνθήκες του προβλήματος. Οι οριακές συνθήκες είναι μαθηματικές σχέσεις που περιγράφουν τον τρόπο επικοινωνίας του ρευστού με το περιβάλλον του και εξαρτώνται από την γεωμετρία και το περιβάλλον του υδρολογικού συστήματος που προσομοιώνεται. Για τον καθορισμό των οριακών συνθηκών έχει αναπτυχθεί ένα γραφικό περιβάλλον φιλικό στον χρήστη που αντλεί τα δεδομένα από ένα ΣΓΠ. Το μοντέλο όμως μπορεί να λειτουργήσει και αυτόνομα εάν ο χρήστης δημιουργήσει τα απαραίτητα αρχεία εισόδου για να τρέξει το πρόγραμμα, τα οποία περιγράφονται αναλυτικά στο παράρτημα.

3 Βελτιστοποίηση με γραμμικό προγραμματισμό

Η βελτιστοποίηση είναι μια μέθοδος για λήψη βέλτιστων αποφάσεων λειτουργίας ενός συστήματος. Για να βελτιστοποιηθεί ένα σύστημα θα πρέπει να μετασχηματιστεί σε μία μαθηματική έκφραση που περιλαμβάνει τρία κύρια χαρακτηριστικά: i) την αντικειμενική συνάρτηση, ii) τις μεταβλητές απόφασης, iii) και τους περιορισμούς αν υπάρχουν. Η αντικειμενική συνάρτηση είναι πρακτικά το μέτρο ή κριτήριο επίδοσης ενός φυσικού ή μαθηματικού συστήματος, ενώ οι μεταβλητές απόφασης είναι μεταβλητές που πρέπει να βελτιστοποιηθούν και αποτελούν την λύση του προβλήματος. Οι διάφορες μέθοδοι βελτιστοποίησης που έχουν αναπτυχθεί, εφαρμόζονται για να βρεθεί ένα σετ μεταβλητών απόφασης το οποίο θα μπορεί να χαρακτηρίζεται ως βέλτιστο με βάση κάποιο κριτήριο που είναι η αντικειμενική συνάρτηση.

Η γενική διατύπωση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης είναι η εξής:

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \Omega}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) \\ & \Omega = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid c_i(\mathbf{x}), i \in \mathcal{E}, c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in \mathcal{I} \} \end{aligned} \quad (3.1)$$

όπου \mathbf{x} είναι το διάνυσμα των μεταβλητών απόφασης, $f(\mathbf{x})$ η αντικειμενική συνάρτηση η οποία ορίζεται στο σύνολο Ω , \mathcal{E} είναι το ακέραιο σύνολο των δεικτών που αντιστοιχούν στους εξισωτικούς περιορισμούς και \mathcal{I} το ακέραιο σύνολο των δεικτών που αντιστοιχούν στους ανισωτικούς περιορισμούς.

Η αποτελεσματικότητα και η ακρίβεια μιας λύσης εξαρτάται τόσο από το μέγεθος του προβλήματος (αριθμός μεταβλητών απόφασης και περιορισμών) όσο και από τα χαρακτηριστικά της αντικειμενικής συνάρτησης και περιορισμών. Όταν η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί είναι γραμμικές συναρτήσεις των μεταβλητών απόφασης τότε το πρόβλημα αντιμετωπίζεται με γραμμικό προγραμματισμό. Στην περίπτωση του μοντέλου ΑΛΣ που περιγράφει το παρόν τεύχος το πρόβλημα βελτιστοποίησης δεν είναι γραμμικό όπως θα φανεί σε επόμενη παράγραφο, και επιλύεται με μεθόδους μη γραμμικού προγραμματισμού.

Ο κύριος στόχος κατά την επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων με περιορισμούς είναι να μετασχηματιστεί το πρόβλημα σε ένα πιο εύκολο υποπρόβλημα. Η πιο συνήθης μέθοδος είναι να αναχθεί σε πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς με την θεώρηση της βοηθητικής συνάρτησης:

$$\varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i \cdot c_i(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

όπου λ_i οι πολλαπλασιαστές Lagrange. Επιπλέον λαμβάνονται υπ' όψιν και οι συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker (KKT) οι οποίες είναι αναγκαίες για την ύπαρξη ακρότατου. Στην περίπτωση που η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί είναι κυρτές συναρτήσεις τότε οι συνθήκες KKT είναι αναγκαίες και ικανές για την ύπαρξη ολικού ακρότατου.

$$\begin{aligned}
\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \cdot \nabla c_i(\mathbf{x}^*) &= 0 \\
\lambda_i^* \cdot c_i(\mathbf{x}^*) &= 0 \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \\
\lambda_i^* &\geq 0 \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Στην περίπτωση του μοντέλου ΑΛΣ που περιγράφει το παρόν τεύχος, το πρόβλημα της βελτιστοποίησης τίθεται ως εξής. Έστω ένας παράκτιος υδροφορέας φέρει k ενεργά πηγάδια τα οποία αντλούν με παροχή Q_i ; $i = 1, \dots, k$ αντίστοιχα. Η αντικειμενική συνάρτηση που πρέπει να μεγιστοποιηθεί αφορά το συνολικό αντλούμενο νερό από τον υδροφορέα, ενώ ταυτόχρονα υπάρχει ο ένας περιορισμός για προστασία του υδροφορέα ώστε τα πηγάδια να μην έρθουν σε επαφή με το θαλασινό νερό. Οι συντεταγμένες των πηγαδιών (x_i, y_i) ; $i = 1, \dots, k$ θεωρούνται γνωστές. Η μαθηματική διατύπωση του προβλήματος σύμφωνα με τα παραπάνω είναι η εξής:

$$\left. \begin{aligned}
\text{maximize} & : Q_{\text{tot}} = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_k \\
& (Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in \mathbb{R}^k \\
\text{subject to} & : \phi_i > 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \\
& x_{w,i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) > 0 \quad i = 1, 2, \dots, k \\
& Q_i^{\min} < Q_i < Q_i^{\max} \quad i = 1, 2, \dots, k
\end{aligned} \right\} \tag{3.4}$$

όπου $(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in \mathbb{R}^k$ είναι οι παροχές άντλησης των k πηγαδιών που αντιστοιχούν στις μεταβλητές απόφασης. Στην εξίσωση (3.4) υπάρχουν τρία σετ περιορισμών. Το πρώτο σετ $\phi_i > 0$; $i = 1, 2, \dots, k$ αφορά το δυναμικό στις θέσεις των πηγαδιών, έτσι ώστε η τιμή του να είναι πάντοτε θετική το οποίο σημαίνει η ελεύθερη επιφάνεια του υδροφορέα να διατηρείται πάντοτε πάνω από την μ.σ.θ. Ωστόσο ο περιορισμός προστατεύει από την υφαλμύρωση μόνο τα πηγάδια που βρίσκονται μακριά από την ακτή. Αν κάποιο πηγάδι βρίσκεται κοντά στην ακτή τότε είναι δυνατόν το πόδι της αλάτινης σφήνας να έρθει σε επαφή με το πηγάδι ακόμα και αν το δυναμικό του είναι θετικό. Έτσι ο δεύτερος περιορισμός έχει εφαρμοστεί για να προστατεύονται από την υφαλμύρωση τα πηγάδια που βρίσκονται κοντά στην ακτή.

Η απόσταση $x_{w,i}$ είναι η ελάχιστη απόσταση του πηγαδιού i από το ίχνος του πόδα της αλάτινης σφήνας, και εξαρτάται από τις παροχές των πηγαδιών με μη γραμμική σχέση έτσι ο περιορισμός $x_{w,i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) > 0$ είναι μη γραμμικός σε σχέση με τις μεταβλητές απόφασης $(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in \mathbb{R}^k$, (Mantoglou et al. 2004). Η απόσταση $x_{w,i}$ θεωρείται θετική όταν το πηγάδι δεν είναι υφάλμυρο και αρνητική όταν το πηγάδι έχει έρθει σε επαφή με το θαλασινό νερό.

Για τον υπολογισμό της απόστασης αναπτύχθηκε ένας αλγόριθμος που περιγράφεται παρακάτω, ο οποίος υπολογίζει τις συντεταγμένες ενός μεγάλου πλήθους διακριτών σημείων του ίχνους του πόδα της υφαλμύρωσης. Το πλήθος των σημείων εξαρτάται άμεσα από την διακριτοποίηση του υδροφορέα. Έπειτα για κάθε πηγάδι υπολογίζεται η απόσταση του σε σχέση όλα τα διακριτά σημεία του ορίου, και ως απόσταση λαμβάνεται η ελάχιστη.

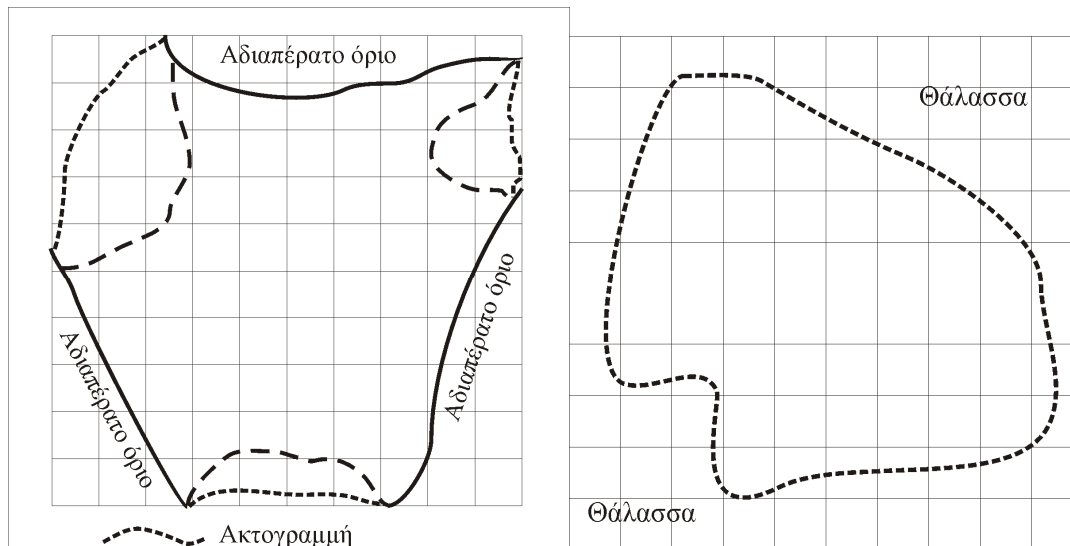
3.1 Αλγόριθμος υπολογισμού απόστασης

Ο τρόπος με τον οποίο υπολογίζεται η απόσταση εξαρτάται άμεσα από τις ειδικές συνθήκες κάθε προβλήματος. Η μεθοδολογία που εφαρμόστηκε από τους Mantoglou et al. 2004, είναι να προσανατολιστεί ο υδροφορέας έτσι ώστε ο ένας άξονας της διακριτοποίησης να είναι παράλληλος με την ακτογραμμή. Έπειτα με βάση μια σταθερή γραμμή αναφοράς που ορίζεται αυθαίρετα (πχ. η

ακτογραμμή) υπολογίστηκαν οι κάθετες στην γραμμή αναφοράς αποστάσεις των πηγαδιών $x_{w,i}$ (σχήμα 3.1) με αφετηρία την γραμμή αναφοράς. Σε κάθε προσομοίωση του υδροφορέα υπολογίζονται η απόσταση του πόδα της αλάτινης σφήνας από την γραμμή αναφοράς, στην διεύθυνση που διέρχεται από το αντίστοιχο πηγάδι κάθετα στην γραμμή αναφοράς. Έτσι ο δεύτερος περιορισμός της εξίσωσης (3.4) είχε την εξής μορφή: $x_{w,i} \geq x_{\tau,i}$ το οποίο εξασφαλίζει ότι το πηγάδι i δεν έρχεται σε επαφή με την αλάτινη σφήνα. Η μέθοδος αυτή αν και έχει εφαρμοστεί επιτυχώς σε διάφορες εργασίες (Mantoglou et al. 2004, Park and Aral 2004), έχει δυο σημαντικά μειονεκτήματα. Σε περιοχές όπου το μέτωπο υφαλμύρωσης δεν είναι μια ευθεία παράλληλη προς την ακτογραμμή, καθώς και σε περιπτώσεις που ακτογραμμή έχει πολύπλοκο σχήμα ή πολύ περισσότερο στην περίπτωση όπου ο υδροφορέας βρέχεται περιμετρικά από την θάλασσα, τότε η μέθοδος είναι αδύνατο να εφαρμοστεί.

