

第二章 多孔介质中地下水流动的有限差分公式数学模型

在不考虑水的密度变化的条件下，孔隙介质中地下水在三维空间的流动可以用下面的偏微分方程来表示：

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (1)$$

其中：

K_{xx} , K_{yy} 和 K_{zz} 为渗透系数在 x 、 y 和 z 方向上的分量。在这里，我们假定渗透系数的主轴方向与坐标轴的方向一致，量纲为 (LT^{-1}) ；

h : 水头(L)；

W : 单位体积流量(T^{-1})，用以代表流进汇或来自源的水量；

S_s : 孔隙介质的贮水率(L^{-1})；

t : 时间 (T)。

一般来说， S_s , K_{xx} , K_{yy} 和 K_{zz} 都可能为空间的函数，而 W 可能不仅随空间变化，还可能随时间发生变化。公式(1)描述了在三维空间中，当渗透系数主轴和坐标系方向一致时，地下水在孔隙介质中的流动。有关这个公式的导出，读者可以在许多教科书中找到(如Rushton和Redshaw, 1979)。

公式(1)加上相应的初始条件和边界条件，便构成了一个描述地下水流动体系的数学模型。从解析解的角度上说，该数学模型的解就是一个描述水头值分布的代数表达式。在所定义的空间和时间范围内，所求得的水头 h 应满足边界条件和初始条件。但除了某些简单的情况，公式(1)的解析解一般很难求得。因此，各种各样的数值法被用来求得公式(1)的近似解。其中一种就是有限差分法。

在有限差分法求解过程中，连续的时间和空间被划分成为一系列离散的点。在这些点上，连续的偏导数也由水头差分公式来取代。将所求的未知点联合起来，这些有限差分式构成了一个线性方程组；然后对这个线性方程组进行联立求解。这样获得的解就是水头在各个离散点上的近似解。数值解虽然不能给出描述水头随时间和空间变化的代数表达式，但它可以用来解决大量的实际问题。

我们可以运用有限差分计算的方法对公式(1)以及相应的边界和初始条件求解。为了便

于讨论，我们通过物理概念对有限差分法进行介绍。

离散化的概念

如图1所示，我们将一个三维含水层系统划分为一个三维的网格系统，整个含水层被剖分为若干层，每一层又剖分为若干行和若干列。这样，含水层就可以由许多剖分成的小长方体所表示。这些剖分出来的小长方体称为计算单元(Cell)。有时这些计算单元也称为元素或格点。[译注：在本书中，我们统一使用计算单元这个名称。] 每个计算单元的位置可以用该计算单元所在的行号(i)，列号(j)和层号(k)来表示。假定一个含水层可以剖分为“nlay”层，而每一层又剖分为“nrow”行和“ncol”列，则i称为行下标，j称为列下标，k称为层下标。显然，我们有

$$i = 1, 2, \dots, nrow$$

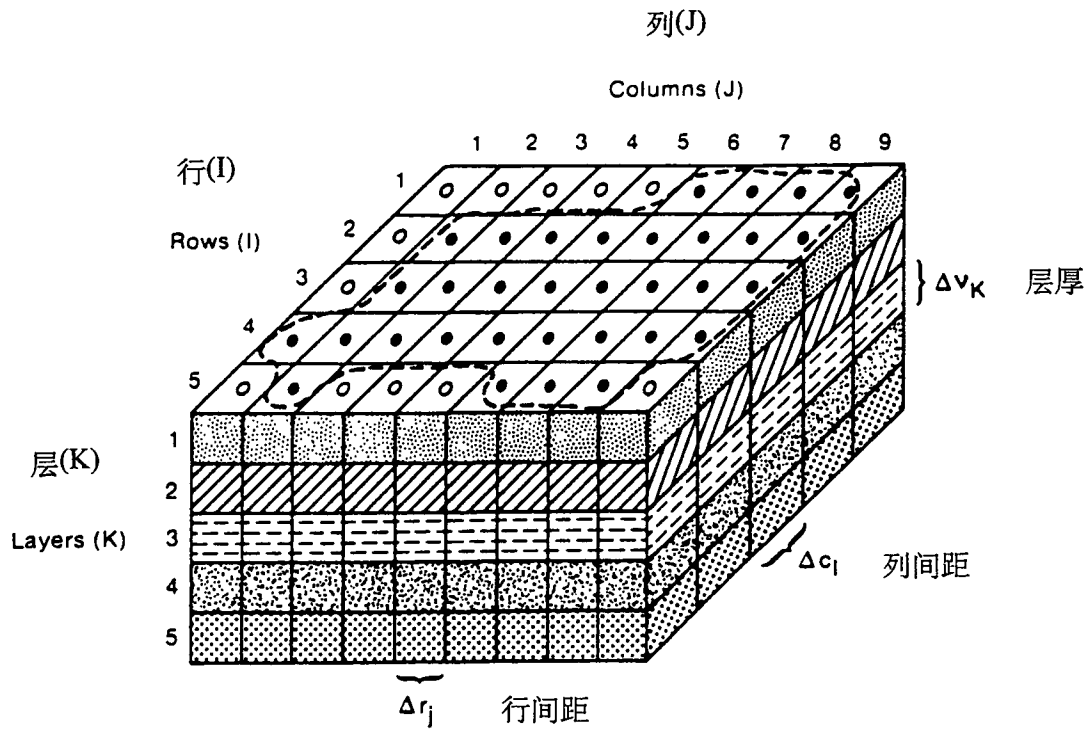
$$j = 1, 2, \dots, ncol$$

$$k = 1, 2, \dots, nlay$$

例如，在图1中所示的含水层系统被剖分为5层，5行和9列。在剖分过程中，我们一般尽量使模型的分层与实际含水层的水平分层一致。因此，在一个卡笛尔坐标系中，下标k通常沿垂直方向z而变化。在MODFLOW中，一个模型的第一层（即k=1）规定为最顶层，所以k的值随着高程降低而增加。MODFLOW还规定行的延伸方向与x轴平行，列的延伸方向与y轴平行。因此列下标(j)随x值增加而增加，而行下标(i)随y值降低而增加。图1所示的标号就是依据这些规定所绘出的。值得注意的是，MODFLOW仅要求一个模型的行与列相互正交，而并不要求用户定义实际的x-y-z坐标系。事实上，MODFLOW中的所有计算并不需要知道计算单元(i,j,k)在空间中的绝对坐标(x, y, z)。

按照图1所示的规定，某列j中的一个计算单元沿行方向上的宽度由 Δr_j 所表示。某行i中的一个计算单元沿列方向上的宽度由 Δc_i 所表示。层k中的计算单元的厚度则由 Δv_k 所表示。在理论上，位于同一层中的所有计算单元应具有相同的厚度。但在实际工作中，同层计算单元的厚度也常常不一样，以反映含水层厚度在空间中的变化。按上述定义，计算单元(4,8,3)的体积应为 $\Delta r_8 \Delta c_4 \Delta v_3$ 。

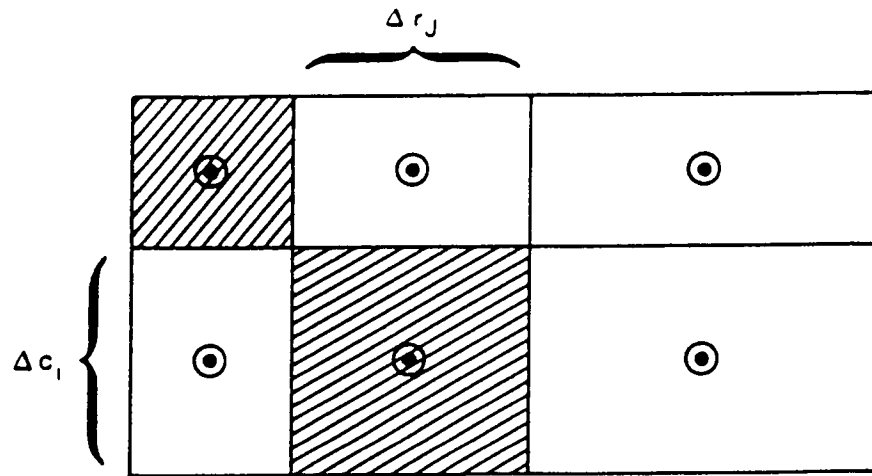
每个剖分出来的小长方体的中心位置称为节点。一个计算单元的水头实际上由水头在该节点的值所表示。正如图2所示，在一个二维平面上，有限差分法的计算可以分为两大类：单元中心法和结点中心法。不论采用哪种方法，整个含水层均由两组正交的平行线剖



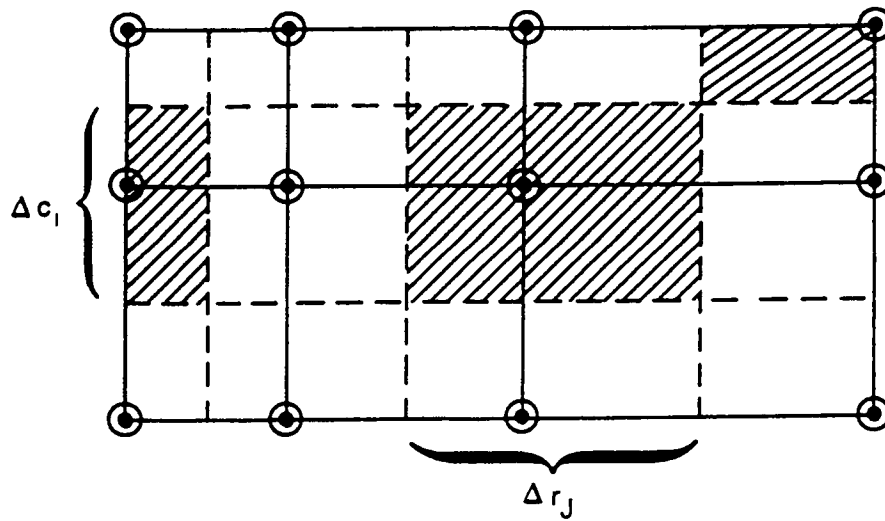
说明

- 含水层边界 Δr_j 行间距
- 有效计算单元 Δc_l 列间距
- 无效计算单元 Δv_k 层厚

图1. 含水层的空间离散。



单元中心系统



结点中心系统

说明

- ⊙ 计算单元的中心位置
- 网格
- - - 结点中心系统中计算单元的边界
- //// 计算单元的面积

图2. 计算单元的划分: 单元中心系统和结点中心系统。

分为一系列单元。在单元中心法中，这些平行线构成了计算单元的边界。而在结点中心法中，结点位于这两组正交直线的交点上，计算单元的边界则位于两个相邻结点中线的位置上。无论采用哪种方法，在计算单元的划分过程中，应尽量保持每个计算单元中的水文地质参数为常数。

