

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

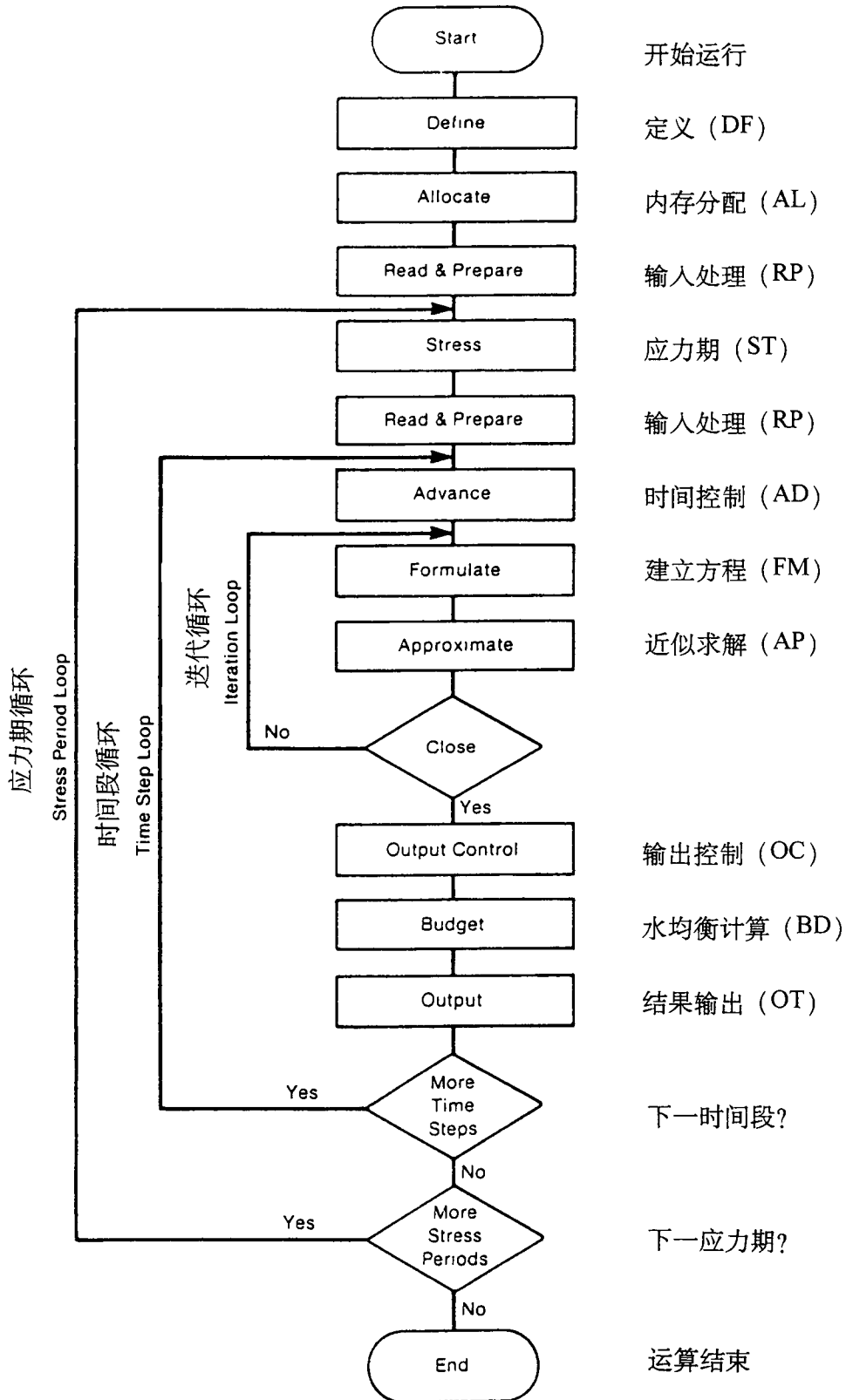


图13. MODFLOW 总框图。

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	
	应力子程序包									
	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

