1 Постановка задачи для уравнения теплопроводности

Рассмотрим задачу для уравнения теплопроводности.

$$\frac{\partial U(t,\vec{r})}{\partial t} = \nabla^2 U(t,\vec{r}) + H(t,\vec{r}), \qquad \vec{r}\in\Omega, \quad \partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 \tag{1}$$

$$U(0,\vec{r}) = \vec{\psi}(\vec{r}), \tag{2}$$

$$U(t,\vec{r})|_{\vec{r}\in\partial\Omega_1} = \vec{\varphi}(t), \tag{3}$$

$$\left.\frac{\partial U(t,\vec{r})}{\partial \vec{r}}\right|_{\vec{r}\in\partial\Omega_2} + p(t)\; U(t,\vec{r})|_{\vec{r}\in\partial\Omega_2} = \vec{q}(t). \tag{4}$$

Смысл последней записи заключается в том, что на части границ области может быть задано граничаное условие первого рода, в том время, как на оставшихся границах заданы граничные условия третьего (или второго как частный случай) рода.

2 Схема Кранка – Николсон

В одномерном случае задача приобретает вид:

$$\frac{\partial U(t,x)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}U(t,x) + H(t,x), \quad x\in\Omega=[x_0,x_1],\ \partial\Omega = \partial\Omega_1\cup\partial\Omega_2 = \{x_0,x_1\} \tag{5}$$

$$U(0,x) = \psi(x), \tag{6}$$

$$U(t,x)|_{x\in\partial\Omega_1} = \varphi(t), \tag{7}$$

$$\left.\frac{\partial U(t,x)}{\partial x}\right|_{x\in\partial\Omega_2} + p(t)\; U(t,x)|_{x\in\partial\Omega_2} = q(t). \tag{8}$$

Схема Кранка–Никольсон для уравнения теплопроводности имеет вид:

$$\frac{U^{n+1}-U^n}{\tau} = \frac{1}{2}L_1U^{n+1} + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}\left(H^{n+1}+H^n\right). \tag{9}$$

Проведём разделение известных и неизвестных.

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^{n+1} = \left(I + \frac{\tau}{2}L_1\right)U^n + \frac{1}{2}\left(H^{n+1}+H^n\right).$$

Оператор имеет вид

$$L_1U = \frac{D_x^+\frac{U_{i+1}-U_i}{h} - D_x^-\frac{U_i-U_{i-1}}{h}}{h} = \frac{D_x^+}{h^2}U_{i+1} - \left(\frac{D_x^+}{h^2}+\frac{D_x^-}{h^2}\right)U_i + \frac{D_x^-}{h^2}U_{i-1}.$$

Левая часть имеет вид

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^{n+1} = U_i^{n+1} - \frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h^2}U_{i+1} - \left(\frac{D_x^+}{h^2}+\frac{D_x^-}{h^2}\right)U_i^{n+1} + \frac{D_x^-}{h^2}U_{i-1}^{n+1}\right] =$$
$$-\frac{\tau D_x^+}{2h^2}U_{i+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\tau D_x^+}{2h^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}\right)U_i^{n+1} - \frac{\tau D_x^-}{2h^2}U_{i-1}^{n+1}.$$

Правая часть имеет вид

$$\left(I + \frac{\tau}{2}L_1\right)U^n = U_i^n + \frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h^2}U_{i+1}^n - \left(\frac{D_x^+}{h^2}+\frac{D_x^-}{h^2}\right)U_i^n + \frac{D_x^-}{h^2}U_{i-1}^n\right] =$$
$$\frac{\tau D_x^+}{2h^2}U_{i+1}^n + \left(1 - \left[\frac{\tau D_x^+}{2h^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}\right]\right)U_i^n + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}U_{i-1}^n + \frac{1}{2}\left(H_i^{n+1}+H_i^n\right).$$

