

第五章 计算单元间渗流子程序包

概念及程序化

在MODFLOW中, 计算单元间渗流(简称BCF)子程序包用于计算相邻计算单元之间的水力传导系数以及计算单元之间的地下水渗流量。它也用于计算含水层由于贮水量的变化所吸收或释放的水量。在MODFLOW中, 我们总是用计算单元的中心点来表示该单元的空间位置, 故计算单元间的流量事实上相当于两相邻计算单元中心点之间的流量。

在第二章中, 我们已经根据地下水流运动的连续性方程推出了对计算单元(i,j,k)水头求解的有限差分公式:

$$\begin{aligned}
 & CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} h_{i,j,k-1} + CC_{i-\frac{1}{2},j,k} h_{i-1,j,k} + CR_{i,j-\frac{1}{2},k} h_{i,j-1,k} + (-CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} - CC_{i-\frac{1}{2},j,k} \\
 & - CR_{i,j-\frac{1}{2},k} - CR_{i,j+\frac{1}{2},k} - CC_{i+\frac{1}{2},j,k} - CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} + HCOF_{i,j,k}) h_{i,j,k} \\
 & + CR_{i,j+\frac{1}{2},k} h_{i,j+1,k} + CC_{i+\frac{1}{2},j,k} h_{i+1,j,k} + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} h_{i,j,k+1} = RHS_{i,j,k}
 \end{aligned} \quad (29)$$

其中 CV , CR 和 CC 均为计算单元之间的水力传导系数。 $HCOF$ 和 RHS 分别包含源汇项以及贮水项。除了计算这些水力传导系数和贮水项之外, 这个子程序包还对由于悬挂含水层所引起的非饱和带渗流计算进行纠正。当悬挂含水层下面含水层的水头低于悬挂含水层之底板高程时, 其下伏的含水层的上部则处于非饱和状态。这时垂向上的渗流量不再与两个含水层之间的水头差成正比, 而是一个常数。在这种情况下, 用公式(29)所得到的垂向流量必须进行纠正才能更为真实地反映两个含水层之间的地下水流动。[译注: 应当说明, 在这里所讲的非饱和带流量与著名的Richard方程无关。我们知道, 地下水通过非饱和带或包气带的流动远比地下水通过饱和的孔隙介质的流动复杂。在非饱和带中, 介质的渗透系数为土壤的含水率的函数, 而这种非线性函数一般只能通过大量的实验分析才能确定。此外, 对滞后现象的处理, 也是非饱和带数值计算中相当难以解决的问题。在MODFLOW中, 非饱和带水流的计算实际上假定介质的非饱和带渗透系数与饱和带相同。此外, 滞后现象也忽略不计。]

水力传导系数的计算

在第二章中, 我们已经介绍了水力传导系数的概念(参见公式(9))。在这一章中, 我们将具体导出不同条件下水力传导系数的计算公式。

实际上,水力传导系数不过是达西(Darcy)公式中几个常数项的合并。例如,在一维流的情况下,通过如图23所示的孔隙介质的地下水渗流量为:

$$Q = KA \frac{(h_2 - h_1)}{L} \quad (30)$$

式中: Q : 流量 (L^3T^{-1});
 K : 沿地下水流动方向的渗透系数 (LT^{-1});
 A : 与水流方向垂直的横断面面积 (L^2);
 h_2-h_1 : 流场两端的水头差 (L);
 L : 所研究流场两端间的距离 (L)。

如果我们将(30)式中几个常数项合并在一起,并称之为水力传导系数, C , 则有

$$C = \frac{KA}{L} \quad (31)$$

这样的话,公式(30)就可以简化为:

$$Q = C(h_2 - h_1) \quad (32)$$

如果使用导水系数(transmissivity)来表示水力传导系数,则有:

$$C = \frac{TW}{L} \quad (33)$$

其中, T (L^2T^{-1})为导水系数, W 为所研究流场断面的宽度(L)。

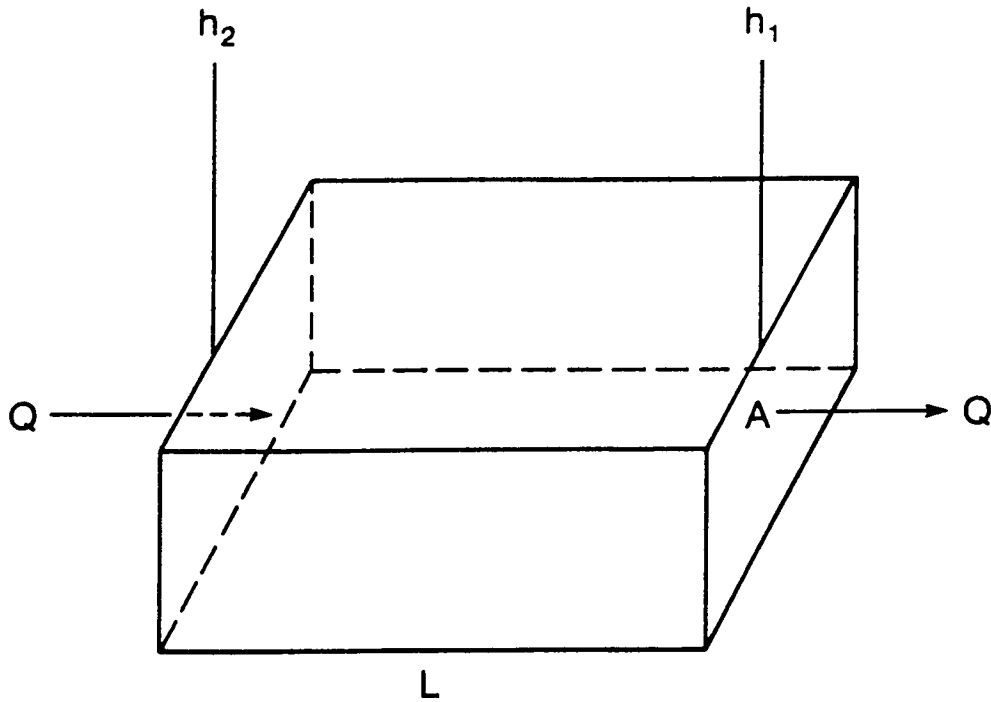
水力传导系数与所考虑的物质透水性以及流动的方向有关。对于各向异性的孔隙介质,在各个方向上的水力传导系数通常也不相同。严格来说,水力传导系数应用二阶张量(tensor)来表示。此外,水力传导系数与过水断面面积成正比,与流线长度成反比。

在实际工作中,我们常可以见到地下水沿水流方向垂直穿过多层具有不同透水能力的岩层的情况。我们也可以用串联计算的方法,求出这些岩层的综合水力传导系数(参见图24)。而流量则可根据综合水力传导系数以及两端之间的总水头差求出:

$$C = \frac{Q}{h_A - h_B} \quad (34)$$

显然,各单层引起的水头损失之和等于总体水头损失:

