1 Нестационарное уравнение диффузии-конвекции-реакции для трехмерной расчетной области

1.1 Постановка задачи

Уравнение диффузии-конвекции-реакции:

$$c'_t + uc'_x + vc'_y + wc'_z = (\mu c'_x)'_x + (\mu c'_y)'_y + (\nu c'_z)'_z + f, \tag{1}$$

с граничными условиями:

$$c'_n(x, y, z, t) = \alpha_n c + \beta_n, \tag{2}$$

где u, v, w - проекция вектора скорости на оси координат x, y и z соответственно, f - функция, описывающая интенсивность и распределение источников, μ - горизонтальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена, ν - вертикальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена.

1.2 Построение дискретной модели

Расчетная область вписана в прямоугольный параллелепипед. Для программной реализации математической модели транспорта веществ вводим равномерную расчетную сетку:

$$w_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z, n = \overline{0..N_t - 1}, i = \overline{0..N_x - 1},$$
$$j = \overline{0..N_y - 1}, k = \overline{0..N_z - 1}, (N_t - 1)\tau = l_x, (N_y - 1)h_y = l_y, (N_z - 1)h_z = l_z\},$$

где τ - шаг по временному направлению; h_x, h_y, h_z - шаги по координатным осям пространства; N_t, N_x, N_y, N_z - чмсло узлов расчетной сетки по времени t и пространственным координатам x, y и x соответственно.

Аппроксимация уравнения (1) по временной переменной выполняется на основе схем с весами.

$$\frac{\hat{c} - c}{\tau} + u\bar{c}'_x + v\bar{c}'_y + w\bar{c}'_z = (\mu\bar{c}'_x)'_x + (\mu\bar{c}'_y)'_y + (\nu\bar{c}'_z)'_z + f, \tag{3}$$

где

$\bar{c} = \sigma\hat{c} + (1 - \sigma) \cdot c, \sigma \in [0, 1]$ - вес схемы $(\sigma = 0,5; 0.75; 1)$

$c = c(x, y, z, t)$; $\hat{c} = (x, y, z, t + \tau)$

Ячейки представлены прямоугольными параллелепипедами, которые могут быть заполненными, пустыми или частично заполненными (см. рисунок 1).

Заполненность ячеек: Центры ячеек и расчетные узлы сетки разнесены на $\frac{h_x}{2}, \frac{h_y}{2}, \frac{h_z}{2}$ по координатным направлениям x, y, z соответственно.

Обозначим $O_{i,j,k}$ - степень заполненности объемной ячейки.

Получается, что окрестными ячейками узла i, j, k являются 8 ячеек (см. рисунок 2).

Обозначим эти ячейки через координаты главных диагоналей (т. к. ячейки - это прямоугольные параллелепипеды).