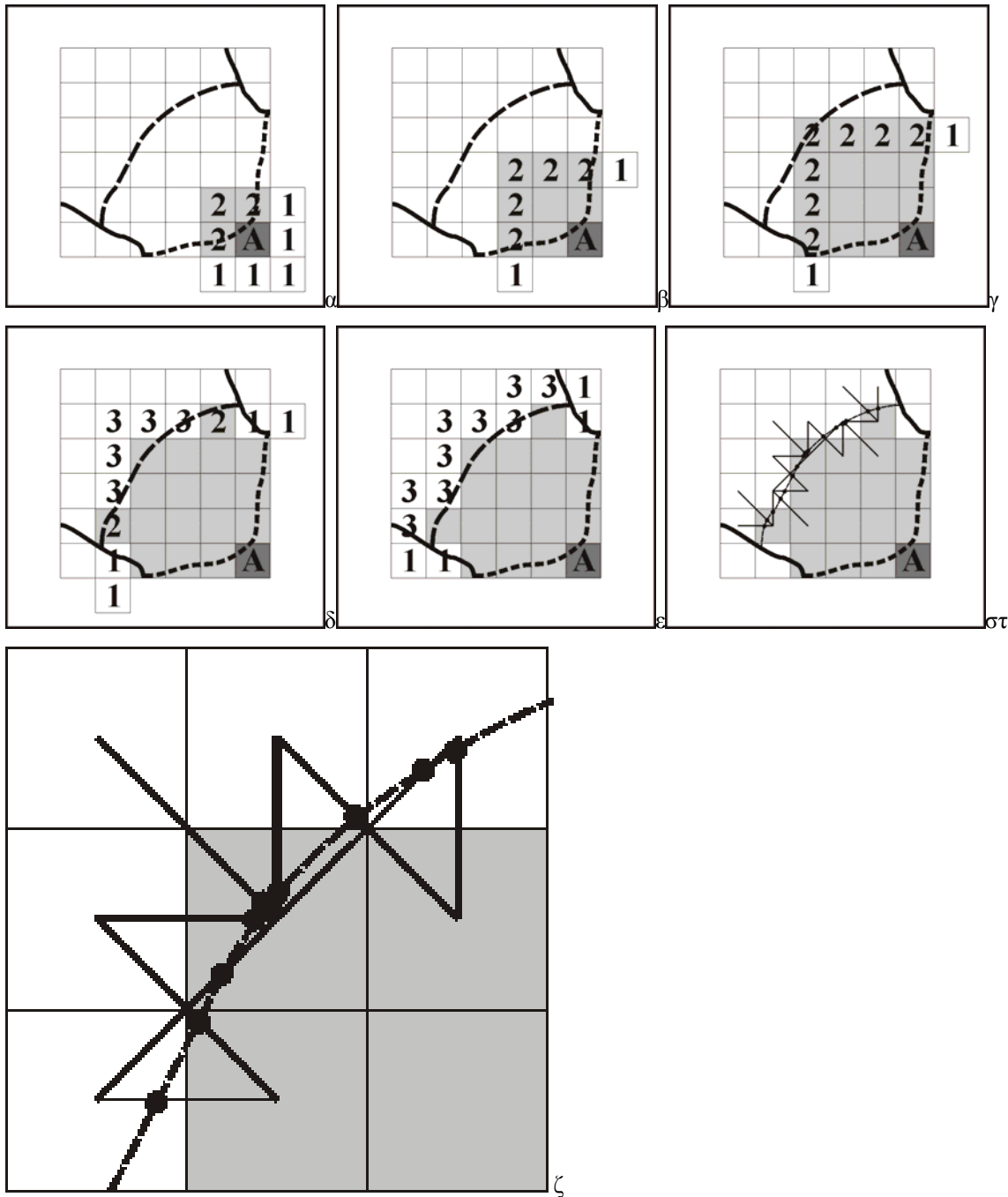





Έτσι για να επιτευχθεί η λειτουργικότητα του προγράμματος σε υδροφορείς πολύπλοκης γεωμετρίας που είναι μια από τις βασικές αρχές σχεδιασμού, αναπτύχθηκε για πρώτη φορά ένας αλγόριθμος που ανιχνεύει και υπολογίζει τις συντεταγμένες, στο σύστημα γραμμών και στηλών του υδροφορέα, ενός μεγάλου πλήθους διακριτών σημείων του ίχνους του πόδα της αλάτινης σφήνας ώστε κατά τη διαδικασία βελτιστοποίησης να προστατευτούν αποτελεσματικά τα φρέατα από υφαλμύρωση.



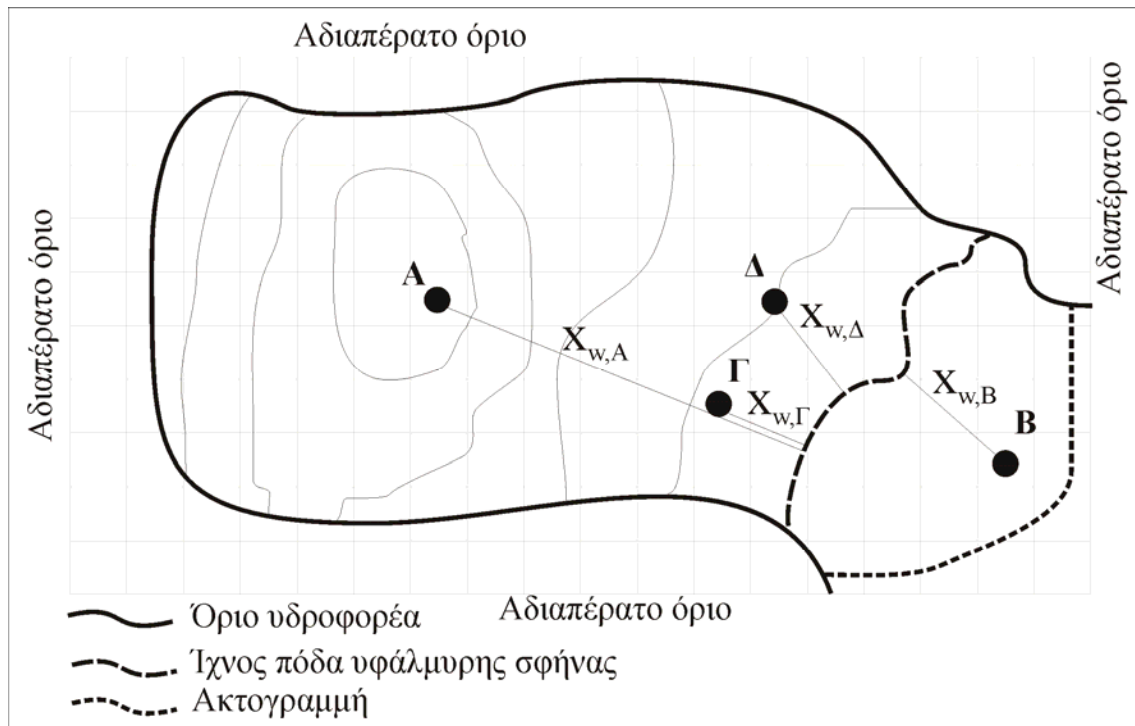
Σχήμα 3.2 Παραδείγματα Υδροφορέων. α) Υδροφορέας με 3 ακτογραμμές, β) Υδροφορέας με μια ακτογραμμή

Ο αλγόριθμος για να ξεκινήσει απαιτεί από τον χρήστη να καθορίσει ένα σημείο κάθε ακτογραμμής (καθορίζοντας τις συντεταγμένες του). Για παράδειγμα, όταν ένας υδροφορέας βρέχεται από 3 διακριτές ακτογραμμές (σχήμα 3.2^α), ο χρήστης πρέπει να εισάγει συντεταγμένες 3 σημείων, ένα από κάθε ακτογραμμή. Στην περίπτωση του σχήματος 3.2β όπου ο υδροφορέας βρέχεται περιμετρικά από θάλασσα η ακτογραμμή θεωρείται ως ενιαία και οι απαιτούνται οι συντεταγμένες ενός μόνο σημείου για να ξεκινήσει ο αλγόριθμος. Το σημείο επιλέγεται αυθαίρετα και η επιλογή του δεν επηρεάζει το τελικό αποτέλεσμα. Με αφετηρία το κελί που ο χρήστης έχει υποδείξει ως υφάλμυρο, εισάγοντας στα δεδομένα εισόδου του προγράμματος στο αρχείο data.dat, τις συντεταγμένες του κελιού (σε σύστημα γραμμών και στηλών με αφετηρία του συστήματος το άνω αριστερό κελί), ο αλγόριθμος ελέγχει τα 8 γειτονικά του, τα οποία κατατάσσονται σε 3 κατηγορίες. Στην πρώτη κατηγορία κατατάσσονται τα κελιά που είτε είναι εκτός ορίων υδροφορέα ή είναι αδιαπέρατα όρια και αγνοούνται. Στην δεύτερη κατηγορία κατατάσσονται τα κελιά των οποίων το δυναμικό είναι μικρότερο από την τιμή $\phi = sc \cdot [\delta(1+\delta)/2]d^2$ όπου sc είναι ένας συντελεστής ασφαλείας (Mantoglou, et al. 2004). Τα κελιά της δεύτερης κατηγορίας θεωρούνται υφάλμυρα. Τέλος στην τρίτη κατηγορία κατατάσσονται τα κελιά εκείνα με τιμή δυναμικού μεγαλύτερη από $\phi = sc \cdot [\delta(1+\delta)/2]d^2$. Για αυτά τα κελιά αυτά υπολογίζονται με γραμμική παρεμβολή οι συντεταγμένες που αντιστοιχούν στην τιμή $\phi = sc \cdot [\delta(1+\delta)/2]d^2$ στην διεύθυνση που ενώνει τα κέντρα των κελιών (σχήμα 3.3ζ). Στο σχήμα 3.3α το κελί με το γράμμα Α είναι το κελί αφετηρίας του αλγόριθμου, ενώ στα υπόλοιπα κελιά του φίλτρου αναγράφονται οι τιμές που αντιστοιχούν. Έπειτα για κάθε κελί της κατηγορίας 2 εξετάζονται τα γειτονικά ενώ τα ίδια κελιά, ενώ τα ίδια κελιά που στο προηγούμενο βήμα είχαν χαρακτηριστεί ως υφάλμυρα διαγράφονται από την κατηγορία 2, διατηρούν όμως το χαρακτηρισμό τους ως υφάλμυρα. Στο 3.3β φαίνονται οι τιμές του αλγόριθμου αφού έχουν εξεταστεί τα τρία υφάλμυρα κελιά της πρώτης επανάληψης. Ο αλγόριθμος θα τελειώσει όταν δεν υπάρχει κανένα κελί στην κατηγορία 2 σχήμα 3.3ε. Τέλος με γραμμική παρεμβολή μεταξύ των υφάλμυρων και των μη υφάλμυρων κελιών υπολογίζονται οι συντεταγμένες ενός πλήθους διακριτών σημείων του μετώπου υφαλμύρωσης (σχήμα 3.3στ).



 Όριο υδροφορέα
 Ίχνος πόδα υφάλμυρης σφήνας
 Ακτογραμμή

Σχήμα 3.3 Περιγραφή αλγόριθμου υπολογισμού απόστασης



Σχήμα 3.4 Υπολογισμός απόστασης υφαλμύρωσης

Όταν ο αλγόριθμος τελειώσει την ανίχνευση του ορίου, υπολογίζονται όλες οι αποστάσεις μεταξύ των διακριτών σημείων που ανιχνεύτηκαν από κάθε πηγάδι, και για κάθε πηγάδι επιλέγεται η ελάχιστη. Αν το πηγάδι κατά την ανίχνευση του ορίου υφαλμύρωσης βρισκόταν σε υφάλμυρο κελί τότε η απόσταση θεωρείται αρνητική, ενώ στην αντίθετη περίπτωση θετική. Στο σχήμα 3.4 φαίνονται 4 πηγάδια εκ των οποίων το πηγάδι Β είναι υφάλμυρο οπότε η απόσταση $x_{w,B}$ είναι αρνητική. Επιπλέον φαίνεται προσεγγιστικά η απόσταση που υπολογίζεται για κάθε πηγάδι ως η ελάχιστη. Ο αλγόριθμος αυτός εκτός του ότι είναι γενικευμένος για κάθε περίπτωση, υπολογίζει και την πραγματική ελάχιστη απόσταση μεταξύ του πηγαδιού και του ίχνους της υφάλμυρης σφήνας.

3.2 Παράμετροι αλγόριθμου βελτιστοποίησης

Παρόλο που η αντικειμενική συνάρτηση (3.4) είναι γραμμική, το πρόβλημα της βελτιστοποίησης έτσι όπως έχει τεθεί είναι μη γραμμικό εξαιτίας του δεύτερου περιορισμού και αντιμετωπίζεται με τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης Sequential Quadratic Programming.

Το μοντέλο αναπτύχθηκε έτσι ώστε να απαιτούνται όσο δυνατόν λιγότερα δεδομένα και ρυθμίσεις, τόσο για το υδρολογικό μοντέλο όσο και για τον μαθηματικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης, τα οποία θα απαιτούσαν εξειδικευμένη γνώση και εμπειρία. Ωστόσο δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη εκτός από τις προτεινόμενες τιμές, οι οποίες είναι αποτέλεσμα συστηματικής μελέτης, να μπορεί να ρυθμίσει μερικές από τις μεταβλητές του αλγόριθμου βελτιστοποίησης. Οι μεταβλητές αυτές και προτεινόμενες αρχικές τιμές ορίζονται παρακάτω

Ανοχή αντικειμενικής συνάρτησης : Tolfun = 0.1

Πρόκειται για το κριτήριο τερματισμού που σχετίζεται με τη διαφορά μεταξύ διαδοχικά υπολογισμένων τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης. Επιτυχής σύγκλιση επιτυγχάνεται όταν η διαφορά αυτή γίνει μικρότερη από την καθορισμένη τιμή Tolfun. Η τιμή που επιλέγεται για την Tolfun εξαρτάται από την τάξη μεγέθους της αντικειμενικής συνάρτησης.

Ανοχή της τιμής της/των μεταβλητής/τών : TolX = 0.001

Πρόκειται για κριτήριο αντίστοιχο με το παραπάνω. Αναφέρεται στη διαφορά των διαδοχικά υπολογισμένων τιμών των μεταβλητών απόφασης. Επιτυχής σύγκλιση επιτυγχάνεται όταν η διαφορά αυτή γίνει μικρότερη από την καθορισμένη τιμή TolX.