Окончательно имеем

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\tau D_x^+}{2h^2}U_{i+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\tau D_x^+}{2h^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}\right)U_i^{n+1} - \frac{\tau D_x^-}{2h^2}U_{i-1}^{n+1} = \\
&= \frac{\tau D_x^+}{2h^2}U_{i+1}^{n} + \left(1 - \left[\frac{\tau D_x^+}{2h^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}\right]\right)U_i^{n} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}U_{i-1}^{n} + \frac{1}{2}\left(H_i^{n+1} + H_i^n\right), \quad i = 1, \ldots, N_x.
\end{aligned}
$$

Обозначим $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x = a_x + c_x$. Тогда

$$
-a_x U_{i+1}^{n+1} + (1 + b_x)\,U_i^{n+1} - c_x U_{i-1}^{n+1} = a_x U_{i+1}^{n} + (1 - b_x)\,U_i^{n} + c_x U_{i-1}^{n}. \tag{10}
$$

где $i = \overline{1, N_x - 1}, a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x = a_x + c_x$.

Начальные условия

$$
U_i^0 = \psi_i, \quad i = \overline{1, N_x - 1}. \tag{11}
$$

Для граничных условий первого рода никакой модификации не требуется:

$$
U_0^n = \varphi^n, \qquad \text{или} \qquad U_{N_x}^n = \varphi^n, \qquad n = \overline{0, T} \tag{12}
$$

Рассмотрим примеры граничных условий третьего рода

$$
\left.\frac{\partial U(t,x)}{\partial x}\right|_{x=x_0} + p(t)U(t,x_0) = q(t), \qquad \left.\frac{\partial U(t,x)}{\partial x}\right|_{x=x_1} + p(t)U(t,x_1) = q(t).
$$

По формуле центральной разности для граничного условия на левом конце имеем

$$
\frac{U_1^n - U_{-1}^n}{2h_x} + p^n U_0^n = q^n, \qquad U_{-1}^{n+1} = U_1^n - 2h_x\left(p^n U_0^n + q^n\right)
$$

Подставим в уравнение

$$
\begin{aligned}
&-a_x U_1^{n+1} + (1 + b_x)\,U_0^{n+1} - c_x\left(U_1^{n+1} - 2h_x(p^{n+1}U_0^{n+1} + q^{n+1})\right) = \\
&\qquad = a_x U_1^n + (1 - b_x)\,U_0^n + c_x\left(U_1^n - 2h_x(p^n U_0^n + q^n)\right).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-(a_x + c_x)U_1^{n+1} + \left(1 + b_x + 2c_x h_x p^{n+1}\right)U_0^{n+1} = \\
&\qquad = (a_x + c_x)U_1^n + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p^n\right)U_0^n - 2c_x h_x(q^{n+1} + q^n).
\end{aligned}
$$

$$
-b_x U_1^{n+1} + \left(1 + b_x + 2c_x h_x p^{n+1}\right)U_0^{n+1} = b_x U_1^n + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p^n\right)U_0^n - 2c_x h_x(q^{n+1} + q^n). \tag{13}
$$

Обозначим $\alpha = 1 + b_x + 2c_x h_x p^{n+1}, \quad \beta = -b_x$

$$
\beta U_1^{n+1} + \alpha U_0^{n+1} = b_x U_1^n + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p^n\right)U_0^n - 2c_x h_x(q^{n+1} + q^n). \tag{14}
$$

Аналогично для правого конца

$$
\frac{U_{N_x+1}^n - U_{N_x-1}^n}{2h_x} + p^n U_{N_x}^n = q^n, \qquad U_{N_x+1}^n = U_{N_x-1}^n - 2h_x\left(p^n U_{N_x}^n - q^n\right)
$$

$$
\begin{aligned}
&-a_x\left(U_{N_x-1}^{n+1} - 2h_x\left(p^{n+1}U_{N_x}^{n+1} - q^{n+1}\right)\right) + (1 + b_x)\,U_{N_x}^{n+1} - c_x U_{N_x-1}^{n+1} = \\
&\qquad = a_x\left(U_{N_x-1}^n - 2h_x\left(p^n U_{N_x}^n - q^n\right)\right) + (1 - b_x)\,U_{N_x}^n + c_x U_{N_x-1}^n.
\end{aligned}
$$

