

美国地质调查局水资源调查技术丛书之六

MODFLOW: 模块化三维有限差分地下水流动模型

原著: Michael G. McDonald 和 Arlen W. Harbaugh

编译: 郭卫星 卢国平

审校: 朱学愚 刘建立

一九九九年六月

## 附 图

图 号		页 数
图 1	含水层的空间离散。	2-3
图 2	计算单元的划分: 单元中心系统和结点中心系统。	2-4
图 3	计算单元(i, j, k)和其六个相邻的计算单元。	2-7
图 4	从计算单元(i, j-1, k)至计算单元(i, j, k)的流量。	2-8
图 5	河流与含水层之间水力联系的理想模式。	2-11
图 6	计算单元(i, j, k)水头随时间的变化。	2-13
图 7	水头的迭代计算过程示意图。	2-16
图 8	含水层边界在模型中的表示。	2-20
图 9	垂向剖分示意图。	2-22
图 10	在砂层—粘土—砂层体系中地下水的可能流态。	2-23
图 11	模型剖面图。粘土层由六个模型层表示。	2-24
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。	2-25
图 13	MODFLOW总框图。	3-2
图 14	MODFLOW主要子程序包分类以及执行步骤。	3-4
图 15	MODFLOW主要子程序包以及执行步骤。	3-6
图 16	MODFLOW总体结构框图。	3-9
图 17	各子程序包在数组IUNIT中的位置以及使用方法示例。	3-17
图 18	IUNIT数组的作用示例。	3-18
图 19	利用IBOUND数组表示含水层的边界条件。	4-2
图 20	水头的计算过程示意图。	4-4
图 21	模拟时间与应力期及时间段的划分。	4-5
图 22	MODFLOW水均衡表实例。	4-7
图 23	达西流量计算示意图。	5-3
图 24	串联条件下的总水力传导系数。	5-4
图 25	平面上两相邻计算单元之间的水力传导系数的计算。	5-7
图 26	位于同一水文地质单元内上下两计算单元之间的垂向水力传导率的计算。	5-11
图 27	模型按水文地质单元分层时垂向水力传导率的计算。	5-12
图 28	两含水层中夹有弱透水层时垂向水力传导率的计算。	5-13
图 29	上层滞水示意图。	5-16
图 30	贮水系数/给水度转换示意图。	5-20

图 号		页 数
图 31	BCF子程序包流程示意图[略]。	
图 32	河流离散为河段的示意图。一些小河段被忽略。	6-2
图 33	(a)有河流出现的含水层横剖面图和(b)河流-含水层相互连接概念的示意图。	6-3
图 34	单个计算单元中河床水力传导系数的理想化模型示意图。	6-4
图 35	河床底积层底面之水头与计算单元水头关系的剖面示意图。 计算单元之水头等于潜水面高程。	6-6
图 36	河流流向某计算单元的流量, $QRIV$ , 与该单元之水头变量的关系示意图。 $RBOT$ 为河床底积层底面高程, $HRIV$ 为河水位。	6-8
图 37	单位水力梯度下的河流极限渗流示意图。	6-9
图 38	补给子程序包中三种选择下接收补给的计算单元。	7-3
图 39	计算单元 $(i, j, k)$ 的汇聚水流之水头损失横剖面示意图。	9-2
图 40	沟渠的直接相邻区域内水头损失的影响因素: (a)回填沟中埋设的排水管道和(b)明渠。	9-3
图 41	流入沟渠的流量 $QD$ 对计算单元之水头 $h$ 的图解。 其中, $d$ 为沟渠之设定水位, $CD$ 为水力传导系数。	9-5
图 42	一个计算单元中体积蒸发蒸腾量, $Q_{ET}$ , 作为水头, $h$ , 的函数图解。 其中 $d$ 为截止深度, $h_s$ 为 $ET$ 界面高程。	10-3
图 43	蒸发蒸腾子程序包中两种选择时发生蒸发蒸腾的计算单元。	10-5
图 44	通用水头边界子程序包原理图。	11-2
图 45	从通用水头边界水源流入某计算单元的流量 $Q_b$ 与该计算单元水头 $h$ 的函数关系示意图。 $h_b$ 为水源之水头。	11-3
图 46	表示一个含有二行, 三列, 两层的网格的有限差分方程组与其矩阵方程的对应关系。	12-3
图 47	系数矩阵的结构。斜线表示非零对角线。	12-4
图 48	一个含有二行, 三列, 两层的网格的对称系数矩阵。	12-5
图 49	系数矩阵与由此分解出的上, 下三角矩阵。	12-6
图 50	矩阵 $[A+B]$ 之结构。斜线表示非零对角线。	12-8
图 51	由矩阵 $[A+B]$ 分解出的下三角矩阵 $[L]$ 和上三角矩阵 $[U]$ 之结构,斜线表示非零对角线。	12-9
图 52	根据某函数在一个矩形三个顶点的已知值, 估计该函数在另一个顶点的值。	12-12
图 53	使用三元下标法和单一下标法分别表示计算单元在网格中的位置。	12-16