Ανοχή της τιμής των περιορισμών : TolCon = 0.1

Πρόκειται για κριτήριο αντίστοιχο με το παραπάνω. Αναφέρεται στη διαφορά των διαδοχικά υπολογισμένων τιμών των περιορισμών. Επιτυχής σύγκλιση επιτυγχάνεται όταν η διαφορά αυτή γίνει μικρότερη από την καθορισμένη τιμή TolX=0.001

Μέγιστη διαφορά των τιμών των μεταβλητών κατά τον υπολογισμό των μερικών παραγώγων : DiffMaxChange = 5

Το συγκεκριμένο κριτήριο σχετίζεται άμεσα με τη διαδικασία εκτέλεσης του προγράμματος βελτιστοποίησης. Ο υπολογισμός των μερικών παραγώγων γίνεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{x_i} \cong \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} \quad (3.5)$$

όπου x_i κάθε μία από τις μεταβλητές του προβλήματος βελτιστοποίησης.

Η παράμετρος DiffMaxChange εκφράζει τη μέγιστη επιτρεπόμενη μεταβολή Δx της τιμής της εκάστοτε μεταβλητής απόφασης, μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων. Οι τιμές των μεταβλητών μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων επιλέγονται έτσι ώστε το Δx να μην υπερβαίνει την τιμή DiffMaxChange.

Ελάχιστη διαφορά των τιμών των μεταβλητών κατά τον υπολογισμό των μερικών παραγώγων : DiffMinChange = 1

Ανάλογα με το DiffMaxChange, η συγκεκριμένη παράμετρος εκφράζει την ελάχιστη επιτρεπόμενη μεταβολή Δx της τιμής της εκάστοτε μεταβλητής, μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων. Το Δx της σχέσης (3.5) παίρνει τιμές μεταξύ :

DiffMinChange < Δx < DiffMaxChange

Αναφορές – βιβλιογραφία

- Cheng, A.H.-D., D. Quazar, Analytical solutions. In: Bear, J., Cheng, A.H.-D., Sorek, S., Quazar, D., Herrera, I. (Eds), Seawater Intrusion in Coastal Aquifers-Concepts, Methods and Practices, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999
- Mantoglou, A., M. Papantoniou, P. Giannouloupoulos, Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms, *Journal of Hydrology*, 297, 209-228, 2004
- Mantoglou, A., Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion, *Water Resources Research* 39(12), 2003
- Mcdonald, M.G., A.W. Harbaugh, A Modular Three-dimensional Finite-Difference Ground-water Flow Model. USGS, (Chapter AI), Book 6, 1988
- Strack, O.D.L., A single-potential solution for regional interface problems in coastal aquifers. *Water Resources Research* 12(6), 1165-1618, 1976
- Das A. and B. Datta “Development of Multiobjective Management Models for Coastal Aquifers”, *J. Water Resources Planning and Management*, 125(2), pp.76-87, 1999
- Park C.-H., M.M. Aral, Multi-objective optimization of pumping rates and well placement in coastal aquifers, *Journal of Hydrology*, 290, 80-99, 2004
- Παπαντωνίου Μ. «Διαχείριση Παράκτιων Υδροφορέων, Βελτιστοποίηση Αντλήσεων», Διπλωματική εργασία στο Μεταπτυχιακό πρόγραμμα σπουδών, Επιστήμη και Τεχνολογία Υδατικών Πόρων, ΕΜΠ, 2003.

4 Παράρτημα

Μεγάλο μέρος της μεθοδολογίας στην οποία βασίστηκε το μοντέλο περιγράφεται στο άρθρο των Mantoglou et al. (2004) και για αυτό κρίνεται σκόπιμη η παράθεση του εν λόγω άρθρου.



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE @ DIRECT®

Journal of Hydrology 297 (2004) 209–228

Journal
of
Hydrology

www.elsevier.com/locate/jhydrol

Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms

Aristotelis Mantoglou*, Maria Papantoniou, Panagiotis Giannouloupoulos

Department of Rural and Surveying Engineering, Technical University of Athens, 9, Iroon Polytechniou Str., Athens 15 780, Greece

Received 25 April 2003; revised 6 April 2004; accepted 15 April 2004

Abstract

A method of assessing the optimum pumping rates of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms (EA) is developed. The objective is to maximize the total pumping rate while protecting the wells from sea water intrusion. The formulation of the constraints is based on numerical simulation of the freshwater flow equations. The simulation model is based on the sharp interface and the Ghyben–Herzberg approximation and is applicable to unconfined aquifers and steady-state flow. The single potential formulation of [Water Resour. Res. 12 (1976) 1165] is followed and the governing equations are solved numerically using finite differences. The numerical model can handle aquifers of complex shapes, nonuniform hydraulic conductivity, nonuniform distribution of surface recharge, etc. The constraints are nonlinear with respect to the decision variables resulting in a nonlinear optimization problem. Two optimization methods are investigated, specifically Sequential Quadratic Programming (SQP) and Evolutionary Algorithms (EA). SQP requires less computer time than EA but can get stuck on local optimum solutions. The simulation and optimization methodology is applied to a real unconfined coastal aquifer in the Greek island of Kalymnos for determining the optimal pumping rates while protecting the wells from sea water intrusion.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Coastal aquifers; Aquifer management; Salt water intrusion; Nonlinear optimization; Evolutionary algorithms; Genetic algorithms

1. Introduction

The demand for freshwater in coastal regions and islands is very high especially during the summer months due to increased water needs and tourism. In order to meet the freshwater demand, coastal aquifers are intensively pumped causing sea water intrusion and deterioration of water quality. Therefore, it is important to develop appropriate simulation and

optimization models for calculating the maximum pumping rates from coastal aquifers while maintaining sustainability of water quality.

The problem of pumping optimization using aquifer simulation has been extensively investigated in the literature (Mayer et al., 2002). Gorelick (1983), Gorelick et al. (1984), Ahlfeld and Heidari (1994) and Gordon et al. (2000) present methodologies based on combined use of groundwater simulation models and optimization methods. Depending on the problem, many different objective functions and sets of constraints have been applied. Shamir et al. (1984),

* Corresponding author.

E-mail address: mantog@central.ntua.gr (A. Mantoglou).

Hallaji and Yazicigil (1996), Cheng et al. (2000) and Mantoglou (2003) aim at maximization of the total pumping rate, whereas Das and Datta (1999) aim at the minimization of the salinity of pumped water. Emch and Yeh (1998) and Gordon et al. (2000) include the pumping cost in the objective function. It is also possible to consider multiple objectives, constituting a multiobjective optimization problem (Shamir et al., 1984; Emch and Yeh, 1998; Das and Datta, 1999).

The aim of optimization is to maximize an objective function subject to various constraints that protect the water quality of the aquifer. The differential equations of flow are solved using analytical solutions or numerical simulation in order to represent the aquifer's response on various pumping scenarios. The resulting optimization problem may be linear (Ahlfeld and Heidari, 1994; Hallaji and Yazicigil, 1996; Mantoglou, 2003) or nonlinear (Gorelick et al., 1984; Shamir et al., 1984; Wang and Ahlfeld, 1994; Hallaji and Yazicigil, 1996; Emch and Yeh, 1998; Mantoglou, 2003). The linearity of the optimization problem as well as the continuity of the objective function, the availability of information for the derivatives and the existence of local minima, determine the optimization method selected (Cheng et al., 2000). Often the purpose of optimization is to maximize the total pumping rate from a number of wells while controlling the seawater intrusion into the aquifer. The constraints restrain the pumping rate between a minimum and a maximum value (Hallaji and Yazicigil, 1996; Emch and Yeh, 1998; Das and Datta, 1999; Cheng et al., 2000). Constraints imposed by Cheng et al. (2000) and Mantoglou (2003) control the location of the toe. Additional constraints may include maintaining water levels, flow potential or salt concentration of the pumped water at desired levels.

The physical processes governing sea water intrusion in coastal aquifers are well understood and governing equations of flow and salinity transport in coastal aquifers have been developed and solved numerically using different methods (Huyakorn et al., 1987; Andersen et al., 1988; Essaid, 1990; Bear et al., 1999; Gambolati et al., 1999; Oude Essink, 2001). A common approach for simulation of sea water intrusion in coastal aquifers is based on the sharp interface approximation and

the Ghyben–Herzberg relation (Bear, 1979; Essaid, 1990; Bear et al., 1999; Essaid, 1999). Emch and Yeh (1998), Cheng and Ouazar (1999), Cheng et al. (2000) and Mantoglou (2003) presented coastal aquifer management models based on the sharp interface approximation. Strack's (1976) flow potential is used in order to trace the toe of sea water lens (Cheng and Ouazar, 1999; Mantoglou, 2003). More complex seawater intrusion models consider the transport processes that occur in the mixing zone (Das and Datta, 1999; Gordon et al., 2000).

The present paper presents a methodology for maximizing the total pumping rate from coastal aquifers based on nonlinear optimization. The modeling methodology is based on the sharp interface approximation and the Ghyben–Herzberg relation and is applicable to unconfined aquifers and steady-state flow. The flow equations are expressed using the Strack (1976) potential, and finite differences are used for the solution of the governing flow equations. Optimization aims at maximizing the total pumping from a number of wells subject to constraints that protect the aquifer from sea water intrusion. The governing differential equations are solved using finite differences while the nonlinear optimization is performed with two different methods, specifically the Sequential Quadratic Programming (SQP) and Evolutionary Algorithms (EA). SQP is based on an iterative procedure requiring evaluation of the derivatives of the objective function with respect to decision variables using finite differences. A quadratic subproblem is solved at each major iteration before proceeding to a new iteration (Gill et al., 1984; Fletcher, 1987; Luenberger, 1989). EA on the other hand are stochastic search methods that mimic the metaphor of natural biological evolution (Holland, 1975; Goldberg, 1989; Fogel, 1994). EA do not require continuity of the objective function or existence of derivatives, and converge to the global optimum solution after a sufficient number of generations. They operate on a population of potential solutions applying the principle of survival of the fittest to produce improved approximations to a solution.

The two optimization methodologies are applied, for determining the optimal pumping rates while protecting the wells from sea water intrusion, in a coastal unconfined aquifer in the Greek island of Kalymnos.

2. Models of sea water intrusion in coastal aquifers based on the sharp interface approximation

The sharp interface approximation is reasonable in regional scale problems when the transition zone is narrow relative to the scale of the problem. At steady state, the position of the interface can be estimated using the Ghyben–Herzberg approximation, which assumes that horizontally flowing freshwater floats above static sea water (Essaid, 1999). During transient periods, the behavior of the freshwater–sea water interface is controlled by both the freshwater and sea water dynamics since significant amounts of sea water must be moved into or out of the aquifer when the interface moves. The one fluid sharp interface approach based on Ghyben–Herzberg approximation is more appropriate for modeling long term responses of freshwater lenses or short term responses in aquifers where sea water can move in and out easily (Essaid, 1999).

Fig. 1 shows a vertical cross-section of an unconfined aquifer with a sharp interface separating freshwater from sea water. It is assumed that the interface has been practically stabilized and is not moving quickly. Sea water is considered to be stagnant whereas fresh water flow is assumed horizontal and steady state. Let τ represent the point in the cross-section where the interface intersects the base of the aquifer, usually called the ‘toe’ of seawater lens. Let S represent the stagnation point defining the region supplying water to the well. Variable d represents the aquifer depth from its base to the sea

level, b is the total freshwater depth, ξ is the freshwater depth measured from the sea level, and h_f is the freshwater head with reference to the impermeable base of the aquifer. Ghyben–Herzberg relation links hydraulic head h_f to the depth ξ as follows: $h_f - d = \delta\xi$ where $\delta = (\rho_s - \rho_f)/\rho_f$, (ρ_s is the density of sea water and ρ_f is the density of freshwater). The value of parameter δ is considered constant throughout this analysis.

As outlined in Fig. 1, there exist two zones with different characteristics. In zone 1, the aquifer behaves exactly as an unconfined (phreatic) aquifer while zone 2 is the sea water intrusion zone where a freshwater lens floats above a denser sea water layer. The governing equation of steady flow in the unconfined heterogeneous aquifer of zone 1 is given by

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(Kh_f \frac{\partial h_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(Kh_f \frac{\partial h_f}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (1)$$

where K is the hydraulic conductivity, N is the surface recharge, and Q is the pumping rate. The continuity equation in zone 2 is written as:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(Kb \frac{\partial h_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(Kb \frac{\partial h_f}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (2)$$

Defining

$$\left. \begin{aligned} b &= h_f, & \text{zone 1} \\ b &= h_f - d + \xi, & \text{zone 2} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Eqs. (1) and (2) can be both written in the form of Eq. (2). Strack (1976) introduced the flow potential ϕ

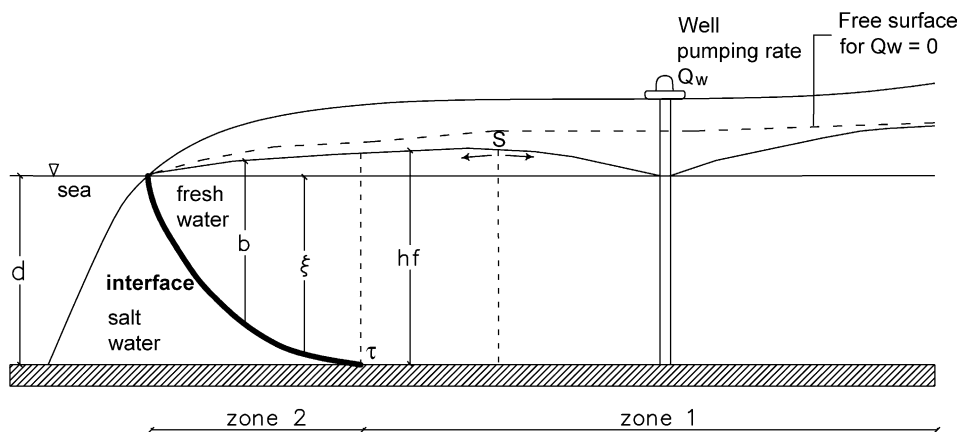


Fig. 1. Coastal unconfined aquifer pumped by one well.

defined by:

$$\left. \begin{aligned} \phi &= \frac{1}{2}[h_f^2 - (1 + \delta)d^2], & \text{zone 1} \\ \phi &= \frac{(1 + \delta)}{2\delta}(h_f - d)^2, & \text{zone 2} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

The above functions and their first derivatives are continuous across the zonal interface. At the toe of the sea water lens, the potentials have the same value for the zones 1 and 2 of the aquifer, i.e. $\phi_{\text{zone 1}} = \phi_{\text{zone 2}} = [\delta(1 + \delta)/2]d^2$. From Eqs. (1), (2) and (4) it follows that potential ϕ satisfies the following differential equation:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + N - Q = 0 \quad (5)$$

in both zones 1 and 2. For a homogeneous aquifer with no pumping or recharge, Eq. (5) simplifies to the following Laplace equation

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (6)$$

Eqs. (5) and (6) can be solved either analytically or numerically. Strack (1976) and Cheng and Ouazar (1999) solved these equations and calculated ϕ and the location of the toe for a homogeneous aquifer of semi-infinite dimensions without surface recharge. Mantoglou (2003) derived more general analytical expressions in the case of finite aquifers of rectangular shape with surface recharge.