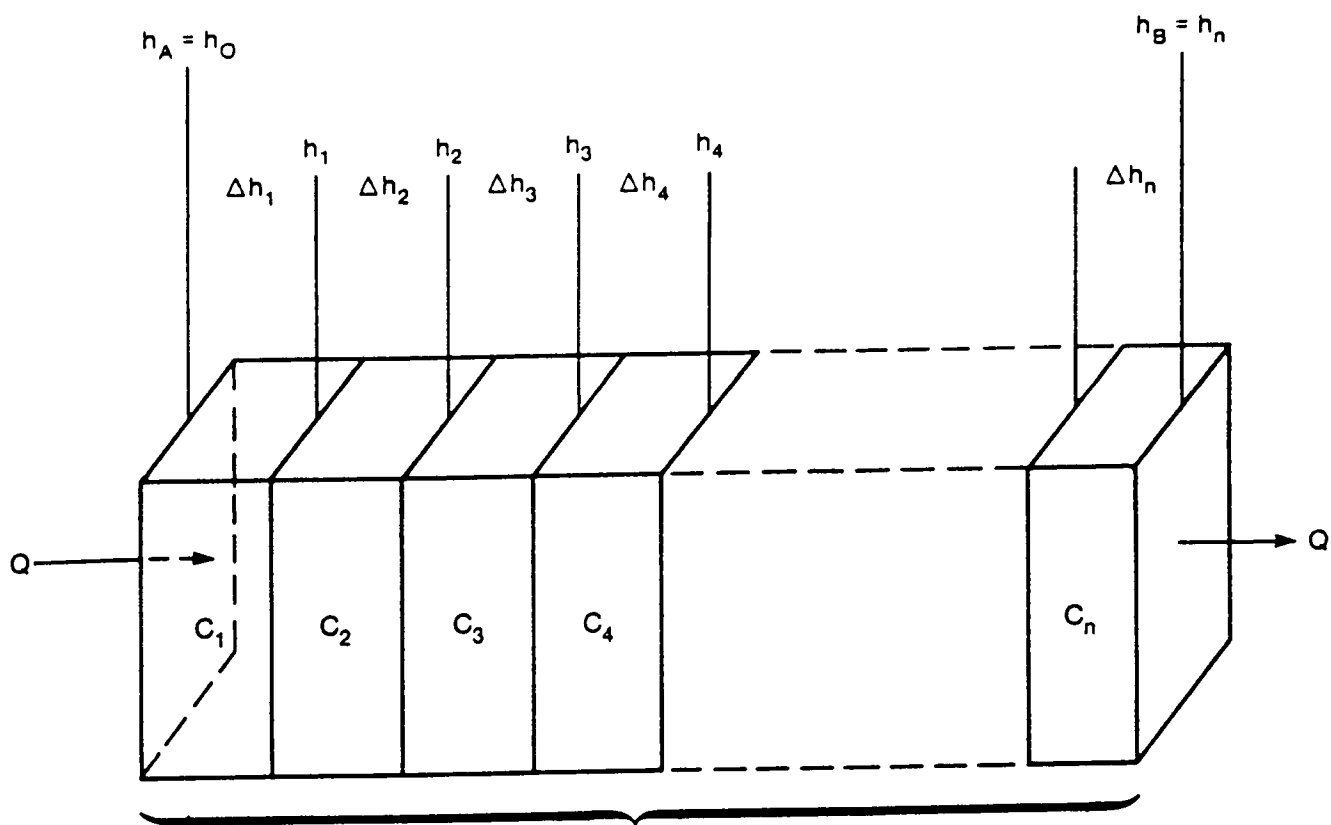
$$Q = \frac{KA (h_2 - h_1)}{L}$$



说 明

- K: 渗透系数
- h_1 : 右端水头
- h_2 : 左端水头
- Q: 自左至右渗流量
- L: 长度
- A: 过水断面面积

图23. 达西流量计算示意图。



$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2} + \frac{1}{C_3} + \dots + \frac{1}{C_n}$$

说 明

- Q: 流量
- C_m : 第m层物质之水力传导系数
- h_m : 第m层之水头
- Δh_m : 第m层之水头损失
- C: 总水力传导系数

图24. 串联条件下的总水力传导系数。

$$\sum_{i=1}^n \Delta h_i = h_A - h_B \quad (35)$$

将(35)式代入(32)式, 则有

$$\sum_{i=1}^n \frac{q_i}{C_i} = h_A - h_B \quad (36)$$

在这里, 我们考虑地下水为一维流动。如果不考虑贮水量的变化, 则通过各个单层的渗流量与总流量 Q 相等, 则:

$$Q \sum_{i=1}^n \frac{1}{C_i} = h_A - h_B \quad \text{或}$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{C_i} = \frac{h_A - h_B}{Q} \quad (37)$$

将(37)式与(34)式相比, 我们可以看出:

$$\frac{1}{C} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{C_i} \quad (38)$$

所以, 对于一系列以串联方式排列的透水岩层来说, 综合水力传导系数的倒数等于各单层之水力传导系数的倒数之和。在只有两个单层相串联排列时, 其综合水力传导系数的计算公式为:

$$C = \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2} \quad (39)$$

承压含水层中水平方向上水力传导系数的计算

当地下水从一个计算单元流向一个相邻的计算单元时, 如果这两个计算单元的透水性不同, 地下水将穿过两层串联排列的岩层。所以两个计算单元间的总水力传导系数可以由(39)式计算。当然, 由于水流将流经这两个相邻单元的各一半距离, 而且这两个单元的大小也许不同, 故实际计算公式要比(39)式复杂一些。公式(29)中的 CR 和 CC 的计算公式由图25示意。 CC 和 CR 分别指沿行方向和列方向上相邻两计算单元之间的水力传导系数。为了明确起见, 这些水力传导系数的下标用 $\frac{1}{2}$ 表示。例如, $CR_{i,j+\frac{1}{2},k}$ 表示计算单元 (i,j,k) 和计

算单元(i, j+1, k)之间的水力传导系数。

在计算水力传导系数时, 我们规定: (1)计算单元的位置以该计算单元的中心点表示; (2)每个计算单元内部的导水系数相同。两个单元间的水力传导系数应包括这两个单元相邻侧的各一半。根据公式(39), 可得:

$$CR_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2} \quad (40)$$

根据公式(33)则可得到:

$$CR_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{\frac{TR_{i,j,k} DELC_i}{0.5 DELR_j} \frac{TR_{i,j+1,k} DELC_i}{0.5 DELR_{j+1}}}{\frac{TR_{i,j,k} DELC_i}{0.5 DELR_j} + \frac{TR_{i,j+1,k} DELC_i}{0.5 DELR_{j+1}}}$$

式中: TR : 沿行方向上的导水系数 ($L^2 T^{-1}$);

$DEL R$ (或 Δr): 沿行方向上的计算单元长度 (L);

$DEL C$ (或 Δc): 沿列方向上的计算单元长度 (L)。

将公式(40)化简后可得:

$$CR_{i,j+\frac{1}{2},k} = 2 DELC_i \frac{TR_{i,j,k} TR_{i,j+1,k}}{TR_{i,j,k} DELR_{j+1} + TR_{i,j+1,k} DELR_j} \quad (41)$$

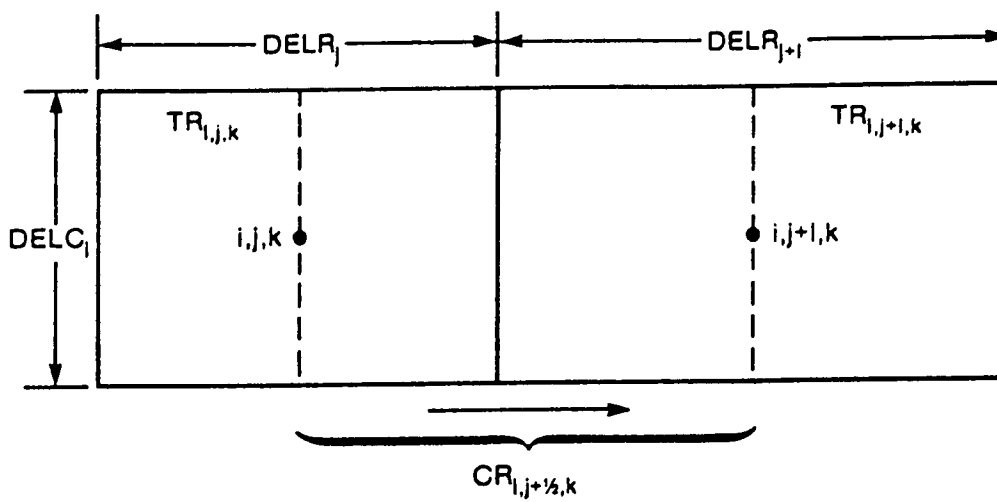
同理可得沿列方向上两相邻计算单元之间的水力传导系数:

$$CC_{i+\frac{1}{2},j,k} = 2 DELR_j \frac{TC_{i,j,k} TC_{i+1,j,k}}{TC_{i,j,k} DELC_{i+1} + TC_{i+1,j,k} DELC_i} \quad (42)$$

其中 TC 为沿列方向上的导水系数($L^2 T^{-1}$)。MODFLOW正是用公式(41)和(42)分别计算位于同一层中各相邻计算单元之间的水力传导系数的。当两个相邻计算单元的导水系数均为零时, MODFLOW将直接跳过公式(41)和(42), 并将它们之间的水力传导系数赋为零。

潜水含水层中水平方向上水力传导系数的计算

当含水层处于承压状态时, 平面上的水力传导系数(CR 和 CC)在模拟计算过程中保持不变。但当含水层处于非承压的条件下时, 平面上的水力传导系数成为水头的函数。MODFLOW在每次迭代开始之前将重新计算平面上的水力传导系数 CC 和 CR 。在计算 CC 和 CR 时, 首先将渗透系数与饱和厚度相乘得到导水系数, 然后再按公式(41)和(42)求出水力



$$\frac{1}{CR_{i,j+1/2,k}} = \frac{1}{\left(\frac{TR_{i,j,k} DELC_i}{\left(\frac{DELR_j}{2} \right)} \right)} + \frac{1}{\left(\frac{TR_{i,j+1,k} DELC_i}{\left(\frac{DELR_{j+1}}{2} \right)} \right)}$$

$$CR_{i,j+1/2,k} = 2 DELC_i \times \frac{TR_{i,j,k} TR_{i,j+1,k}}{TR_{i,j,k} DELR_{j+1} + TR_{i,j+1,k} DELR_j}$$