$$\left(1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}\right)U^{n+1}_{N_x}-(a_x+c_x)U^{n+1}_{N_x-1}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^{n}\right)U^{n}_{N_x}+(a_x+c_x)U^{n}_{N_x-1}+2a_xh\left(q^{n+1}+q^n\right).$$

$$\left(1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}\right)U^{n+1}_{N_x}-b_xU^{n+1}_{N_x-1}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^{n}\right)U^{n}_{N_x}+b_xU^{n}_{N_x-1}+2a_xh_x\left(q^{n+1}+q^n\right). \tag{15}$$

Обозначим $\gamma=-b_x,\quad \delta=1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}$

$$\delta U^{n+1}_{N_x}+\gamma U^{n+1}_{N_x-1}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^{n+1}\right)U^{n}_{N_x}+b_xU^{n}_{N_x-1}+2a_xh_x\left(q^{n+1}+q^n\right). \tag{16}$$

Объединяя формулы (10) – (16) заключаем, что задача (5) – (8) сводится к следующему виду:

$$-a_xU^{n+1}_{i+1}+(1+b_x)U^{n+1}_{i}-c_xU^{n+1}_{i-1}=a_xU^{n}_{i+1}+(1-b_x)U^{n}_{i}+c_xU^{n}_{i-1}+\frac{1}{2}\left(H^{n+1}_i+H^n_i\right).$$

где $i=\overline{1,N_x-1},\ n=\overline{0,T};\ a_x=\frac{\tau D^+_x}{2h^2}, c_x=\frac{\tau D^-_x}{2h^2}, b_x=a_x+c_x.$

Начальные условия

$$U^0_i=\psi_i,\quad i=\overline{1,N_x-1}.$$

Примеры граничных условий первого рода:

$$U^n_0=\varphi^n_1,\qquad U^n_{N_x}=\varphi^n_2,\qquad n=\overline{0,T}.$$

Примеры граничных условий третьего рода:

$$\beta U^{n+1}_1+\alpha U^{n+1}_0=b_xU^n_1+\left(1-b_x-2c_xh_xp^n\right)U^n_0-2c_xh_x(q^{n+1}+q^n).$$
$$\delta U^{n+1}_{N_x}+\gamma U^{n+1}_{N_x-1}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^{n+1}\right)U^{n}_{N_x}+b_xU^{n}_{N_x-1}+2a_xh_x\left(q^{n+1}+q^n\right).$$

где $n=\overline{0,T}$, $\alpha=1+b_x+2c_xh_xp^n,\quad \beta=-b_x,\ \gamma=-b_x,\quad \delta=1+b_x+2h_xa_x$

---

3 Схема Дугласа – Ганна для двумерной прямоугольной области

В двумерном случае задача приобретает вид:

$$\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial t}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(t,x,y)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}U(t,x,y)+H(t,x,y),\quad x\in\Omega=[x_0,x_1]\times[y_0,y_1] \tag{17}$$

$$U(0,x,y)=\psi(x,y), \tag{18}$$

$$U(t,x,y)|_{(x,y)\in\partial\Omega_1}=\varphi(t,x,y),\ \partial\Omega=\partial\Omega_1\cup\partial\Omega_2 \tag{19}$$

$$\left.\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial\vec{n}}\right|_{(x,y)\in\partial\Omega_2}+p(t)\,U(t,x,y)|_{(x,y)\in\partial\Omega_2}=q(t,x,y). \tag{20}$$

Схема Дугласа – Ганна для двумерной области

$$\begin{cases}\frac{U^*-U^n}{\tau}=\frac{1}{2}L_1U^*+\frac{1}{2}L_1U^n+L_2U^n+H^n,\\ \frac{U^{n+1}-U^n}{\tau}=\frac{1}{2}L_1U^*+\frac{1}{2}L_1U^n+\frac{1}{2}L_2U^{n+1}+\frac{1}{2}L_2U^n+H^{n+1}.\end{cases}$$