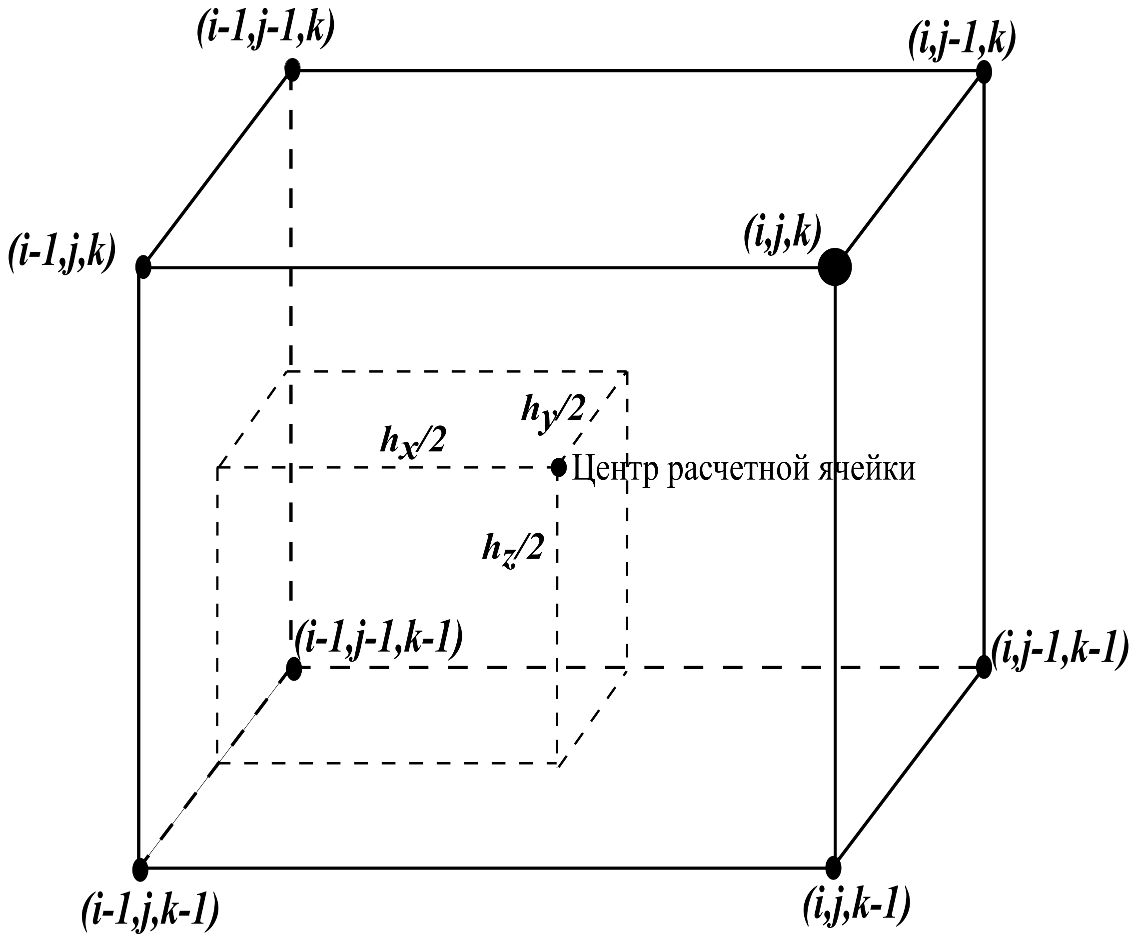

Рис. 1: Вершины объемной ячейки

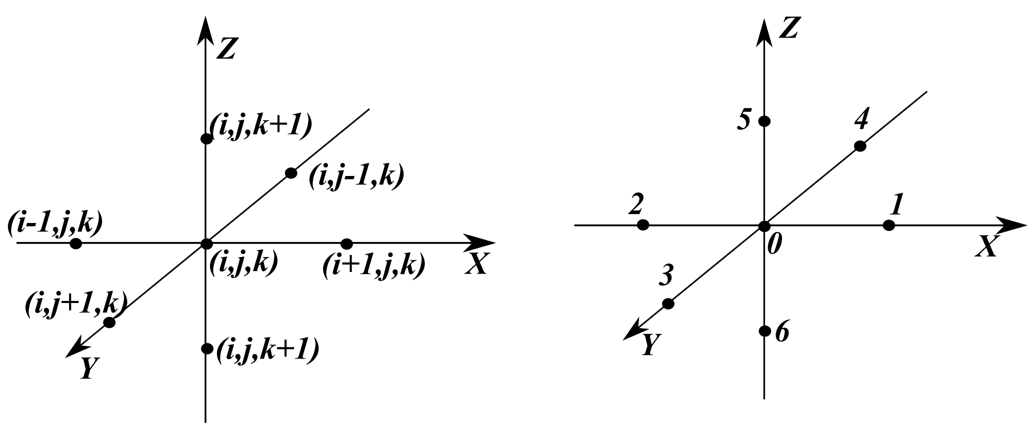

Рис. 2: Разностный шаблон

Внизу:
1) $(i-1, j+1, k-1)$ - (i, j, k)
2) $(i-1, j, k-1)$ - $(i, j-1, k)$
3) $(i, j, k-1)$ - $(i+1, j-1, k)$
4) $(i, j+1, k-1)$ - $(i+1, j, k)$
Вверху:

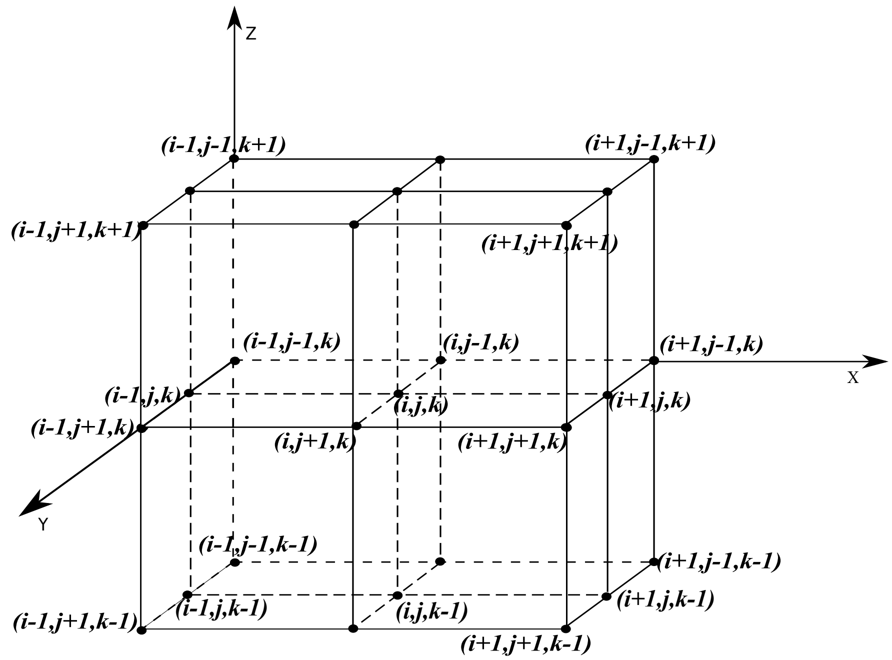

Рис. 3: Параллилепипед с центром i, j, k

1) $(i-1, j+1, k)$ - $(i, j, k+1)$
2) $(i-1, j, k)$ - $(i, j-1, k+1)$
3) (i, j, k) - $(i+1, j-1, k+1)$
4) $(i, j+1, k)$ - $(i+1, j, k+1)$

Читай метод конечных объемов (Рояк)

Для описания геометрии расчетного объема введем коэффициенты $q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6$ заполненности контрольных "объемов" ячейки (i, j, k).