For a nonrectangular geometry of the aquifer and when the hydraulic conductivity and recharge rates are nonuniform, it is not possible to use such analytical solutions. In these cases, numerical

simulation is required. MODFLOW code (McDonald and Harbaugh, 1988) can be used in order to solve Eq. (5) and calculate potential ϕ . The aquifer is discretized in a mesh of cells, described in terms of rows and columns.

In order to test the simulation method an aquifer with the simple rectangular geometry of Fig. 2 is examined first. The aquifer has uniform hydraulic conductivity $K = 100$ m/day. The recharge rate at the higher elevations of the aquifer is $N = 150$ mm/year distributed over an area of $A = 9$ km² and the recharge rate at the lower elevations of the aquifer is $N = 30$ mm/day. The sea boundary constitutes a constant head boundary whereas the north and south boundaries are regarded as impermeable. The aquifer thickness from the base of the aquifer to the sea surface is taken as $d = 25$ m. The value of parameter δ is taken as $\delta = (1.025 - 1.000)/1.000 = 0.025$. The potential at the toe of seawater lens is calculated according to equation $\phi = [\delta(1 + \delta)/2]d^2 = 8.0078$ m². The geometry of this aquifer approximates the aquifer at Vathi in the Greek island of Kalymnos which is shown in Fig. 3 and described in more detail in the applications section.

In order to investigate the response of this test aquifer to pumping let us initially assume that there is only one well in operation at distance 3850 m from the coast. For given values of pumping Q_w , Eq. (5) is solved for ϕ using MODFLOW and then the distance of the toe to the coast x_τ is calculated using interpolation so that $\phi_\tau = 8.0078$ m². Fig. 4 plots the location of the toe and the stagnation point as a function of the well pumping rate Q_w . The figure shows that increasing Q_w causes the toe τ of

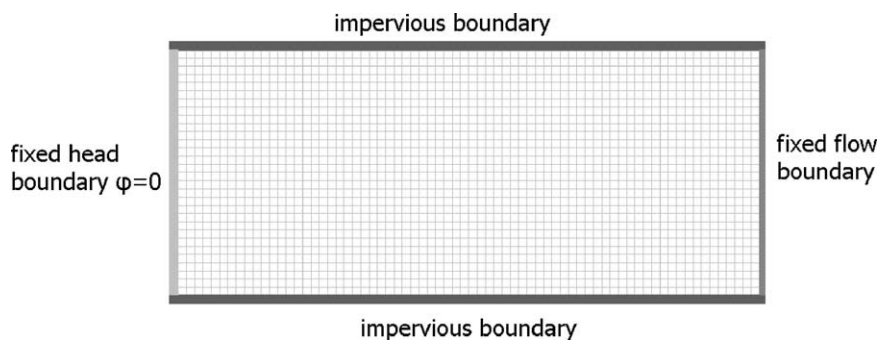


Fig. 2. An aquifer of rectangular shape.

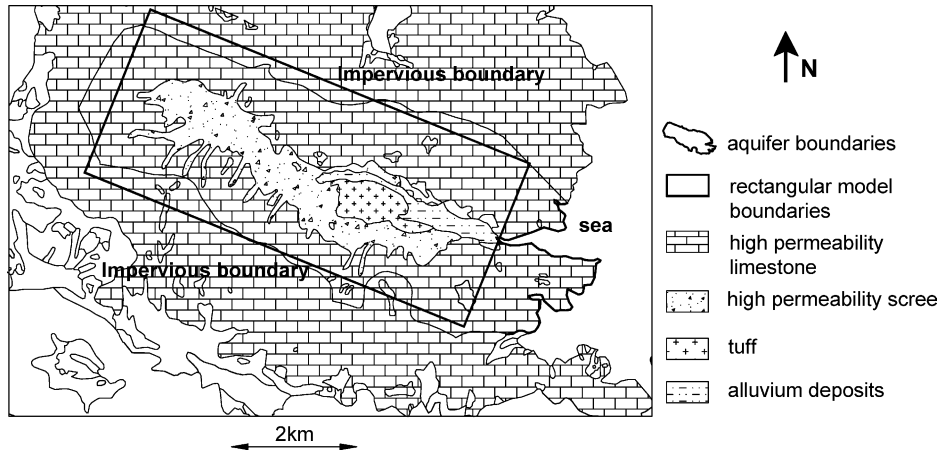


Fig. 3. Kalymnos aquifer and approximation of the aquifer with a rectangular shape.

the interface to move inland, whereas the stagnation point S moves towards the sea. For low values of pumping rate Q_w points τ and S are distinct. As Q_w increases they approach each other until they merge to a single point with potential $\phi_\tau = 8.0078 \text{ m}^2$ (Bear, 1979). This is an unstable critical situation since any further increase in pumping causes a rapid advance of the interface inland resulting in pumping of seawater. The location where the two diagrams intersect corresponds to this critical pumping rate.

It must be stressed that once the well starts pumping sea water, the static saltwater assumption used to calculate the interface location is violated (Cheng et al., 2000). Hence, for pumping rates higher than the critical, the toe location shown in Fig. 4 is inexact and is only indicative of the sea water intrusion.

The previous analysis is repeated for a well located near the coast and another well located far from the coast, at distances of 1850 and 5850 m, respectively. Fig. 5 plots the position of the toe as a function of the pumping rate for both wells. The figure indicates that the maximum pumping rate (without sea water intrusion to the well) is higher for the more distant well than for the well being closer to the coast. Both plots show a sudden and extensive movement of the toe inland as pumping rate is increased beyond a certain critical rate. The length of such sudden intrusion is larger for the well located at $x_w = 5850 \text{ m}$ because of the higher values of withdrawal rate. After this critical rate, the well starts pumping sea water and as the pumping is increased there is almost

linear toe advancement inland with increasing pumping rate.

3. Pumping optimization based on nonlinear programming

Let the coastal aquifer be pumped by k wells with rates Q_i ; $i = 1, \dots, k$ respectively. The objective is to maximize the total pumping from the aquifer while protecting the wells from sea water intrusion. The coordinates of the wells (x_i, y_i) ; $i = 1, \dots, k$ are assumed known. The problem is expressed in the following constraint optimization framework with

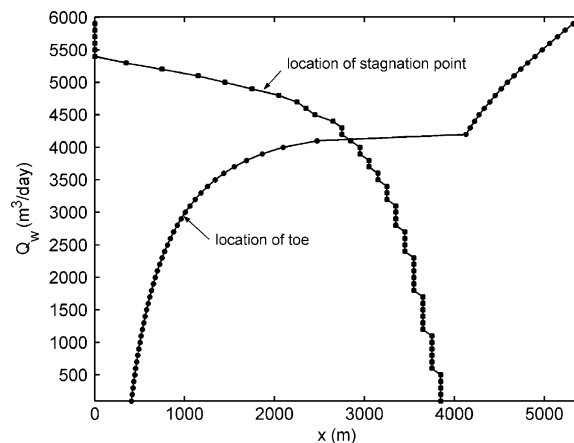


Fig. 4. Location of toe and stagnation point as a function of pumping rate for a well located 3850 m from the coast.

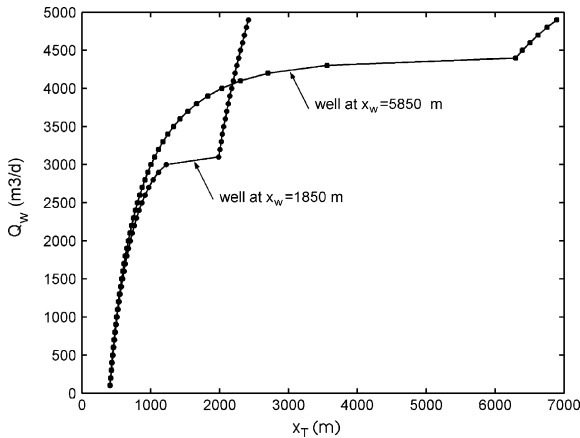


Fig. 5. Intrusion distance as a function of pumping rate for wells located at 1850 and 5850 m from the coast.

objective to maximize the total pumping rate and nonlinear constraints whose purpose is to protect the wells from sea water intrusion

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} : Q_{\text{tot}} = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_k \\
 & (Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in R^k \\
 & \text{subject to: } \left. \begin{aligned}
 & \phi_i > 0, & i = 1, \dots, k \\
 & x_{\tau_i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) < x_{w_i}, & i = 1, \dots, k \\
 & Q_{i,\text{min}} < Q_i < Q_{i,\text{max}}, & i = 1, \dots, k
 \end{aligned} \right\} \quad (7)
 \end{aligned}$$

where $(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in R^k$ are the decision variables. The first set of constraints concern the potential at the well locations and ϕ is set larger than 0 so that the free surface of the aquifer is maintained above the sea water level. However, these constraints can protect only wells located sufficiently far from the coast. For wells located near the coast, it is possible for the toe of the interface to reach the wells even when $\phi_i > 0$, $i = 1, \dots, k$. The second set of constraints in Eq. (7) is introduced to prevent sea water intrusion in such cases, where x_{w_i} and x_{τ_i} express the distance from the coast of the well and the toe, respectively. These constraints protect the wells located near the coast from sea water intrusion by not allowing the toe of the interface to reach the wells.

As indicated by Fig. 5, distance x_{τ} depends nonlinearly on the pumping rates, therefore, constraint $x_{\tau_i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) < x_{w_i}$ is nonlinear with respect to decision variables $(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in R^k$.

Although the objective function (7) is linear, the optimization problem is nonlinear because the second set of constraints is nonlinear with respect to the decision variables.

The optimization problem (7) belongs to the class of the general nonlinear optimization problems. An efficient and accurate solution to this problem depends not only on the size of the problem in terms of the number of constraints and decision variables but also on characteristics of the objective function and constraints. A solution of the nonlinear optimization problem generally requires an iterative procedure to establish a direction of search. In constrained optimization, the general aim is to transform the problem into an easier sub-problem that can be solved and be used as the basis of the iterative process.

The most popular methods are based on the solution of the Kuhn–Tucker equations which are necessary conditions for optimality for a constrained optimization problem. The solution of the Kuhn–Tucker equations forms the basis to many nonlinear programming algorithms. These algorithms attempt to compute the Lagrange multipliers directly. Constrained quasi-Newton methods guarantee superlinear convergence by accumulating second order information regarding the Kuhn–Tucker equations using an updating procedure. These methods are commonly referred to as SQP methods, since a quadratic programming sub-problem is solved at each major iteration (Schittkowski, 1985; Biggs, 1975; Han, 1977; Gill et al., 1981; Powell, 1983; Hock and Schittkowski, 1983). At each major iteration k of the SQP method, an approximation of the Hessian of the Lagrangian function using a quasi-Newton updating method is made. This is then used to generate a QP sub-problem whose solution is used to form a search direction for a line search procedure. The positive definite quasi-Newton approximation of the Hessian \mathbf{H}_k of the Lagrangian function is calculated using the BFGS formula (Broyden, 1970; Fletcher, 1970; Goldfarb, 1970; Shanno, 1970) for updating the approximation of the Hessian. The solution procedure of the QP sub-problem involves two phases. The first phase involves the calculation of a feasible point (if one exists). The second phase involves the generation of an iterative sequence of feasible points that converge to the solution. The method used is an active set strategy (also known as a projection

method) similar to that of Gill et al. (1991). The solution is used to form a new iteration so that a sufficient decrease in a merit function is obtained (Han, 1977; Powell, 1978).

A nonlinearly constrained problem can often be solved in fewer iterations than an unconstrained problem using SQP. One reason is that, because of limits on the feasible area, the optimizer can make informed decisions regarding directions of search and step length.

The optimization programs needed for calculation of the optimum pumping rates using SQP were developed in MATLAB environment. At each iteration of the optimization, the potential is evaluated by solving differential equation (5) using MODFLOW and the distance of the toe from the coast is obtained by setting $\phi = 8.0078 \text{ m}^2$. The method follows the steps outlined by Fig. 6.

Application of SQP method requires continuity of the objective function and the constraints as well as the existence of partial derivatives of the objective function with respect to the decision variables. The optimization problem may need many iterations to converge and can be sensitive to numerical approximations such as truncation and round-off error in the calculation of finite difference gradients of the objective function. Furthermore, the program may converge to a local rather than the global minimum. Starting optimization with different initial conditions can help to locate the global minimum. Additionally, by changing the values of the parameters that take part in finite differences calculation of the objective function gradients or increasing the number of iterations contribute to the computation of the global minimum.