Проведём разделение известных и неизвестных переменных для каждого из уравнений.

$$\begin{cases} \frac{U^*}{\tau} - \frac{1}{2}L_1U^* = \frac{U^n}{\tau} + \frac{1}{2}L_1U^n + L_2U^n, \\ \frac{U^{n+1}}{\tau} - \frac{1}{2}L_2U^{n+1} = \frac{U^n}{\tau} + \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}L_2U^n. \end{cases}$$

Сгруппируем операторы

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2\right)U^n, \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{n+1} = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2\right)U^n + \frac{1}{2}L_1U^* \end{cases}$$

Вычтем первое уравнение из второго:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = \left(\frac{I}{\tau} + \frac{1}{2}L_1 + L_2\right)U^n, \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{n+1} - \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = -\frac{1}{2}L_2U^n + \frac{1}{2}L_1U^* \end{cases}$$

Отсюда

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = \left(\frac{I}{\tau} + \frac{1}{2}L_1 + L_2\right)U^n, \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{n+1} = \frac{1}{\tau}U^* - \frac{1}{2}L_2U^n \end{cases}$$

Домножим на τ

$$\begin{cases} \left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* = \left(I + \frac{\tau}{2}L_1 + \tau L_2\right)U^n, \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{n+1} = U^* - \frac{\tau}{2}L_2U^n, \end{cases}$$

Операторы имеют вид:

$$L_1U = \frac{D_x^+\frac{U_{i+1,j}-U_{i,j}}{h_x} - D_x^-\frac{U_{i,j}-U_{i-1,j}}{h_x}}{h_x} = \frac{D_x^+}{h_x^2}U_{i+1,j} - \frac{D_x^+}{h_x^2}U_{i,j} - \frac{D_x^-}{h_x^2}U_{i,j} + \frac{D_x^-}{h_x^2}U_{i-1,j} \quad \forall i,j;$$

$$L_2U = \frac{D_y^+}{h_y^2}U_{i,j+1} - \frac{D_y^+}{h_y^2}U_{i,j} - \frac{D_y^-}{h_y^2}U_{i,j} + \frac{D_y^-}{h_y^2}U_{i,j-1} \quad \forall i,j;$$

Преобразуем левые части уравнений

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* = U^*_{i,j} - \frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h_x^2}U^*_{i+1,j} - \frac{D_x^+}{h_x^2}U^*_{i,j} - \frac{D_x^-}{h_x^2}U^*_{i,j} + \frac{D_x^-}{h_x^2}U^*_{i-1,j}\right] = \\ -\frac{\tau D_x^+}{2h_x^2}U^*_{i+1,j} + \left(1 + \frac{\tau D_x^+}{2h_x^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h_x^2}\right)U^*_{i,j} - \frac{\tau D_x^-}{2h_x^2}U^*_{i-1,j}$$

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{n+1} = U^{n+1}_{i,j} - \frac{\tau}{2}\left[\frac{D_y^+}{h_y^2}U^{n+1}_{i,j+1} - \frac{D_y^+}{h_y^2}U^{n+1}_{i,j} - \frac{D_y^-}{h_y^2}U^{n+1}_{i,j} + \frac{D_y^-}{h_y^2}U^{n+1}_{i,j-1}\right] = \\ -\frac{\tau D_y^+}{2h_y^2}U^{n+1}_{i,j+1} + \left(1 + \frac{\tau D_y^+}{2h_y^2} + \frac{\tau D_y^-}{2h_y^2}\right)U^{n+1}_{i,j} - \frac{\tau D_y^-}{2h_y^2}U^{n+1}_{i,j-1}$$

Обозначим $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h_x^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h_x^2}$ и $a_y = \frac{\tau D_y^+}{2h_y^2}, c_y = \frac{\tau D_y^-}{2h_y^2}$ соответственно. Тогда