这两种剖分方法各有优缺点。二者之间的差别主要在于渗流边界的处理上。在单元中心法中，渗流边界总是位于计算单元的边线上。而在结点中心法中，渗流边界则与计算单元的中心位置相吻合。一般来说，在比较复杂的计算机程序中，由于对边界的数学处理比较容易，故多采用单元中心法。在MODFLOW中，也采用了单元中心法。然而，下面有关有限差分公式的推导，则适用于这两种方法。

由于所计算的水头值，既是空间的函数，也是时间的函数。因此，我们不仅得将含水层进行空间上的离散，同时也得对时间进行离散。

有限差分公式

地下水运动的有限差分公式实际上是根据地下水流动的连续性方程进行的。按照连续性方程，流入和流出某个计算单元的水流之差应等于该单元中贮水量的变化。当地下水的密度不变时，连续性方程可以简单地表示为：

$$\sum Q_i = SS \cdot \frac{\Delta h}{\Delta t} \cdot \Delta v \quad (2)$$

式中：

Q_i : 单位时间内流进或流出该计算单元的水量(L^3T^{-1});

SS : 含水层的贮水率(L^{-1})。它表示当水头变化为一个单位时，该含水层单位体积中所吸收或释放的水量;

Δv : 计算单元的体积(L^3);

Δh : 某一时间段内水头的变化(L);

Δt : 时间变化量 (T)。

公式(2)中的右侧项表示在单位时间内，当水头变化为 Δh 时含水层的贮水量变化。在这个公式中，仅表示了由于地下水的流入而引起的贮水量的增加。同理，如果流出的地下水量大于流入的地下水量，则含水层的贮水量应为减少。

图3表示计算单元(i,j,k)和其相邻的六个计算单元。这六个相邻的计算单元的下标分别由(i-1, j, k), (i+1, j, k), (i, j-1, k), (i, j+1, k), (i, j, k-1)和(i, j, k+1)来表示。

为简化下面的推导, 我们用正号来表示流入某一计算单元(i,j,k)的流量, 用负号来表示流出计算单元(i,j,k)的流量。而在一般情况下, 这样的负号与达西公式本身所包含的负号相抵消。由达西公式, 我们可以得到在行方向上由计算单元(i,j-1,k)流入单元(i,j,k)的流量(见图4)为:

$$q_{i,j-\frac{1}{2},k} = KR_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k \frac{(h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k})}{\Delta r_{j-\frac{1}{2}}} \quad (3)$$

其中:

$h_{i,j,k}$: 水头在计算单元(i, j, k)处的值;

$h_{i,j-1,k}$: 水头在计算单元(i, j-1, k)处的值;

$q_{i,j-\frac{1}{2},k}$: 通过计算单元(i, j, k)和计算单元(i, j-1, k)之间界面的流量(L³T⁻¹);

$KR_{i,j-\frac{1}{2},k}$: 计算单元(i, j, k)和(i, j-1, k)之间的渗透系数(LT⁻¹);

$\Delta c_i \Delta v_k$: 横断面面积(L²);

$\Delta r_{j-\frac{1}{2}}$: 计算单元(i, j, k)和计算单元(i, j-1, k)之间的距离(L)。

值得注意的是, 下标中的 $j-\frac{1}{2}$ 并不表示几何坐标, 而表示该变量在两计算单元之间的相当值, 例如两点间的平均值。在MODFLOW中, 这样的相当值多由调和平均值所代替。有兴趣的读者可参看Collins (1961)。在一维稳定流的情况下, (3)式可以用来求得自计算单元(i,j-1,k)到(i,j,k), 通过横断面积 $\Delta c_i \Delta v_k$ 的地下水流量。

通过其它五个界面的地下水流量, 均可按公式(3)类推。例如, 沿行方向从计算单元(i,j+1,k)至(i, j, k)的地下水流量为:

$$q_{i,j+\frac{1}{2},k} = KR_{i,j+\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k \frac{(h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k})}{\Delta r_{j+\frac{1}{2}}} \quad (4)$$

同理, 我们可以写出:

$$q_{i+\frac{1}{2},j,k} = KC_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta r_j \Delta v_k \frac{(h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k})}{\Delta c_{i+\frac{1}{2}}} \quad (5)$$

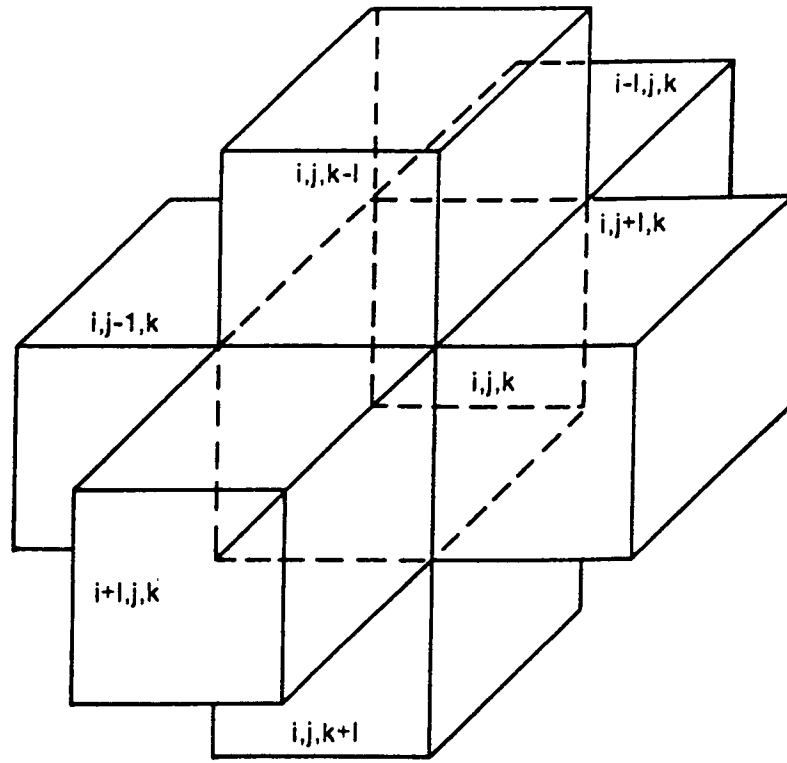


图3. 计算单元 (i, j, k) 和其六个相邻的计算单元。

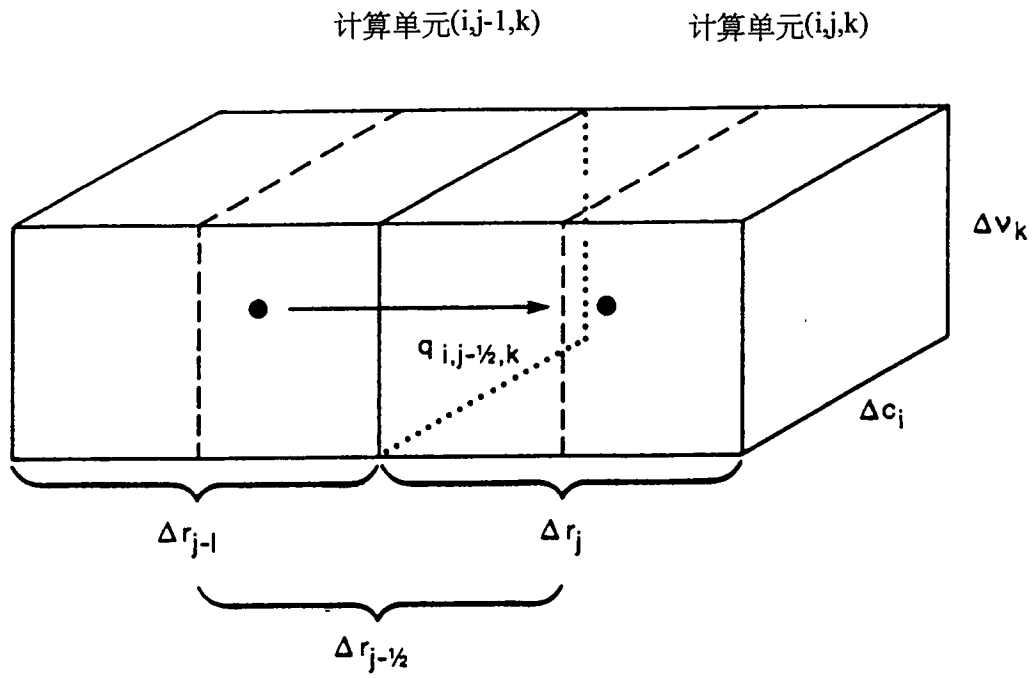


图4. 从计算单元(i, j-1, k)至计算单元(i, j, k)的流量。

$$q_{i-\frac{1}{2},j,k} = KC_{i-\frac{1}{2},j,k} \Delta r_j \Delta v_k \frac{(h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k})}{\Delta c_{i-\frac{1}{2}}} \quad (6)$$

$$q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = KV_{i,j,k+\frac{1}{2}} \Delta r_j \Delta c_i \frac{(h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k})}{\Delta v_{k+\frac{1}{2}}} \quad (7)$$

$$q_{i,j,k-\frac{1}{2}} = KV_{i,j,k-\frac{1}{2}} \Delta r_j \Delta c_i \frac{(h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k})}{\Delta v_{k-\frac{1}{2}}} \quad (8)$$

公式(3)至(8)表示通过计算单元(i,j,k)的六个界面上的地下水渗流量。这些公式中包括了水头、计算单元中心之间的距离和渗透系数。我们还可以简化这些公式，将计算单元间距和渗透系数合并为同一个变量，并称之为水力传导系数(hydraulic conductivity):

$$CR_{i,j-\frac{1}{2},k} = KR_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k / \Delta r_{j-\frac{1}{2}} \quad (9)$$

式中 $CR_{i,j-\frac{1}{2},k}$ 定义为位于层k行i中计算单元(i,j-1,k)和计算单元(i,j,k)之间的水力传导系数(L^2T^{-1})。它等于渗透系数和横断面积的乘积除以计算单元间距。