Значение q_i характеризует степень заполненности объема V_i, где $i = \overline{0...6}$.

$$q_0 - V_0 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_6 - V_1 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_k)$$

$$q_5 - V_2 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_k, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_2 - V_3 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_i), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_1 - V_4 : x \in (x_i, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_4 - V_5 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_{j-\frac{1}{2}}, y_j), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

$$q_3 - V_6 : x \in (x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}), y \in (y_j, y_{j+\frac{1}{2}}), z \in (z_{k-\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})$$

Будем называть Ω заполненные части объемов V_m, где $m = \overline{0...6}$. Таким образом, коэффициенты g_m вычисляются по формулам:

$$(q_0)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{8};$$

$$(q_6)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_5)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k}}{4};$$

$$(q_2)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_1)_{i,j,k} = \frac{O_{i+1,j,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i+1,j,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

$$(q_4)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k} + O_{i+1,j,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i+1,j,k+1}}{4};$$

$$(q_3)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j+1,k} + O_{i+1,j+1,k} + O_{i,j+1,k+1} + O_{i+1,j+1,k+1}}{4};$$

Проинтегрируем по объему Ω_0 уравнение (2), воспользуемся свойством линейности интеграла, в результате чего получим:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau}\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} u\overline{c}'_x\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} v\overline{c}'_y\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} w\overline{c}'_z\, dxdydz =$$
$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\overline{c}'_x)'_x\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\overline{c}'_y)'_y\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\overline{c}'_z)'_z\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_0} f\, dxdydz \quad (4)$$

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

$$\iiint\limits_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau}\, dxdydz \simeq (q_0)_{i,j,k} \iiint\limits_{V_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau}\, dxdydz = (q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{c} - c}{\tau} h_x h_y h_z \quad (5)$$

Второй интеграл в формуле (4) принимает вид:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} u\overline{c}'_x\, dxdydz \simeq \iiint\limits_{\Omega_1} u\overline{c}'_x\, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_2} u\overline{c}'_x\, dxdydz$$
$$= (q_1)_{i,j,k} \iiint\limits_{V_1} u\overline{c}'_x\, dxdydz + (q_2)_{i,j,k} \iiint\limits_{V_2} u\overline{c}'_x\, dxdydz$$

Вычислим интегралы по V_1 и V_2:

$$\iiint\limits_{V_2} u\overline{c}'_x\, dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u\overline{c}'_x dx \simeq u_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\overline{c}_{i,j,k} - \overline{c}_{i-1,j,k}}{2} h_y h_z$$

$$\iiint\limits_{V_1} u\bar{c}'_x\,dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u\bar{c}'_x dx \simeq u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_y h_z$$

Следовательно,

$$\iiint\limits_{\Omega_0} u\bar{c}'_x\,dxdydz = (q_2)_{i,j,k}u_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i-1,j,k}}{2}h_y h_z + (q_1)_{i,j,k}u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_y h_z, \qquad (6)$$

где

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{u_{i+1,j,k}+u_{i,j,k}}{2};$$

$$u_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{u_{i-1,j,k}+u_{i,j,k}}{2};$$

Аналогично вычислим

$$\iiint\limits_{\Omega_0} v\bar{c}'_y\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_3} v\bar{c}'_y\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_4} v\bar{c}'_y\,dxdydz$$

$$= (q_5)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_3} v\bar{c}'_y\,dxdydz + (q_4)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_4} v\bar{c}'_y\,dxdydz =$$

$$(q_4)_{i,j,k}\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_j} v\bar{c}'_y dy + (q_3)_{i,j,k}\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{y_j}^{y+\frac{1}{2}} v\bar{c}'_y dy =$$

$$(q_4)_{i,j,k}v_{i,j-\frac{1}{2},k}\frac{\bar{c}_{i,j-1,k}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_x h_z + (q_3)_{i,j,k}v_{i,j+\frac{1}{2},k}\frac{\bar{c}_{i,j+1,k}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_x h_z,$$

где

$$v_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{v_{i,j+1,k}+v_{i,j,k}}{2};$$

$$v_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{v_{i,j-1,k}+v_{i,j,k}}{2};$$

Аналогично вычислим:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} w\bar{c}'_x\,dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_5} w\bar{c}'_x\,dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_6} w\bar{c}'_x\,dxdydz =$$

$$(q_5)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_5} w\bar{c}'_z\,dxdydz + (q_6)_{i,j,k}\iiint\limits_{V_6} w\bar{c}'_z\,dxdydz =$$

$$(q_6)_{i,j,k}\int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_k} w\bar{c}'_z dz + (q_5)_{i,j,k}\int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int\limits_{z_k}^{z_{k+\frac{1}{2}}} w\bar{c}'_z dz =$$

$$(q_6)_{i,j,k}w_{i,j,k-\frac{1}{2}}\frac{\bar{c}_{i,j,k-\frac{1}{2}}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_x h_y + (q_5)_{i,j,k}w_{i,j,k+\frac{1}{2}}\frac{\bar{c}_{i,j,k+\frac{1}{2}}+\bar{c}_{i,j,k}}{2}h_x h_y,$$

где

$$w_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{w_{i,j,k+1} + w_{i,j,k}}{2};$$

$$w_{i,j,k-\frac{1}{2}} = \frac{w_{i,j,k-1} + w_{i,j,k}}{2};$$

Вычислим интеграл, стоящий в правой части формулы (1):

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz$$

Рассмотрим случай: $V_{\Omega 1} > V_{\Omega 2}$, выделим из Ω_1 фрагмент $\Omega_{1,2}$ смежный с областью Ω_2, при этом $V_{\Omega 2} = V_{\Omega 1,2}$

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz = \iiint\limits_{\Omega_1 \setminus \Omega_{1,2}} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz + \iiint\limits_{\Omega_{1,2} \cup \Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz =$$
$$((q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}) \iiint\limits_{V_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz + (q_2)_{i,j,k} \iiint\limits_{V_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz$$