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

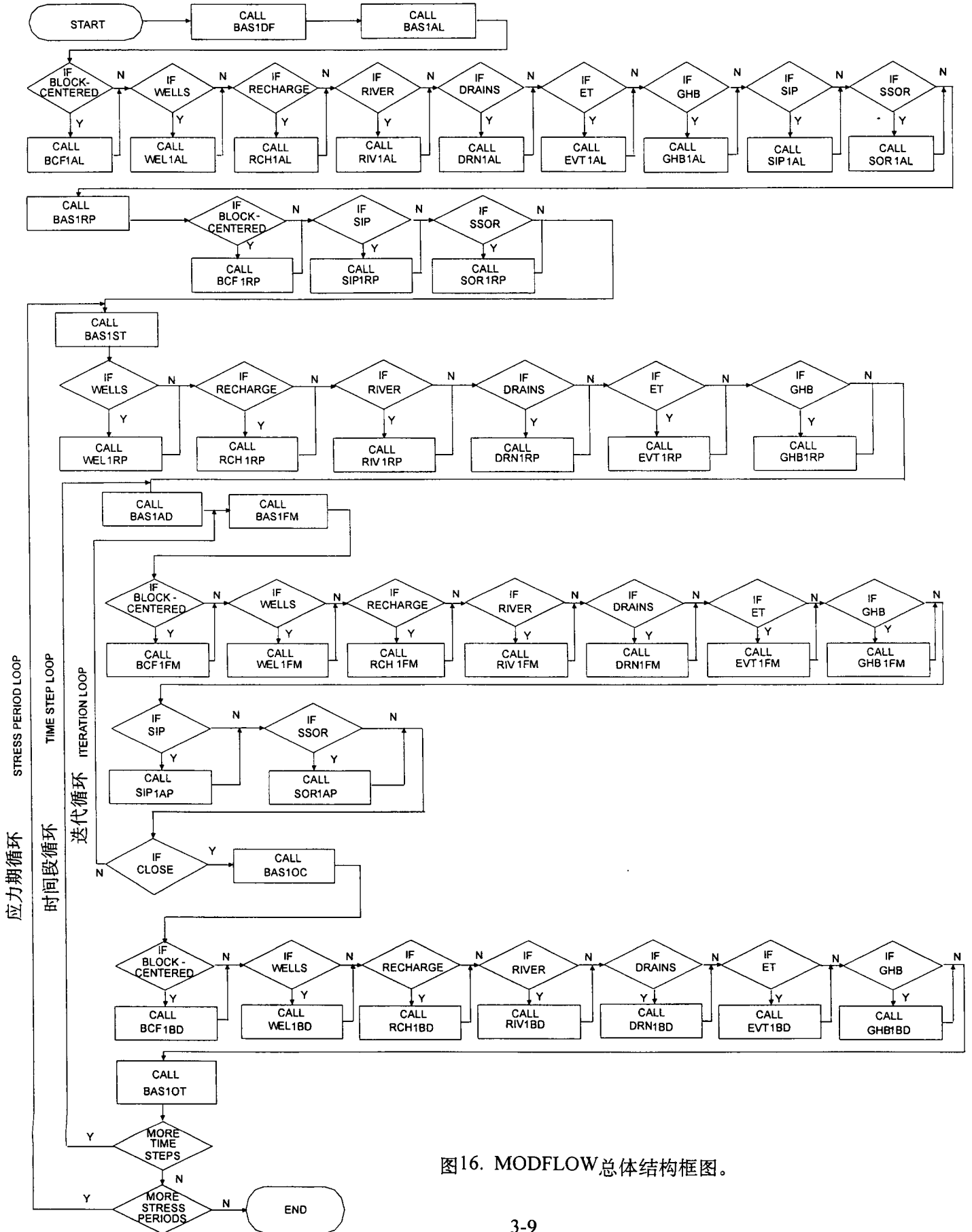


图16. MODFLOW总体结构框图。

若某个计算单元中含有河流段，则由河流子程序包在 $HCOF_{i,j,k}$ 中加上常数 $-P_{i,j,k}$ ；同时在 $RHS_{i,j,k}$ 中加上另一个常数 $-P_{i,j,k}h_s$ 。这里 h_s 为河水水位（同一应力期内为一常数）。对用户所选用的其它外应力子程序包，MODFLOW也依次进行类似的处理。然后，这两个系数数组与三个存贮水力传导系数的数组一同传递给求解子程序包，对整个线性方程组求解。此外，求解时还需要另外两个数组：初始水头数组和边界定义数组。求解子程序包利用 $HCOF$ 的值和三个水力传导系数数组构成公式(26)中的系数矩阵。这样就可以进行迭代运算了。