图号		页数
图 54	在SSOR子程序包中, 将三维模型分解为垂向分层进行处理。	13-2
图 55	图55. 分层方程组的系数矩阵及其在计算机中存贮形式。	13-7
图 56	工具子程序ULAPRW和ULAPRS的输出示例。该模型共含有七行十七列。	14-2

## 附 表

表 1	MODFLOW子程序包列表。	3-7
表 2	工具子程序ULAPRS和ULAPRW使用的打印格式代码。	14-3

目 录

译者的话	
摘要	
第一章 概述 .....	1-1
目的	1-1
本书内容的安排	1-1
致谢	1-3
第二章 多孔介质中地下水流动的有限差分公式数学模型 .....	2-1
离散化的概念	2-2
有限差分公式	2-5
迭代求解	2-15
差分方程的求解形式	2-18
计算单元的类型和边界条件的处理	2-19
有关垂向离散的讨论	2-19
第三章 MODFLOW程序设计 .....	3-1
总体结构	3-1
模型边界和含水层边界 .....	3-10
水均衡计算	3-12
内存分配	3-15
三维数组下标的定义	3-15
数据输入	3-16
结果输出控制	3-19
主程序	3-19
第四章 基本子程序包 (BAS) .....	4-1
概念及程序化	4-1
子程序包的选择及其输入文件	4-1
边界数组 (IBOUND)	4-1
初始条件	4-3
时间离散	4-3
输出	4-3
水均衡计算	4-6
基本子程序包输入数据及格式	4-8
输入数据说明	4-9
BAS子程序包输入样单	4-12
输出控制部分的输入数据	4-14
输入数据说明	4-15
输入控制选择输入样单	4-17
第五章 计算单元间渗流子程序包 (BCF) .....	5-1
概念及程序化	5-1
水力传导系数的计算	5-1
承压含水层中水平方向上水力传导系数的计算	5-5

潜水含水层中水平方向上的水力传导系数的计算	5-6
垂向水力传导率的计算 .....	5-8
非饱和带垂向渗流的计算	5-14
贮水系数的处理	5-17
贮水系数的转换	5-18
特殊处理方式的使用及其局限性	5-21
输入数据	5-21
BCF子程序包输入数据及格式	5-25
输入数据说明	5-27
BCF子程序包输入样单	5-29
第六章 河流子程序包 (RIV) .....	6-1
概念及程序化	6-1
河流子程序包输入数据及格式	6-11
输入数据说明	6-11
河流子程序包输入样单	6-13
第七章 补给子程序包 (RCH).....	7-1
概念及程序化	7-1
补给子程序包输入数据及格式.....	7-5
输入数据说明	7-5
补给子程序包输入样单	7-7
第八章 井流子程序包 (WEL).....	8-1
概念及程序化	8-1
井流子程序包输入数据及格式	8-2
输入数据说明	8-2
井流子程序包输入样单	8-4
第九章 沟渠子程序包 (DRN).....	9-1
概念及程序化	9-1
沟渠子程序包输入数据及格式	9-6
输入数据说明	9-6
沟渠子程序包输入样单	9-8
第十章 蒸发蒸腾子程序包 (EVT).....	10-1
概念及程序化	10-1
蒸发蒸腾子程序包输入数据及格式	10-6
输入数据说明	10-6
蒸发蒸腾子程序包输入样单	10-8
第十一章 通用水头边界子程序包 (GHB).....	11-1
概念及程序化	11-1
通用水头边界子程序包输入数据及格式	11-4
输入数据说明	11-4
通用水头边界子程序包输入样单	11-6
第十二章 强隐式法子程序包 (SIP) .....	12-1
概念及程序化	12-1
数组转换	12-17