Вычислим инртеграл:

$$\iiint\limits_{V_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x \, dxdydz = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (\mu \vec{c}'_x) \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy$$

Введем замену: $W = \mu \vec{c}'_x$

$$\int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} W \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy = \int\limits_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int\limits_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) dy = (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) h_y h_z$$

Вычислим $W_{i+\frac{1}{2}}$ на отрезке $[x_{i+1}, x_i]$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{W}{\mu} dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \vec{c}'_x dx$$

или

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} W \frac{1}{\mu} dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \vec{c}'_x dx,$$

следовательно, по теореме о среднем

$$W_{i+\frac{1}{2}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \vec{c}'_x dx,$$

следовательно, $W_{i+\frac{1}{2}}$ вычисляется в точке $x_{i+\frac{1}{2}}$, так как считаем, что функция $W(x)$ - линейная. В противном случае, это будет не середина отрезка $[x_{i+1}, x_i]$.

Поделим обе части равенства на $\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu}$ и получим:

$$W_{i+\frac{1}{2}} = \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu}\right)^{-1} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \bar{c}'_x dx,$$

проинтегрируем $\bar{c}'_x$ и получим

$$W_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{\mu}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}} x \Big|_{x_i}^{x_{i+1}}} = \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{\frac{1}{\mu_{i+\frac{1}{2}}}(x_{i+1} - x_i)} = \mu_{i+\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i+1} - \bar{c}_i}{h_x},$$

где $h_x = x_{i+1} - x_i$.

Теперь вычислим $W_{i-\frac{1}{2}}$ на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$.

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{W}{\mu} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \bar{c}'_x dx$$

Вычисления для $W_{i-\frac{1}{2}}$ выполняем аналогично, как для $W_{i+\frac{1}{2}}$. Поэтому получим:

$$W_{i-\frac{1}{2}} = \mu_{i-\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_{i-1}}{h_x}$$

В результате получим:

$$\iiint\limits_{V_0} (\mu \bar{c}'_x)'_x \, dxdydz = (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) h_y h_z =$$
$$\left(\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k})}{h_x} - \mu_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k})}{h_x}\right) h_y h_z$$

Вычислим интеграл по V_1:

$$\iiint\limits_{V_1} (\mu \bar{c}'_x)'_x \, dxdydz = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\mu \bar{c}'_x)'_x dx = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \mu \bar{c}'_x \Big|_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy =$$
$$\left(\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_x} - \mu_{i,j,k}(\alpha_x \bar{c}_{i,j,k} + \beta_x)\right) h_y h_z$$

Граничные условия: $c'_n(x, y, t) = \alpha_n \cdot c + \beta_n$

В интеграле по объему V_1 учитываются граничные условия.

$$\int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\mu \bar{c}'_x)'_x dx = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} (\mu \bar{c}'_x) \Big|_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dy =$$
$$\left(\mu \bar{c}'_x \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} - \mu \bar{c}'_x \Big|_{x_i}\right) h_y h_z = \left(\mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_x} - \mu_{i,j,k}(\alpha_x \bar{c}_{i,j,k} + \beta_x)\right) h_y h_z$$

Здесь обозначим $A = \mu \bar{c}'_x \Big|_{x_i}$

Слагаемое A для внутренних узлов будет выглядеть так:
$A = \mu_{i,l,k} \cdot \bar{c}_{i,j,k}$
Для граничных узлов:
$A = \mu_{i,l,k} \cdot (\alpha\bar{c}_{i,j,k} + \beta)$
Т.о., приведя подобные при сложении вычесленных интегралов по V_0 и V_2, получим:

$$\iiint\limits_{\Omega_0} (\mu\bar{c}'_x)'_x \, dxdydz = ((q_1)_{i,j,k} \cdot \mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_x} - (q_2)_{i,j,k} \cdot \mu_{i-\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{h_x} - ((q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}) \cdot \mu_{i,j,k}(\alpha_x\bar{c}_{i,j,k} + \beta_x)) \cdot h_y h_z \quad (7)$$

В случае $S_{\Omega_2} > S_{\Omega_1}$ результат аналогичен.
Т.о., уравнение (4) с учетом уравнение (5), (6), (7) запишем в следующем виде:

$$\begin{gathered}
(q_0)_{i,j,k}\frac{\hat{c} - c}{\tau}h_x h_y h_z + (q_1)_{i,j,k}u_{i+\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} \cdot h_y h_z + (q_2)_{i,j,k}u_{i-\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{2} \cdot h_y h_z \\
+ (q_3)_{i,j,k}v_{i,,j+\frac{1}{2},k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j+1,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} \cdot h_x h_z + (q_4)_{i,j,k}v_{i,,j-\frac{1}{2},k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i,j-1,k}}{2} \cdot h_x h_z + \\
(q_5)_{i,j,k}w_{i,,j,k+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k+1} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} \cdot h_x h_y + (q_6)_{i,j,k}w_{i,,j,k-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i,j,k-1}}{2} \cdot h_x h_y = \\
((q_1)_{i,j,k} \cdot \mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_x} - (q_2)_{i,j,k} \cdot \mu_{i-\frac{1}{2},j,k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{h_x} - \\
|(q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot (\alpha_x \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \beta_x))h_y h_z + \\
((q_3)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j+\frac{1}{2},k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j+1,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_y} - (q_4)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j-\frac{1}{2},k} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i,j-1,k}}{h_y} - \\
|(q_3)_{i,j,k} - (q_4)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot (\alpha_y \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \beta_y))h_x h_z + \\
((q_5)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k+1} - \bar{c}_{i,j,k}}{h_z} - (q_6)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i,j,k-1}}{h_z} - \\
|(q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k}| \cdot \nu_{i,j,k} \cdot (\alpha_z \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \beta_z))h_x h_y + (q_5)_{i,j,k} \cdot f_{i,j,k}h_x h_y h_z \quad (8)
\end{gathered}$$