将水力传导系数的概念应用于公式(3)至公式(8)，我们可以得到:

$$q_{i,j-\frac{1}{2},k} = CR_{i,j-\frac{1}{2},k} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) \quad (10)$$

$$q_{i,j+\frac{1}{2},k} = CR_{i,j+\frac{1}{2},k} (h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) \quad (11)$$

$$q_{i-\frac{1}{2},j,k} = CC_{i-\frac{1}{2},j,k} (h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}) \quad (12)$$

$$q_{i+\frac{1}{2},j,k} = CC_{i+\frac{1}{2},j,k} (h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) \quad (13)$$

$$q_{i,j,k-\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} (h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) \quad (14)$$

$$q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}) \quad (15)$$

公式(10)至公式(15)中的水力传导系数项均可按公式(9)的方式计算。这些公式可以用来计算从计算单元(i,j,k)的六个界面流入的地下水流量。除此以外，我们还得考虑其他各种外部源和汇对计算单元(i,j,k)的影响:例如河流、沟渠、生产井、注水井、蒸发蒸腾等等。这些外部源、汇对计算单元的水头 $h_{i,j,k}$ 的影响，有些与该水头有关，有的则与所求水头无关。自外部源汇流入计算单元(i,j,k)的流量可以用一个通式来表达:

$$a_{i,j,k,n} = p_{i,j,k,n} h_{i,j,k} + q_{i,j,k,n} \quad (16)$$

式中： $a_{i,j,k,n}$ 第n项外部源对计算单元(i,j,k)的补给量 (L^3T^{-1})。 $q_{i,j,k,n}$ 和 $p_{i,j,k,n}$ 均为常数，它们的单位分别为(L^3T^{-1})和(L^2T^{-1})。

例如，计算单元(i,j,k)从两种外部源得到补给：注水井和河床的渗漏补给。对第一种源而言， $n=1$ 。因为假定注水量与该计算单元的水头无关，则 $p_{i,j,k,1}=0$ ；而 $q_{i,j,k,1}$ 等于该注水井的注水量。这时我们有

$$a_{i,j,k,1} = q_{i,j,k,1} \quad (17)$$

对于第二种源($n=2$)来说，由于通过河床的渗漏补给量与河水位与该计算单元的水头之差成正比，这个比例系数称为河床的水力传导系数。河床的水力传导系数直接反映了河床堆积物对渗流的阻力。据此可得：

$$a_{i,j,k,2} = CRIV_{i,j,k,2} (R_{i,j,k} - h_{i,j,k}) \quad (18)$$

式中 $R_{i,j,k}$ 为河水位， $CRIV_{i,j,k,2}$ 为河床的水力传导系数(L^2T^{-1})。

如图5所示，河床的水力传导系数等于河床堆积物的垂向渗透系数与河床的面积之乘积，除以河床堆积物的厚度。公式(18)也可以写为：

$$a_{i,j,k,2} = -CRIV_{i,j,k,2} h_{i,j,k} + CRIV_{i,j,k,2} R_{i,j,k} \quad (19)$$

其中 $-CRIV_{i,j,k,2}$ 一项相当于公式(16)中的 $p_{i,j,k,2}$ ，而 $CRIV_{i,j,k,2} R_{i,j,k}$ 相当于公式(16)中 $q_{i,j,k,2}$ 项。与此类似，所有其它外部源和汇的计算都可以参照公式(16)的形式表达。一般来说，如果一个计算单元受到N种外部源汇的影响，这些影响的总和可以归纳为：

$$QS_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N a_{i,j,k,n} = \sum_{n=1}^N p_{i,j,k,n} h_{i,j,k} + \sum_{n=1}^N q_{i,j,k,n} \quad (20)$$

如果将式中的 $p_{i,j,k}$ 和 $q_{i,j,k}$ 分别表达为：

$$P_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N p_{i,j,k,n}$$

$$Q_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N q_{i,j,k,n}$$

则外部源和汇的一般计算公式为：

$$QS_{i,j,k} = P_{i,j,k} h_{i,j,k} + Q_{i,j,k} \quad (21)$$

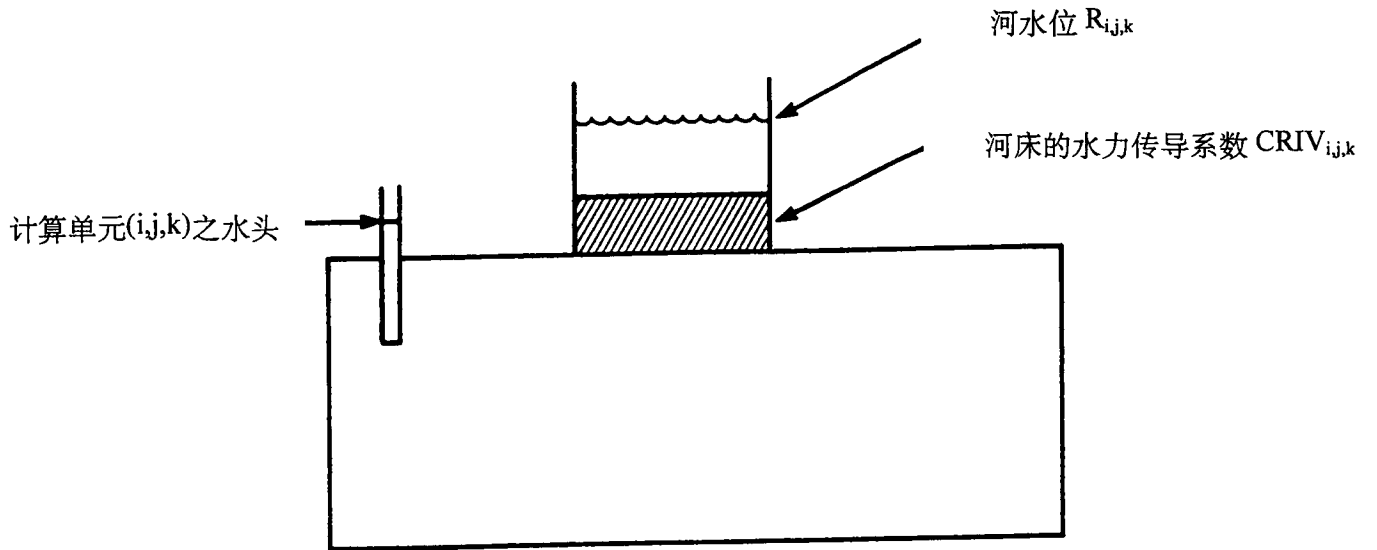


图5. 河流与含水层之间水力联系的理想模式。

考虑到某计算单元六个相邻的计算单元以及该单元所包含的所有源与汇，连续性方程，公式(2)可以表述为：

$$\begin{aligned} & q_{i,j-\frac{1}{2},k} + q_{i,j+\frac{1}{2},k} + q_{i-\frac{1}{2},j,k} + q_{i+\frac{1}{2},j,k} + q_{i,j,k-\frac{1}{2}} + q_{i,j,k+\frac{1}{2}} + QS_{i,j,k} \\ & = SS_{i,j,k} \frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k \end{aligned} \quad (22)$$

式中 $\frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t}$ 为水头对于时间的偏导数之差分近似表达式 (LT^{-1});

$SS_{i,j,k}$ 表示该计算单元的贮水率 (L^{-1});

$\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k$ 为该计算单元的体积 (L^3)。

将公式(10)至(15)以及公式(21)代入公式(22)，则可获得计算单元(i,j,k)的地下水渗流计算的有限差分公式：

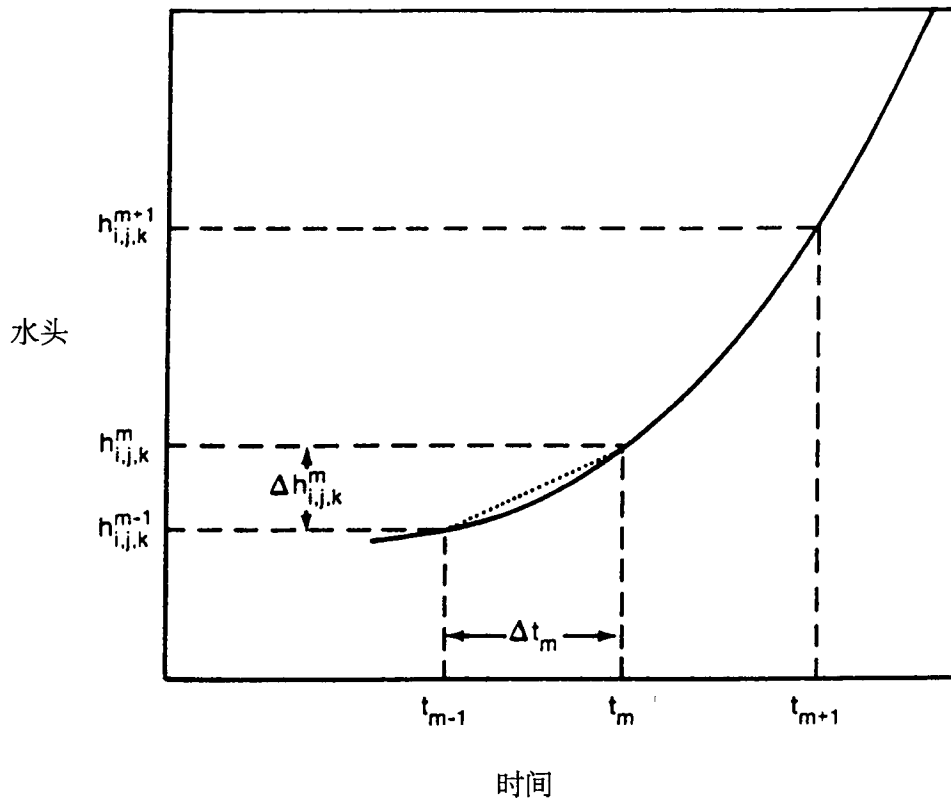
$$\begin{aligned} & CR_{i,j-\frac{1}{2},k} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) + CR_{i,j+\frac{1}{2},k} (h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) + CC_{i-\frac{1}{2},j,k} (h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}) \\ & + CC_{i+\frac{1}{2},j,k} (h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} (h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}) \\ & + P_{i,j,k} h_{i,j,k} + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k} (\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k) \frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (23)$$

下面我们来讨论水头的变化对时间的差分。图6表示了计算单元水头值 $h_{i,j,k}$ 随时间的变化曲线。在横坐标轴上任选两个点， t_{m-1} 和 t_m 。 t_m 表示当前的时刻， t_{m-1} 表示在此之前的某一时刻。与这两个时刻相对应的水头值不妨用 $h_{i,j,k}^m$ 和 $h_{i,j,k}^{m-1}$ 来分别表示。根据有限差分计算的方法，我们可以将水头对时间的偏导数用差商来近似表示：

$$\left(\frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \right)_m \approx \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}}$$

这样的差分公式也称为向后差分法，因为在计算 t_m 时的水头值时，我们利用了该时间之前某一时刻的水头值。除了向后差分法，还有其它不同的差分方式。例如，我们也可以用当前时刻和其之后的某一时刻的水头值来计算 $\Delta h / \Delta t$ （即向前差分法），或者利用当前时刻之前与当前时刻之后的水头值来计算 $\Delta h / \Delta t$ （即中心差分法）。值得注意的是，向前差分与中心差分法都可能引起数值计算的非稳定性问题，即截断误差可能会随时间而增加，最终导致错误的计算结果或程序运行的中断。