说明

$TR_{i,j,k}$: 计算单元沿行方向上的导水系数

$CR_{i,j,k}$: 计算单元(i, j, k)和(i, j+1, k)之间的水力传导系数

图25. 平面上两相邻计算单元之间的水力传导系数的计算。

传导系数。

在潜水含水层的条件下，计算单元(i, j, k)的导水系数的计算分下列三种情况进行：

(1) 如果 $HNEW_{i,j,k} \geq TOP_{i,j,k}$

$$\text{则 } TR_{i,j,k} = (TOP_{i,j,k} - BOT_{i,j,k})HYR_{i,j,k} \quad (43)$$

(2) 如果 $TOP_{i,j,k} > HNEW_{i,j,k} > BOT_{i,j,k}$

$$\text{则 } TR_{i,j,k} = (HNEW_{i,j,k} - BOT_{i,j,k})HYR_{i,j,k} \quad (44)$$

(3) 如果 $HNEW_{i,j,k} \leq BOT_{i,j,k}$

$$\text{则 } TR_{i,j,k} = 0$$

这里, $HYR_{i,j,k}$ 为沿行方向上的渗透系数(LT^{-1}); $TOP_{i,j,k}$ 为计算单元(i,j,k)的顶面标高(L); $BOT_{i,j,k}$ 为计算单元(i,j,k)的底面标高(L); $HNEW_{i,j,k}$ 为某时刻计算单元(i, j, k)的水头(L)。

值得注意的是, MODFLOW仅要求用户输入各种计算单元沿行方向上的渗透系数。而沿列方向的渗透系数则由这些值与平面方向上各向异性率的乘积来计算。在输入时, 用户应给每一层输入一个各向异性率。如果同一层内的岩层有明显的非均质性, 用户则应该对MODFLOW的源程序进行修改, 并加入一个类似于 HYR 那样的数组用于贮存沿列方向上的渗透系数。这种情况在MODFLOW的应用中并不常见。

在计算过程中, 如果计算水头低于该计算单元之底面标高, 该计算单元则处于非饱和状态。这时, MODFLOW并不考虑该计算单元在非饱和态下的渗透系数, 而是将这个计算单元列为“干枯计算单元”(dry cell), 并将其导水系数赋值为零。一旦一个计算单元变为干枯计算单元, 它将被重新定义为不透水或无效计算单元, 从而被摒除出以后的模拟计算。计算结果也可能因为干枯计算单元的出现而受到影响。[译注: 我们将在附录中专门讨论干枯计算单元的一些处理方法。]

垂向水力传导率的计算

平面上的水力传导系数 CC 和 CR 均由MODFLOW根据输入数据计算得到, 而垂向水力传导系数则由用户自己根据含水层厚度和垂向渗透系数计算出垂向水力传导率(vertical conductance, 简称为 VC)后再输入给MODFLOW。MODFLOW读入垂向水力传导率后, 乘以计算单元的面积以得到垂向水力传导系数。下面我们来介绍如何计算垂向水力传导率。

一般来说, 在垂向上相邻两个计算单元(i,j,k)和(i,j,k+1)之间还可能包括有几个水文地质亚层。这些亚层的渗透系数和厚度分别由 K_1, K_2, \dots, K_n 和 $\Delta Z_1, \Delta Z_2, \dots, \Delta Z_n$ 来表示。假定这两个计算单元的平面断面积为 $DEL R_j * DEL C_i$, 则一个亚层(g)的垂向水力传导系数为

$$C_g = \frac{K_g DEL R_j * DEL C_i}{\Delta Z_g} \quad (46)$$

按照前面讲过的计算方法, 这些亚层的综合水力传导系数, $C_{i,j,k+1/2}$ 为:

$$\frac{1}{C_{i,j,k+1/2}} = \sum_{g=1}^n \frac{1}{C_g} = \sum_{g=1}^n \frac{1}{\frac{K_g * DEL R_j * DEL C_i}{\Delta Z_g}} = \frac{1}{DEL R_j * DEL C_i} \sum_{g=1}^n \frac{\Delta Z_g}{K_g} \quad (47)$$

或写为

$$\frac{C_{i,j,k+1/2}}{DEL R_j * DEL C_i} = \frac{1}{\sum_{g=1}^n \frac{\Delta Z_g}{K_g}} \quad (48)$$

其中: $\frac{C_{i,j,k+1/2}}{DEL R_j * DEL C_i}$ 也可称为垂向水力传导率 (或称越流系数, vertical leakance, 单位为 T^{-1})。在这里记作 $VC_{i,j,k+1/2}$:

$$VC_{i,j,k+1/2} = \frac{1}{\sum_{g=1}^n \frac{\Delta Z_g}{K_g}} \quad (49)$$

VC 的值由用户计算并输入。这一点很重要。在MODFLOW的输入数据中并没有垂向渗透系数和层厚。对于一个承压含水层来说, 含水层的厚度仅由用户用来计算与厚度有关的水文地质参数, 如导水系数、贮水系数和垂向水力传导率; MODFLOW并不需要读入含水层的厚度资料。这样一来, 对一个数值模型的空间几何形态的定义就产生了多义性。仅从MODFLOW的输入输出数据, 我们无法得知含水层的厚度和模型的纵深。

一般情况下, 垂向水力传导率可按公式(49)进行计算, 并将结果以二维数组的形式输入MODFLOW。值得注意的是, 垂向水力传导率是指某计算单元(i,j,k)和其下伏的计算单元(i,j,k+1)之间的水力传导率。正因为如此, 对模型最底层不需要输入垂向水力传导率。下面我们来讨论几种特殊情况下垂向水力传导率的计算方法。当然, $VC_{i,j,k+1/2}$ 表示计算单元(i,j,k)和(i,j,k+1)之间的垂向水力传导率。

当计算单元(i,j,k)和(i,j,k+1)均属于同一水文地质单元(参见图26)时,这两个单元之间的垂向水力传导率可由公式(49)直接得到:

$$VC_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{K_{z,i,j}}{\Delta Z_{k+\frac{1}{2}}} \quad (50)$$

其中 $\Delta Z_{k+\frac{1}{2}}$ 为这两个计算单元中心点之间的距离,即 $\frac{\Delta V_k}{2}$ 和 $\frac{\Delta V_{k+1}}{2}$ 之和。在模型设计过程中,为提高计算精度常将同一水文地质单元在垂向上再分为若干亚层。

图27表示另外一种情况,两个上下相邻的计算单元分别代表两个相邻但性质有所不同的水文地质单元。两个计算单元的中心分别落于这两个水文地质层的中心位置。当计算单元(i,j,k)和(i,j,k+1)的渗透系数不等时,相对应的垂向水力传导率可由下式求出:

$$VC_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\frac{\Delta V_k / 2}{K_{z,i,j,k}} + \frac{\Delta V_{k+1} / 2}{K_{z,i,j,k+1}}} \quad (51)$$

式中: ΔV_k : 层k的厚度(L);

ΔV_{k+1} : 层k+1的厚度(L);

$K_{z,i,j,k}$: 层k的垂向渗透系数 (LT^{-1});

$K_{z,i,j,k+1}$: 层k+1的垂向渗透系数 (LT^{-1})。

第三种情况(参见图28)是在计算单元(i,j,k)和(i,j,k+1)之间含有一弱透水层,而该弱透水层又没有在模型之中作为一层明确地表示出来。但它的存在又应通过公式(49)反映在垂向水力传导率之中,即:

$$VC_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\frac{\Delta Z_u / 2}{K_{zu}} + \frac{\Delta Z_c}{K_{zc}} + \frac{\Delta Z_l / 2}{K_{zl}}} \quad (52)$$

其中: ΔZ_u 为上层的厚度(L);

ΔZ_c 为弱透水层的厚度(L);

ΔZ_l 为下层的层厚(L);

K_{zu} 为上层的垂向渗透系数(LT^{-1});