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* = -a_xU^*_{i+1,j} + (1 + a_x + c_x)U^*_{i,j} - c_xU^*_{i-1,j}$$

$$\left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{n+1} = -a_yU^{n+1}_{i,j+1} + (1 + a_y + c_y)U^{n+1}_{i,j} - c_yU^{n+1}_{i,j-1}$$

Преобразуем правые части:

$$\left(I+\frac{\tau}{2}L_1+\tau L_2\right)U^n = U^n_{i,j}+\frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h_x^2}U^n_{i+1,j}-\frac{D_x^+}{h_x^2}U^n_{i,j}-\frac{D_x^-}{h_x^2}U^n_{i,j}+\frac{D_x^-}{h_x^2}U^n_{i-1,j}\right]+$$
$$+\tau\left[\frac{D_y^+}{h_y^2}U^n_{i,j+1}-\frac{D_y^+}{h_y^2}U^n_{i,j}-\frac{D_y^-}{h_y^2}U^n_{i,j}+\frac{D_y^-}{h_y^2}U^n_{i,j-1}\right]=\frac{\tau D_x^+}{2h_x^2}U^n_{i+1,j}+\frac{\tau D_x^-}{2h_x^2}U^n_{i-1,j}+$$
$$+\frac{\tau D_y^+}{h_y^2}U^n_{i,j+1}+\frac{\tau D_y^-}{h_y^2}U^n_{i,j-1}+\left[1-\frac{\tau D_x^+}{2h_x^2}-\frac{\tau D_x^-}{2h_x^2}-\frac{\tau D_y^+}{h_y^2}-\frac{\tau D_y^-}{h_y^2}\right]U^n_{i,j}$$

$$U^*-\frac{\tau}{2}L_2U^n = U^*_{i,j}-\frac{\tau}{2}\left[\frac{D_y^+}{h_y^2}U^n_{i,j+1}-\frac{D_y^+}{h_y^2}U^n_{i,j}-\frac{D_y^-}{h_y^2}U^n_{i,j}+\frac{D_y^-}{h_y^2}U^n_{i,j-1}\right]=$$
$$=U^*_{i,j}-\frac{\tau D_y^+}{2h_y^2}U_{i,j+1}-\frac{\tau D_y^-}{2h_y^2}U_{i,j-1}+\left[\frac{\tau D_y^+}{2h_y^2}+\frac{\tau D_y^-}{2h_y^2}\right]U_{i,j}.$$

Или, используя ранее введённые обозначения

$$\left(I+\frac{\tau}{2}L_1+\tau L_2\right)U^n = a_xU^n_{i+1,j}+c_xU^n_{i-1,j}+2a_yU^n_{i,j+1}+2c_yU^n_{i,j-1}+(1-a_x-c_x-2a_y-2c_y)U^n_{i,j}$$

$$U^*-\frac{\tau}{2}L_2U^n = U^*_{i,j}-a_yU^n_{i,j+1}-c_yU^n_{i,j-1}+(a_y+c_y)\,U^n_{i,j}=$$
$$=U^*_{i,j}-a_yU^n_{i,j+1}-c_yU^n_{i,j-1}+(a_y+c_y)U^n_{i,j}.$$

Обозначая $b_x=a_x+c_x$ и $b_y=a_y+c_y$

$$-a_xU^*_{i+1,j}+(1+b_x)\,U^*_{i,j}-c_xU^*_{i-1,j}=a_xU^n_{i+1,j}+c_xU^n_{i-1,j}+2a_yU^n_{i,j+1}+2c_yU^n_{i,j-1}+(1-b_x-2b_y)U^n_{i,j}, \tag{21}$$

$$-a_yU^{n+1}_{i,j+1}+(1+b_y)\,U^{n+1}_{i,j}-c_yU^{n+1}_{i,j-1}=U^*_{i,j}-a_yU^n_{i,j+1}-c_yU^n_{i,j-1}+b_yU^n_{i,j}. \tag{22}$$