计算顺序	12-17
迭代参数	12-19
SIP子程序包输入数据及格式	12-23
输入数据说明	12-23
SIP子程序包输入样单	12-24
第十三章 分层逐次超松弛法子程序包 (SSOR) .....	13-1
概念及程序化	13-1
SSOR子程序包输入数据及格式	13-8
输入数据说明	13-8
SSOR子程序包输入样单	13-9
第十四章 工具子程序和数据读入 .....	14-1
数组输入说明	14-1
参考文献	
附录A 干枯计算单元的几种处理方法 .....	A-1
附录B PCG2子程序包 (PCG) .....	B-1
PCG2子程序包输入数据及格式	B-3
输入数据说明	B-3
PCG2子程序包输入样单	B-5
附录C MODFLOW计算结果的处理 .....	C-1
MODFLOW的输出种类	C-1
无格式输出	C-1
无格式水头和降深文件的解读	C-2
无格式流量文件的解读	C-4
附录D 一些新开发的子程序包 .....	D-1

## 译者的话

### 一. MODFLOW简介

MODFLOW是英文Modular Three-dimensional Finite-difference Ground-water Flow Model (模块化三维有限差分地下水流动模型)的简称。这套计算机程序由美国地质调查局(U.S. Geological Survey)的McDonald和Harbaugh于八十年代开发出来。它是一套用于孔隙介质中地下水流动数值模拟的软件。自从它的问世以来, MODFLOW已经在全世界范围内, 在科研、生产、工业、司法、环境保护、城乡发展规划、水资源利用等许多行业和部门得到了广泛的应用。它已经成为目前世界上最为普及的地下水运动数值模拟的计算机程序。

不需对源程序进行任何修改, MODFLOW就可直接用来解决大多数地下水模拟问题。这为我们提供了一个相对来说标准化的软件, 也为同行之间的交流提供了方便。自从它问世以来, 人们已经对MODFLOW进行了多种测试, 至今尚未发现错误。所以, 它已经被世界上许多官方和司法机构所认可。

MODFLOW的一个最显著的特点是它采用了模块化的结构。它一方面将许多具有类似功能的子程序组合成为子程序包, 另一方面是用户可以按实际工作需要选用其中某些子程序包对地下水运动进行数值模拟。此外, 这种模块化结构使程序易于理解、修改、以至添加新的子程序包。事实上, 自从MODFLOW问世以来, 已经有许多新的子程序包被开发出来, 用来解决一些MODFLOW本身不能解决的问题。例如用于模拟河流与含水层之间水力联系的河流子程序包(Prudic,1989), 用于模拟由于抽水引起地面沉降的子程序包(Leake和Prudic, 1988), 用于模拟水平流动障碍(Horizontal flow-barrier)的子程序包(Hsieh和Freckleton,1993)等。这些新子程序包的加入, 大大增加了MODFLOW的功能和应用范围。

虽然MODFLOW本身仅限于模拟地下水在孔隙介质中的流动, 但大量实际工作经验表明, 只要合理使用, 它也可以用来解决许多地下水在裂隙介质中的流动问题。经过合理的线性化处理, MODFLOW还可以用于解决空气在土壤中的运动问题(Guo和Neville, 1998)。如果将它与其它用于溶质运移模拟的程序结合起来, 它还可以用来模拟诸如海水入侵等地下水密度为变量的问题(Guo和Bennett, 1998)。

MODFLOW之所以能得到如此广泛的应用, 一个很重要的因素就在于它在设计上的合



理性。很多参与MODFLOW设计、编程的人员，都是具有丰富实际经验的著名水文地质学家。这些都不难从MODFLOW对很多问题的处理方式中看出。因此，MODFLOW的使用说明书本身就是一部关于地下水数值模拟的教科书，值得广大水文地质工作者阅读参考。当然，MODFLOW也有它的缺点。例如对于干枯计算单元的处理，还很不合理。