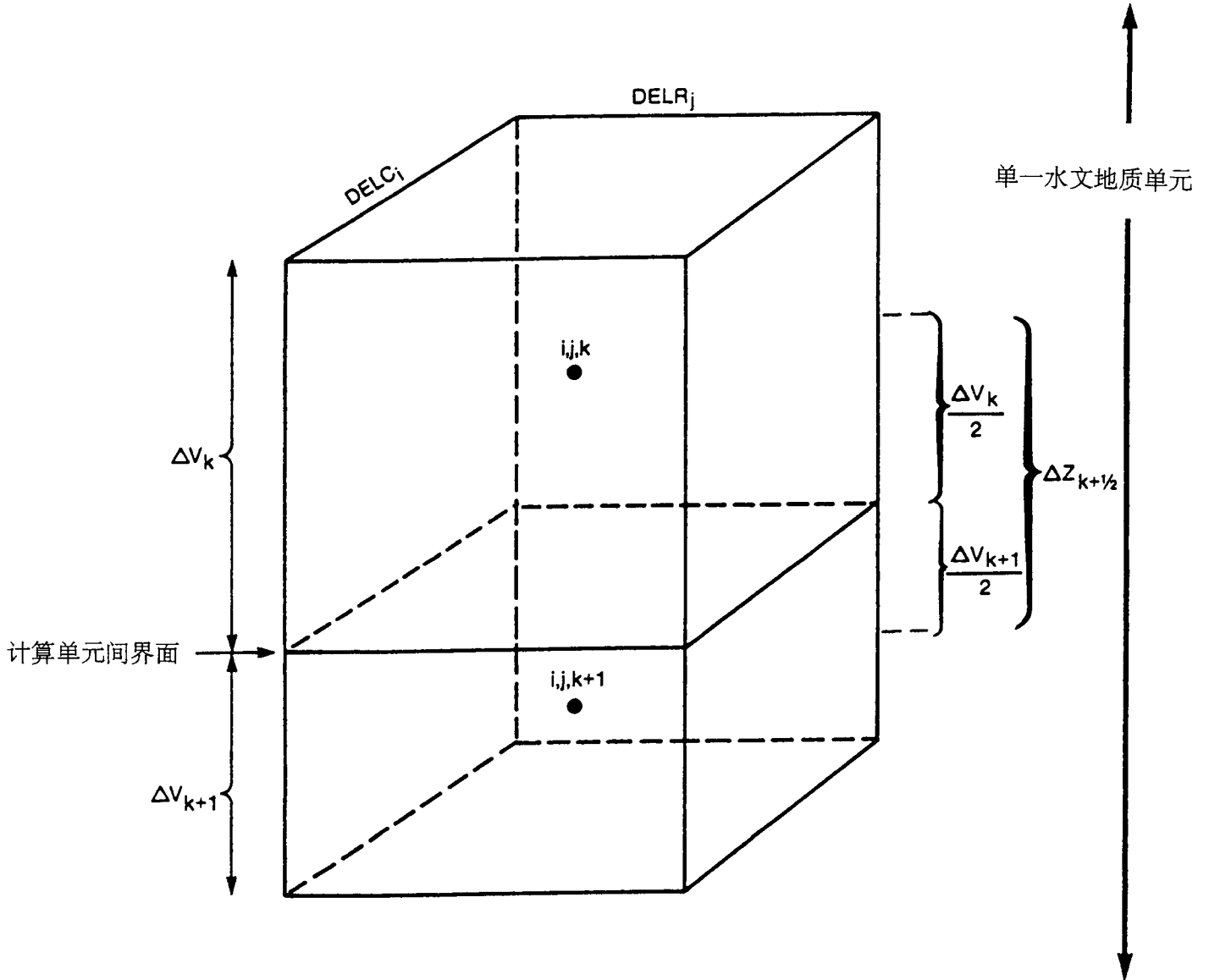


图26. 位于同一水文地质单元内上下两计算单元之间的垂向水力传导率的计算。

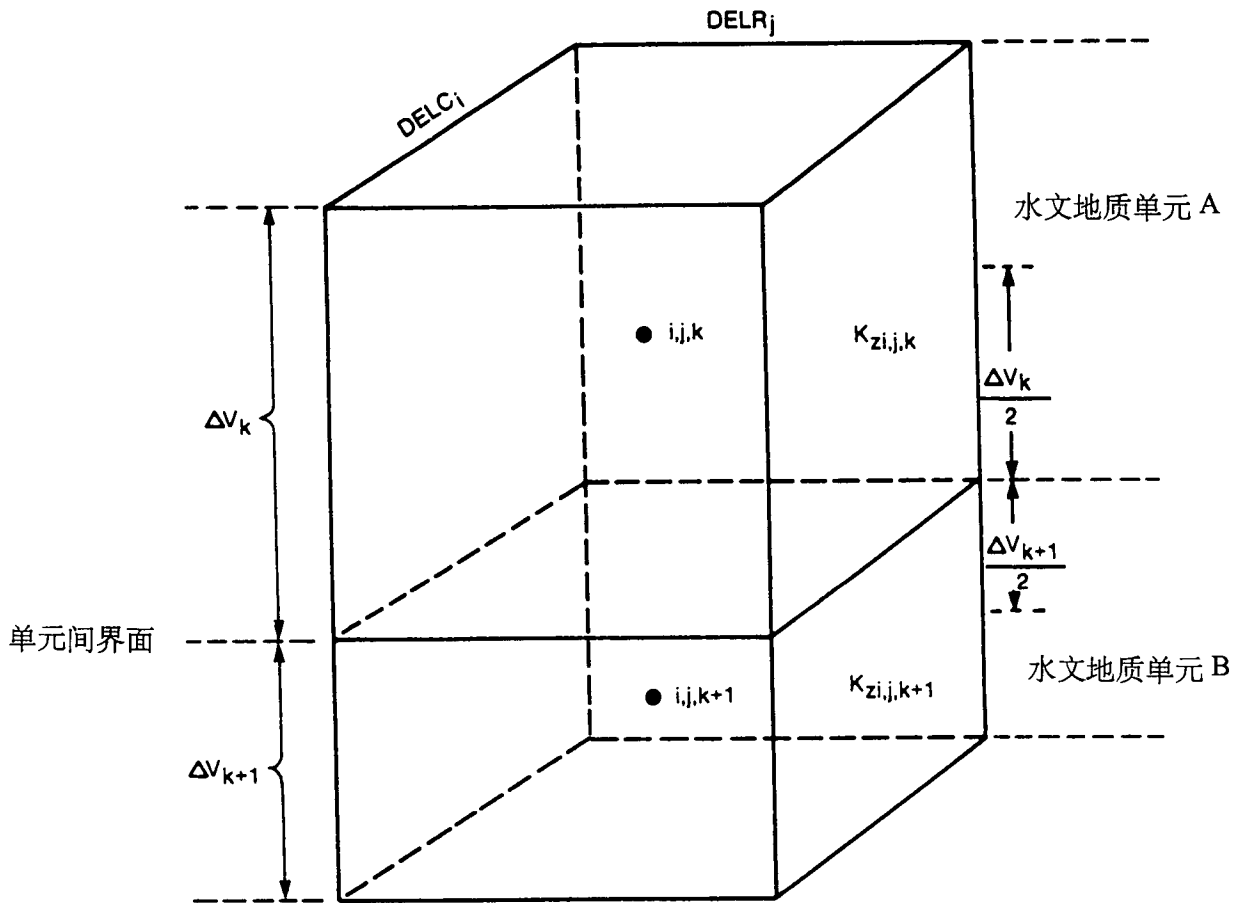
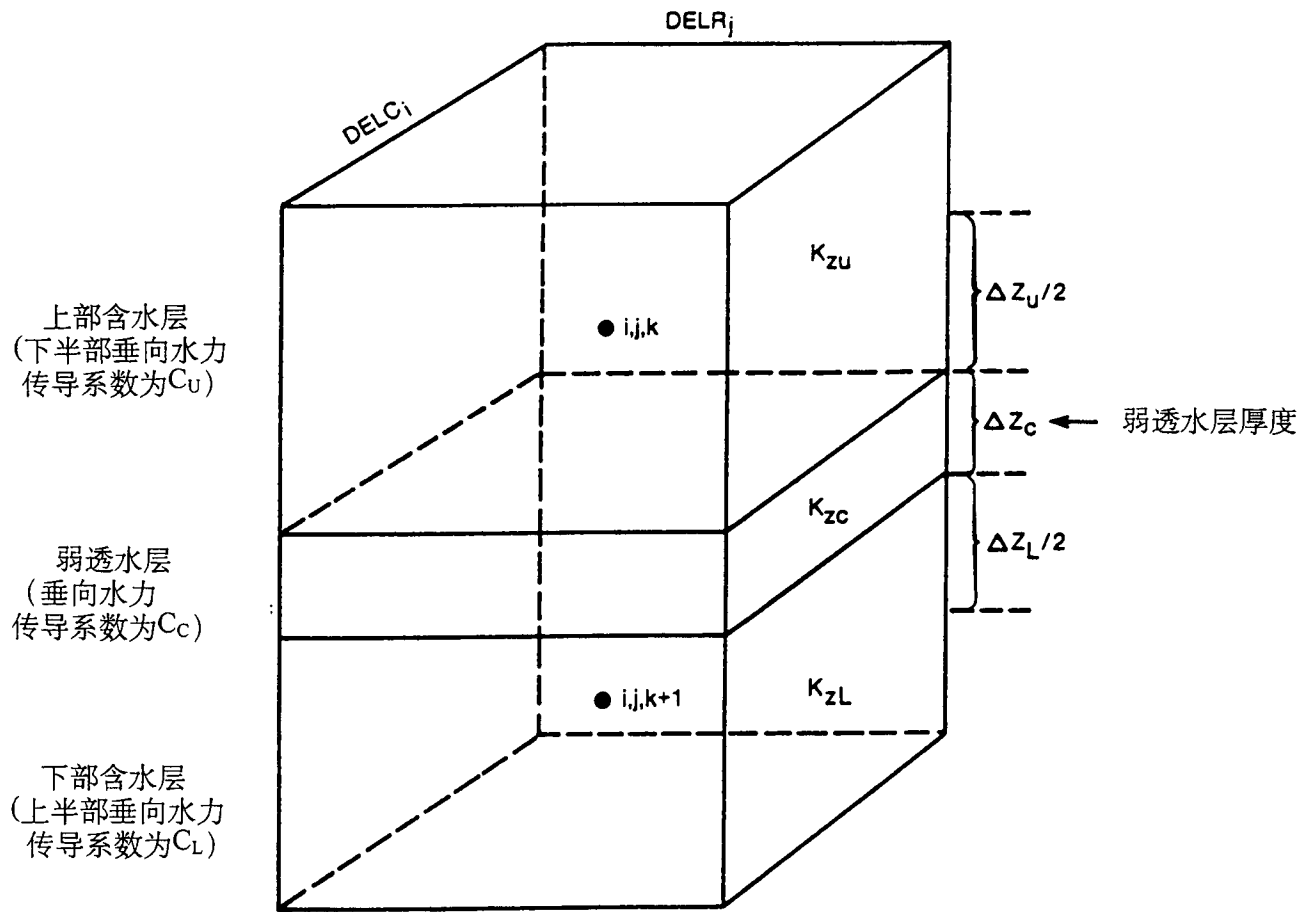