Section 4 presents an alternative method for solving nonlinear optimization problems based on EA. These algorithms do not require continuity of the objective function and their derivatives and converge to the global optimum if appropriate parameters are chosen.

4. Optimization of pumping rates using evolutionary algorithms

Evolutionary Algorithms (EA) are stochastic search methods that mimic the metaphor of natural

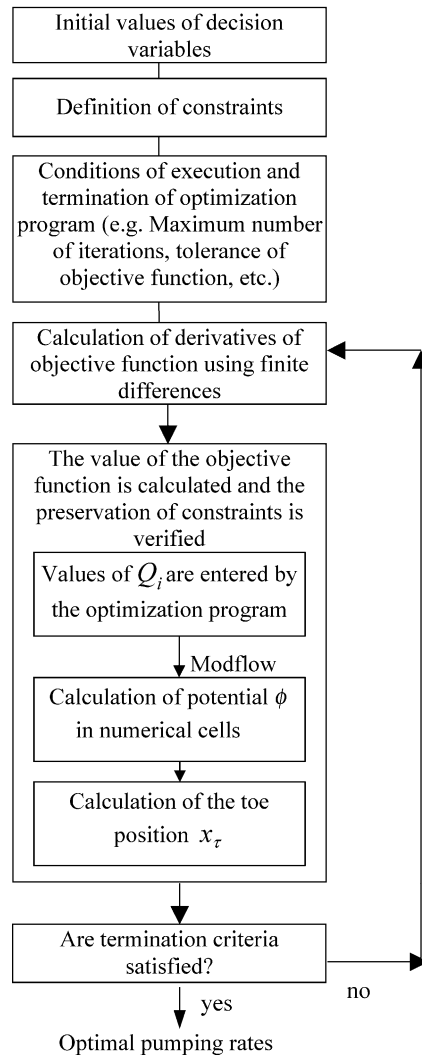


Fig. 6. Flow chart of SQP optimization methodology.

biological evolution (Holland, 1975; Goldberg, 1989; Fogel, 1994). EA neither require continuity of the objective function nor existence of derivatives and should converge to the global optimum solution after a sufficient number of generations. They operate on a population of potential solutions applying the principle of survival of the fittest to produce improved approximations to a solution. A new set of approximations is created at each generation by selecting individuals according to their fitness and breeding them together using operators borrowed from natural genetics. This

process leads to the evolution of populations of individuals that are better suited to their environment than their parents, just as in natural adaptation. EA model natural processes by applying the procedures of selection, recombination, mutation and migration at each iteration of the program.

The objective is to maximize the total pumping rates subject to constraints that protect the aquifer from sea water intrusion and the optimization problem is again expressed by Eq. (7). Since EA solve unconstrained optimization problems, maximization problem (7) is modified in the following unconstrained form

$$\begin{aligned} \text{minimize}_{(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \in R^k} : Q_{\text{tot}} = & -(Q_1 + Q_2 + \dots + Q_k) \\ & + p(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \end{aligned} \quad (8)$$

where $p(Q_1, Q_2, \dots, Q_k)$ is a penalty term inserted in the optimization problem in order to handle constraints. Penalty $p(Q_1, Q_2, \dots, Q_k)$ is zero when the constraints are satisfied and takes a very high value when constraints are violated. In the following applications, penalty term in Eq. (8) is defined as follows:

$$\left. \begin{aligned} p(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) = 0, & \quad \text{when } \phi_i \geq 0 \text{ and } x_{\pi} \leq x_{wi} \\ p(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) = 10^{10}, & \quad \text{when } \phi_i < 0 \text{ or } x_{\pi} > x_{wi} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Fig. 7 outlines the flow chart of the EA optimization procedure. To initialize the computations, a number of individuals (the population) are randomly selected and the first generation is produced. The objective function is then evaluated for these individuals. If the optimization criteria are not met, a new generation is produced according to the following procedure.

- *Fitness assignment and parent selection.* Determines which individuals are chosen for mating (recombination) and how many offspring each selected individual produces. The parents are selected according to their fitness by means of an algorithm such as roulette-wheel selection, tournament selection or stochastic universal sampling.
- *Recombination.* Produces new individuals by mixing the information contained in their parents.

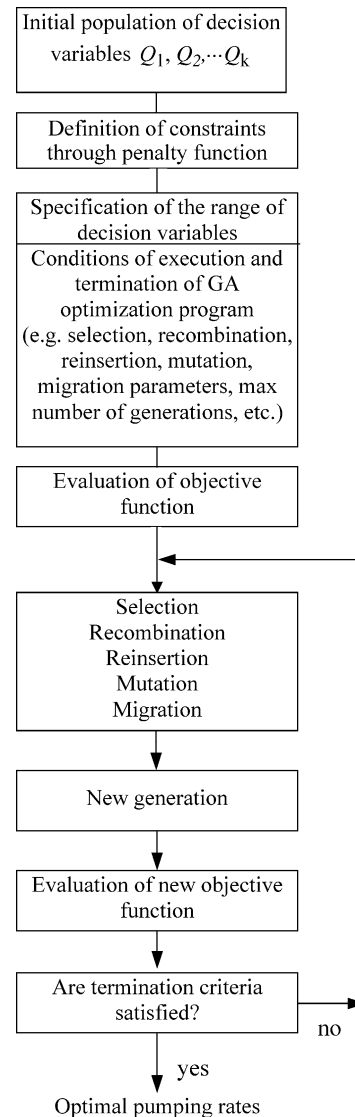


Fig. 7. Flow chart of EA optimization methodology.

The representation of the decision variables (binary, integer, real valued representation) determines the type of algorithm used.

- *Mutation.* After recombination every offspring undergoes mutation. Offspring variables are mutated by small perturbations with low probability. The algorithm depends on the representation of the variables.
- *Reinsertion.* The produced offspring must be inserted into the population. Sometimes

the number of offspring is smaller than the size of the original population. In other cases, more offspring are generated than needed. The reinsertion scheme determines which individuals are replaced by offspring and which individuals are inserted in the new population.

The above cycle is performed until the termination criteria are reached. Such criteria are, for example, the number of generations or the maximum computer time.

It follows from the above discussion that EA differ substantially from more traditional search and optimization methods. The most significant difference is that EA search a population of possible solutions in parallel rather than a single solution. Additionally, EA do not require calculation of derivatives of the objective function. They require only the objective function and corresponding fitness levels which influence the direction of search. Therefore, EA can solve general classes of optimization problems even when the objective function is not continuous and the derivatives of the objective function do not exist. Therefore, EA solve more general classes of problems because there are no restrictions in the form of the objective function. They use probabilistic transition rules and can provide a number of potential solutions to a given problem. Thus, in cases where the particular problem does not have one individual solution, then EA are potentially useful for identifying these alternative solutions simultaneously.

Optimization based on EA is very flexible and, if the population size and the number of generations are sufficient, it should converge to the global rather than a local minimum. However, EA are often slow converging and require a large number of iterations. Increasing the number of individuals in the population and the number of generations improves the results but it takes more computer time. Convergence is improved by choosing reasonable initial population values.

The EA optimization program needed for calculation of the optimal pumping rates was developed in MATLAB. MODFLOW was again used at each iteration of the optimization for solving differential equation (5) and evaluating the required potential.

5. Simple applications and necessary modification of constraints

In a first example application, an aquifer of rectangular geometry (Fig. 2) with uniform hydraulic conductivity and recharge rate is chosen in order to calculate the optimum pumping rate of one well located at different coordinates (x_w, y_w) . The numerical discretization of the aquifer is $\Delta x = \Delta y = 50$ m, thus the well coordinates x_w and y_w are assumed to be multiples of 50 m. Moving the well inland along x -axis with fixed $y_w = 1500$ m, leads to an increase in pumping rate (except near the eastern impermeable boundary), as shown by Fig. 8. The maximum quantity of groundwater is obtained when the well is located at $x_w = 6250$ m from the coast. The numerical results show that when the well is located at distance $x_w > 1650$ m from the coast the first constraint in Eq. (7) becomes active (i.e. $Q = Q_{\max}$, when $\phi_w \rightarrow 0$). For $x_w < 1650$ m the second set of constraints become active (i.e. $Q = Q_{\max}$, when $x_\tau \rightarrow x_w$). Notice that the last part of the diagram for large x_w has a descending direction since these points are close to the impermeable boundary and are affected by it.

Fig. 9 shows the dependence of the optimum pumping rate on the y coordinate of the well for fixed $x_w = 3500$ m. The diagram is symmetric since both the north and the south boundaries are impervious. As expected, the optimum pumping rate is obtained at the middle row while the minimum is obtained near

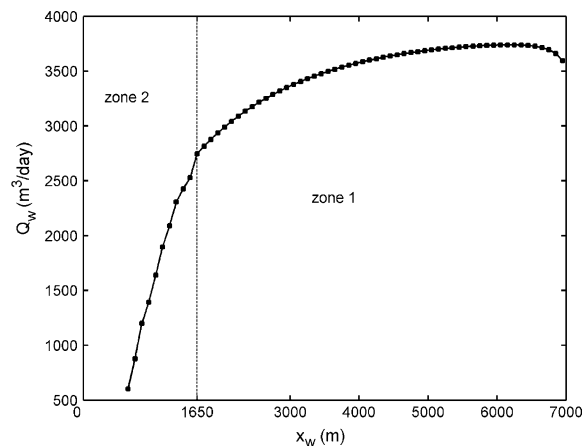


Fig. 8. Dependence of optimum pumping rate on well distance from the coast for fixed $y_w = 1500$ m.

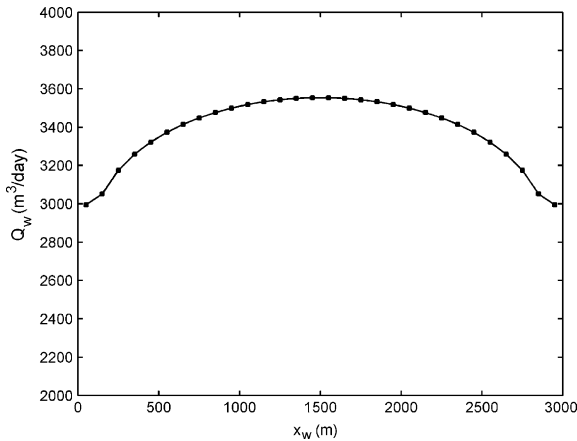


Fig. 9. Dependence of optimum pumping rate on well distance from the north boundary for fixed $x_w = 3500$ m.

the impermeable boundaries. In conclusion, the maximum pumping rate from one well is obtained when the well is located far from the coast and the impervious boundaries.

In a second example, the rectangular aquifer is pumped by three wells located quite far from the coast and distributed almost uniformly over the width of the aquifer as shown in Fig. 10. Evaluation of pumping rates from minimization of Eq. (7) gives the following values: $Q_1 = 1436.3$ m³/day, $Q_2 = 1452.8$ m³/day and $Q_3 = 1431.1$ m³/day, with a total pumping rate of $Q_{tot} = 4320.2$ m³/day.

Fig. 10 is a plot of the equipotentials corresponding to these optimal pumping rates. The equipotential

$\phi = 8$ m² corresponds approximately to the advancement of the toe (the exact value at the toe is $\phi_\tau = 8.0078$ m²). The plot indicates that there is a region with $\phi < 8$ m² surrounding the wells and not connected to the toe, (there is an area with potentials higher than 8 m² separating it from the toe). Therefore, the wells are not contaminated in this case since the toe of the interface has not yet reached the wells. Notice however, that this is a very unstable situation and with the slightest increase of pumping, these two regions will connect and the toe will advance quickly beyond the wells.

When the number of wells is relatively large and are widely spread over the aquifer, constraints (7) are usually sufficient for protecting the aquifer from sea water intrusion by forming a barrier where the sea water front cannot advance into the aquifer. Notice that in such case, each well pumps with a low pumping rate. However, when the number of wells is small and/or when the wells lie at a large distance from each other, constraints in Eq. (7) may not effectively protect the aquifer. This is demonstrated in the example of Fig. 11 where wells 2 and 3 have the same y coordinates. Minimization of Eq. (7) gives the following rates in this case: $Q_1 = 1564.1$ m³/day, $Q_2 = 1043.9$ m³/day and $Q_3 = 1715.1$ m³/day with a total pumping rate of $Q_{tot} = 4323.1$ m³/day. While these optimal values of pumping satisfy all constraints in Eq. (7), Fig. 11 shows that the toe has advanced beyond the wells and has contaminated them. The large distance between the wells in this case allows a path for the toe to connect to the region with

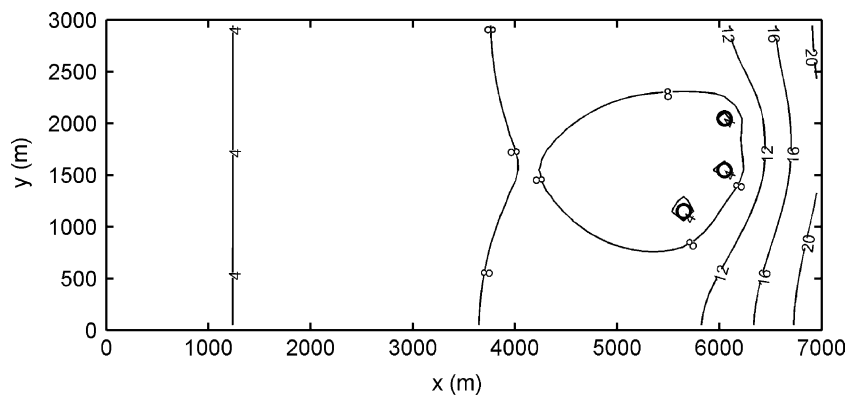


Fig. 10. Equipotentials corresponding to the optimal pumping rate for three pumping wells.