当解的非稳定问题出现后，计算过程中的误差项将随着计算过程的推移而增长。由此



说明

t_m 时间段 m 结束的时间

$h_{i,j,k}^m$ 时间 t_m 时计算单元 (i,j,k) 之水头

..... 时刻 t_m 水头变化以向后差分近似表达

图6. 计算单元 (i, j, k) 水头随时间的变化。

而获得的计算结果毫无价值。相反，在数值计算中，向后差分是无条件稳定的。这也就是说，计算中引起的误差（如截断误差）将会随着计算过程的推移而减小。出于这种考虑，在利用有限差分法对地下水流方程求解时应当尽可能采用向后差分法。利用向后差分法求解时，要求对模型中所包含的所有有效计算单元的水头进行同步求解，因此计算量和内存需要量都会比较大。在MODFLOW中，采用了向后差分法。

下面我们就根据向后差分法将公式(23)重写。如果所有的流量项均以某一时间段长的结束时间 t_m 为准，则有

$$\begin{aligned} & CR_{i,j-\frac{1}{2},k}(h_{i,j-1,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CR_{i,j+\frac{1}{2},k}(h_{i,j+1,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CC_{i-\frac{1}{2},j,k}(h_{i-1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m) \\ & + CC_{i+\frac{1}{2},j,k}(h_{i+1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(h_{i,j,k-1}^m - h_{i,j,k}^m) + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m) \\ & + P_{i,j,k}h_{i,j,k}^m + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k}(\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k) \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}} \end{aligned} \quad (24)$$

公式(24)即称为向后差分公式。该式可以用来对描述地下水在三维空间流动的偏微分方程（公式（1））进行数值求解。公式(24)中的 $Q_{i,j,k}$ 与初始水头均应为已知，应预先输入给程序。该公式中还包含有七个未知水头项，也就是我们要求的解。另外，公式(24)不能独立求解，因为它不仅含有计算单元(i,j,k)的水头值，还包含有与其相邻的另外六个计算单元的水头值。我们可以按公式(24)的方式，对整个模型所包含的所有计算单元写出类似于公式(24)的有限差分方程。如果模型中共有n个计算单元，我们就可以写出n个这样的方程式，并由这几个方程式构成一个n元方程组。最后通过对这个n元方程组联立同步求解，获得每一个计算单元的水头值。

进行非稳定流数值模拟的目的是预测在不同时刻的水头变化。这种水头变化取决于初始水头分布、边界条件、各种水文地质参数的分布以及各种外界源和汇的分布与强度。非稳定流模拟总是从初始水头开始，每一步求出每个时间段(time step)结束时的水头值，并用该值作为下一时间段的初始值。并重复这样的过程，直至所要求的时间结束。在第一个时间段的计算中，我们有 $m=2$ 以及 $m-1=1$ 。这时公式(24)的形式为：

$$\begin{aligned} & CR_{i,j-\frac{1}{2},k}(h_{i,j-1,k}^2 - h_{i,j,k}^2) + CR_{i,j+\frac{1}{2},k}(h_{i,j+1,k}^2 - h_{i,j,k}^2) + CC_{i-\frac{1}{2},j,k}(h_{i-1,j,k}^2 - h_{i,j,k}^2) \\ & + CC_{i+\frac{1}{2},j,k}(h_{i+1,j,k}^2 - h_{i,j,k}^2) + CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(h_{i,j,k-1}^2 - h_{i,j,k}^2) + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^2 - h_{i,j,k}^2) \\ & + P_{i,j,k}h_{i,j,k}^2 + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k}(\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k) \frac{h_{i,j,k}^2 - h_{i,j,k}^1}{t_2 - t_1} \end{aligned} \quad (25)$$

其中上标1和2分别表示第一个时间段的起始值和终结值。我们可以参照上式对模型中的每一个计算单元写出这样的一个差分方程。当然无效计算单元或常水头计算单元可以除外。然后将这些差分方程联立求解，就可以获得第一个时间段结束时 $t=t_2$ 时的水头分布。应当注意到，这组差分方程应当在每个时间段结束后重新定义，因为其中所包含的未知项已经成为已知项了。

迭代求解

有很多方法可以用来对线性方程组进行求解。当线性方程组中的方程个数比较少时，可采用直接求解的方法（如高斯消元法等）。但在解决地下水的流动问题中，我们常常碰到包含有上百万个未知数的线性方程组。对于这样的问题，我们通常采用迭代的方法进行求解。[译注：标准的MODFLOW都是采用迭代法求解的。在1996年的MODFLOW中Harbaugh加进去了一个直接求解的程序包。但这个程序包仅当所求的未知水头数目较少时才有实用价值。]

按照迭代求解的方法，求解过程开始时，每个水头未知的计算单元都应赋给初始水头或估计水头。对于非稳定流计算，这些初始值应为已知的初始条件。初始水头通常由野外实际观测资料获得。由于初始水头会影响计算结果，所以在准备输入数据时应当仔细。而对于稳定流计算而言，初始水头仅用于第一次迭代计算。故初始水头值可以由估计获得。一个好的数值模型，不论什么样的估计值，最终都应收敛于同样的结果。但初始值估计的好坏，和迭代的次数有关。如果初始水头的估计值与最终计算的结果比较接近，则可减少程序运行的时间。[译注：干枯计算单元的出现有时与水头的估计值有关。]

在迭代过程中，每次迭代的结果都将经过处理后用于下一次的计算。不同的算法有不同的处理方法。在正常情况下，每次迭代后的水头变化逐渐减小，最终达到收敛。这样就完成了一个时间段的水头计算。是否收敛，通常由一个预先定义的收敛指标来确定。当两次迭代计算的最大水头差值小于该收敛指标时，我们就称之为收敛。所以计算结果的精度与收敛指标的选定有很大的关系。

因此，在每个时间段的计算过程中，计算机内存贮水头的数组也不断更新。我们可以设想有许多数组，每个数组存贮一组计算结果。如图7所示，这些数组均由 \bar{h} 表示。 \bar{h} 有两个上标，第一个上标表示当前的时间段，第二个上标表示当前的迭代次数。例如 $\bar{h}^{m,l}$ 表

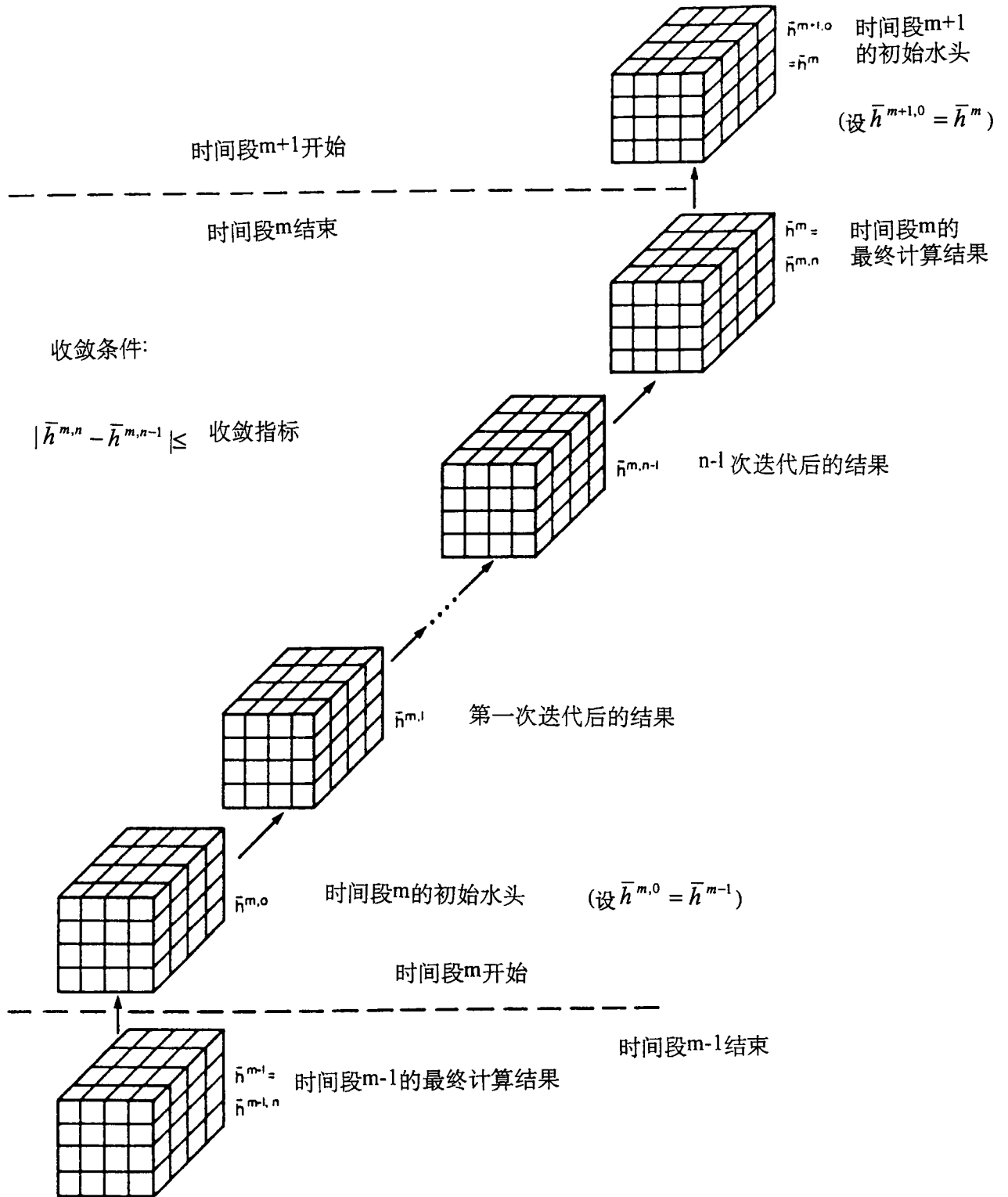


图7. 水头的迭代计算过程示意图。

示时间段 m 中第一次迭代步骤之后的水头值； $\bar{h}^{m,0}$ 则表示第 m 个时间段开始时的初始值。经过 n 次迭代，才完成时间段 m 的计算。最后一次迭代后的计算结果，既作为本时间段的结果，也将用于下一个时间段($m+1$)计算的初始水头。

当计算的水头值与实际水头非常接近时，我们总是希望结束运算。但问题在于我们无法预测需要多少次迭代才能得到满意的结果。为了防止程序无休止地迭代下去，我们常可采用一种间接的方法来结束迭代过程，即预计一个收敛指标和一个最大迭代次数。当相邻两次迭代计算出的水头变化的最大值小于该收敛指标时，程序就自动终止迭代而执行下一步运算指令。注意收敛指标指的是计算水头的变化量而非水头本身。通常收敛指标应比期望的计算精度至少小一个数量级。最大迭代次数是用来防止在不收敛的情况下，程序无休止地进行计算。如果实际的迭代次数已达到所规定的最大迭代次数而尚未收敛时，用户可以适当调整最大迭代次数以得到结果。但如果迭代过程中已显示出不可能收敛的趋势时，则应检查模型的结构和输入数据是否合理，并对不合理的部分进行修正后再重新计算。