图27. 模型按水文地质单元分层时垂向水力传导率的计算。



$$\frac{1}{C_{eq}} = \frac{1}{C_u} + \frac{1}{C_c} + \frac{1}{C_L} =$$

$$\frac{1}{DELC_i \cdot DELR_j} \left\{ \frac{\Delta Z_u/2}{K_{zu}} + \frac{\Delta Z_c}{K_{zc}} + \frac{\Delta Z_L/2}{K_{zL}} \right\}$$

$$VCONT_{i,j,k+1/2} = \frac{1}{\frac{\Delta Z_u/2}{K_{zu}} + \frac{\Delta Z_c}{K_{zc}} + \frac{\Delta Z_L/2}{K_{zL}}}$$

图28. 两含水层中夹有弱透水层时垂向水力传导率的计算。

K_{ZC} 为弱透水层的垂向渗透系数(LT^{-1});

K_{ZL} 为下层的垂向渗透系数(LT^{-1})。

以上这些参数都可能随空间的位置而发生变化。根据实际工作的经验, K_{ZC} 一般比 K_{ZU} 和 K_{ZL} 要小得多。从计算结果上来看, 含有 K_{ZU} 和 K_{ZL} 的两项可以忽略不计。这种情况下的垂向水力传导率可按下式计算:

$$VC_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{K_{ZC}}{\Delta Z_C} \quad (53)$$

如果我们进一步假定夹层的水平渗透系数和储水能力可以忽略不计, 则图(28)所示的上中下三层含水层结构可仅用模型层k和层k+1来分别表示; 而介于它们之间的弱透水夹层的存在则由这两模型层之间的垂向水力传导系数来反映。这种方法在MODFLOW中称为“准三维”(quasi-three-dimensional)方法。

前面已经提到, 在MODFLOW中用户输入的数据为垂向水力传导率而非垂向渗透系数和厚度。MODFLOW根据读入的垂向水力传导率和计算单元的面积来计算垂向水力传导系数。用户应根据实际情况和模型的设计选择适当的公式计算水力传导率。这样做, 虽然会增加用户的工作量, 但也提高了MODFLOW解决问题的灵活性。用户可选用正交网格(图9b), 非正交网格(图9c), 也可以按准三维的办法设计模型。

非饱和带垂向渗流的计算

与计算单元相对应的有限差分公式可以写为:

$$\begin{aligned} & CR_{i,j-\frac{1}{2},k}(h_{i,j-1,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CR_{i,j+\frac{1}{2},k}(h_{i,j+1,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CC_{i-\frac{1}{2},j,k}(h_{i-1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m) \\ & + CC_{i+\frac{1}{2},j,k}(h_{i+1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m) + CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(h_{i,j,k-1}^m - h_{i,j,k}^m) + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m) \quad (54) \\ & + P_{i,j,k}h_{i,j,k}^m + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k}(\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k) \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}} \end{aligned}$$

在这个公式中, $CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m)$ 一项给出了通过计算单元(i,j,k)底面的地下水渗流量:

$$q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m) \quad (55)$$

按照规定, 当 $q_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ 为正时, 地下水由计算单元 $(i,j,k+1)$ 流入计算单元 (i,j,k) ; 反之, 地下水从计算单元 (i,j,k) 通过底面流入计算单元 $(i,j,k+1)$ 。公式(54)和(55)均要求计算单元 (i,j,k) 和 $(i,j,k+1)$ 为饱和, 即它们的水头高于它们的顶面标高。但在实际模拟过程中, 有时承压含水层会转变为非承压含水层。这样, 处于非承压态的计算单元的一部分就可能转成非饱和态。下面讨论对这种情况的处理办法。

图29中的含水层系统包括两个含水层和一个弱透水夹层。对该弱透水层的处理可以按前面讨论的准三维办法处理。下面我们讨论相关的渗流计算问题。

假定在下层含水层 $(k+1)$ 中抽水, 导致该单元的水头低于该单元的顶面标高。这时该计算单元就从承压态变为非承压态, 同时上层含水层成了上层滞水含水层。而弱透水层仍处于饱和态。在该弱透水层顶面处的水头为上层含水层的水头 $(h_{i,j,k})$, 而其底面的压力水头为零 (或一个大气压)。所以, 在弱透水层底面处的水头事实上是该点的标高, $TOP_{i,j,k+1}$ 而通过弱透水层的流量为:

$$q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (TOP_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}^m) \quad (56)$$

由于已经假设 $h_{i,j,k+1}$ 低于其顶面标高 $TOP_{i,j,k+1}$, 故此时地下水总是从计算单元 (i,j,k) 向下流入单元 $(i,j,k+1)$ 。但值得注意的是, 此时越流补给量的大小与下层计算单元 $(i,j,k+1)$ 的水位无关。由于公式(56)与MODFLOW中其它流量计算公式的形式有所不同, 在程序中需要特别的处理。如果将公式(56)直接代入公式(54), 公式(27)中的系数矩阵则会变成不对称矩阵。这对求解过程会造成困难。为避免这种情况出现, MODFLOW中采用了另一种处理方法。将公式(55)代入公式(54)后, 计算单元 (i,j,k) 和 $(i,j,k+1)$ 之间的流量为:

$$CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m)$$

由于 $h_{i,j,k}$ 大于 $h_{i,j,k+1}$, 故地下水从计算单元 (i,j,k) 流向单元 $(i,j,k+1)$ 。而实际流量应由公式(56)来计算。为获得正确的流量计算, 我们将公式(56)和公式(55)之差用作纠正项, q_c :

$$q_c = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1}^m - TOP_{i,j,k+1}) \quad (57)$$

然后将这个纠正项加在公式(54)的右侧以抵消由于引用公式(55)所引起的误差。由于公式(54)与公式(24)等价, 所以这样做实际上相当于在公式(26)的右侧项加上这个纠正项。但