MODFLOW最初由FORTRAN66版本写成 (McDonald和Harbaugh, 1984)。原作者又在1988年将其移植为FORTRAN77语言 (McDonald和Harbaugh, 1988)。虽然最近Harbaugh等人 (Harbaugh和McDonald, 1996) 将一些新开发的子程序包加入了MODFLOW，并将数据的输入输出方法做了改进；修改后的MODFLOW被称为MODFLOW96。但在主要内容上，MODFLOW96与MODFLOW88并没有太大的差别。大多数水文地质工作者仍采用MODFLOW88的使用说明书。本书的编译也以美国地质调查局于1988年出版的MODFLOW使用说明书为基础进行的。故在本书中，除非特别申明，MODFLOW均指1988年版的MODFLOW。

## 二. 关于MODFLOW说明书的编译

鉴于MODFLOW的种种优点及其应用的广泛性，我们深感有必要将MODFLOW程序的使用说明书翻译成中文以便中国广大的水文地质工作者学习使用MODFLOW。随着经济建设的发展和人口的不断增长，地下水资源的开发、利用和保护已显得日益重要。同时，随着电子计算机的普及，地下水运动的数值模拟也成为水文地质工作中一种经济、迅速、定量程度高的工作手段。在中国推广使用MODFLOW，无疑将有助于中国的水文地质工作，同时也能促进中国水文地质的科研工作、及时吸收国外的先进技术和经验，并促进对外科技文化交流。此外，中国的水文地质工作者也会在MODFLOW使用过程中不断总结提高，并根据实际情况，对MODFLOW加以改进和提高。

在翻译过程中，我们对MODFLOW使用说明书的原文作了适量的增删。一方面，原文中所附有的MODFLOW源程序及各子程序的文字说明均被略去。读者可以从INTERNET上下载MODFLOW的源程序。原文中的附录内容多已过时，故略去未译。另一方面，我们在本书的附录中，增加了有关干枯计算单元的讨论、计算结果的处理等内容。考虑到共轭梯度法 (PCG2, Hill, 1990a)应用的广泛性，我们对这一方法的基本原理和使用方法也作了简单的介绍。另外，原书中的第十三章未附有输入格式和输入样单。为一致起见，我们在译本中增加了这一内容。原文中所有的公式均为保留。除了图31外（该图出现于BCF子程序包子程序说明之中），原文中的其它图件均为保留。除了原文的参考文献之外，我们还加入

了其它一些文献供读者参考。为帮助中国读者了解MODFLOW的发展情况，我们在附录D中列出了一些由美国地质调查局开发的新子程序包的资料。在译文中，我们根据工作实践经验和体会，加入了一些解释，并置于方括弧中。

经过一年多的时间、多方面的努力，我们终于完成了MODFLOW使用说明书的翻译工作。本书的初稿基本上为编译，于一九九八年六月完成，由南京大学地球科学系出版并作为同年七月初在南京大学举办的MODFLOW学习班的教材。之后，我们按照美国地质调查局的意见，将原文中第十二、十三章全文译出，并将主要添加内容移至附录部分。

本书的翻译工作由美国Missimer International (Camp Dresser & Mckee, Inc.) 郭卫星博士主持。第一章至第五章及第十二章和第十四章由郭卫星翻译。第六章至第十一章和第十三章由美国阿拉巴马大学地质系博士研究生卢国平翻译。附录各部分由郭卫星编写。大部分中文输入工作由南京大学地球科学系研究生班完成，并由南京大学地球科学系博士研究生刘建立负责校对工作。全书由南京大学地球科学系朱学愚教授审阅。美国地质调查局的简小东博士和王文振博士对译文提供了宝贵的修改意见。

### 三. 鸣谢

在全书的翻译过程中，我们得到了下列部门和个人的鼎力协助，在此一致鸣谢：美国国家地质调查局 (U. S. Geological Survey)，美国Missimer International, Inc.，美国S. S. Papadopoulos & Associates, Inc.，中国南京大学地球科学系，朱学愚教授和刘建立等同学（中国南京大学地球科学系），郑春苗博士 (The University of Alabama)，卫迦教授（成都理工大学），Dr. Charles Andrews 和Mr. Gordon D. Bennett (S. S. Papadopoulos & Associates, Inc.)，Dr. Thomas E. Reilly 和Mr. Arlen W. Harbaugh (U. S. Geological Survey)。