当实际迭代次数达到最大迭代次数仍未收敛时，MODFLOW将会自动终止运行并打印出相应的信息供用户参考。收敛指标和最大迭代次数均为输入数据，在MODFLOW中分别由实型变量HCLOSE和整型变量MXITER表示。

对于稳定流计算，起始水头虽不可少，但它对最终结果的影响很小。从理论上来说，经过多次迭代之后，最终结果都应收敛于同样的水头值。当然，迭代次数与起始水头的选择有关。在进行非稳定流计算时，初始水头的选择就很重要了。在MODFLOW中，每个时间段结束时的水头计算值，也将用做下一时间段计算的初始值。正如图7所示，数组 $\bar{h}^{m-1,n}$ 为时间段 $m-1$ ，迭代次数为 n 时的计算水头值。当时间段 $m-1$ 结束后，这些水头值将存入数组 $\bar{h}^{m,0}$ ，作为时间段 m 的初始水头。每次非稳定流模拟只需要用户在模拟开始时输入初始水头。另外，图7中所示的数组系列仅为了说明水头数组所存内容随时间的变化。在MODFLOW的程序设计时，并不需要对每次迭代开辟一个三维数组，而是使用同一个三维数组并不断更新其内容。

有关各种各样对线性方程组迭代求解的方法，用户不难在许多参考书中找到。例如：Peaceman(1977)，Crichlow (1977)和Remson, Hornberger and Molz (1971)等书。通过阅读这些参考文献，读者可以加深对有关概念的理解，并熟悉矩阵计算、迭代参数的作用以及

收敛速度的各种影响因素。尤其是在阅读本书第十二、十三章之前，读这些参考书会很有帮助。

应当说明的是，通过迭代法所得到的解，仅仅是差分方程的近似解。其精度受很多因素的影响，如选定的收敛指标以及所用的迭代方法本身。即使每个时间段所得到的解是精确的，也仅仅是相对于在该时间段内所建立的差分方程组而言。对于偏微分方程公式(1)来说，它的数值解也是近似解而已。因为通过有限差分法所得到的解与对应的解析解相比，总带有截断误差。一般来说，这种截断误差会随网格间距和时间段的增加而增加。最后值得说明的是，即使是获得了对基本偏微分方程的精确解，对于野外条件而言，这种解仍然是近似解而已。因为野外观测的水文地质参数总带有误差。另外，水文地质边界的确定，也常常带有很大的的人为因素和不确定因素。

差分方程的求解形式

MODFLOW中采用了两种不同的迭代求解方法。为了使程序结构满足任何迭代解的格式，差分方程的形式需要改变。为建立起线性方程组的矩阵形式，我们将所有包括未知水头的项移到方程的左侧，而将所有的已知项移到方程的右侧，则有：

$$\begin{aligned}
 & CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} h_{i,j,k-1}^m + CC_{i-\frac{1}{2},j,k} h_{i-1,j,k}^m + CR_{i,j-\frac{1}{2},k} h_{i,j-1,k}^m \\
 & + (-CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} - CC_{i-\frac{1}{2},j,k} - CR_{i,j-\frac{1}{2},k} - CR_{i,j+\frac{1}{2},k} - CC_{i+\frac{1}{2},j,k} - CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} \\
 & + HCOF_{i,j,k}) h_{i,j,k}^m + CR_{i,j+\frac{1}{2},k} h_{i,j+1,k}^m + CC_{i+\frac{1}{2},j,k} h_{i+1,j,k}^m \\
 & + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} h_{i,j,k+1}^m = RHS_{i,j,k}
 \end{aligned} \tag{26}$$

其中：

$$HCOF_{i,j,k} = P_{i,j,k} - SC1_{i,j,k} / (t_m - t_{m-1}) \quad (L^2 T^{-1})$$

$$RHS_{i,j,k} = -Q_{i,j,k} - SC1_{i,j,k} h_{i,j,k}^{m-1} / (t_m - t_{m-1}) \quad (L^3 T^{-1})$$

$$SC1_{i,j,k} = SS_{i,j,k} \Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k \quad (L^2)$$

如果对模型所包含的计算单元逐个写出类似于公式(26)那样的差分方程，则可得一个线性方程组。这个方程组可用矩阵的形式表示为：

$$[A]\{h\}=\{q\} \tag{27}$$

其中 $[A]$ 为水头的系数矩阵; $\{h\}$ 为所求的水头矩阵; 而 $\{q\}$ 表示各个方程中所包含的所有常数项和已知项。 $\{q\}$ 也称为右侧项。在MODFLOW中, 系数矩阵和右侧项是通过各个软件包来逐步建立起来的。最后MODFLOW根据这两个矩阵, 通过迭代法对 $\{h\}$ 求解。

计算单元的类型和边界条件的处理

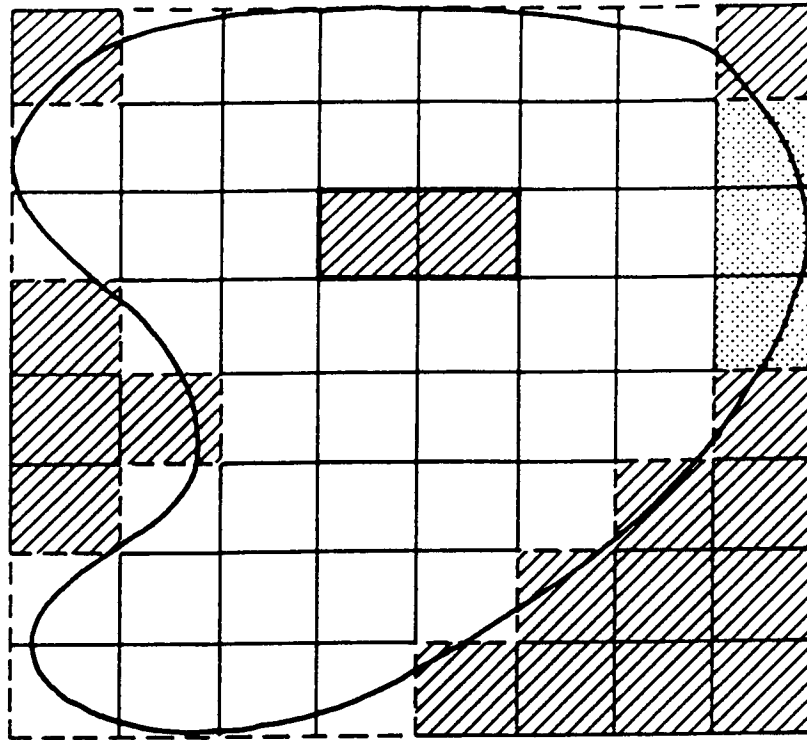
在实际工作中, 我们不必对模型中所包含的每个单元都写出类如公式(24)那样的差分公式, 因为有些单元用于代表相应的水文地质边界。它们的水头值是已知的。还有些单元可能位于所研究问题的边界之外, 它们的水头与问题本身无关。根据计算单元的性质, 可将它们划分为三大类: 定水头计算单元, 无效计算单元(inactive)和变水头计算单元。我们只须对变水头计算单元写出有限差分公式并计算其水头值。定水头计算单元的水头值是由用户事先规定, 并在计算过程中保持不变。无效计算单元相当于该单元的渗透系数为零, 不允许地下水通过, 故也可称为无渗流或不透水计算单元(no-flow cells)。除此之外其它所有的计算单元称为变水头单元(active cells); 它们的水头值随时间和空间发生变化, 是通过计算得到的。

定水头计算单元和无渗流计算单元可以用来描述边界上的水文地质条件。如图8中所示的含水层, 具有不规则的几何形状。假定将该含水层剖分为8行8列的等间距网格, 则有些单元落于边界之内, 也有不少单元落于边界之外。这些位于边界之外的单元则可称为无效计算单元, 它们可以从计算中排除。该含水层中含有一段定水头边界, 它可能表示与含水层相连的地表水体(如河流、湖泊等)。它们的水头值是已知并固定不变的。其它类型的水文地质边界, 如定流量边界, 则可利用外部源汇与无效计算单元的设置进行模拟。

[译注: 虽然无效计算单元和无渗流计算单元的作用在模拟效果上相同, 但它们所代表的意义并不相同。无效计算单元通常指那些位于水文地质边界之外的单元, 而无渗流计算单元可能位于边界之内, 但其渗透系数为零或忽略不计。]

有关垂向离散的讨论

一个数值模型在水平方向上的离散, 是将所模拟的区域在平面上剖分为相互垂直的行和列, 并定义这些行和列的间距。垂向上的离散则是将所模拟的岩层在垂向上进行剖分分层。这些层的厚度由用户在输入数据中定义, 或并入其它水文地质参数, 如导水系数的计



说明




- 含水层边界
- - - 模型中不透水边界
-  无效计算单元或不透水计算单元
-  定水头计算单元
-  变水头计算单元

图8. 含水层边界在模型中的表示。

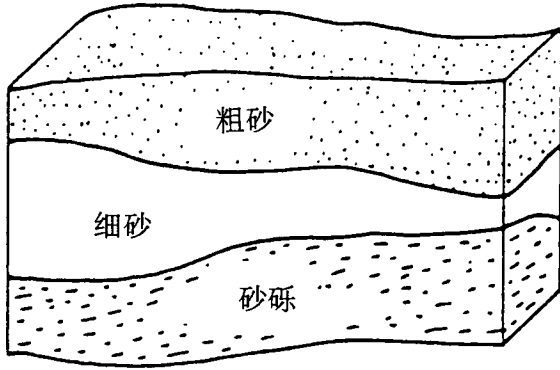
算。

在一种极端的情况下，垂向离散与平面离散相似，或多或少地将模型在垂直方向上划分为若干层。在另一种极端的情况下，则是将整个含水层看作一层来处理。在图9中，我们可以看到如何按这两种方法将一个典型的水文地质系统进行垂直离散。按照第一种情况（如图9b）将整个模型在垂向上剖分成若干层，而在第二种情况下，模型的垂直分层与含水层在空间上的分布一致（参见图9c）。在第一种情况下，模型被划分为三维正交网格，而不考虑地层的变化，但在同一层的所有计算元素具有相同的厚度。而若按第二种方法分层，模型的分层与地层相一致，但同一层中所含的计算单元将有不同的厚度。