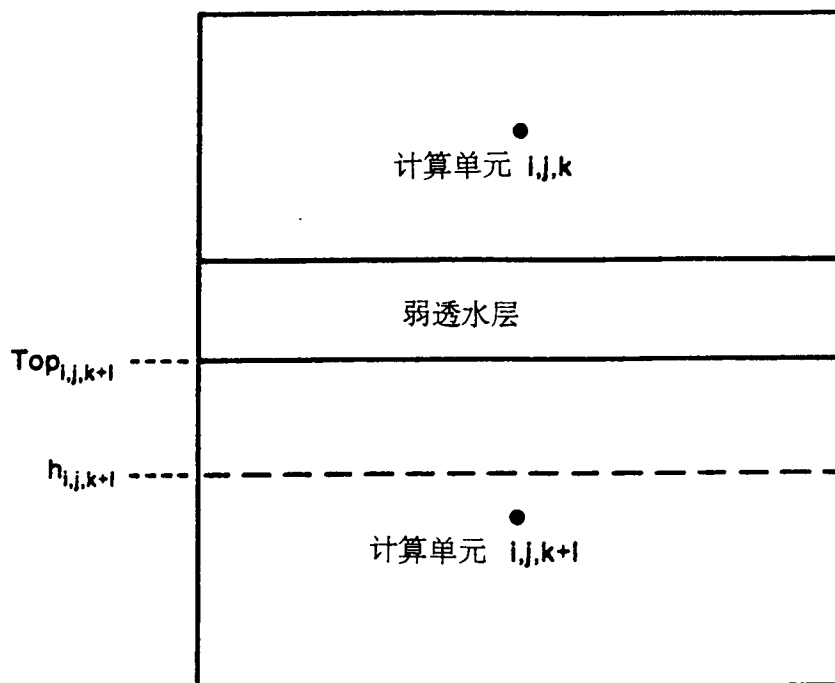


图29. 上层滞水示意图。

这样一来, 公式(26)的右侧项就会出现含有未知水头的项。为解决这一问题, 程序在计算纠正项时用前一次迭代计算得到的水头值 ($h_{i,j,k+1}^{m,n-1}$) 来代替公式(57)中的未知水头项

$h_{i,j,k+1}^m$, 即有:

$$q_{C,n} = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}}(h_{i,j,k+1}^{m,n-1} - TOP_{i,j,k+1}) \quad (58)$$

其中 $q_{C,n}$ 为第 n 次迭代时使用的纠正项;

$h_{i,j,k+1}^{m,n-1}$ 为前一次迭代求得的水头值。

随着迭代过程趋于收敛, $h_{i,j,k+1}^{m,n-1}$ 与 $h_{i,j,k+1}^{m,n}$ 之间的差别也会逐渐减小。当 $n=1$ 时 (即第一次迭代时), $h_{i,j,k+1}^{m,n-1}$ 的值可用初始水头来代替。注意由公式(58)所表示的纠正项是针对计算单元 (i,j,k) 而言的, 而该单元本身并没有出现非饱和带的情况。那么对于出现非饱和现象的计算单元又该怎么办呢?

为便于讨论, 我们将计算单元 (i,j,k) 作为出现非饱和情况的单元, 而假定其上面相邻的计算单元 $(i,j,k-1)$ 的状态没有发生变化。从计算单元 $(i,j,k-1)$ 流向计算单元 (i,j,k) 的流量则为 $CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(h_{i,j,k-1}^m - h_{i,j,k}^m)$ 。但实际流量为 $CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(h_{i,j,k-1}^m - TOP_{i,j,k})$ 。二者之差为

$$q'_C = CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}(TOP_{i,j,k} - h_{i,j,k}^m)$$

其中 q'_C 为纠正项。为编程方便, MODFLOW 将 q'_C 分为两部分并分别加至(26)式的两侧: 将 $CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}$ 加至(26)式左侧的 $HCOF$ 中, 同时将 $CV_{i,j,k-\frac{1}{2}}TOP_{i,j,k}$ 加在(26)式的右侧项 RHS 中。因为 $HCOF$ 是系数矩阵中主对角线上的元素, 所以加上纠正项后不会改变系数矩阵的对称性。

在模拟过程中, 是否要求 MODFLOW 处理上层滞水的情况, 由用户在定义层类型的变量(LAYCON)中说明。有关 LAYCON 的使用方法, 后面将进一步介绍。

贮水系数的处理

根据贮水系数的计算, MODFLOW 将模型层分为两类: 贮水系数为常数和贮水系数可能进行类型转换的模型层。在前一种情况中, 贮水系数仅需要在运算开始时计算一次, 其

数值在整个模拟过程中保持不变；在后面一种情况中，贮水系数的选用将依据含水层的性质，承压含水层或非承压含水层而定。因为在实际工作中，一个承压含水层可能由于抽水而转变为非承压含水层，或一个非承压含水层由于注水而转变成为承压含水层。含水层是否承压，含水层物质释放或吸收地下水的方式及数量都是不相同的。用户可以通过数组 LAYCON 定义模型中各层的性质。

当贮水系数为常数时，公式(24)或(54)中贮水项的计算比较简单：直接使用由用户输入的贮水系数，并按下式求得贮水项：

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = SS_{i,j,k} (\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k) \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}} \quad (60)$$

式中 $\frac{\Delta V}{\Delta t}$ 表示计算单元(i,j,k)中地下水在单位时间内的变化量； $SS_{i,j,k}$ 为贮水率 (L^{-1})；

$\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k$ 为计算单元的体积； $h_{i,j,k}^m$ 为时间段 t_m 结束时的水头， $h_{i,j,k}^{m-1}$ 为时间段 t_m 开始时的起始水头。在(26)式中，用了另一种形式来表示贮水项： $SC1_{i,j,k} = SS_{i,j,k} (\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k)$ 。

在MODFLOW中，这一项称之为计算单元(i,j,k)的贮水量或第一类贮水量(primary storage capacity)。后面在讨论贮水系数的转换时，我们还将引入第二类贮水系数 (secondary storage capacity)的概念。根据贮水量的定义，计算单元(i,j,k)中贮水量的变化率为：

$$SC1_{i,j,k} (h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}) / (t_m - t_{m-1})$$

上式可以分解为两部分， $SC1_{i,j,k} h_{i,j,k}^m / (t_m - t_{m-1})$ 加入公式(26)左侧的HCOF中，而将其余部分加到(26)式的右侧项RHS之中。

在BCF子程序包的输入数据中，应包括模型各层的贮水系数（无量纲数）。对于一个承压含水层而言，贮水系数为贮水率与该层厚度的乘积。而对于一个潜水含水层来说，用户应输入潜水含水层的给水度。这里应当注意，给水度是无量纲数，与含水层饱和厚度无关。MODFLOW逐层读入由用户提供的给水度或贮水系数，并存入数组SC1之中。

贮水系数的转换

如果在模拟过程中，某计算单元的水头要么保持高于顶板标高，要么保持低于顶板标高，则无须进行贮水系数的转换，计算中可直接使用SC1的值。但当含水层的性质由于水

头的变化而发生变化, 即由承压态变为非承压态或由非承压态转变为承压态时, 则应当进行贮水系数的转换并选用正确的贮水系数或给水度。是否进行这种转换, 则要看用户如何定义含水层的类型。如果用户估计这种转换发生的可能性较大, 则应要求MODFLOW在运算过程中, 检查含水层的类型。同时用户还应当提供第二类贮水系数。在这种情况下, 第一类贮水量将用于含水层处于承压态时的计算。 $SC1_{i,j,k}$ 为承压含水层的贮水系数与计算单元面积的乘积; 而第二类贮水量, $SC2_{i,j,k}$, 应当为给水度与计算单元面积的乘积, 用于含水层处于非承压态的计算。贮水系数和给水度的值均由用户按二维数组逐层输入, 由程序读入并与计算单元面积相乘, 然后分别存入SC1和SC2两个数组中。用户应当仔细, 不要将这两组贮水系数弄混了。

下面介绍MODFLOW如何进行贮水系数的转换。对于允许类型转换的含水层, 其贮水量的变化可表示为:

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{SCB(h_{i,j,k}^m - TOP_{i,j,k}) + SCA(TOP_{i,j,k} - h_{i,j,k}^{m-1})}{t_m - t_{m-1}} \quad (61)$$