Разделим уравнение (8) на объем ячейки $h_x h_y h_z$, получим дискретный аналог уравнения диффузии-конвекции-реакции (1) с граничными условиями третьего рода:

$$(q_0)_{i,j,k}\frac{\hat{c}-c}{\tau}+(q_2)_{i,j,k}\cdot u_{i+\frac{1}{2},j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2h_x}+(q_1)_{i,j,k}\cdot u_{i-\frac{1}{2},j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i-1,j,k}}{2h_x}+$$
$$(q_4)_{i,j,k}v_{i,,j+\frac{1}{2},k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j+1,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{2h_y}+(q_3)_{i,j,k}v_{i,,j-\frac{1}{2},k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i,j-1,k}}{2h_y}+(q_6)_{i,j,k}w_{i,,j,k+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k+1}-\bar{c}_{i,j,k}}{2h_z}+$$
$$(q_5)_{i,j,k}w_{i,,j,k-\frac{1}{2}}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i,j,k-1}}{2h_z}=((q_2)_{i,j,k}\cdot\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i+1,j,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{h_x^2}-(q_1)_{i,j,k}\cdot\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i-1,j,k}}{h_x^2}-$$
$$|(q_2)_{i,j,k}-(q_1)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{(\alpha_x\cdot\bar{c}_{i,j,k}+\beta_x)}{h_x})+((q_4)_{i,j,k}\cdot\mu_{i,j+\frac{1}{2},k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j+1,k}-\bar{c}_{i,j,k}}{h_y^2}-$$
$$(q_3)_{i,j,k}\cdot\mu_{i,j-\frac{1}{2},k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}-\bar{c}_{i,j-1,k}}{h_y^2}-|(q_4)_{i,j,k}-(q_3)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{(\alpha_y\cdot\bar{c}_{i,j,k}+\beta_y)}{h_y})+$$
$$((q_6)_{i,j,k}\cdot\mu_{i,j,k+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k+1}-\bar{c}_{i,j,k}}{h_z^2}-(q_5)_{i,j,k}\cdot\mu_{i,j,k-\frac{1}{2}}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k-1}-\bar{c}_{i,j,k}}{h_z^2}-$$
$$|(q_6)_{i,j,k}-(q_5)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{(\alpha_z\cdot\bar{c}_{i,j,k}+\beta_z)}{h_z})+(q_0)_{i,j,k}\cdot f_{i,j,k} \quad (9)$$

Т.о., получим дискретные аналоги операторов конвективного и диффузного переноса в случае частичной заполненности ячеек:

$$(q_0)_{i,j,k}\cdot uc'_x\simeq(q_1)_{i,j,k}u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i+1,j,k}-c_{i,j,k}}{2h_x}+(q_2)_{i,j,k}u_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i,j,k}-c_{i-1,j,k}}{2h_x}$$

$$(q_0)_{i,j,k}\cdot(\mu c'_x)'_x\simeq(q_1)_{i,j,k}\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i+1,j,k}-c_{i,j,k}}{h_x^2}-(q_2)_{i,j,k}\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i,j,k}-c_{i-1,j,k}}{h_x^2}-$$
$$|(q_1)_{i,j,k}-(q_2)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{(\alpha_x\cdot\bar{c}_{i,j,k}+\beta_x)}{h_x}$$

В случае внутреннего узла (ячейка заполнена полностью) $q_0=1, q_1=q_2=1$, следовательно, дискретные аналоги операторов конвективного и диффузного переноса запишем в виде:

$$uc'_x=u_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i+1,j,k}-c_{i,j,k}}{2h_x}+u_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i,j,k}-c_{i-1,j,k}}{2h_x}$$

$$(\mu c'_x)'_x=\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i+1,j,k}-c_{i,j,k}}{h_x^2}-\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}\frac{c_{i,j,k}-c_{i-1,j,k}}{h_x^2}$$

Сеточные уравнения для задачи диффузии-конвекции-реакции

Запишем дискретную модель транспорта веществ в канонической форме сеточных уравнений:

$$L(c(P))=A(P)\cdot c(P)-\sum_{Q\in\Psi'(P)}B(P,Q)\cdot c(Q)=F(P), \quad (10)$$

где L - некоторый сеточный оператор,
$P\equiv(x_i,y_j,z_k)$ - центр шаблона,

$$\Psi'(P) = \{Q_1(x_{i+1}, y_j, z_k), Q_2(x_{i-1}, y_j, z_k), Q_3(x_i, y_{j+1}, z_k), Q_4(x_i, y_{j-1}, z_k), Q_5(x_i, y_j, z_{k+1}), Q_6(x_i, y_j, z_{k-1})\}$$ - окрестность центра шаблона.