我们在此也对在本书的翻译工作过程中，我们的太太和孩子们对这项志愿性工作的理解和支持深表谢意。

本书的翻译工作，完全是利用业余时间完成的。作为译者，我们唯一的愿望就是希望这本书能够帮助中国的广大水文地质工作者了解并能使用MODFLOW这一世界范围已得到广泛应用的地下水运动模拟计算机程序，以促进数值模拟技术在中国水资源利用和环境保护工作中的应用。对译文中可能出现的不正之处，我们热忱欢迎读者提出批评建议。

## 模块化三维有限差分地下水流动模型

Michael G. McDonald 和 Arlen W. Harbaugh

### 摘要

本书描述一个有限差分模型及其相关的模块化计算机程序。这个模型用于三维地下水运动模拟。本书介绍了建立地下水流动模型的物理和数学概念以及如何将这些概念应用于计算机程序。这里谈的模块化结构由一个主程序和一系列具有高度独立性的子程序（模块）组成。这些模块又组合成为子程序包。每个子程序包用于代表所模拟水文体系中的某一特征，例如来自河流的渗流补给、排泄于沟渠的地下水等；或者对描述地下水运动的线性方程组进行求解，例如强隐式法和超松弛因子法等。

程序的模块化结构有利于用户分别研究整个模型中某一水文地质特征。这种结构也有利于在增加新的子程序包时，不用修改现有的子程序包。MODFLOW的输入和输出格式具有很高的灵活性。

本程序采用单元中心有限差分法模拟地下水在含水层中的运动。模型层可以用来代表承压含水层、潜水含水层、以及二者的组合。模型还可模拟各种外应力，例如井流、面状补给、蒸发蒸腾、沟渠和河流等对地下水流动的影响。有限差分方程组可以用强隐式法或超松弛因子法进行求解。

本程序用FORTRAN 77 语言写成，可直接在大多数装有FORTRAN 77 编译系统的计算机上运行。本书对程序中的每一个子程序都给予详细描述，并附有各个子程序的计算框图、变量表和源程序。[译注：原文中对各子程序的描述，框图，变量表和源程序略去未译。]

## 第一章 概述

### 目的

一系列用于模拟地下水二维和三维流动的计算机程序 (Trescott,1975;Trescott和Larson, 1976;Trescott,Pinder和Larson,1976) 已经问世, 并已在美国地质调查局内部以及其它部门的地下水模拟工作中得到广泛使用。MODFLOW就是在这些早期工作的基础之上发展起来的。其主要目的就是发展一套容易修改、实用、稍加修改就能在多种计算机上运行、能有效地利用计算机的内存并提高运算速度的计算机软件供水文地质工作者使用。

本书所描述的程序采用了模块化的结构。它一方面将许多具有类似功能的子程序组合成为子程序包, 另一方面用户可以按实际工作需要选用其中某些子程序包对地下水运动进行数值模拟。此外, 这种模块化结构使程序易于理解、修改、以至添加新的子程序包。此外, 不被选用的子程序可以从程序中删除以减小程序的长度。这套程序可用于二维或三维地下水的数值模拟。用户将输入数据按一定格式存入一系列输入文件并由程序读入。灵活多样的输入格式使程序可以直接输入数据而不用对程序进行修改。另外, 程序还提供了多种输出格式供用户选用。这套程序最初用FORTRAN66语言写成 (McDonald和Harbaugh,1984)。本书则介绍MODFLOW的FORTRAN77语言版本。这套程序具有高度的移植性, 可在多种电子计算机上运行。有些计算机则可能要求对源程序稍加修改。

本书介绍的MODFLOW程序[译注: 即1988年版]可以用来模拟水井、补给、河流、沟渠、蒸发蒸腾和“通用水头边界”。这套程序现包括两种迭代求解方法: 强隐式法 (SIP) 和超松弛因子法 (SSOR)。

### 本书内容的安排

本书的主要内容包括地下水运动数值模拟中的数学、物理概念, MODFLOW的程序结构以及使用方法、输入数据的类型及格式。程序可分为一个主程序和若干个高度独立的子程序 (称为模块, modules)。这些模块反过来结合成为子程序包 (packages)。每个子程序包含有若干个模块, 每个模块用以完成整个模拟计算工作的一部分。例如, 井流子程序包模拟抽水井、注水井, 河流子程序包模拟河流渗流, SIP子程序包用强隐式法对线性方程组进行迭代求解。用户可根据实际需要选用这些子程序包。每个子程序包将在本书中分章进行描述。第