在MODFLOW中，为便于数据的传递和内存量的估计，这些数组在主程序中均换算为一个一维数组，并称为“X”数组。MODFLOW在读入数据后，将对每个子程序包所使用的内存空间进行计算。X的数组大小预先在程序中设定。当数据量超过X数组的容量时，MODFLOW将打印出相关信息并自动停止运行。此时用户应根据计算机的容量适当增加X数组的容量，并在修改源程序后重新进行编译。[译注：对于FORTRAN77版本，这一步骤有时是相当麻烦的：X数组过大，计算机的物理存贮量不够；如果X数组太小，MODFLOW又无法运行。在FORTRAN90，或FORTRAN77的扩充版中，增加了动态内存分配的功能。用户不必事先定义X数组的大小，而由程序根据计算机的实际物理存贮量进行内存分配。当然，如果模型所包含的数据量太大，超过了计算机的物理存贮量，程序还是无法运行。有兴趣的读者，可以参阅有关编程书籍，对MODFLOW进行修改。]

在这一章的其余部分，我们将介绍边界条件、水均衡计算、内存分配和数据的输入和输出。另外，我们还将对MODFLOW的主程序加以介绍。

模型边界和含水层边界

正如上一章中谈过的，一个模型的结构可以看作是一个由许多计算单元组成并按行、列和层排列成的三维网格。这些计算单元的大小与排列方式由用户定义。在设计模型时，用户首先要确定该模型的行数、列数和层数，也就基本上确定了这个模型的大小。当然，随着对问题的认识逐渐深入，有时我们不得不对模型的设计进行必要的修定，例如增加或减少层数等等。

MODFLOW规定，一个模型的六个侧面均为不透水边界，即所模拟的水文地质体系与外界没有任何水力联系。所模拟的体系与外界的水力联系应通过定水头边界、井、降水及蒸发

等加以体现。如果含水层的不透水边界与模型的外边界一致，则模型的边界本身就可以用作含水层的不透水边界。但如果含水层的不透水边界与模型的外边界不一致，用户则必须利用无效计算单元的设置来表示含水层不透水边界的实际位置。对于定水头边界，则可利用定水头计算单元的设置来表示。但地表补给、蒸发蒸腾则应调用相关的子程序包来模拟。

前面说过，对模型中的每个计算单元，我们都可以写出一个类似于公式(26)那样的有限差分方程。对于定水头计算单元，当然不用如此。但对于与定水头计算单元相邻的变水头计算单元，我们需要考虑该单元与定水头计算单元之间的水力联系。对于无效计算单元和不透水计算单元，我们既不用构造相应的差分方程，也不用考虑流进或流出它们的地下水流量。值得注意的是，不透水计算单元与无效计算单元在运算中的效果虽然一样，但它们所代表的意义是不相同的。

出于程序编写的考虑，一个模型总是具有三维立方体的形状。如果含水层的形状为不规则，则模型中可能包含有许多位于含水层边界之外的计算单元。在模型的设计时，可以利用无效计算单元的设置将边界之外的计算单元排除于计算之外。在第二章中，我们已通过例子说明了这一点。在那个例子中，我们用定水头计算单元来代表第一类水文地质边界，利用不透水计算单元与注水井来表示第二类水文地质边界。如果边界条件是水头的函数，可以使用在第11章中介绍的通用水头边界子程序包(GHB)或第6章中介绍的河流子程序包(RIV)来处理。使用GHB和RIV子程序包均要求预先确定水位以及水力传导系数，它们应由实际工作情况来确定。

在MODFLOW中，一个三维整型数组 (IBOUND) 用来定义计算单元的属性：定水头计算单元、无效计算单元（不透水计算单元）和变水头计算单元。该数组中的每一元素与模型中的一个计算单元相对应。对计算单元的规定如下：

定水头计算单元	$IBOUND(i, j, k) < 0$
不透水和无效计算单元	$IBOUND(i, j, k) = 0$
变水头计算单元	$IBOUND(i, j, k) > 0$

这个数组的内容由用户预先准备。在迭代运算过程中，程序仅对变水头计算单元进行求解。值得注意的是，在这三类计算单元中，变水头计算单元的性质可能在计算过程中发生变化。当一个变水头计算单元的导水系数在迭代过程中变为零时，MODFLOW将会把这个单元的属性重新定义为无效计算单元。此外，当一个计算单元中的水头低于该单元底面标高时，

该单元则处于非饱和状态。MODFLOW也会重新定义这个单元为不透水计算单元。这种现象常称为“干枯单元”(dry cell)。它是一个比较难以解决的技术问题。

水均衡计算

对于一个确定的空间区域，水均衡指流入和流出该区域的各项地下水渗流量之和。MODFLOW中，水均衡各项的计算均是以体积为单位进行的。严格地讲，这里讲的水均衡并不等于物质平衡，尽管人们常常将物质平衡与体积平衡看作是一回事。由于在我们所讨论的范围内，地下水的密度变化很小，所以质量的均衡可以近似看作为体积的均衡。