Выделим семейство сеточных уравнений, для которых коэффициенты удовлетворяют свойствам:

$$A(P) > 0, B(P,Q) > 0, D(p) = A(P) - \sum_{Q \in \Psi'(P)} B(P,Q) \quad (11)$$

Преобразуем уравнение (2): перенесем $\frac{\bar{c}}{\tau}$ в правую часть и домножим обе части уравнения на $(q_0)_{i,j,k}$.

$$\frac{(q_0)_{i,j,k}}{\tau}\hat{c}_{i,j,k} + \frac{(q_1)_{i,j,k} \cdot u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2h_x} \cdot \bar{c}_{i+1,j,k} - \frac{(q_1)_{i,j,k} \cdot u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2h_x} \cdot \bar{c}_{i,j,k} +$$
$$\frac{(q_2)_{i,j,k} \cdot u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2h_x} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_2)_{i,j,k} \cdot u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2h_x} \cdot \bar{c}_{i-1,j,k} + \frac{(q_3)_{i,j,k} \cdot v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2h_y} \cdot \bar{c}_{i,j+1,k} - \frac{(q_3)_{i,j,k} \cdot v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2h_y} \cdot \bar{c}_{i,j,k} +$$
$$\frac{(q_4)_{i,j,k} \cdot v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2h_y} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_4)_{i,j,k} \cdot v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2h_y} \cdot \bar{c}_{i,j-1,k} + \frac{(q_5)_{i,j,k} \cdot w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{2h_z} \cdot \bar{c}_{i,j,k+1} - \frac{(q_5)_{i,j,k} \cdot w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{2h_z} \cdot \bar{c}_{i,j,k} +$$
$$\frac{(q_6)_{i,j,k} \cdot w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{2h_z} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_6)_{i,j,k} \cdot w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{2h_z} \cdot \bar{c}_{i,j,k-1} = \frac{(q_0)_{i,j,k}}{\tau}\hat{c}_{i,j,k}$$
$$+ \frac{(q_1)_{i,j,k} \cdot \mu_{i+\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2} \cdot \bar{c}_{i+1,j,k} - \frac{(q_1)_{i,j,k} \cdot \mu_{i+\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_2)_{i,j,k} \cdot \mu_{i-\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \frac{(q_2)_{i,j,k} \cdot \mu_{i-\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2} \cdot \bar{c}_{i-1,j,k} -$$
$$\frac{|(q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot \alpha_x}{h_x} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{|(q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot \beta_x}{h_x} + \frac{(q_3)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j+\frac{1}{2},k}}{h_y^2} \cdot \bar{c}_{i,j+1,k} -$$
$$\frac{(q_3)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j+\frac{1}{2},k}}{h_y^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_4)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j-\frac{1}{2},k}}{h_y^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \frac{(q_4)_{i,j,k} \cdot \mu_{i,j-\frac{1}{2},k}}{h_y^2} \cdot \bar{c}_{i,j-1,k} -$$
$$\frac{|(q_3)_{i,j,k} - (q_4)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot \alpha_y}{h_y} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{|(q_3)_{i,j,k} - (q_4)_{i,j,k}| \cdot \mu_{i,j,k} \cdot \beta_y}{h_y} + \frac{(q_5)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{h_z^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k+1} -$$
$$\frac{(q_5)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{h_z^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{(q_6)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{h_z^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k} + \frac{(q_6)_{i,j,k} \cdot \nu_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{h_z^2} \cdot \bar{c}_{i,j,k-1} -$$
$$\frac{|(q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k}| \cdot \nu_{i,j,k} \cdot \alpha_y}{h_z} \cdot \bar{c}_{i,j,k} - \frac{|(q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k}| \cdot \nu_{i,j,k} \cdot \beta_z}{h_z} + (q_0)_{i,j,k} \cdot f_{i,j,k} \quad (12)$$

Запишем сеточный аналог уравнения диффузии-конвекции-реакции (12) в канонической форме (10):

$$\frac{(q_0)_{i,j,k}}{\tau}\cdot\hat{c}_{i,j,k}+$$
$$\left[\left(|(q_1)_{i,j,k}-(q_2)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_x}{h_x}+|(q_3)_{i,j,k}-(q_4)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_y}{h_y}\right)\cdot\mu_{i,j,k}+|(q_5)_{i,j,k}-(q_6)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_z}{h_z}\cdot\nu_{i,j,k}\right]\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_1)_{i,j,k}\left(-\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2h_x}+\frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_2)_{i,j,k}\left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2h_x}+\frac{\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_3)_{i,j,k}\left(-\frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2h_y}+\frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2},k}}{h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_4)_{i,j,k}\left(\frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2h_y}+\frac{\mu_{i,j-\frac{1}{2},k}}{h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_5)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{2h_z}+\frac{\nu_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_6)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{2h_z}+\frac{\nu_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}-$$
$$(q_1)_{i,j,k}\left(-\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2h_x}+\frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2}\right)\bar{c}_{i+1,j,k}-(q_2)_{i,j,k}\left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2h_x}+\frac{\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}}{h_x^2}\right)\bar{c}_{i-1,j,k}-$$
$$(q_3)_{i,j,k}\left(-\frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2h_y}+\frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2},k}}{h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j+1,k}-(q_4)_{i,j,k}\left(\frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2h_y}+\frac{\mu_{i,j-\frac{1}{2},k}}{h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j-1,k}-$$
$$(q_5)_{i,j,k}\left(-\frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{2h_z}+\frac{\nu_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k+1}-(q_6)_{i,j,k}\left(-\frac{w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{2h_z}+\frac{\nu_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k-1}=$$

В правой части ураснения (12) находятся известные величины, в левой - искомые

$$=(q_0)_{i,j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}}{\tau}+(q_0)_{i,j,k}\cdot f_{i,j,k}-|(q_1)_{i,j,k}-(q_2)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_x}{h_x}-|(q_3)_{i,j,k}-(q_4)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_y}{h_y}-$$
$$|(q_5)_{i,j,k}-(q_6)_{i,j,k}|\cdot\nu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_z}{h_z}\quad(13)$$