式中 $\frac{\Delta V}{\Delta t}$ 为单位时间内计算单元(i,j,k)内由于贮水量的变化而引起的水量变化。 SCA 表示计算单元(i,j,k)在时间段 m 开始时的贮水能力, 而 SCB 表示该单元“目前”的贮水能力。如果在时间 t_{m-1} 时水头 $h_{i,j,k}$ 高于或等于该单元顶面标高, 则含水层处于承压态。这时 SCA 的值等于 $SC1_{i,j,k}$ 。如果经过数次迭代后, 计算的水头仍高于或等于顶板标高, 则 SCB 的值也等于 $SC1_{i,j,k}$, 即含水层仍处于承压态。这种情况下, 公式(61)与公式(60)等价。

但如果经过若干次迭代后, 计算的水头低于顶面标高, 含水层由承压态转变为非承压态(图30)。这时 SCB 使用 $SC2_{i,j,k}$ 的值(即给水度与单元面积的乘积)。在这种情况下, 含水层释放的水量实际上包括两部分:

- (1)弹性释放: $SC1_{i,j,k}(TOP_{i,j,k} - h_{i,j,k}^{m-1})/(t_m - t_{m-1})$
- (2)重力释放: $SC2_{i,j,k}(h_{i,j,k}^m - TOP_{i,j,k})/(t_m - t_{m-1})$

如果在某时间段 m 开始时含水层就处于非承压态, 则(61)式中 SCA 等于给水度 $SC2_{i,j,k}$ 。在迭代过程中, 只要计算的水头低于该单元之顶面标高, 含水层仍处于非承压态, SCB 的值也将等于给水度 $SC2_{i,j,k}$ 。这时, 公式(61)与(60)等价。如果经过若干次迭代计算后, 发现水头高于该单元的顶面标高, 则含水层的类型发生了转变: 由非承压态变为承压态。这时

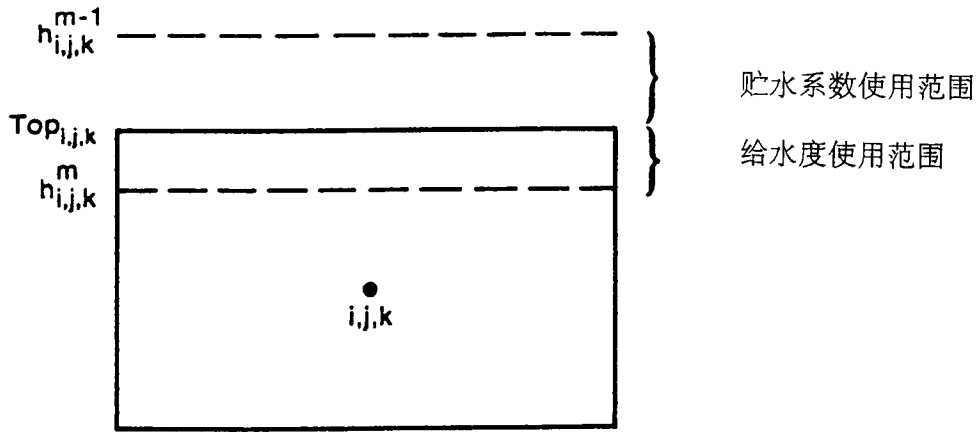


图30. 贮水系数/给水度转换示意图。

SCB 的值则等于 $SC1_{i,j,k}$ (贮水系数与单元面积之乘积) 同样, 这时由计算单元所吸收的水量也包括由弹性贮存和重力贮存两部分。

对于有可能发生含水层类型转变的计算单元, $MODFLOW$ 将在每次迭代开始之前检查上次迭代所计算的水头与该单元的顶面标高以确定是否进行贮水系数/给水度的转换。这样做, 从理论上来说更为符合实际。但同时也产生了非线性问题, 故可能造成求解上的困难。当然, 由于计算量的增加, 也会增加程序的运行时间。

为计算和程序编写方便起见, 现将公式(61)重写为:

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{SCB}{t_m - t_{m-1}} h_{i,j,k}^m + \frac{SCA(TOP_{i,j,k} - h_{i,j,k}^{m-1}) - SCB * TOP_{i,j,k}}{t_m - t_{m-1}} \quad (62)$$

在计算过程中, 将含有未知项 $h_{i,j,k}^m$ 的部分并入公式(26)中的左侧系数项 $HCOF$, 同时将常数项加入(26)式的右侧项 $RHS_{i,j,k}$ 之中。

特殊处理方式的使用及其局限性

以上共讨论了三种特殊情况的处理方式: 潜水含水层和承压含水层在平面上的水力传导系数 CC 和 CR 的计算; 非饱和带垂向渗流以及贮水系数/给水度的转换。在这些问题的讨论过程中, 我们均假定每个模型分层代表某种含水层或透水体。含水层和透水体之间由弱透水层分开。如果这些假定不成立, 上述的处理方式有可能会造成许多问题, 计算结果的可靠性也将大打折扣。例如, 如果将一个独立的潜水含水层剖分为若干个模型层, 当潜水面下降时可能会切割入数个模型层。这时不仅难于定义贮水系数/给水度, 同时由于可能出现干枯计算单元而影响模拟结果 (参见附录A)。因此, 在使用这些特殊处理方式时, 应当慎重。

输入数据

BCF子程序包需要大量与含水层物质以及透水性有关的数据。这些数据包括: 导水系数、渗透系数、给水度和贮水系数、垂向水力传导率、顶面及底面标高等。所有这些数据均应以二维数组的形式逐层输入。除了这些以外, 计算单元的大小、含水层类型等数据也

由BCF子程序包读入。

MODFLOW根据用户定义的含水层类型(LAYCON)来决定是否以及如何使用前述的特殊处理方法,如水力传导系数是否为常数、是否进行贮水系数/给水度的转换等。由于对这些特殊情况的处理方式不同,MODFLOW所需要的输入数据也不尽相同。

在数据输入过程中,MODFLOW按层从上至下(即从第一层至最后一层)读入数据。这种逐层输入方法比使用三维数组的方式更为简单,且易于检查和修改输入数据。

不论计算单元是有效还是无效计算单元,输入数据都应包括模型中的所有单元。只是对于无效计算单元而言,所赋的值并不用于实际运算。

由于含水层渗透性的各向异性,平面上的导水系数和渗透系数均应按行方向和列方向分别定义。为了减少输入数据量,MODFLOW要求用户对模型每个计算单元在行方向上的导水系数或渗透系数进行定义,同时定义出各层的各向异性比率。MODFLOW则按各层的各向异性比率求出各个计算单元在列方向上的导水系数和渗透系数。每层的各向异性比率只有一个。所以用户在输入数据中以一个一维实型数组定义各层的各向异性比率MODFLOW将这些数据存入数组TRPY。

在垂向上,用户应计算出各计算单元的垂向水力传导率(VCONT)。由于垂向水力传导率(V_{cont} 或 $k_z/\Delta z$)定义为层 k 与其下伏层 $k+1$ 之间的透水能力,故不用给出模型最底层的垂向水力传导率。例如,第一层的 V_{cont} 输入数据实际上是第一层和第二层之间的垂向渗透率。

除了上述数据之外,BCF子程序包读入的数据还包括模型的行距和列距(即:DELX和DELR),稳定流或非稳定流运算标示符(ISS),以及是否存写计算单元间渗流量的标示符(IBCFCB)。如果模拟为稳定流计算($ISS \neq 0$),则MODFLOW不需要读入有关贮水系数/给水度等数据项。故在准备稳定流模拟的数据时,输入文件中不应列含有贮水系数或给水度,否则程序会误读数据。同样,如果含水层类型的定义与实际输入不符,也可能造成程序的输入错误。

MODFLOW将含水层按处理方式分为四种类型。这四种类型的标示符与相应的参数使

用方式列举如下:

含水层类型0 (LAYCON=0): 这一类型多用于模拟承压含水层。当降深与含水层厚度相比不大,且从顶层越流补给量可以忽略不计时,它也可用于模拟非承压含水层。遇到这种类型,程序将不进行任何前面提到的特殊处理。贮水系数、导水系数和垂向水力传导率均在运算过程中保持不变。使用这种类型的含水层时,输入数据包括导水系数、垂向水力传导率(若不是模型之最底层的话)。对于非稳定流计算,还应输入有关给水度的资料。

含水层类型1 (LAYCON=1): 这种类型仅用于单层模型或多层模型之最上层,并且该含水层具有潜水含水层的特征。对于这种含水层,MODFLOW不进行贮水系数/给水度的转换,给水度保持不变。由于这种类型的含水层仅出现于模型的最上层,故不需要进行非饱和带垂向渗流处理。由于潜水含水层的饱和厚度可能随时间发生变化,故MODFLOW需在每次迭代之前重新计算饱和厚度以及导水系数。使用这种类型的含水层时,输入数据包括渗透系数、底面标高和垂向水力传导率(VCONT)。对于非稳定流计算,还应输入有关给水度的资料。这一类型仅用于模型之最顶层,否则将导致运行错误。