MODFLOW在每一个应力期结束时都要进行水均衡的计算，并将其结果打印出来供用户参考。用户可以根据水均衡的情况来检查模拟计算的质量，同时对整个模型的设计、数据输入、程序运行情况有所了解。

对有限差分方程组联立求解所获得的结果并不能保证其正确性。特别是在使用迭代法求解时，迭代过程可能在得到足够接近于收敛指标时就停止了。水均衡是对计算结果的可信度的一个重要测量指标。有限差分方程是依据水流的连续性方程建立起来的，所以流进和流出一个地下水系统的水量总和应能满足连续性原则：总流入量和总流出量之差等于贮水量的变化量。

在MODFLOW中，水均衡的计算与求解无关。所以水均衡可以用作对水头计算结果质量的一种独立检验。在MODFLOW的每个子程序包中，都有一个子程序专门用来计算该子程序包对水均衡的贡献。在输出文件中所列出的水均衡收支表是将模型作为一个整体来计算的。例如，流入和流出所有河流计算单元的总流量，流入和流出所有定水头计算单元的流量等。对于诸如水井流量这样由用户定义的常数，MODFLOW则直接根据输入的数据进行水均衡计算。如果模拟是非稳定流，贮水量的变化也将在水均衡收支表中列出。当贮水量增加时，表明地下水由运动形式转化为存贮形式；而当贮水量减少时，表明地下水由贮存形式转化为运动形式。无论如何变化，贮水量的变化直接反映了地下水不同形式之间的数量转换。

当一个时间段结束时，每个所选用的与地下水渗流有关的子程序包都将计算在这个时间段内该子程序包对整个系统的影响。由各个子程序包计算的各项流入量和流出量，均存入一个称为VBVL的数组。多数子程序包仅仅计算全部水均衡中的一部分，但BCF子程序包需要计

算出定水头计算单元和贮水量变化对水均衡的贡献。除了流量计算之外，在每个时间段结束时，MODFLOW还将由流量和时间的乘积求出流入和流出整个体系的地下水总量。从模拟开始时刻到当前时刻的累积总量也存入数组VBVL之中。

基本子程序包(BAS)中的子程序SBAS1V根据要求，利用VBVL中的流入量、流出量和累积量，将结果输出打印为水均衡收支表。相对于地下水水流系统，贮水量的增加意味着地下水离开水流系统，故被看作为流出量。同理，贮水量的减少标志着地下水水流的增加，因而列为流入量。此外，MODFLOW还将根据总流入量和流出量计算水均衡相对误差。用百分数表示，其计算公式如下：

$$D = \frac{100(IN - OUT)}{(IN + OUT)/2}$$

式中IN为总流入量，OUT为总流出量，D为相对误差(%)。当计算结果比较理想时，相对误差的值应当很小。[译注：虽然无法给出一个绝对指标来衡量计算结果的好坏，但一般来说D的绝对值应当小于1%，而且应当随着模拟时间的增加呈现出下降的趋势。]通常每个应力期结束时流量水均衡情况可以对该应力期内模型的表现进行评估；而累积水均衡量可以作为对整个模拟过程的质量评估的指标。无论用户是否要求，MODFLOW都将在每个应力期结束时打印出水均衡收支表。

在很多情况下，我们希望知道模型中一部分的地下水流入流出量。为了达到这个目的，MODFLOW可以按照要求将流入、流出每个计算单元的地下水渗流量存入一个特别的输出文件。用户可按需要对这个文件进行处理，计算出局部水均衡。在MODFLOW中，计算单元之间的地下水渗流量称为cell-by-cell flow。计算单元间的流量可以有四种形式：(1)由外应力引起的计算单元间流量，即由于外部源汇所引起的流量，如水井注水量，降水补给量等；(2)由于贮水量的变化而引起的计算单元间流量；(3)由于定水头计算单元引起的计算单元间流量；(4)计算单元之间的流量。如果想要MODFLOW将这些信息存入文件，用户必须在输入文件中预先说明。在基本子程序包的输出控制部分中有一个称为ICBCFL的选择项，它控制着整个时间段长结束时是否将计算单元间的流量存盘。另外，在每个与地下水流动有关的子程序包的输入文件中，也有一个类似的选择项，用以决定该子程序包计算的单元间流量是否存盘。例如，在蒸发蒸腾子程序包中的该项如果被选用，则每个时间段内由于蒸发蒸腾所引起的计算单元间流量将输出存盘。当然，与此同时，基本子程序包中的ICBCFL也必须正确选择。是否输出存入文件，则由BCF子程序包输入文件中的IBCFB项单独控制。