Учитывая, что

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k}=\frac{u_{i+1,j,k}+u_{i,j,k}}{2},$$

$$u_{i-\frac{1}{2},j,k}=\frac{u_{i,j,k}+u_{i-1,j,k}}{2},$$

$$\mu_{i+\frac{1}{2},j,k}=\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2},$$

$$\mu_{i-\frac{1}{2},j,k}=\frac{\mu_{i,j,k}+\mu_{i-1,j,k}}{2},$$

аналогично для j, k, получим (14):

$$\frac{(q_0)_{i,j,k}}{\tau}\cdot\hat{c}_{i,j,k}+$$
$$\left[\left(|(q_1)_{i,j,k}-(q_2)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_x}{h_x}+|(q_3)_{i,j,k}-(q_4)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_y}{h_y}\right)\cdot\mu_{i,j,k}+|(q_5)_{i,j,k}-(q_6)_{i,j,k}|\cdot\frac{\alpha_z}{h_z}\cdot\nu_{i,j,k}\right]\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_1)_{i,j,k}\left(\frac{-u_{i+1,j,k}-u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_2)_{i,j,k}\left(\frac{u_{i,j,k}+u_{i-1,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i,j,k}+\mu_{i-1,j,k}}{2h_x^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_3)_{i,j,k}\left(\frac{-v_{i,j+1,k}-v_{i,j,k}}{4h_y}+\frac{\mu_{i,j+1,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_4)_{i,j,k}\left(\frac{v_{i,j,k}+v_{i,j-1,k}}{4h_y}+\frac{\mu_{i,j,k}+\mu_{i,j-1,k}}{2h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+$$
$$(q_5)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k+1}+w_{i,j,k}}{4h_z}+\frac{\nu_{i,j,k+1}+\nu_{i,j,k}}{2h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}+(q_6)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k}+w_{i,j,k-1}}{4h_z}+\frac{\nu_{i,j,k}+\nu_{i,j,k-1}}{2h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}-$$
$$(q_1)_{i,j,k}\left(\frac{-u_{i+1,j,k}-u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\bar{c}_{i+1,j,k}-(q_2)_{i,j,k}\left(\frac{u_{i,j,k}+u_{i-1,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i,j,k}+\mu_{i-1,j,k}}{2h_x^2}\right)\bar{c}_{i-1,j,k}-$$
$$(q_3)_{i,j,k}\left(\frac{-v_{i,j+1,k}-v_{i,j,k}}{4h_y}+\frac{\mu_{i,j+1,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j+1,k}-(q_4)_{i,j,k}\left(\frac{v_{i,j,k}+v_{i,j-1,k}}{4h_y}+\frac{\mu_{i,j,k}+\mu_{i,j-1,k}}{2h_y^2}\right)\bar{c}_{i,j-1,k}-$$
$$(q_5)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k+1}+w_{i,j,k}}{4h_z}+\frac{\nu_{i,j,k+1}+\nu_{i,j,k}}{2h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k+1}-(q_6)_{i,j,k}\left(\frac{w_{i,j,k}+w_{i,j,k-1}}{4h_z}+\frac{\nu_{i,j,k}+\nu_{i,j,k-1}}{2h_z^2}\right)\bar{c}_{i,j,k-1}=$$
$$(q_0)_{i,j,k}\cdot\frac{\bar{c}_{i,j,k}}{\tau}+(q_0)_{i,j,k}\cdot f_{i,j,k}-|(q_1)_{i,j,k}-(q_2)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_x}{h_x}-|(q_3)_{i,j,k}-(q_4)_{i,j,k}|\cdot\mu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_y}{h_y}-$$
$$|(q_5)_{i,j,k}-(q_6)_{i,j,k}|\cdot\nu_{i,j,k}\cdot\frac{\beta_z}{h_z}\quad(14)$$

Учитывая выражение $\bar{c}=\sigma\hat{c}+(1-\sigma)c$ покажем преобразование для одного элемента левой части уравнения (14):

$$(q_1)_{i,j,k}\left(\frac{-u_{i+1,j,k}-u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\bar{c}_{i,j,k}=$$
$$(q_1)_{i,j,k}\left(\frac{-u_{i+1,j,k}-u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\cdot(\sigma\hat{c}+(1-\sigma)c)=$$
$$\sigma\cdot\left(-\frac{u_{i+1,j,k}+u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\cdot(q_1)_{i,j,k}\cdot\hat{c}+(1-\sigma)\cdot\left(-\frac{u_{i+1,j,k}+u_{i,j,k}}{4h_x}+\frac{\mu_{i+1,j,k}+\mu_{i,j,k}}{2h_x^2}\right)\cdot(q_1)_{i,j,k}\cdot c \quad (15)$$

или

$$B(P,Q_1)=\sigma\cdot\left(-\frac{u(Q_1)+u(P)}{4h_x}+\frac{\mu(Q_1)+\mu(P)}{2h_x^2}\right)\cdot q_1(P) \quad (16)$$

$$B(P,Q_7)=(1-\sigma)\cdot\left(-\frac{u(Q_1)+u(P)}{4h_x}+\frac{\mu(Q_1)+\mu(P)}{2h_x^2}\right)\cdot q_1(P) \quad (17)$$

