

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

## 1.1 Постановка задачи

Уравнение диффузии-конвекции-реакции:

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

с граничными условиями:

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

где  $u, v, w$  - составляющие вектора скорости,  $f$  - функция, описывающая интенсивность и распределение источников,  $\mu$  - горизонтальная проекция коэффициента диффузионного (турбулентного) обмена,  $\nu$  - 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:

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

где  $\tau$  - шаг по временному направлению,  $h_x, h_y, h_z$  - шаги по координатным осям пространства,  $N_t, N_x, N_y, N_z$  - границы по времени и пространству.

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

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

где

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

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

Рисунок 1 Разностный шаблон

Рисунок 2 Параллелепипед с центром  $i, j, k$

Ячейки представлены прямоугольными параллелипипедами, которые могут быть заполненными, пустыми или частично заполненными.

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.

Рисунок 3 Вершины 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).

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:

- 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  $q_0$  характеризует степень заполненности объема  $V_0$ .

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$(q_2)_{i,j,k} = \frac{O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k} + O_{i,j,k+1} + O_{i,j+1,k+1}}{2 \quad 4};$$

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

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

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

Проинтегрируем по объему  $\Omega_0$  уравнение (2), воспользуемся свойством линейности интеграла, в результате чего получим:

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} u \bar{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} v \bar{c}'_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} w \bar{c}'_z dx dy dz = \\ \iiint_{\Omega_0} (\mu \bar{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} (\mu \bar{c}'_y)'_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} (\mu \bar{c}'_z)'_z dx dy dz + \iiint_{\Omega_0} f dx dy dz \end{aligned} \quad (4)$$

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

$$\iiint_{\Omega_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz \simeq (q_0)_{i,j,k} \iiint_{V_0} \frac{\hat{c} - c}{\tau} dx dy dz = (q_0)_{i,j,k} \frac{\hat{c} - c}{\tau} h_x h_y h_z \quad (5)$$

Второй интеграл в формуле (4) принимает вид:

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} u \bar{c}'_x dx dy dz &\simeq \iiint_{\Omega_1} u \bar{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_2} u \bar{c}'_x dx dy dz \\ &= (q_1)_{i,j,k} \iiint_{V_1} u \bar{c}'_x dx dy dz + (q_2)_{i,j,k} \iiint_{V_2} u \bar{c}'_x dx dy dz \end{aligned}$$

Вычислим интегралы по  $V_1$  и  $V_2$ :

$$\begin{aligned} \iiint_{V_2} u \bar{c}'_x dx dy dz &= \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u \bar{c}'_x dx \simeq u_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{2} h_y h_z \\ \iiint_{V_1} u \bar{c}'_x dx dy dz &= \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u \bar{c}'_x dx \simeq u_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_y h_z \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\iiint_{\Omega_0} u \bar{c}'_x dx dy dz = (q_2)_{i,j,k} u_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k}}{2} h_y h_z + (q_1)_{i,j,k} u_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_y h_z, \quad (6)$$

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

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} v \bar{c}'_y dx dy dz &= \iiint_{\Omega_3} v \bar{c}'_y dx dy dz + \iiint_{\Omega_4} v \bar{c}'_y dx dy dz \\ &= (q_5)_{i,j,k} \iiint_{V_3} v \bar{c}'_y dx dy dz + (q_4)_{i,j,k} \iiint_{V_4} v \bar{c}'_y dx dy dz = \\ &= (q_4)_{i,j,k} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_j} v \bar{c}'_y dy + (q_3)_{i,j,k} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} dz \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{y_j}^{y+\frac{1}{2}} v \bar{c}'_y dy = \\ &= (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-\frac{1}{2},k} \frac{\bar{c}_{i,j-1,k} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_z + (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+\frac{1}{2},k} \frac{\bar{c}_{i,j+1,k} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_z, \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} w \bar{c}'_x dx dy dz &= \iiint_{\Omega_5} w \bar{c}'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_6} w \bar{c}'_x dx dy dz = \\ &= (q_5)_{i,j,k} \iiint_{V_5} w \bar{c}'_x dx dy dz + (q_6)_{i,j,k} \iiint_{V_6} w \bar{c}'_x dx dy dz = \\ &= (q_6)_{i,j,k} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_k} w \bar{c}'_x dz + (q_5)_{i,j,k} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} dy \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx \int_{z_k}^{z_{k+\frac{1}{2}}} w \bar{c}'_x dz = \\ &= (q_6)_{i,j,k} w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k-\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y + (q_5)_{i,j,k} w_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\bar{c}_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \bar{c}_{i,j,k}}{2} h_x h_y, \end{aligned}$$

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):

$$\iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz = \iiint_{\Omega_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz$$

Рассмотрим случай:  $V_{\Omega_1} > V_{\Omega_2}$ , выделим из  $\Omega_1$  фрагмент  $\Omega_{1,2}$  смежный с областью  $\Omega_2$ , при этом  $V_{\Omega_2} = V_{\Omega_{1,2}}$

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz &= \iiint_{\Omega_1 \setminus \Omega_{1,2}} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + \iiint_{\Omega_{1,2} \cup \Omega_2} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz = \\ &= ((q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k}) \iiint_{V_1} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz + (q_2)_{i,j,k} \iiint_{V_0} (\mu \vec{c}'_x)'_x dx dy dz \end{aligned}$$

Вычислим интеграл:

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

Введем замену:  $W = \mu \vec{c}'_x$

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

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:

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

проинтегрируем  $\vec{c}'_x$  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:

$$\begin{aligned} \iiint_{V_0} (\mu \bar{c}'_x)_x dx dy dz &= (W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}}) h_y h_z = \\ &= \left( \mu_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i+1,j,k} - \bar{c}_{i,j,k})}{h_x} - \mu_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{(\bar{c}_{i,j,k} - \bar{c}_{i-1,j,k})}{h_x} \right) h_y h_z \end{aligned}$$

Вычислим интеграл по  $V_1$ :

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

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

В интеграле по объему  $V_1$  учитываются граничные условия.

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

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

Слагаемое А 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 вычисленных интегралов по  $V_0$  и  $V_2$ , получим:

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

В случае  $S_{\Omega_2} > S_{\Omega_1}$  результат аналогичен.

Т.о., уравнение (4) с учетом уравнение (5), (6), (7) запишем в следующем виде:

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

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:

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

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  $(q_0)_{i,j,k}$ .



$$\begin{aligned}
& \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_z}{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)
\end{aligned}$$

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

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

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

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

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):