值得注意的是, MODFLOW仅将计算单元间流量和各个外应力引起的流量存入文件。这并不包括水均衡计算所用的水体积或累积体积等信息。另外, MODFLOW总是假定这些流量的单位与其它输入数据的单位一致。单元间流量以无格式形式存入指定文件,以节省存贮空间。

某计算单元中的单元源汇渗流指由于外部源汇的存在所引起的流入或流出量。例如,在计算单元(i,j,k)中,单元间蒸发流量即为由于蒸发作用所致、从该单元丧失的水量。流入某计算单元的流量为正,反之为负。如果用户要求,MODFLOW将把各个外应力子程序包所产生的地下水渗流量写入文件。在这个文件中,每项外应力子程序包的输出都占有同样的空间,并按一定的顺序排列。各个外应力子程序的输出都以三维数组的形式写入文件。若某一外应力子程序在计算单元(i,j,k)处的流量为零或不存在,MODFLOW均以“零”写入输出文件。当模型包含单元较多时,这个无格式文件可能会占相当多的存贮空间。

在非稳定流的情况下,计算单元由于贮水量变化而引起的流量记录了模型中各个计算单元的贮水量的变化。由存贮量释出的流量为正,反之为负。

定水头计算单元中的定水头流量是指进入或离开该单元的流量。这一项总出现于定水头计算单元内部,而与其它因素无关。若某一个定水头计算单元与六个变水头计算单元相邻,则定水头流量为该单元与其相邻之变水头计算单元之间的流量之和。当净流量为正数时,表明地下水从该定水头计算单元流出,进入模型。而当净流量为负时,表明地下水由其相邻之变水头计算单元进入该定水头计算单元。例如一个定水头计算单元表示一个具有固定水位的地表水体,当该单元的流量为正时,说明含水层获得补给。注意,当河流、沟渠等外部源汇与一个定水头计算单元相重叠时,这些源汇的存在并不能改变定水头计算单元的水头值,故其流量不列入计算。

计算单元之间的流量指通过一个计算单元之六个界面上的流量。按用户要求,程序还可由BCF子程序包将通过每个变水头计算单元之三个界面上的流量输出存入文件。通过这三个界面上的流量分别称为:正面流量(front,即计算单元i,j,k和i+1,j,k之间的流量),右面流量(right,即单元i,j,k和i,j+1,k之间的流量)和底面流量(bottom,即单元i,j,k和i,j,k+1之间的流量)。另外三个界面上的流量很容易由这三个界面上的流量获得。当地下水沿行、列和层数增加的方向流动时,其流量为正,反之为负。在实际工作中,我们可利用这些单元间流量计算流入或流出模型中一部分区域的地下水流量或用它们建立流场矢量。

理论上，我们可以根据计算单元之间的流量计算水均衡，但实际上这并不一定可行。因为在某些情况下，MODFLOW计算水均衡的求和方法有所不同。在计算单元间流量计算时，同一单元可能包含有同一类型的数项流量。MODFLOW仅将它们累加求和并输出。但在水均衡计算中，我们则希望将流入量和流出量分别列出。所以用逐个计算单元的流量求和所得到的总流入量和总流出量可能会与水均衡计算所得到的结果有所不同。但由这两种方法得到的总流入量和总流出量应当相同。

内存分配

前面已经提到，MODFLOW中使用了一个一维实型数组“X”来存贮程序运行时所使用的实型变量数据。MODFLOW将所有三维实型数组换算为一维数组的形式，依次存入该X数组。在每个子程序包中，都有一个专门的子程序为该子程序包所使用的数据进行内存分配。注意，这里所说的内存分配并不是指计算机存贮器按地址定义的内存分配，而是指各个数组在X数组中的位置和长度。一维数组X的大小预先在MODFLOW之源程序中确定。实际使用X数组的情况则取决于一个模型的大小和复杂程度。一般来说，X数组至少应为模型中所包含的计算单元数目的10~20倍。通常X数组按计算机的实际存贮能力来确定，这样用户就不必对每个模型进行源程序修正。在主程序的起始部分，有两个语句可用来定义或修正X数组的长短。首先定义一个正整数LENX（如令LENX=300,000）；然后定义X数组：

```
COMMON X(LENX)
```

当一个模型所要求的内存量大于LENX时，MODFLOW会打印出错误信息并自动停止运行。此时用户应根据所使用的计算机的容量（主要指计算机的随机存贮器RAM）的大小重新定义LENX并重新对MODFLOW进行编译。[译注：如果用户使用FORTRAN77的扩充版或者FORTRAN90，则可以将X数组按动态内存分配（dynamically allocable memory）的方式进行定义。这在很大程度上解决了估计内存容量的问题。]

