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 - составляющие вектора скорости, 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:

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

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 - границы по времени и пространству.

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

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

где

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

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

Ячейки представлены прямоугольными 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.

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).

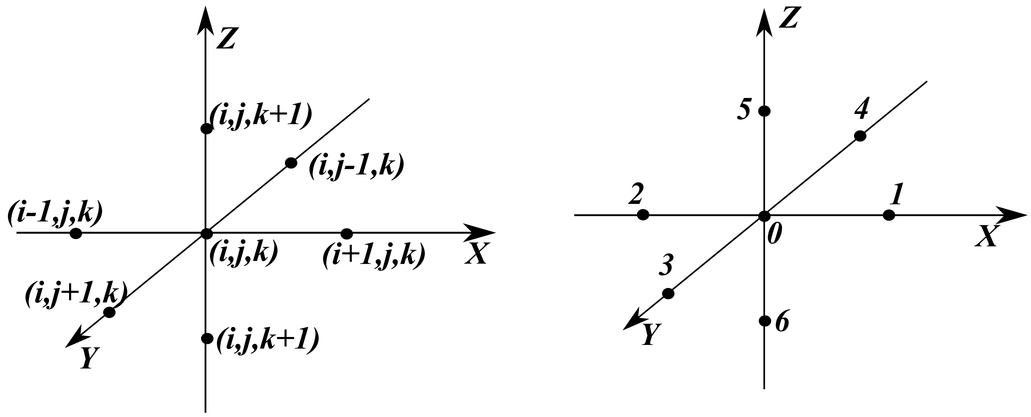

Рис. 1: Разностный шаблон

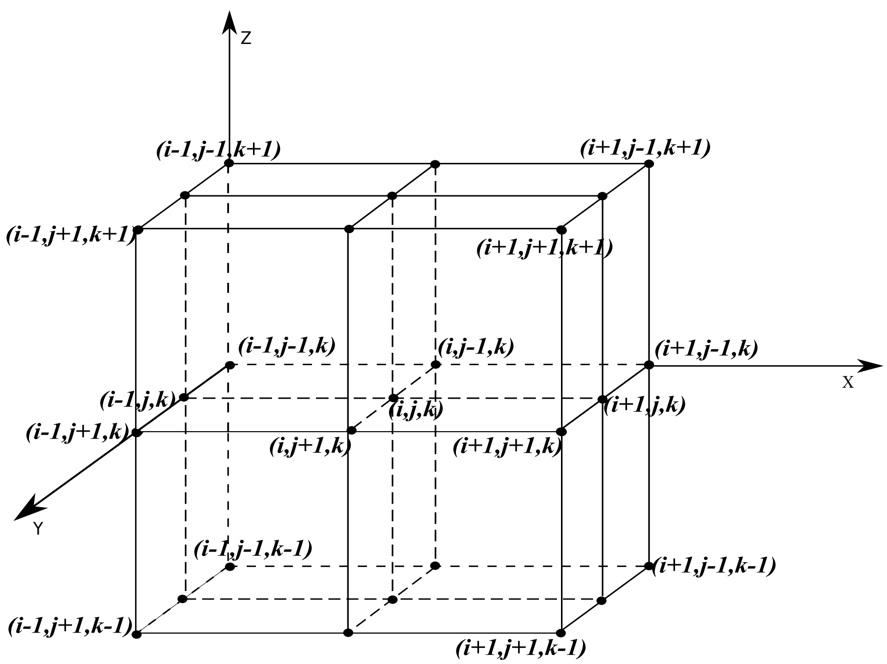

Рис. 2: Параллилепипед с центром i, j, k

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).

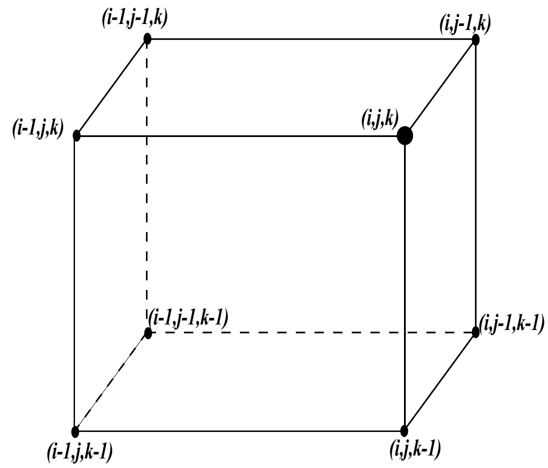

Рис. 3: Вершины объемной ячейки

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 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:

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

Вычислим отдельно каждый из полученных интегралов.

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

Второй интеграл в формуле (4) принимает вид:

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

Вычислим интегралы по V_1 и V_2:

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

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

Следовательно,

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

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

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

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

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

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

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:

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

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:

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

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:

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

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:

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

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:

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

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 урaснения (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):

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

или

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

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

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:

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

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