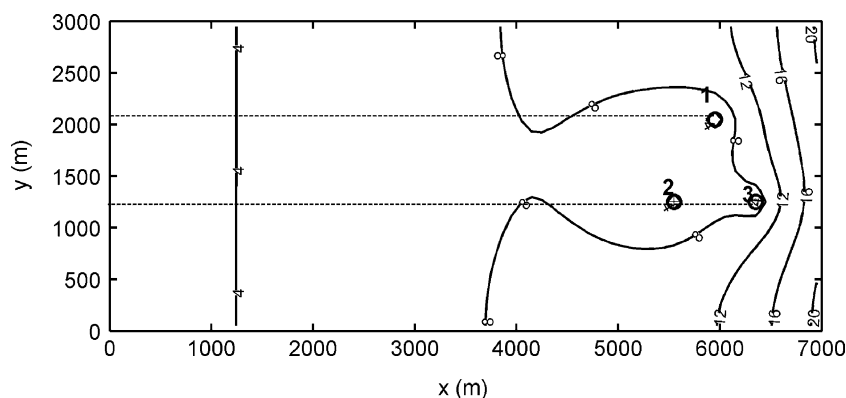


Fig. 11. Equipotentials for the optimum pumping rates.

$\phi < 8 \text{ m}^2$ without violating constraints in Eq. (7). Notice that when the wells are more densely distributed on the y -axis, these paths are narrow and do not allow such advancement of the toe.

In order to avoid this situation a modification of the constraints is needed. One possibility is to add additional constraints preventing the advancement of the front. This can be accomplished by determining the line connecting the closest to the coast wells with the north and south boundaries as shown in Fig. 12, and impose new constraints so that the toe does not reach this line. Such constraints are expressed by $x_{Tj}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \leq x_{Twj}; j = 1, \dots, m$ where x_{Twj} is the distance of this line to the coast, x_{Tj} is the distance of the toe to the coast along the j th row of the discretized aquifer model, respectively, and m is the number of rows of the discretized aquifer model. Notice that the number of constraints is now much larger than before

since there is one constraint for each row of the aquifer. The optimal pumping rates evaluated from minimization of the objective function in Eq. (7) subject to the new constraints are: $Q_1 = 1449.0 \text{ m}^3/\text{day}$, $Q_2 = 1475.2 \text{ m}^3/\text{day}$ and $Q_3 = 1394.2 \text{ m}^3/\text{day}$ while the total pumping rate is $Q_{\text{tot}} = 4318.4 \text{ m}^3/\text{day}$. Fig. 12 is a plot of equipotential lines corresponding to the optimal solution derived using the new constraints indicating now protection of the wells from seawater intrusion. Notice that a small reduction of $\Delta Q_{\text{tot}} = (4323.1 - 4318.4) = 4.7 \text{ m}^3/\text{s}$ of the total pumping rate is sufficient for protecting the wells from sea water intrusion.

Although this method effectively protects the wells, it requires many additional constraints. Another possibility for achieving protection without additional constraints is to implement stricter constraints limiting the advancement of the toe.

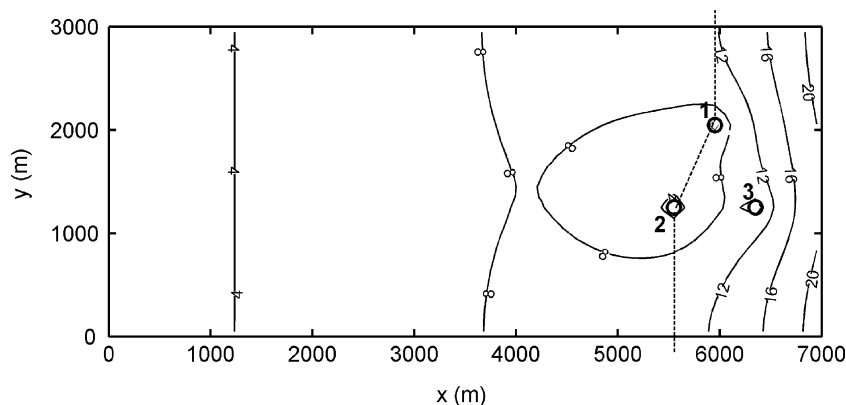


Fig. 12. Line connecting the seaward wells to the north and south boundaries and equipotentials for the resulting optimal pumping rates.

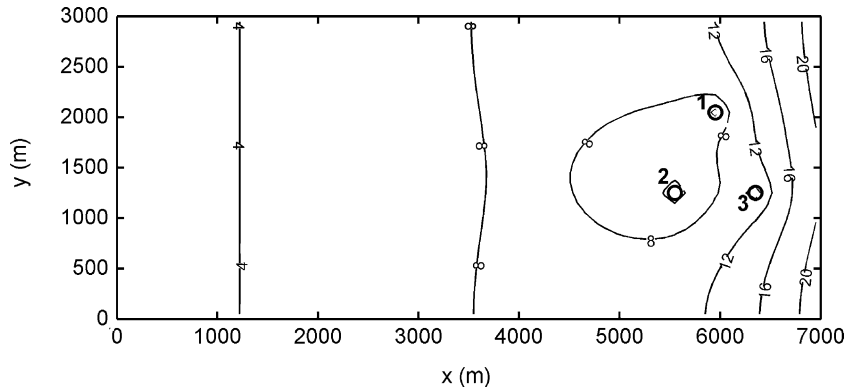


Fig. 13. Equipotentials for the optimum pumping rates with $\phi_{sr} = 8.1 \text{ m}^2$.

Notice that the second set of constraints in Eq. (7) can be made stricter by modifying the second inequality as follows: $x_{s\tau i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \leq x_{wi}$; $i = 1, \dots, k$ where $x_{s\tau i}$ corresponds to somewhat larger value of potential than the toe potential ($\phi_\tau = 8.0078 \text{ m}^2$). For example, by setting $\phi_{sr} = 8.1 \text{ m}^2$ in the previous application increases the values of $x_{s\tau i}$ making constraints $x_{s\tau i}(Q_1, Q_2, \dots, Q_k) \leq x_{wi}$; $i = 1, \dots, k$ stricter. Minimization of objective function (7) subject to the new constraints yields the following optimal pumping rates: $Q_1 = 1438.7 \text{ m}^3/\text{day}$, $Q_2 = 1532.2 \text{ m}^3/\text{day}$ and $Q_3 = 1339.1 \text{ m}^3/\text{day}$ with a total pumping rate of $Q_{tot} = 4310.0 \text{ m}^3/\text{day}$. Fig. 13 is a plot of the equipotential lines corresponding to the optimal solution obtained using the new constraints, indicating protection of the wells from seawater intrusion. Notice again that a small reduction of $\Delta Q_{tot} = (4323.1 - 4310.0) = 13.1 \text{ m}^3/\text{s}$ on the total pumping rate is sufficient for protecting the wells from

sea water intrusion. By further increasing ϕ_{sr} , it is possible to obtain solutions that offer even greater protection of the aquifer with further reduction of pumping rates.

Another possibility for protecting the wells investigated in detail in Mantoglou (2003), is to replace both sets of constraints in Eq. (7) with $\phi_{wi} \geq \phi_\tau$; $i = 1, \dots, k$ where ϕ_{wi} is the potential at the well locations and $\phi_\tau = 8.0078 \text{ m}^2$ is the potential at the toe. Evaluation of pumping rates from minimization of the objective function in Eq. (7) subject to these constraints gives the following optimal pumping rates: $Q_1 = 1313.3 \text{ m}^3/\text{day}$, $Q_2 = 1312.9 \text{ m}^3/\text{day}$ and $Q_3 = 1313.3 \text{ m}^3/\text{day}$ with a total pumping rate of $Q_{tot} = 3939.5 \text{ m}^3/\text{day}$. Fig. 14 is a plot of the equipotential lines corresponding to this solution indicating a significant protection of the wells from sea water intrusion since the toe (corresponds to equipotential $\phi_\tau = 8.0078 \text{ m}^2$) is

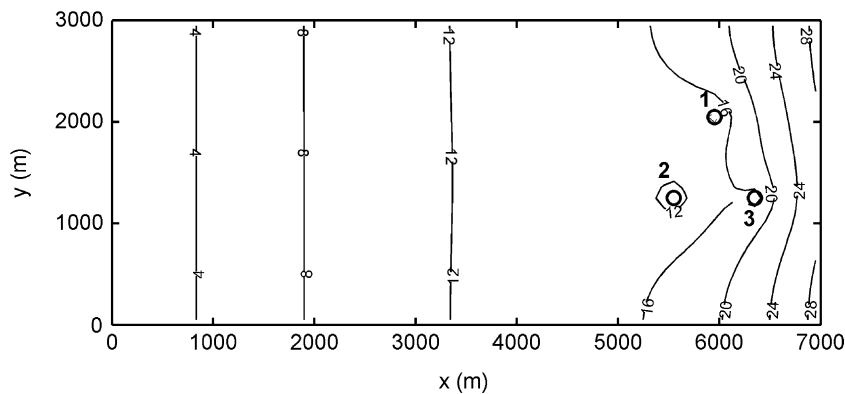


Fig. 14. Equipotentials for the optimum pumping rates with constraints $\phi_{wi} \geq \phi_\tau$.

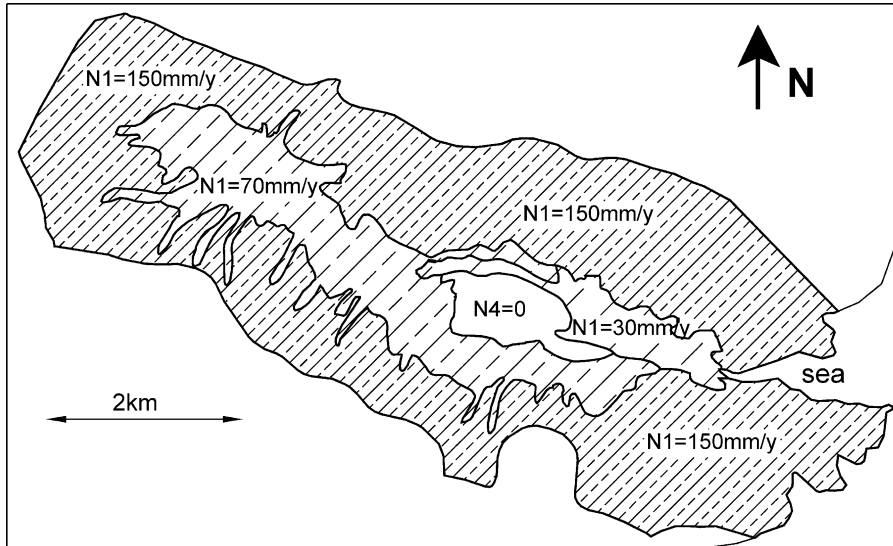


Fig. 15. The four zones of the aquifer with different surface recharge rates.

located very far from the wells. Notice, however, that the total pumping rate is now reduced by $\Delta Q_{\text{tot}} = (4323.1 - 3939.5) = 383.6 \text{ m}^3/\text{s}$ which is significant compared to previous solution. Although these constraints are strict and yield a suboptimal solution, they may be preferable in a real problem because (a) the solution based on the first set of constraints is very sensitive and the

wells are contaminated with the slightest increase of pumping rate or decrease of recharge rate, (b) a real aquifer is heterogeneous and the sea water could invade the aquifer through preferential paths if the aquifer is pumped to its limit, (c) in a real field application there must be a safety margin to account for modeling and parameter errors.

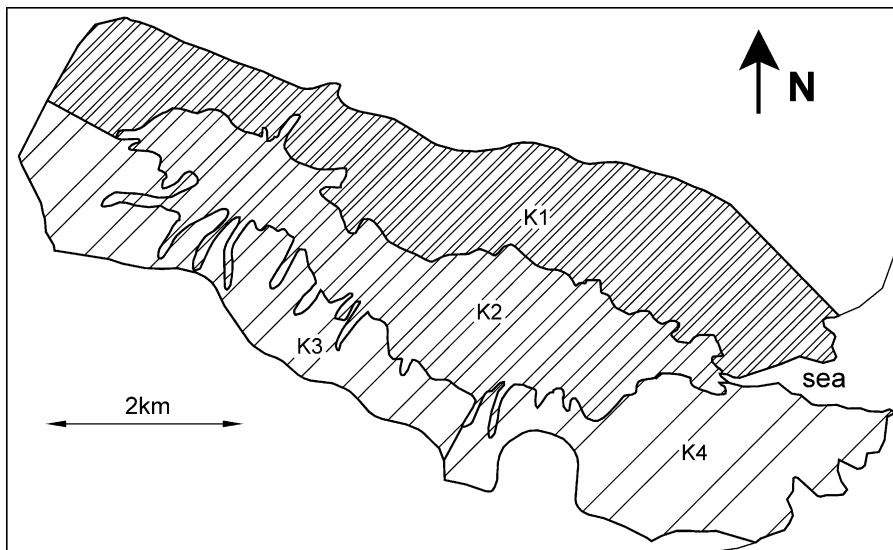


Fig. 16. The four aquifer zones with different hydraulic conductivities.