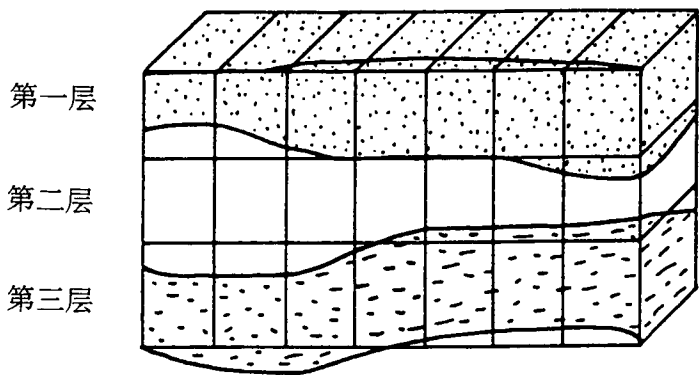
这两种方法各有其优缺点。在有限差分方程中，我们假定同一个计算单元内部的各项水文地质参数为常数，或至少可以用某种平均值来代替。这种假定实际上正符合如图9c所示的垂向离散法。此外，若不考虑水头在垂向上的损失，这种方法能提高计算结果的精确度。但是，按这种方法分层也违反了其它一些建立有限差分方程的假定。例如，某些计算单元不再具有规则的矩形形状。渗透系数的主轴方向也可能与模型的主轴方向产生不一致的情况。一般来说，违反这些假定将会在计算中导致某种程度的误差。

在实际工作中，多采用这两种方法相结合的方法。例如，当分层的边界与水文地质单元的边界一致时，为提高计算精度，常将同一层再细分为若干层来代表同一水文地质单元体。图10表示一个包括两层砂岩和一层粘土的水文地质系统。假定砂岩和粘土均具有同样的产状和厚度，则每一层都可以用一模型层来代表，而不必使用非矩形的计算单元。在这种情况下，地下水的流动既不水平又不垂直，而是以一定的夹角穿过粘土层。如果欲知道地下水在每个地层中的具体流向，则应将每个地层再细分为若干层，同样，对于图11中所示的砂岩与粘土互层的地质体系，不能简单地把模型在垂向上分为三层。如果在砂岩中抽水，其水量的一部分来自于粘土层贮水量的变化。如果建立模型的目的之一是研究粘土层的贮水量的变化情况，则应将该粘土层用数层模型层来表示。但如果该粘土层的释水量很小，水量基本来自砂岩，则地下水在砂岩中的流动基本上是水平的，而在粘土层中的流动为垂直的。在这种情况下，上下砂岩可分别由一模型层来代表，而粘土层则通过垂向水力传导系数来反映（图12）。这种方法有时称为“准三维”离散法。对此，我们将在第四章中进一步讨论。

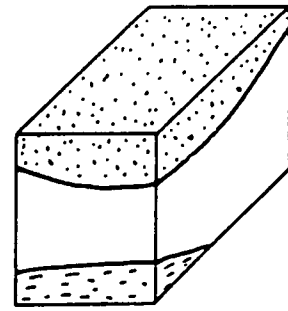
无论采用哪种方法进行离散，最终都可以得到类似于公式(26)那样的差分方程组。这



(a)含水层剖面图。

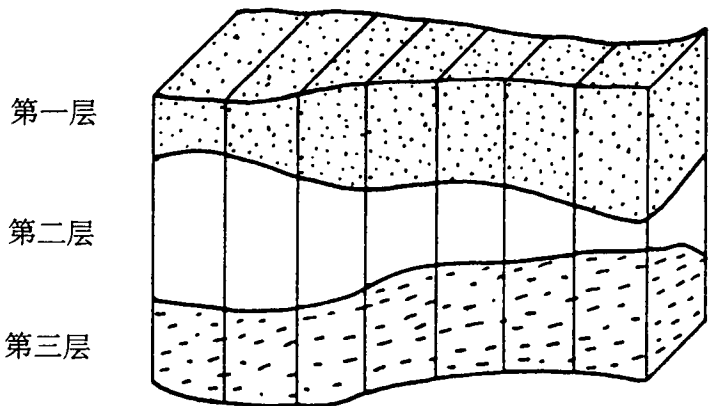


(b)长方体剖分网格。

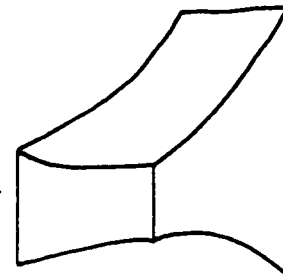


长方体计算单元。

同一单元内含有三种不同的地质体。



(c)曲面体剖分网格。



曲面六面体计算单元。

同一单元内仅包含一种地质体。

图9. 垂向剖分示意图。

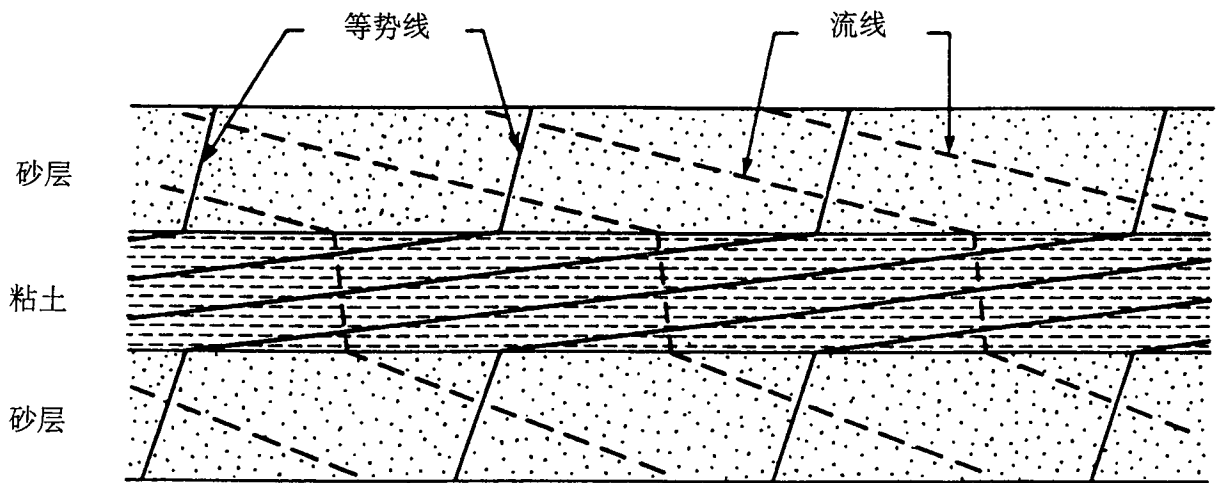


图10. 在砂层—粘土—砂层体系中地下水的可能流态。

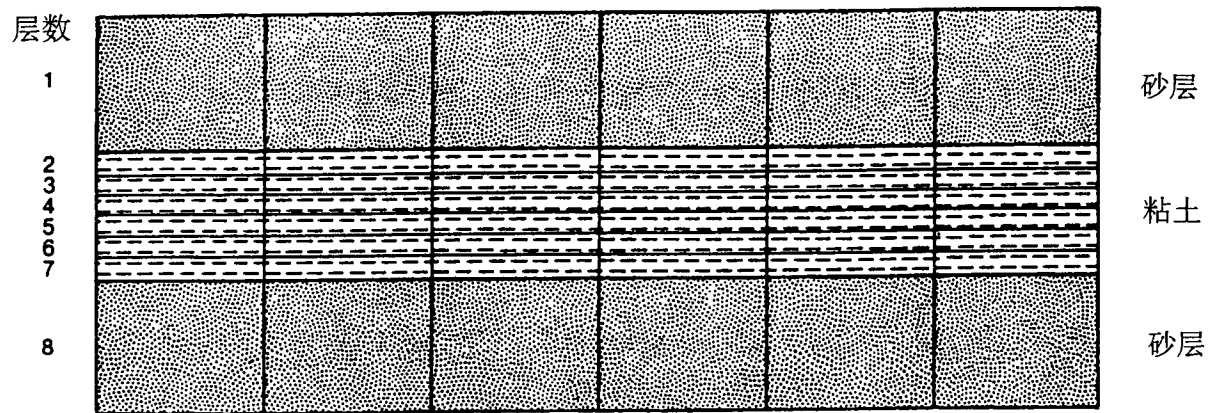


图11. 模型剖面图。粘土层由六个模型层来表示。

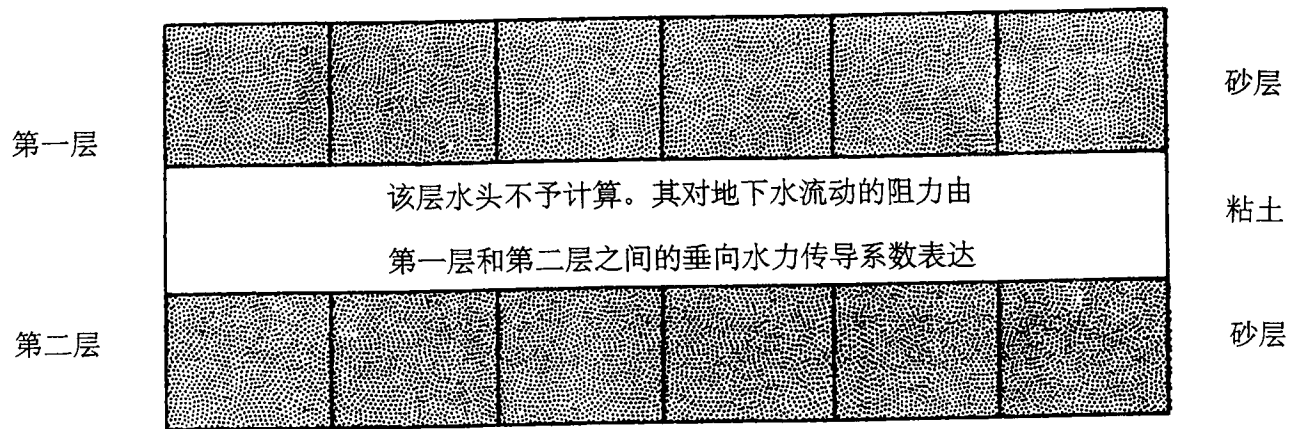


图12. 模型剖面图。粘土层的影响由垂向水力传导系数来反映。

个方程组必须在每个时间段内联立求解。前面所讨论的两种垂向离散方法的差别在于如何定义垂向水力传导系数、贮水项、方程组中方程的个数和计算结果的精度。MODFLOW允许用户采用所有这些方法。值得注意的是，程序的输入参数中并没有层厚这样的数值。但它们已包含在其它水文地质参数的计算之中，例如，在承压含水层的情况下，导水系数定义为渗透系数与厚度的乘积，贮水系数为贮水率与厚度的乘积。对于潜水含水层来说，输入数据包括含水层底板的标高和渗透系数，在程序运行过程中，MODFLOW根据水头和含水层底板标高来计算饱和厚度，然后由饱和厚度和渗透系数计算导水系数。因此，计算单元的厚度可能随底板标高和水头而变化。在第五章中讨论有关水力传导系数和贮水项的计算方法时，我们将进一步讨论垂向离散化的方法以及在程序中的处理。