三维数组下标的定义

在讨论过程中，我们采用通常的数组下标顺序，用i,j,k来表示一个计算单元的位置。但从计算单元的角度来看，这种下标记法并非最优的选择。数组下标的顺序决定了数组在计算机

内存贮的方式。为了提高运算速度，MODFLOW中采用了列一行一层的顺序（即j,i,k）来确定一个计算单元的下标。所以在源程序中，一个计算单元的下标表示为(J,I,K)而不是(I,J,K)。[译注：在阅读MODFLOW之源程序时应记住这一点。特别是在自己编写程序对MODFLOW的结果进行处理时，当心不要把行和列的顺序弄反。]

数据输入

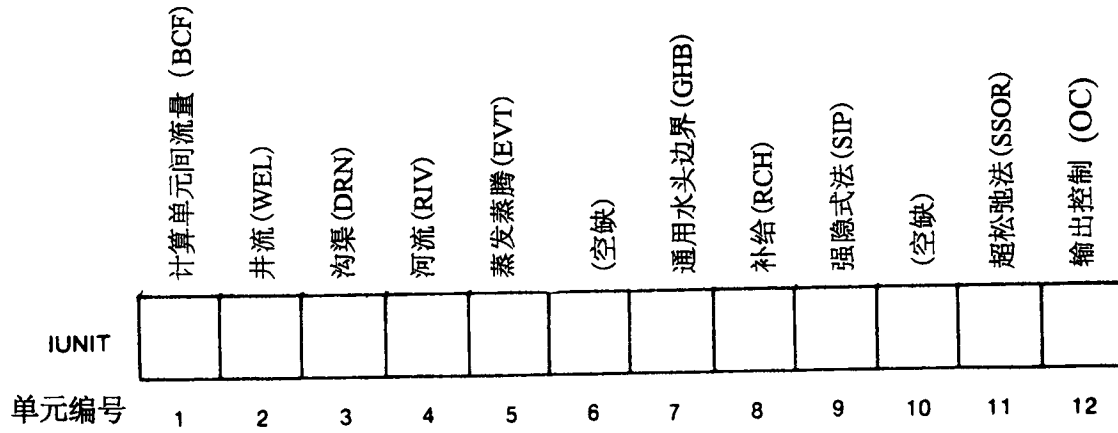
MODFLOW在运行时，需要读取输入数据和运行操作指令。实际上，MODFLOW所需要的所有数据和指令均通过输入文件（files）读入。按照FORTRAN的规定，程序通过规定的设备号对所指定的文件进行读和写操作。

正如前面所介绍的，MODFLOW具有模块结构。用户根据需要选用某些模块或子程序包进行地下水模拟计算。除了基本子程序包之外，所有其它子程序包均可视为可选子程序包。MODFLOW还需要一个输入文件对程序的输出内容进行控制。虽然输出控制部分不是一个独立的子程序包，但它是程序运行不可缺少的一部分。BCF子程序包虽然被看作为可选子程序包，但它也是模拟计算过程中不可缺少的一个子程序包。MODFLOW将它划分为可选子程序包是基于它与地下水渗流计算有关的属性。

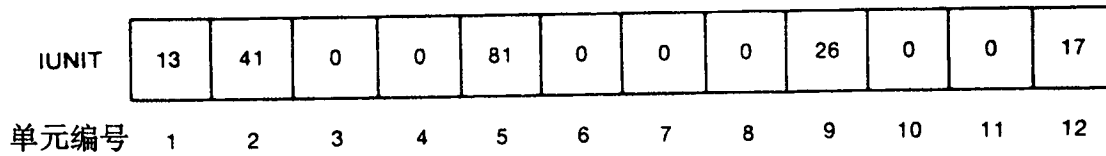
数据输入的第一步是定义选用的子程序包。在基本子程序的输入部分有一个一维整型数组，称为IUNIT（参见图17）。该数组中每三位表示一个单元，共有24个单元。[译注：图17仅显示了IUNIT中前12个单元。]用户可以在这个数组的指定位置输入一个正整数表示该单元所对应的子程序包被选用，而且这个正整数表示所规定的输入文件的设备号。MODFLOW将通过这个设备号由所选用的子程序包读取它所需的输入数据和指令。对不选用的子程序包，则在相对应的单元位置上输入“零”。重申一次，每个单元占三位。通过对IUNIT数组的定义，MODFLOW就可知道哪些子程序包被选用了。例如在图18中，用户没有选用沟渠子程序包。故IUNIT中第3单元（第7~9位）的位置上的输入为零。而在第二单元（第4~6位）的输入为23，表明井流子程序包被选用。程序将通过设备号23读入使用井流子程序包所需要的输入文件。