二、三章则对整个程序加以描述。第二章介绍MODFLOW中使用的有限差分法；了解有限差分法的概念及数学推导，对了解MODFLOW的功能及局限性有很大的益处，同时对了解有限差分法在地下水模拟中的应用也很有帮助。第三章介绍整个程序的整体设计。在第十四章，我们将介绍一些具有特殊用途的子程序。

第四章至第十三章对各个子程序包逐一进行说明。对每个子程序包的介绍包括（1）概念和程序化；（2）输入数据的种类及格式。在第一部分中，主要对该子程序包所代表的水文地质过程、概念以及数学表达加以介绍。例如在河流子程序包中，首先介绍河流与含水层之间的水力联系，然后讨论如何定量表示这种水力联系，推导出通过河床的地下水渗流近似计算公式。最后介绍如何将这个计算公式应用于有限差分公式。第二部分的内容包括输入数据的种类、定义、输入的方法及格式。在每章的最后部分还列出了各项输入数据的定义，供用户参考。同时还给出了输入文件的例子。第十二章和第十三章分别介绍程序所使用的迭代求解方法。

在第四至十三章中介绍输入时，我们用了输入项目（items）的名称。一个输入项目可以是单独的一行记录(record)，或是多行记录，也可以是一个或多个数组。（MODFLOW中三维数组的输入总是由一系列二维数组依次进行。每个二维数组对应于模型的一层。）在每章的输入格式部分，列出了该子程序包所要求的输入项目的定义，以供用户参考。这些输入项按输入顺序编号。一般来说，每一输入项的描述包括两行（有时还带有注解）。对于那些只有一行或一组记录的输入项，第一行列出该项的名称，第二行给出由FORTRAN语言规定的输入格式。如果输入项为数组，则由第一行给出该数组的名称，而由第二行给出用以读入该数组的子程序名。有关这些子程序，将在第十四章中加以介绍。

对于多数子程序包而言，输入数据可以分为两大类：（1）一次性输入数据，它们在整个模拟过程中保持不变；（2）多次性输入数据，它们可能随时间发生变化（例如抽水量等），所以每个应力期（stress period）均要求一组输入数据。各个子程序包的输入数据又进一步按读入数据的子程序分组。每组数据之前为读入子程序的名称。输入项目名称用大写字母表示，同时这些名称也作为程序中该项数据的变量名。由大小写字母混合表示的输入数据名仅用于输入说明，而非程序中该项之变量名。第四章为基本子程序包。它含有两张输入数据表（即两个输入文件）。一张表列出了必需的输入数据；而另一张表可以省略，它包含进行输出控制(output control)的各项数据。

第四章至第十三章中列举的各输入项将在相应的章节中加以介绍。多数情况下，我们将举例说明输入方法。在第四章，用以输出控制的各项输入数据也将给予解释，并给出例子。

在进行模拟时，用户必须告诉程序选用哪些子程序包，同时也必须告诉程序输入文件的名称及路径。用户可通过一个一维数组，IUNIT，将这些信息传递给MODFLOW。输入到这个一维数组中的整数值也将成为程序读入相应输入文件的设备号。IUNIT数组的输入方法，将在第五章至第十三章中输入数据开始的部分作以介绍。输出控制的输入将在第四章中介绍。对于选用的子程序包，用户必须在IUNIT中指定的位置上输入一个正整数加以表示，而这个正整数也就是程序读入该子程序包输入文件的设备号。对不选用的子程序包，则在相应位置以零表示。有关IUNIT的用法，我们在第三、四章中还要详细说明。

总的来说，本书的第二、三章和第四章中的“概念及程序化”部分对程序的总体设计以及功能进行讨论。某些参数的计算方法将在第五章中介绍。第六章至第十一章则讨论各个外部源汇子程序包的应用。第十二章和第十三章讲解程序中所使用的两种迭代求解方法。每个子程序包所要求的输入数据将在相应的章节中加以介绍。

### 致谢

本文作者特别感谢Gordon Bennett。他不仅在程序的开发过程中提供了行政管理上的协助，并不断给予我们鼓励和指导。他的审稿意见在很大程度上提高了本报告的易读性。