含水层类型2 (LAYCON=2): 当被模拟的含水层既具有承压含水层的性质又具有非承压含水层的性质时,常使用这一类型。对于这一类型含水层,MODFLOW将根据需要进行贮水系数/给水度的转换,和非饱和带垂向渗流的处理,但不重新计算水力传导系数。所以只有当整个含水层厚度的大部分始终处于饱和态时才宜于使用这种类型。如果水头变化较大,或饱和厚度仅占含水层厚度一小部分时,使用这一类型将会导致过高估计导水系数(MODFLOW用整个含水层厚度进行导水系数的计算)。由于这种含水层可能发生贮水系数/给水度的转换,故输入数据应包括贮水系数和给水度。同时,为处理非饱和带垂向渗流问题,输入数据中还应包括计算单元的顶面高程。当然,如果不是模型的最底层,输入数据还应包括垂向水力传导率。

[译注:由于这一类型常会过高估计导水系数,故在实际工作中较为少用。]

含水层类型3 (LAYCON=3): 这种类型的含水层用于模拟典型的潜水含水层。与含水层类型1不同的是,这一类型不必是模型的最顶层。对于这一类型MODFLOW将在每次迭代之后重新计算导水系数,并根据水头的变化进行贮水系数/给水度的转换,以及非饱和带垂向渗流的计算。所要求的数据包括渗透系数、底面标高、贮水系数、给水度和顶面标高。如果不是模型的最底层,输入数据还应包括垂向水力传导率。

BCF子程序包是MODFLOW的核心部分。这个子程序包所要求的数据比较多，结构变化也比较大。故用户在准备输入数据时应当格外仔细。

BCF子程序包的输入数据及格式

BCF子程序包所需要的各项数据从由IUNIT(1)所定义的设备号读入。

对每次模拟

由子程序BCF1AL读入的数据包括

1. 数据名称: ISS IBCFCB
输入格式: I10 I10
2. 数据名称: LAYCON (NLAY) (最多80层)
输入格式: 40I2
(如果少于40层, 使用一个记录行; 否则使用两个记录行。)

由子程序BCF1RP读入的数据包括

3. 数据名称: TRPY (NLAY)
输入形式: 一维实型数组
读入子程序: U1DREL
4. 数据名称: DELR (NCOL)
输入形式: 一维实型数组
读入子程序: U1DREL
5. 数据名称: DELC (NROW)
输入形式: 一维实型数组
读入子程序: U1DREL

下列的各项数据按层输入。每层数据均以二维数组的形式输入。数据的种类则取决于含水层的类型 (LAYCON) 以及模拟的性质 (稳定流还是非稳定流)。数据的输入应严格按照规定进行。输入从第一层开始, 向下逐层进行。

对于非稳定流模拟 (ISS=0)

6. 数据名称: sf1 (NCOL, NROW) (贮水系数或给水度)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

如果含水层类型为0或2 (LAYCON=0, 2)

7. 数据名称: Tran (NCOL, NROW) (导水系数)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

如果含水层类型为1或3 (LAYCON=1, 3)

8. 数据名称: HY (NCOL, NROW) (渗透系数)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

9. 数据名称: BOT (NCOL, NROW) (底面标高)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

如果不是最底层

10. 数据名称: VCONT (NCOL, NROW) (垂向水力传导率)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

非稳定流模拟并且含水层类型为2或3 (ISS=0, LAYCON =2, 3)

11. 数据名称: sf2 (NCOL, NROW) (给水度)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

如果含水层类型为2或3

12. 数据名称: TOP (NCOL, NROW) (顶面标高)

输入形式: 二维实型数组

读入子程序: U2DREL

输入数据说明

ISS: 稳定流模拟标示符:

ISS=0 非稳定流模拟

ISS≠0 稳定流模拟

IBCFCB: 流量输出标示符:

IBCFCB>0: MODFLOW使用其值作为流量输出之设备号。输出的内容包括各个计算单元由于贮水量变化而引起的流量, 流入和流出各个定水头计算单元的水量以及计算单元间的渗流量。

IBCFCB=0: 不打印存写输出各流量项。

IBCFCB<0: 打印输出但不存写各流量项。贮水量变化引起的流量和计算单元间渗流量亦不打印。

LAYCON: 含水层类型标识码。每个输入数字表示一个模型层。从第一层开始逐层输入。最多可有80层。对没有使用的层则留为空白。

LAYCON=0: 承压含水层。导水系数和贮水系数均为常数。

LAYCON=1: 非承压含水层。仅用于模型的最上层。导水系数随饱和厚度和渗透系数而变化。贮水系数为常数。

LAYCON=2: 承压/非承压含水层。导水系数为常数。贮水系数和给水度的选用取决于含水层是否处于承压态。当非饱和带出现时, 垂向渗流量的计算需要特别处理。

LAYCON=3: 承压/非承压含水层。导水系数随饱和厚度而变化。MODFLOW通过渗透系数与饱和厚度的乘积来计算导水系数。贮水系数和给水度的选用取决于含水层状态。当非饱和带出现时, 垂向渗流量的计算需要特别处理。

TRPY: 各层之平面各向异性比率。由一维数组形式输入。每层的各向异性比率为一常数。MODFLOW根据各层之各向异性比率求出渗透系数或导水系数沿列方

向的值。对各向同性之含水层，则各向异性比率为1。这个数组中每个值对应模型的一个分层。

- DELR: 沿行方向的列间距。每列一个值。共有NCOL个值。
- DELC: 沿列方向的行间距。每行一个值。共有NROW个值。
- sf1: 第一类贮水系数。仅用于非稳定流计算 (ISS=0)。当LAYCON=1时，其值为给水度或释水率。当LAYCON等于2或3时，其输入值应为承压条件下的贮水系数。LAYCON=0时，sf1的值一般为贮水系数。注意，当降深很小、没有来自上部的越流补给时，含水层类型0也可以用来近似模拟潜水含水层。在这种条件下，sf1的值应该为该层的给水度。
- Tran: 沿行方向的导水系数。仅当LAYCON等于0或等于2时才输入导水系数。
- HY: 沿行方向的渗透系数。仅当LAYCON等于1或等于3时才输入此数据。
- BOT: 含水层底板标高。仅当LAYCON等于1或等于3时才输入此数据。
- VCONT: 垂向水力传导率。其值等于垂向渗透系数与含水层厚度之比。垂向水力传导率指本层与其下伏层之间的水力联系。模型之最底层不需要定义垂向水力传导率。
- sf2: 第二类贮水系数。仅当LAYCON等于2或3，并且非稳定流计算时，才输入此数据。sf2的值为非承压含水层的给水度。仅用于贮水系数与给水度的转换。
- TOP: 含水层之顶板标高。仅当LAYCON等于2或3，才输入此数据。

BCF子程序包输入样单

数据项	说明	输入记录
1	{ISS, IBCFCB}	0 0
2	{LAYCON}	1 3 0
3	{TPRY数组控制记录} {第1、2、3层TRPY的值}	31 1.0 (3F5.0) 1.0 1.0 4.0
4	{DELR数组控制记录}	0 1000.0
5	{DELC数组控制记录} {各行的DELC的值}	31 1000.0 (10F5.0) 2.0 2.0 1.5 1.5 1.5 1.0 1.0 1.0 0.7 0.5
6	{sfl数组控制记录, 第一层}	0 0.2
8	{HY数组控制记录, 第一层}	0 10.0
9	{BOT数组控制记录, 第一层}	0 -100.
10	{VCONT数组控制记录, 第一层}	0 0.005
6	{sfl数组控制记录, 第二层}	0 0.00007
8	{HY数组控制记录, 第二层}	0 40.0
9	{BOT数组控制记录, 第二层}	31 1.0 (12F5.0) -201 -205 -210 -217 -223 -230 -237 -245 -253 -264 -273 -284 -201 -204 -211 -216 -224 -231 -237 -244 -252 -265 -273 -285 -200 -204 -211 -216 -222 -231 -236 -244 -253 -265 -272 -285 -199 -204 -212 -218 -222 -232 -238 -244 -252 -263 -273 -283 -202 -205 -212 -216 -222 -233 -237 -243 -252 -263 -272 -282 -201 -206 -212 -218 -224 -231 -237 -245 -252 -265 -274 -283

第二层底板标高