由于基本子程序包不可缺省，故用户必须准备该子程序包所需要的输入文件。在MODFLOW中，读入基本子程序包的输入文件的设备号规定为1。当然，用户可以通过修改源程序对这个设备号重新定义。

各子程序包在数组IUNIT中的位置



示例



- | | | |
|----|----------------|---------------|
| 1 | BCF | 由第13号设备读入输入文件 |
| 2 | WEL | 由第41号设备读入输入文件 |
| 3 | DRN | 未选用 |
| 4 | RIV | 未选用 |
| 5 | EVT | 由第81号设备读入输入文件 |
| 7 | GHB | 未选用 |
| 8 | RCH | 未选用 |
| 9 | SIP | 由第26号设备读入输入文件 |
| 11 | SOR | 未选用 |
| 12 | Output Control | 由第17号设备读入输入文件 |

图17. 各子程序包在数组IUNIT中的位置及用法示例。

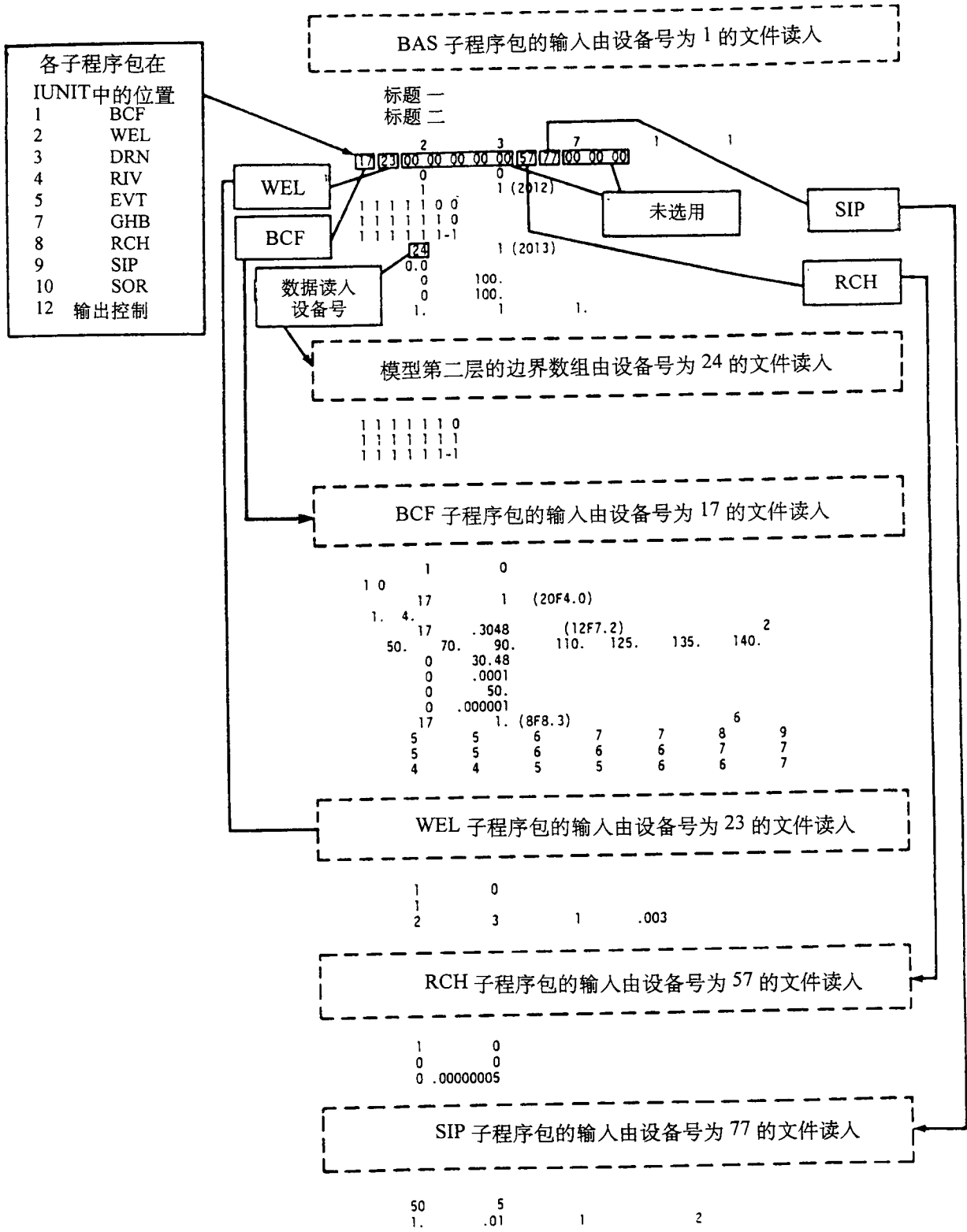


图18. IUNIT的作用示例。

IUNIT数组中的第一单元（第1~3位）必须是用于读入BCF子程序包所需数据的设备号。在现有的MODFLOW中，BCF子程序包用来建立有限差分方程并求计算单元间的地下水渗流量。它是MODFLOW中的一个重要子程序包，实际上也是不可缺省的子程序包之一。

MODFLOW所需要的数据多由一维和二维数组的形式输入。每个数据数组之前必须有一个说明行，用来说明数据的类型、格式等。如果该组数据为常数，则可在这样的说明行中说明，而不必按数组的形式输入。该说明行除表明文件设备号、格式之外，还可能含有是否在输出文件中打印输入数据的指令。在说明行中的文件设备号与IUNIT中的设备号可以相同，也可以不相同。MODFLOW是以IUNIT中的设备号进行文件打开、读入操作的。

MODFLOW的计算可以采用任意时间单位和距离单位。但是，所使用的数据必须在单位上保持一致。例如，当时间单位为天、距离单位为米时，导水系数的单位则必须是米²/天。如果将数据的单位搞错，所得到的结果也将毫无意义。

结果输出控制

MODFLOW需要读入一个用来控制结果输出的输入文件。这部分输入数据主要用来控制结果打印及存盘方式、类型和频率。若欲在某个时间段结束时打印或输出计算的水头值，或打印水均衡各项收支情况，则应在这个输入文件中声明。用户还可以指示程序将水头、降深以及计算单元间的流量等结果存盘以用于其它用途。