С учетом выражений (15), (16), (17) коэффициенты сеточных уравнений, находящиеся в окрестномти центра шаблона примут вид:

$$B(P,Q_1) = \sigma \cdot \left(-\frac{u(Q_1)+u(P)}{4h_x} + \frac{\mu(Q_1)+\mu(P)}{2h_x^2} \right) \cdot q_1(P),$$

$$B(P,Q_2) = \sigma \cdot \left(\frac{u(Q_2)+u(P)}{4h_x} + \frac{\mu(Q_2)+\mu(P)}{2h_x^2} \right) \cdot q_2(P),$$

$$B(P,Q_3) = \sigma \cdot \left(-\frac{v(Q_3)+v(P)}{4h_y} + \frac{\mu(Q_3)+\mu(P)}{2h_y^2} \right) \cdot q_3(P),$$

$$B(P,Q_4) = \sigma \cdot \left(\frac{v(Q_4)+v(P)}{4h_y} + \frac{\mu(Q_4)+\mu(P)}{2h_y^2} \right) \cdot q_4(P),$$

$$B(P,Q_5) = \sigma \cdot \left(\frac{w(Q_5)+w(P)}{4z_y} + \frac{v(Q_5)+v(P)}{2h_z^2} \right) \cdot q_5(P),$$

$$B(P,Q_6) = \sigma \cdot \left(\frac{w(Q_6)+w(P)}{4z_y} + \frac{v(Q_6)+v(P)}{2h_z^2} \right) \cdot q_6(P)$$

Коэффициент, стоящий в центре шаблона, запишем в виде:

$$A(P) = \frac{q_0(P)}{\tau} + B(P,Q_1) + B(P,Q_2) + B(P,Q_3) + B(P,Q_4) + B(P,Q_5) + B(P,Q_6) +$$
$$\sigma \left[\left(|q_1(P) - q_2(P)| \cdot \frac{\alpha_x}{h_x} + |q_3(P) - q_4(P)| \cdot \frac{\alpha_y}{h_y} \right) \cdot \mu(P) + |q_5(P) - q_6(P)| \cdot \frac{\alpha_z}{h_z} \cdot \nu(P) \right]$$

Для записи правой части сеточвного уравнения понадобятся вспомогательные коэффициенты:

$$B(P,Q_8) = (1-\sigma) \cdot \left(-\frac{u(Q_1)+u(P)}{4h_x} + \frac{\mu(Q_1)+\mu(P)}{2h_x^2} \right) \cdot q_1(P),$$

$$B(P,Q_9) = (1-\sigma) \cdot \left(\frac{u(Q_2)+u(P)}{4h_x} + \frac{\mu(Q_2)+\mu(P)}{2h_x^2} \right) \cdot q_2(P),$$

$$B(P,Q_{10}) = (1-\sigma) \cdot \left(-\frac{v(Q_3)+v(P)}{4h_y} + \frac{\mu(Q_3)+\mu(P)}{2h_y^2} \right) \cdot q_3(P),$$

$$B(P,Q_{11}) = (1-\sigma) \cdot \left(\frac{v(Q_4)+v(P)}{4h_y} + \frac{\mu(Q_4)+\mu(P)}{2h_y^2} \right) \cdot q_4(P),$$

$$B(P,Q_{12}) = (1-\sigma)\cdot\left(\frac{w(Q_5)+w(P)}{4z_y} + \frac{v(Q_5)+v(P)}{2h_z^2}\right)\cdot q_5(P),$$

$$B(P,Q_{13}) = (1-\sigma)\cdot\left(\frac{w(Q_6)+w(P)}{4z_y} + \frac{v(Q_6)+v(P)}{2h_z^2}\right)\cdot q_6(P)$$

$$B(P,Q_7) = \frac{q_0(P)}{\tau} - B(P,Q_8) - B(P,Q_9) - B(P,Q_{10}) - B(P,Q_{11}) - B(P,Q_{12}) - B(P,Q_{13}) +$$
$$(1+\sigma)\cdot\left[\left(|q_1(P)-q_2(P)|\cdot\frac{\alpha_x}{h_x} + |q_3(P)-q_4(P)|\cdot\frac{\alpha_y}{h_y}\right)\cdot\mu(P) + |q_5(P)-q_6(P)|\cdot\frac{\alpha_z}{h_z}\cdot\nu(P)\right]$$

При этом правые части сеточных уравнений примут вид:

$$F(P) = q_0(P)\cdot f(P) - |q_1(P)-q_2(P)|\cdot\mu(P)\cdot\frac{\beta_x}{h_x} - |q_3(P)-q_4(P)|\cdot\mu(P)\cdot\frac{\beta_y}{h_y} - |q_5(P)-q_6(P)|\cdot\nu(P)\cdot\frac{\beta_z}{h_z} +$$
$$B(P,Q_7)\cdot c(P) + B(P,Q_8)\cdot c(Q_1) + B(P,Q_9)\cdot c(Q_2) + B(P,Q_{10})\cdot c(Q_3) + B(P,Q_{110})\cdot c(Q_4) + B(P,Q_{12})\cdot c(Q_5) +$$
$$B(P,Q_{13})\cdot c(Q_6)$$

$$\sum_{Q\in\Psi'(P)} B(P,Q)\cdot c(Q) = B(P,Q_1)\cdot c(Q_1) + B(P,Q_2)\cdot c(Q_2) + B(P,Q_3)\cdot c(Q_3) + B(P,Q_4)\cdot c(Q_4) +$$
$$B(P,Q_5)\cdot c(Q_5) + B(P,Q_6)\cdot c(Q_6)$$