Table 1

Optimum pumping rates (m^3/d) and potential ϕ at the well locations, obtained by SQP, EA and hybrid EA + SQP method

Method	Well											$\sum Q_i$	
	B1	B2	B3	B4	B5	B6	B7	B8	B9	Y3	Y4		
SQP	Q_i	391.1	397.4	443.0	370.7	352.1	679.1	136.5	286.1	841.5	961.3	286.1	5280.2
	ϕ_i	42.4	29.1	29.2	23.4	18.6	12.8	13.1	11.6	0	0	13.5	
EA	Q_i	1095.8	367.79	442.91	558.53	291.86	100	263.98	323.66	726.14	776.12	410.23	5357.0
	ϕ_i	14.6	14.3	13.8	10.2	12.4	14.5	8.2	8.7	0.1	0.4	8.2	
EA + SQP	Q_i	1094.8	448.8	283.5	558.9	372.7	100.6	261.7	325.9	725	778	410.7	5360.5
	ϕ_i	14.4	14.0	13.5	10.0	12.4	14.3	8.1	8.6	0	0.3	8.1	

In the application discussed in Section 6, the second variant of increasing ϕ_r by a small amount was utilized, because of its simplicity (it does not introduce more constraints), effectiveness (it yields the maximum pumping rates while protecting the wells from sea water intrusion) and flexibility (it is possible to obtain more conservative or less conservative solutions by increasing or reducing ϕ_r , respectively).

6. Application in a real coastal aquifer in Kalymnos island

The simulation and optimization methodologies developed above are applied to an unconfined aquifer located at Vathi valley in the Greek island of Kalymnos (Fig. 3). The aquifer consists of high permeability limestone, which outcrops at the highland areas while the impermeable bottom of the aquifer is mainly composed by schist. The geologic formations found in the valley are highly permeable scree, medium permeability alluvium deposits and almost impermeable tuff (volcanic formations). Although in parts of the aquifer flow is taking place in the limestone fissures, we assume for the purposes of this analysis that the aquifer can be represented by an equivalent porous medium. According to the data available so far, the thickness of the aquifer is assumed as $d = 25$ m.

Fig. 15 outlines the recharge areas of the aquifer indicating four zones with different surface recharge rates. The large recharge rate $N_1 = 150$ mm/year in the limestone parts of the aquifer is justified by the large crevices present in the limestone facilitating percolation of surface water. The recharge rate at

the scree area is smaller and is estimated at $N_2 = 70$ mm/year, whereas the presence of clay in the alluvium deposits reduces the recharge rate to $N_3 = 30$ mm/year. The tuffs are regarded as impermeable formations with zero recharge $N_4 = 0$.

Based on the geology of the valley, the aquifer is divided into four zones having different hydraulic conductivities (Fig. 16). The data regarding hydraulic heads and historical pumping rates was not sufficient to allow an accurate calibration of model parameters using an automatic calibration method, thus the zonal hydraulic conductivities were estimated by trial and error so that model (5) provided reasonable predictions compared to the measured fresh water levels on the existing wells. Notice that the data available so far is not sufficient to accurately estimate the aquifer parameters and recharge rate. Thus the selected values are rough estimates applied only to illustrate the method.

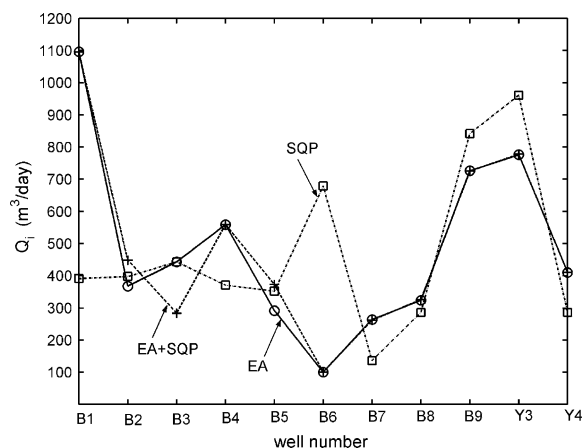


Fig. 17. Predicted pumping rates for the 11 wells with three optimization methods.

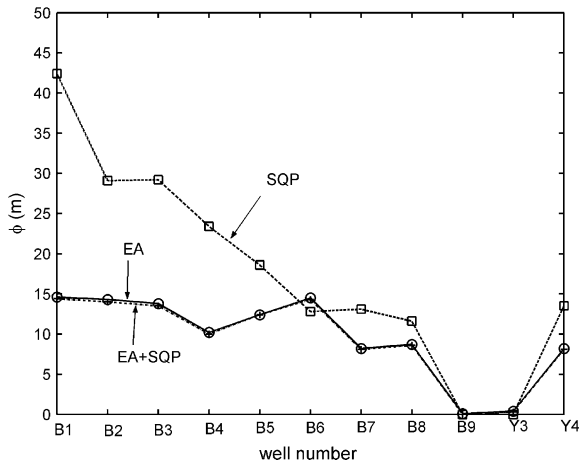


Fig. 18. Predicted potential ϕ corresponding to the pumping rates obtained from the three optimization methods.

The sea along the east side of the aquifer creates a constant hydraulic head boundary. The west and south boundaries of the aquifer correspond to groundwater divides, estimated based on hydrogeologic data of the region, and in the model are considered as impermeable boundaries. Although the sea is very close to the aquifer in the northeastern boundary, water quality data show that the existing wells have not been contaminated by sea water so far which indicate an impermeable boundary at the northeastern side.

Therefore, the west, south, and north sides of the aquifer are considered impermeable boundaries and the east side is a constant hydraulic head boundary. In the optimization case study that follows the aquifer is replenished by surface recharge and pumped by 11 wells with specified (known) coordinates.

The optimum pumping rates are calculated using the two optimization methodologies described earlier based on SQP and EA. Besides the two algorithms, a combination of both EA and SQP methods was also used where the optimum solution obtained by EA was used for initializing the iterations of the SQP method.

Table 1 presents the optimal pumping rates and the potential at the well locations obtained by the three methods. The resulting total pumping rate obtained by SQP is $Q_{tot,SQP} = 5280.2 \text{ m}^3/\text{day}$, by EA is $Q_{tot,EA} = 5357.0 \text{ m}^3/\text{day}$, while the one obtained by the hybrid EA + SQP method is $Q_{tot,EA+SQP} = 5360.5 \text{ m}^3/\text{day}$. Fig. 17 is a plot of the pumping rates obtained by the three methods for each of the 11 wells. Fig. 18 is a plot of the predicted potential at the 11 well locations for the pumping rates obtained with the three different methods. Notice that the SQP and EA solutions are very different from each other, while the EA and the EA + SQP solutions are similar. Since a better solution was found by EA, it indicates that the SQP solution is a local optimum. In the hybrid EA + SQP methodology, the EA identifies

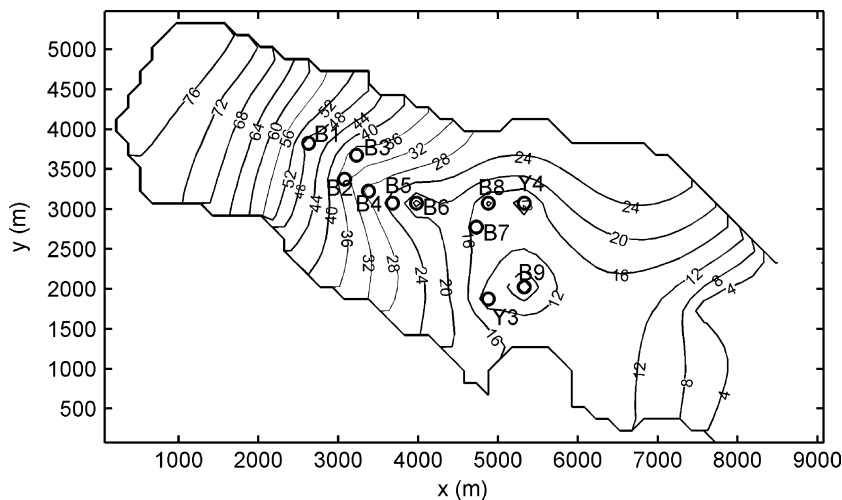


Fig. 19. Equipotentials corresponding to the optimal pumping rate obtained by SQP.

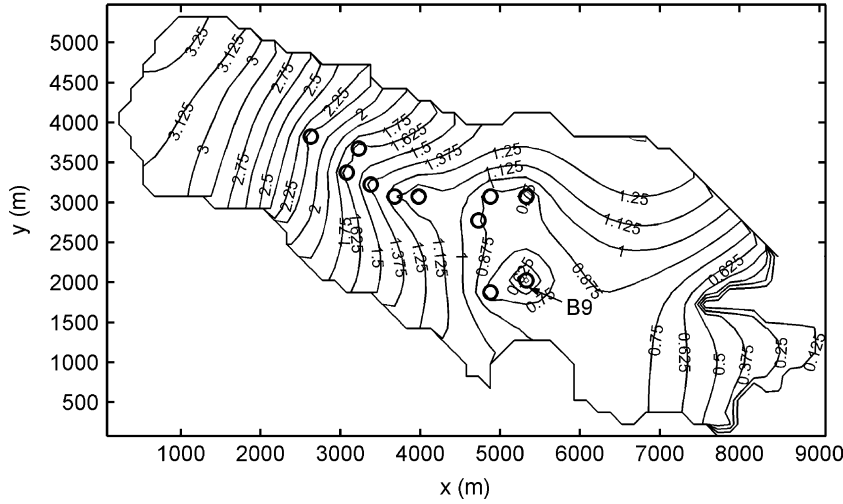


Fig. 20. Map of piezometric head for the pumping rate calculated by SQP.

the region of the global optimal solution whereas SQP searches more deeply for the actual global optimum. Notice that all solutions maintain the constraints of $\phi_i > 0$ and keep the toe location from reaching the wells. However, in this case study for the particular coordinates of the wells, the constraints $\phi_i > 0$ rather than the toe constraints are limiting. The general conclusion is that EA gives a better solution than SQP but requires more computer time.

Fig. 19 is a plot of equal potential lines for ϕ , while Fig. 20 is a plot of resulting piezometric head map

corresponding to the pumping rate obtained by SQP. For the selected location of the wells, constraints $0 < \phi_i; i = 1, \dots, k$, employed for maintaining a piezometric head greater than zero with respect to the sea surface, become active rather than the second set of constraints restricting sea water intrusion into the aquifer. This fact is indicated by Fig. 19 where the toe of sea water interface (corresponds to $\phi \cong 8 \text{ m}^2$) has not advanced very deeply into the aquifer and by Fig. 20 showing a piezometric head approaching zero in well B9.

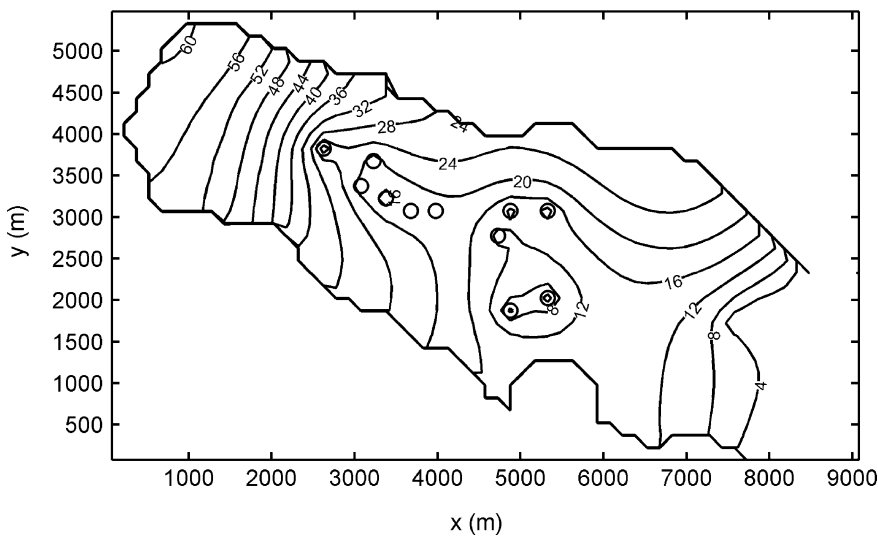


Fig. 21. Equipotential map for the pumping rate calculated by EA.

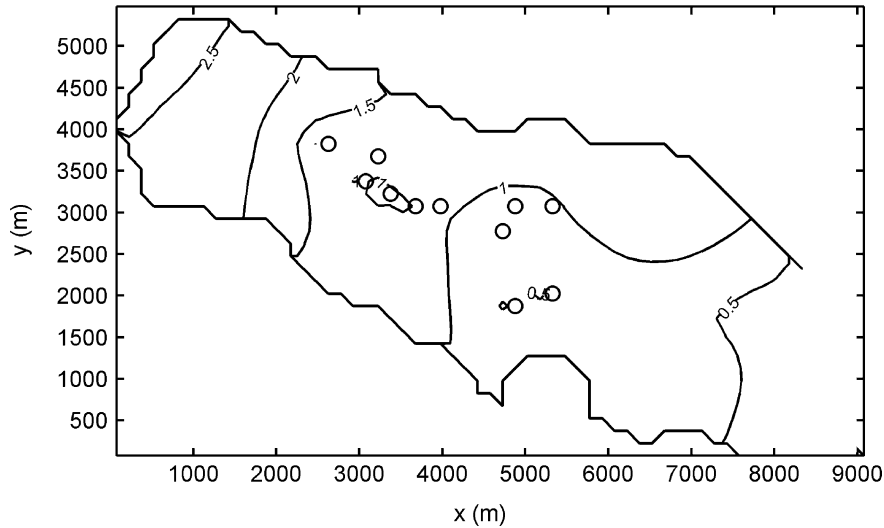


Fig. 22. Map of piezometric head for the pumping rate calculated by EA.

Figs. 21 and 22 plot the equipotential and piezometric head maps corresponding to the EA solution indicating somewhat smaller values of potential and piezometric head than previous solution based on SQP. Finally Fig. 23 plots the total pumping rate as a function of the number of generations in the EA. The figure indicates a slow convergence of the EA algorithm, i.e. a large number of iterations are required for convergence to the global optimal solution.