第三章 MODFLOW程序设计

总体结构

本章中，我们介绍MODFLOW程序的总体设计。与任何一个FORTRAN程序一样，MODFLOW包括一个主程序和一系列相对独立的子程序包。每个子程序包又包括有多个模块和子程序。在这章中，我们将介绍主程序的功能以及子程序包的构成和它们的功能。

图13中列出了MODFLOW的基本程序结构，以及各个主要部分的功能。整个模拟过程可分为一系列应力期(stress periods)。在每一个应力期内，所有的外应力(stress)，如抽水量、蒸发量等保持不变。每个应力期又可再分为若干个时间段(time steps)。通过对有限差分方程组的迭代求解，我们可以得到每个时间段结束时的水头值。所以每个模拟应包括三大循环：应力期循环，时间段循环以及迭代求解循环。

图13中所示的每个矩形表示一个步骤(procedure)。每个步骤完成一定的任务。例如，在进入应力期循环之前，程序要首先完成三项与整个模拟过程有关的步骤。在“模型定义”步骤中，模型的大小，类型（稳定流或非稳定流），应力期数目，子程序包的选择，以及求解方法的选择等都在这个步骤中加以确定。在“存贮分配”步骤中，程序按所选用的子程序包，以及各个数组的大小，按一定的顺序进行内存的分配。在“输入处理”步骤中，程序读入所有不随时间变化的输入数据并且按要求进行适当的处理。这些数据包括：边界条件，初始水头，导水系数，渗透系数，给水度和贮水系数，顶面标高及底面标高以及用于控制迭代运算的有关参数等。在执行这个步骤的操作时，MODFLOW将对某些数据进行处理换算为后面程序运算所需要的数据类型。

在应力期循环的过程中，MODFLOW首先进入一个称为“应力”的步骤(Stress)。在该步骤中，MODFLOW读入时间段的数目并计算各个时间段的长度。在“输入处理”步骤中，程序将读入所有与当前应力期有关的数据，如抽水量、补给量等。在此以后，程序进入时间段循环。接下来，程序将执行另一个输入操作(Advance)，计算当前时间段的步长，并准备水头计算的初始值。然后MODFLOW开始用迭代的方法对水头进行求解。迭代循环的过程中包括建立方程(Formulate)步骤，其任务是计算公式(27)中的系数矩阵。在此以后，程序执行“近似求解”(Approximate)步骤，即对有限差分方程组进行一次迭代计算。迭代求解循环将持续进行直到达到收敛或达到预定的最大循环次数。如果迭代次数达到最大循环次数时

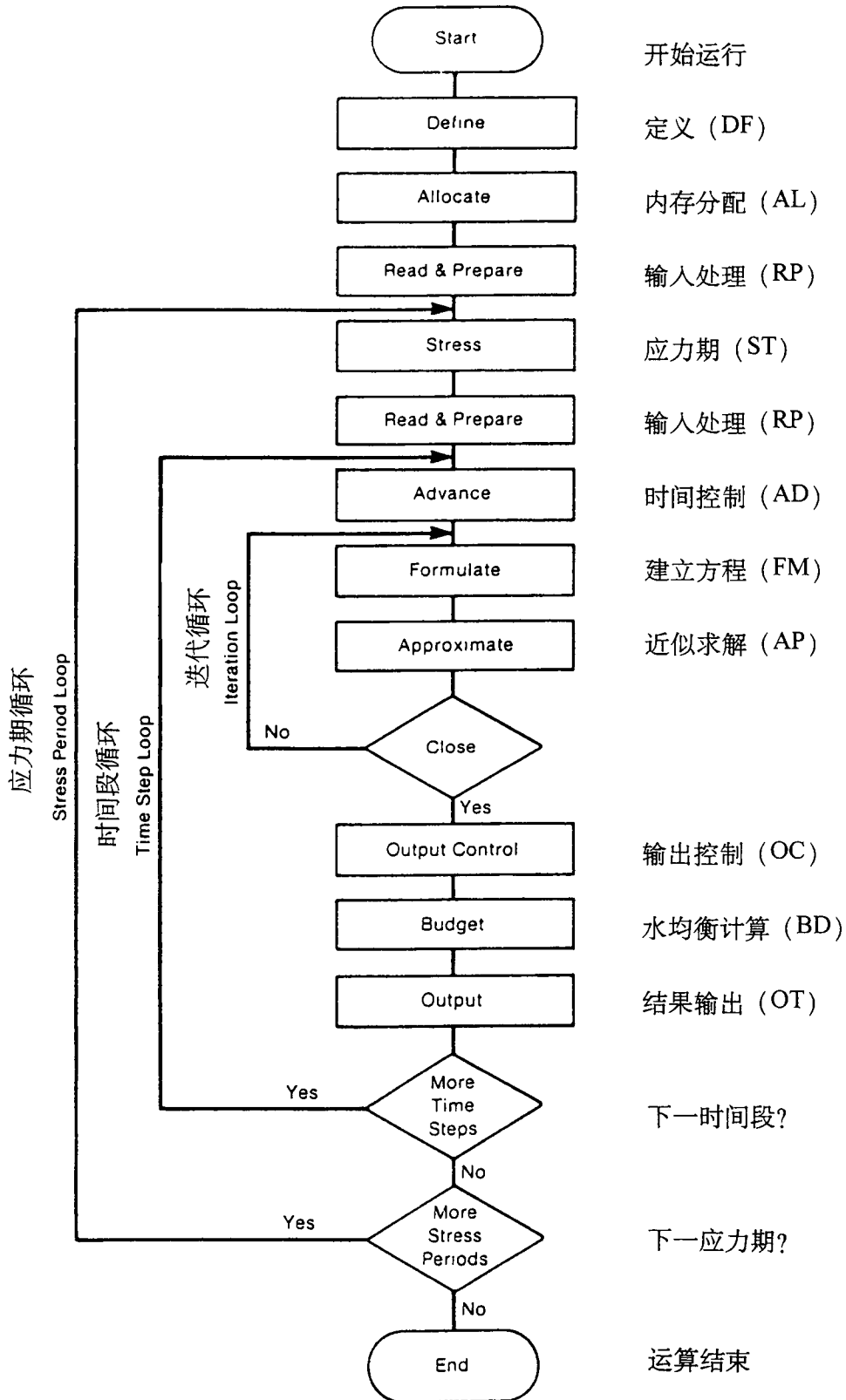


图13. MODFLOW 总框图。

仍未收敛，程序将自动停止运算。如果在达到最大迭代次数之前已经收敛，MODFLOW将执行输出（Output control）步骤和水均衡（Budget）步骤：将计算得到的水头值以及计算单元之间的流量按要求输出，并打印出有关信息供用户参考。程序还将计算出水均衡各项，并打印出水均衡计算得到的相对误差。

上面所叙述的各个步骤，可以用图13所示的框图来表示。图13也描述了MODFLOW的程序结构。该图也是主程序的程序框图。图中的各个步骤均由相应的子程序来实现。在主程序中使用了許多条件判断语句，根据具体情况由主程序调动有关的子程序来完成模拟计算。在MODFLOW中，子程序可分为两种类型：直接由主程序调用的基本子程序和被子程序所调用的次级子程序。

图13中所示的各个步骤由不同的子程序来完成。这些子程序组合在一起共同完成某些特别的功能。正如在第一章中所指出的，某些具有特定功能的子程序结合起来组成子程序包，如河流子程序包等。MODFLOW通过调用某些特定的子程序包来实现对地下水运动的模拟计算。了解每个子程序包中所包含的子程序以及它们的功能对了解整个程序的结构很有帮助。例如，从子程序包的分类可以看出该子程序包的功能以及执行过程。有些子程序包在每次模拟中都不不可少（如基本子程序包），而有些子程序包则由用户根据研究的问题进行选用。

步骤的划分，则是按其所包含的子程序的功能来进行的。同一步骤可能需调用不同子程序包中的某些功能相似的子程序来完成某一特定的操作。例如，在内存分配的步骤中，MODFLOW需调用不同子程序包中用于内存分配的子程序分别对该子程序包运算时所需要的内存空间进行分配。若某个模拟所涉及的子程序包数目较少，则在内存分配步骤中调用的子程序数目也较少。所以，引用子程序的数目与问题的复杂程度有直接的关系。

图14列出了MODFLOW所定义的子程序包所包含的步骤。在图14中，横列为子程序包的名称，纵列为步骤名称。表格中“X”表示该子程序包具有执行相应步骤的功能。反之，若表格中为空白，则表示该子程序包不具有执行对应步骤的功能。下标“U”表示对应的子程序为工具（Utility）类子程序；而下标“S”表示该子程序仅在相对应的子程序包内起作用。子程序包使用各种工具类子程序来完成某些特定的功能。

对子程序包的命名是根据该子程序包所包含的子程序以及它所完成的任务来进行的。前三个字母表示子程序包的名称；然后是版本号；最后两位字母表示该子程序所具有的功能。

步 骤	地下水运动子程序包								求解子程序包	
	B A S	B C F	W E L	R C H	R I V	D R N	E V T	G H B	S I P	S O R
定义 (DF)	X									
内存分配 (AL)	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
输入处理 (RP)	X_U	X_{US}							X	X
应力期 (ST)	X									
输入处理 (RP)			X	X_U	X	X	X_U	X		
时间控制 (AD)	X									
建立方程 (FM)	X	X_S	X	X	X	X	X	X		
近似求解 (AP)									X_S	X_S
输出控制 (OC)	X									
水均衡计算 (BD)		X_{US}	X_U	X_U	X_U	X_U	X_U	X_U		
结果输出 (OT)	X_U									

图14. MODFLOW主要子程序包分类及其执行步骤。

[译注：由于1988年标准MODFLOW是根据FORTRAN77发展的，故所有子程序的名称限用六个字符。]例如，图14中的井流子程序包中，在内存分配步骤中应用了一个名为WEL1AL的子程序。这个子程序名的前三个字母WEL表示该子程序属于井流子程序包；“1”表示该子程序的版本序号；“AL”是单词“Allocate”的前两个字母，表示该子程序的功能是为井流子程序包所使用的数组和变量分配内存。