输出控制是基本子程序的一部分。用户必须在IUNIT数组中相应的位置上（第12个单元）指定读入输出控制文件的设备号。MODFLOW将在每个时间段结束时通过这个文件读入相应的输出要求。如果IUNIT中第12个单元的位置上的输入为零，MODFLOW则会用一个预先设定的输出方式进行结果输出。依照这种预定的输出方式，所计算的水头和水均衡各项将在每个应力期结束时打印出来并存盘。这里所说的打印，并非由打印设备打印结果，而是将所打印内容写入设备号为6的一个标准输出文件（文本文件）。

主程序

主程序是每个FORTRAN程序的主要部分。MODFLOW的主程序有两个功能：(1)对各个子程序包的执行顺序进行控制；(2)作为各个子程序包之间数据的交换场所。当主程序调用各

子程序包时，同时将所需数据以参数形式送入子程序包。

主程序调用子程序包的顺序已在本章图13中所示的框图中标明。在各个步骤中对子程序的调用可以为任意顺序。但如果所调用的子程序是基本子程序中的一部分，则优先调用该子程序。

主程序按顺序完成下列任务：

1. 确定用于存贮数据的X数组的大小，即定义LENX的值；
2. 设定基本子程序包数据文件输入设备号为1，打印文件（标准输出文件）的设备号为6；
3. 定义模型的行数、列数和层数，应力期数和其它一些可选项；
4. 为各个数组在X数组中分配存贮空间；
5. 如果X数组不足以容纳所有数据，则停止运算并打印错误信息；
6. 读入并处理在模拟过程中与时间变量无关的数据；
7. 在每个应力期中：
 - (a) 读入该应力期的长度等信息；
 - (b) 读入并处理随时间变化的有关数据；
 - (c) 在每个时间段内：
 - (1) 计算当前时间段的长度，并将前一个时间段末的水头值存入初始水头数组；
 - (2) 对有限差分方程组进行迭代求解：
 - a. 构造有差分方程组的各项；
 - b. 计算该方程组的近似数值解；
 - c. 如果达到收敛指标，则停止迭代。
 - (3) 确定输出的内容及方式；
 - (4) 计算水均衡各项，并按要求计算通过三个界面的地下水渗流量；
 - (5) 按要求打印和（或）输出计算的水头和降深值。打印水均衡各项以及当前模拟时间；
 - (6) 如果迭代过程达到最大迭代次数尚未收敛，则停止运算。
8. 程序运行结束。