The recharge of the aquifer in the above examples is distributed as shown by Fig. 15. This gives a total recharge volume of the aquifer of $Q_{\text{rech}} = 7746 \text{ m}^3/\text{day}$. The total pumping rate evaluated by SQP is $Q_{\text{tot}} = 5280.2 \text{ m}^3/\text{day}$ (that is 68% of the total recharge), and by EA is $Q_{\text{tot}} = 5357.0 \text{ m}^3/\text{day}$ (that is 69% of recharge). It is of interest to investigate the reduction of pumping rates in a dry year when recharge is reduced. We assume in the following example a reduced recharge in recharge zone 1 of $N_1 = 93.75 \text{ mm/year}$ and in recharge zone 2 of $N_2 = 52.5 \text{ mm/year}$. The recharge rates in the remaining zones are considered unchanged. The total recharge volume of the aquifer in this case is $Q_{\text{rech}} = 4990 \text{ m}^3/\text{day}$ and the optimal pumping rates obtained by SQP are given in Table 2. The total pumping rate in this case is $Q_{\text{tot}} = 3248.5 \text{ m}^3/\text{day}$ (that is 65% of the recharge rate). This result indicates

a nonlinear dependence of the optimal pumping rate on the recharge rate, i.e. for reduced recharge, the amount of water that can be pumped from the aquifer is reduced nonlinearly.

According to local data, the actual pumping from this aquifer is estimated between $1,300,000\text{--}1,500,000 \text{ m}^3/\text{year}$ (that is $3300\text{--}4100 \text{ m}^3/\text{day}$). According to the optimization results, these actual pumping rates are reasonable for an average recharge year, but need to be reduced in dry years in order to protect the aquifer from sea water intrusion.

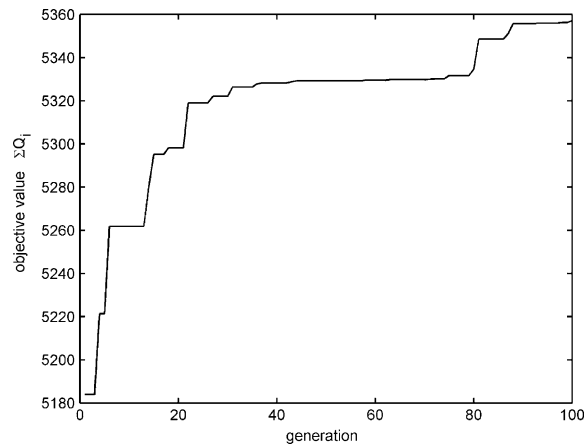


Fig. 23. Objective value versus number of generations in Evolutionary Algorithm optimization.

Table 2
Optimum pumping rates (m³/d) obtained by SQP for reduced recharge

Well	B1	B2	B3	B4	B5	B6	B7	B8	B9	Y3	Y4	$\sum Q_i$
Q_i	196.5	176.8	192.1	146.8	196.7	233.6	5	317.9	694.4	576.0	512.6	3248.5

7. Summary and conclusions

An optimization method for determining the optimal pumping rates in coastal aquifers pumped by a number of wells was developed and utilized in a coastal aquifer in the Greek island of Kalymnos. The method is based on nonlinear optimization subject to constraints that limit the sea water intrusion into the aquifer. The simulation model is based on the sharp interface and the Ghyben–Herzberg approximations and is applicable to unconfined aquifers and steady-state flow. The single potential formulation of Strack (1976) was used and the governing equations were solved numerically using finite differences. The numerical model is more general than previous analytical solutions (Cheng et al., 2000; Mantoglou, 2003) and can handle aquifers of complex shapes, nonuniform hydraulic conductivity, nonuniform distribution of surface recharge, etc.

Optimization aims at maximizing the total pumping rates from a number of the wells subject to constraints that protect the aquifer from sea water intrusion. The governing differential equations are solved using finite differences whereas the nonlinear optimization is performed with two different methods, specifically the SQP and EA. SQP uses an iterative procedure based on evaluation of the derivatives of the objective function with finite differences. EA on the other hand are stochastic search methods that mimic the metaphor of natural biological evolution. EA do not require continuity of the objective function or existence of derivatives and converge to the global optimum solution after a sufficient number of generations. They operate on a population of potential solutions by applying the principle of survival of the fittest to produce improved approximations to a solution. SQP requires less computer time than EA but can get stuck on local optimum solutions.

An irregular advancement of the front beyond the wells was encountered when the number of wells is small and the distance between the wells is large.

A modification of the original constraints was suggested in such cases in order to make them stricter and avoid sea water intrusion in the wells. Three different modifications were presented and the one based on enforcing slightly stricter constraints that limit the advancement of the toe was selected. The proposed modification is simple, does not add additional constraints in the optimization problem and it effectively protects the aquifer from sea water intrusion.

The simulation and optimization methodology was applied to a real unconfined aquifer located at the Vathi valley in the Greek island of Kalymnos. The aquifer is modeled as heterogeneous with four zones of different hydraulic conductivity and four areas with different recharge rates. Using the optimization methodologies developed in the paper, based on nonlinear optimization with numerical simulation of flow in the aquifer, the optimum pumping rates were calculated by applying the methods of SQP and EA. Besides the two algorithms, a combination of EA and SQP method was also used where the solution obtained by EA was used for initializing the iterations of the SQP method. In this method, EA identify the region of the global optimal solution whereas SQP searches more deeply for the global optimum.

The results indicate that the EA solution is superior to the SQP solution but requires more computer time. The solution obtained by the combination of EA and SQP methods is a little better regarding total pumping rates than the EA answer. All solutions maintain the constraints of $0 < \phi_i$; $i = 1, \dots, k$ and keep the toe location far from the wells.

For the reference recharge, the total pumping of the aquifer was found to be 68–69% of the total recharge. However, in a dry year when the aquifer recharge is reduced, pumping must be reduced to 65% of recharge. This result indicates a nonlinear dependence of the optimal pumping rate on the recharge rate, i.e. for reduced recharge, the amount of water that can be pumped from the aquifer is reduced nonlinearly.

The solution calculated by the optimization methodology shows a strong sensitivity on the recharge rate and other parameters of the problem thus, in real applications the constraints must be stricter to allow a safety margin in the calculated solution. A suboptimal solution might be preferable in a real problem because (a) the solution based on the original constraints is very sensitive and the wells are contaminated with the slightest increase of pumping rate or decrease of recharge rate, (b) a real aquifer is heterogeneous and the sea water could invade the aquifer through preferential paths if the aquifer is pumped to its limit, (c) in a real field application, there must be a safety margin to account for modeling and parameter errors.

The proposed methodology based on the sharp interface approximation is applicable in regional scale problems where the transition zone is narrow relative to the scale of the problem. The proposed numerical solution of the governing differential equation does not have the limitations of analytical solutions regarding the aquifer shape and homogeneous distribution of hydraulic conductivity (Cheng et al., 2000; Mantoglou, 2003) and can solve the pumping optimization problem in cases where the shape of the aquifer is of finite and irregular dimensions or the hydraulic conductivity of the aquifer and the recharge rate is nonuniform.

References

- Ahlfeld, D.P., Heidari, M., 1994. Applications of optimal hydraulic control to ground-water systems. *J. Water Resour. Plan. Mgmt* 120(3), 350–365.
- Andersen, P.F., White, H.O. Jr., Mercer, J.W., 1988. Numerical modeling of saltwater intrusion at Hallandale, Florida. *Ground Water* 26(5), 619–630.
- Bear, J., 1979. *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, New York.
- Bear, J., Cheng, A.H.-D., Sorek, S., Ouazar, D., Herrera, I., 1999. *Seawater intrusion in coastal aquifers: concepts, methods and practices*. Kluwer, Dordrecht.
- Biggs, M.C., 1975. Constrained minimization using recursive quadratic programming. In: Dixon, L.C.W., Szergo, G.P. (Eds.), *Towards Global Optimization*. North-Holland, Amsterdam, pp. 341–349.
- Broyden, C.G., 1970. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms. *J. Inst. Math. Appl.* 6, 76–90.
- Cheng, A.H.-D., Ouazar, D., 1999. Analytical solutions. In: Bear, J., Cheng, A.H.-D., Sorek, S., Ouazar, D., Herrera, I. (Eds.), *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers—Concepts, Methods and Practices*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Cheng, A.H.-D., Halhal, D., Naji, A., Ouazar, D., 2000. Pumping optimization in saltwater-intruded coastal aquifers. *Water Resour. Res.* 36(8), 2155–2165.
- Das, A., Datta, B., 1999. Development of multiobjective management models for coastal aquifers. *J. Water Resour. Plan. Mgmt* 125(2), 76–87.
- Emch, P.G., Yeh, W.W.-G., 1998. Management model for conjunctive use of coastal surface water and ground water. *J. Water Resour. Plan. Mgmt* 124(3), 129–139.
- Essaid, H.I., 1990. A multilayered sharp interface model of coupled freshwater and saltwater flow in coastal systems: model development and application. *Water Resour. Res.* 26(7), 1431–1454.
- Essaid, H.I., 1999. USGS SHARP model. In: Bear, J., Cheng, A.H.-D., Sorek, S., Ouazar, D., Herrera, I. (Eds.), *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers—Concepts, Methods and Practices*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Fletcher, R., 1987. *Practical Methods of Optimization*. Wiley, New York.
- Fletcher, R., 1970. A new approach to variable metric algorithms. *Comput. J.* 13, 317–322.
- Fogel, D.B., 1994. An introduction to simulated evolutionary optimization. *IEEE Trans. Neural Netw.* 5(1), 3–14.
- Gambolati, G., Putti, M., Paniconi, C., 1999. Three-dimensional model of coupled flow and miscible salt transport. In: Bear, J., Cheng, A.H.-D., Sorek, S., Ouazar, D., Herrera, I. (Eds.), *Seawater Intrusion in Coastal Aquifers: Concepts, Methods and Practices*. Kluwer, Dordrecht, (Chapter 10).
- Gill, P.E., Murray, W., Wright, M.H., 1981. *Practical Optimization*. Academic Press, London.
- Gill, P.E., Murray, W., Saunders, M.A., Wright, M.H., 1984. Procedures for optimization problems with a mixture of bounds and general linear constraints. *ACM Trans. Math. Software* 10, 282–298.
- Gill, P.E., Murray, W., Wright, M.H., 1991. *Numerical Linear Algebra and Optimization*, vol. 1. Addison-Wesley, Reading, MA.
- Goldberg, D.E., 1989. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley, Reading, MA.
- Goldfarb, D., 1970. A family of variable metric updates derived by variational means. *Math. Comput.* 24, 23–26.
- Gordon, E.E., Shamir, U., Bensabat, J., 2000. Optimal management of a regional aquifer under salinization conditions. *Water Resour. Res.* 36(11), 3193–3203.
- Gorelick, S.M., 1983. A review of distributed parameter groundwater management modeling methods. *Water Resour. Res.* 19(2), 305–319.
- Gorelick, S.M., Voss, C.I., Gill, P.E., Murray, W., Saunders, M.A., Wright, M.H., 1984. Aquifer reclamation design: the use of contaminant transport simulation combined with nonlinear programming. *Water Resour. Res.* 20(4), 415–427.
- Hallaji, K., Yazicigil, H., 1996. Optimal management of a coastal aquifer in southern Turkey. *J. Water Resour. Plan. Mgmt* 122(4), 233–244.

- Han, S.P., 1977. A globally convergent method for nonlinear programming. *J. Optimiz. Theory Appl.* 22, 297.
- Hock, W., Schittkowski, K., 1983. A comparative performance evaluation of 27 nonlinear programming codes. *Computing* 30, 335.
- Holland, J.H., 1975. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. The University of Michigan Press, Ann Arbor.
- Huyakorn, P.S., Andersen, P.F., Mercer, J.W., White, H.O., 1987. Saltwater intrusion in aquifers—development and testing of a 3-dimensional finite-element model. *Water Resour. Res.* 23(2), 293–312.
- Luenberger, D.G., 1989. *Linear and Nonlinear Programming*. Addison-Wesley, Reading, MA.
- Mantoglou, A., 2003. Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion. *Water Resour. Res.* 39(12).
- Mayer, A.S., Kelley, T., Miller, C.T., 2002. Optimal design for problems involving flow and transport phenomena in saturated subsurface systems. *Adv. Water Resour.* 25, 1233–1256.
- McDonald, M.G., Harbaugh, A.W., 1988. A Modular Three-dimensional Finite-Difference Ground-water Flow Model. USGS, (Chapter AI), Book 6.
- Oude Essink, G.H.P., 2001. Salt water intrusion in a three dimensional groundwater system in the Netherlands: a numerical study. *Transport Porous Media* 43, 137–158.
- Powell, M.J.D., 1978. A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations. In: Watson, G.A., (Ed.), *Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics*, vol. 630. Springer, Berlin.
- Powell, M.J.D., 1983. Variable metric methods for constrained optimization. In: Bachem, A., Grottschel, M., Korte, B. (Eds.), *Mathematical Programming: The State of the Art*, Springer, Berlin, pp. 288–311.
- Schittkowski, K., 1985. NLQPL: a FORTRAN-subroutine solving constrained nonlinear programming problems. *Ann. Oper. Res.* 5, 485–500.
- Shamir, U., Bear, J., Gamliel, A., 1984. Optimal annual operation of a coastal aquifer. *Water Resour. Res.* 20(4), 435–444.
- Shanno, D.F., 1970. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Math. Comput.* 24, 647–656.
- Strack, O.D.L., 1976. A single-potential solution for regional interface problems in coastal aquifers. *Water Resour. Res.* 12(6), 1165–1174.
- Wang, W., Ahlfeld, D.P., 1994. Optimal groundwater remediation with well location as a decision variable: model development. *Water Resour. Res.* 30(5), 1605–1618.