图15中列出了MODFLOW中所包括的所有主要子程序的名称。和图14一样，下标中字母“S”表示该子程序为次级子程序；下标“U”表示该子程序为工具类子程序。

次级子程序的名字也为六个字符。第一个字母总为“S”；然后的三个字母表示该子程序所属的子程序包名称；随后一个字符为一数字，用以表示该子程序的版本号；最后一个字母用来区分该子程序。例如，一个名为“SBCF1S”的次级子程序，通过其名称可以知道这个子程序属于BCF子程序包；其版本号为1。工具类子程序的名字以“U”开始，而其余的5个字符用来表示该子程序所具有的功能。例如，“U2DREL”是一个工具类子程序，该子程序的功能是读入一个二维实数数组。

表1中列出了MODFLOW所包括的所有子程序包，以及它们名称的缩写形式（由三个字母表示）。表中对这些子程序包的作用也作了简单的介绍。这些子程序包可以分为两大类：水文地质子程序包和求解子程序包。水文地质子程序包中又包括了一些与外应力有关的子程序包。在这里，水文地质子程序包均用于计算有限差分方程组的系数矩阵。这一类子程序包也包括BCF子程序包；该子程序包用于计算各计算单元之间的地下水渗流量。这一类子程序包还包括外应力子程序包，分别用于模拟不同的外应力对地下水运动的影响。例如，河流子程序包可用来计算地表水体与含水层之间的水力交换。另一大类子程序称为求解子程序包，用于对线性方程组求解。[译注：88年版本MODFLOW中仅含有两种迭代求解方法：超松弛因子法（SOR）和强隐式法（SIP）。后来，由美国地质调查局的Hill发展的PCG2法也成为常用的迭代求解方法，而SOR法较少使用。]除了这两大类子程序包之外，MODFLOW还有一个称为基本子程序包的子程序包，其作用是完成准备整个模拟的基本任务，如模拟时间的划分等。这个基本子程序包也常常简称为“BAS”[译注：BASIC的简称。]子程序包。

在计算各单元之间地下水渗流时，目前版本MODFLOW采用BCF子程序包。这里，BCF为Block-Centered-Flow（计算单元间地下水渗流）的缩写。如用户希望采用其它的计算方法，则可自行编写一些类似的程序来代替本书中的BCF子程序包。例如，使用结点中心法等。同

子程序包

步 骤	BAS	BCF	WEL	RCH	RIV	DRN	EVT	GHB	SIP	SOR
定义 (DF)	BAS1DF									
内存分配 (AL)	BAS1AL	BCF1AL	WEL1AL	RCH1AL	RIV1AL	DRN1AL	EVT1AL	GHB1AL	SIP1AL	SOR1AL
输入处理 (RP)	BAS1RP _U	BCF1RP _{US}							SIP1RP	SOR1RP
应力期 (ST)	BAS1ST									
输入处理 (RP)			WEL1RP	RCH1RP _U	RIV1RP	DRN1RP	EVT1RP _U	GHB1RP		
时间控制 (AD)	BAS1AD									
建立方程 (FM)	BAS1FM	BCF1FM _S	WEL1FM	RCH1FM	RIV1FM	DRN1FM	EVT1FM	GHB1FM		
近似求解 (AP)									SIP1AP _S	SOR1AP _S
输出控制 (OC)	BAS1OC									
水均衡计算 (BD)		BCF1BD _{US}	WEL1BD _U	RCH1BD _U	RIV1BD _U	DRN1BD _U	EVT1BD _U	GHB1BD _U		
结果输出 (OT)	BAS1OT _U									

图15. MODFLOW主要子程序包及执行步骤。

表1. MODFLOW子程序包列表

子程序包名称	英文缩写	子程序包功能
基本子程序包	BAS	指定边界条件、时间段长度、初始条件及结果打印方式
计算单元间渗流子程序包	BCF	计算多孔介质中地下水流有限差分方程组各项, 即, 单元间流量和进入贮存的流量
井流子程序包	WEL	将流向水井的流量项加进有限差分方程组
补给子程序包	RCH	将代表面状补给的流量项加进有限差分方程组
河流子程序包	RIV	将流向河流的流量项加进有限差分方程组
沟渠子程序包	DRN	将流向沟渠的流量项加进有限差分方程组
蒸发蒸腾子程序包	EVT	将代表蒸发蒸腾作用的流量项加进有限差分方程组
通用水头边界子程序包	GHB	将流向通用水头边界的流量项加进有限差分方程组
SIP求解子程序包	SIP	采用强隐式方法通过迭代求解有限差分方程组
SSOR求解子程序包	SOR	采用分层逐次超松弛迭代方法求解有限差分方程组

样，用户也可以在程序中添加新的求解子程序包，或其它外应力子程序包。但任何一个数值模型，至少要包括基本子程序包、BCF子程序包和一个求解子程序包。除此之外，用户还应根据实际情况和需要选用相应的外应力子程序包。除了基本子程序包、BCF子程序包和求解子程序包必须使用之外，其它所有的外应力子程序包均为选用。用户也可根据需要开发新的子程序包，并加入MODFLOW之中。本程序各模块在设计时已充分考虑到了个子程序包的独立性。除了上面提到的必需的子程序包之外，是否选用某个子程序包对其它子程序包没有任何影响。用户可以根据自己的实际工作需要改写或重写某些子程序包。如果要希望开发一个新的子程序包，用户可以按各个步骤编写新的模块，并在主程序中适当的位置加入相应的调用语句。

图16给出了MODFLOW主程序的框图。其中包括一些条件判断语句，用来选择适当的子程序包进行模拟计算。读者应同时参考图13、图15和表1，对MODFLOW的总体程序结构有比较深刻的理解。这对使用MODFLOW、改进MODFLOW以及错误排除等都很有帮助。

在程序开始运行时，首先需要计算公式(26)中的各水力传导系数项(CC、CR、CV)。这些将用于计算各计算单元之间的地下水渗流量。它们可能在运算中保持不变，也可能需要重新计算。对于非承压含水层来说，由于这些参数取决于含水层的饱和厚度，而饱和厚度可能在迭代过程中不断发生变化。在目前使用的MODFLOW中，水力传导系数的计算由BCF子程序包完成。当然用户也可以根据需要用新的程序来计算。公式(26)中的CR和CC项，均按相邻两计算单元的水文地质参数和它们的尺寸进行调和平均(harmonic mean)。而公式(26)中垂向水力传导系数则由用户在MODFLOW之外计算，并作为输入数据输入MODFLOW。所有这些参数将存入相应的数组并传送给求解子程序包进行求解运算。

公式(26)中的另外两项， $HCOF_{i,j,k}$ 和 $RHS_{i,j,k}$ 则在每次迭代运算后重新计算。这两项的计算是根据所选用的子程序包逐步进行的。在每次迭代开始前，它们都首先清零。然后调用BCF子程序包在 $HCOF_{i,j,k}$ 中加入一项

$$-SS_{i,j,k} \frac{\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k}{t_m - t_{m-1}}$$

并在 $RHS_{i,j,k}$ 中加入

$$-SS_{i,j,k} \frac{\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k}{t_m - t_{m-1}} h_{i,j,k}^{m-1}$$

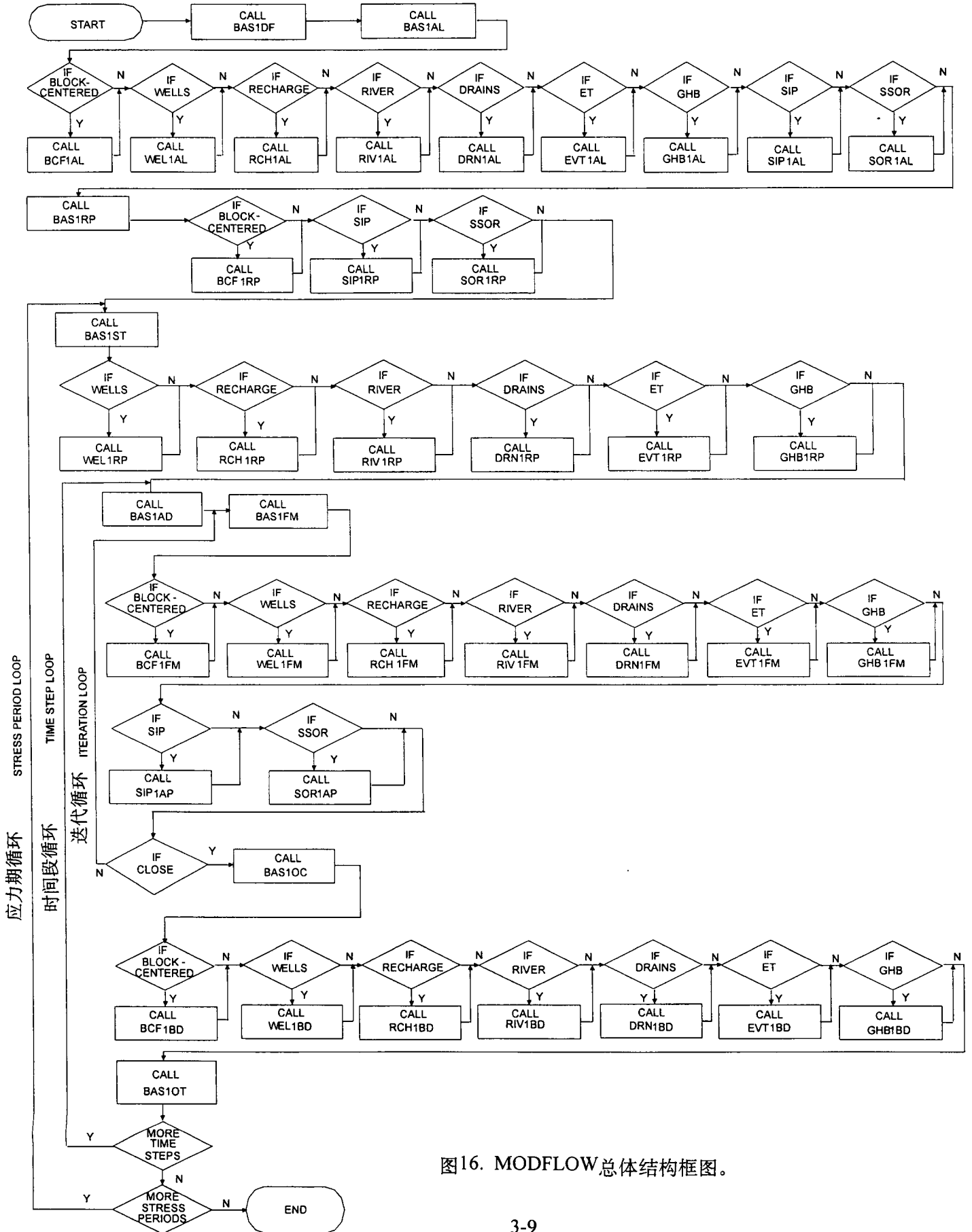


图16. MODFLOW总体结构框图。