Начальные условия

$$U^0_{ij}=\psi_{ij},\quad i=\overline{1,N_x-1},\ j=\overline{1,N_y-1}. \tag{23}$$

Примеры граничных условий первого рода:

$$U^n_{0j}=\varphi^n_j,\qquad U^n_{N_xj}=\varphi^n_j,\qquad U^n_{i0}=\varphi^n_i,\qquad U^n_{iN_y}=\varphi^n_i,$$

где $j=\overline{1,N_y-1},\ n=\overline{0,T}$. Рассмотрим примеры граничных условий третьего рода:

$$\left.\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial x}\right|_{x=x_0}+p(t)U(t,x_0,y)=q(t,y),\ \left.\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial x}\right|_{x=x_1}+p(t)U(t,x_1,y)=q(t,y),\quad y\in[y_0,y_1]$$
$$\left.\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial y}\right|_{y=y_0}+p(t)U(t,x,y_0)=q(t,x),\ \left.\frac{\partial U(t,x,y)}{\partial y}\right|_{y=y_1}+p(t)U(t,x,y_1)=q(t,x),\quad x\in[x_0,x_1]$$

По формуле центральной разности для условия на границе $x=x_0$

$$\frac{U^n_{1,j}-U^n_{-1,j}}{2h_x}+p^n_jU^n_{0,j}=q^n_j,\qquad U^n_{-1,j}=U^n_{1,j}-2h_x\left(p^n_jU^n_{0,j}+q^n_j\right)$$

Подставим в уравнение

$$
\begin{aligned}
-\,a_x U_{1,j}^{n+1} + \left(1+b_x\right) U_{0,j}^{n+1} - c_x \left(U_{1,j}^{n+1} - 2h_x(p_j^{n+1} U_{0,j}^{n+1} + q_j^{n+1})\right) = \\
= a_x U_{1,j}^{n} + \left(1-b_x\right) U_{0,j}^{n} + c_x \left(U_{1,j}^{n} - 2h_x(p^n U_{0,j}^{n} + q_j^{n})\right).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-\,(a_x + c_x) U_{1,j}^{n+1} + \left(1 + b_x + 2c_x h_x p_j^{n+1}\right) U_{0,j}^{n+1} = \\
= (a_x + c_x) U_{1,j}^{n} + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p^n\right) U_{0,j}^{n} - 2c_x h_x (q_j^{n+1} + q_j^{n}).
\end{aligned}
$$

$$
-b_x U_{1,j}^{n+1} + \left(1 + b_x + 2c_x h_x p_j^{n+1}\right) U_{0,j}^{n+1} = b_x U_{1,j}^{n} + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p_j^{n}\right) U_{0,j}^{n} - 2c_x h_x (q_j^{n+1} + q_j^{n}). \tag{24}
$$

Обозначим $\alpha_1 = 1 + b_x + 2c_x h_x p_j^{n+1}$, $\beta_1 = -b_x$

$$
\beta_1 U_{1,j}^{n+1} + \alpha_1 U_{0,j}^{n+1} = b_x U_{1,j}^{n} + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p_j^{n}\right) U_{0,j}^{n} - 2c_x h_x (q_j^{n+1} + q_j^{n}). \tag{25}
$$

Аналогично для границы $x = x_1$:

$$
\frac{U_{N_x+1,j}^{n} - U_{N_x-1,j}^{n}}{2h_x} + p_j^n U_{N_x,j}^{n} = q_j^n, \qquad U_{N_x+1,j}^{n} = U_{N_x-1,j}^{n} - 2h_x \left(p_j^n U_{N_x,j}^{n} - q_j^n\right)
$$

$$
\begin{aligned}
-\,a_x \left(U_{N_x-1,j}^{n+1} - 2h_x \left(p_j^{n+1} U_{N_x,j}^{n+1} - q_j^{n+1}\right)\right) + \left(1+b_x\right) U_{N_x,j}^{n+1} - c_x U_{N_x-1,j}^{n+1} = \\
= a_x \left(U_{N_x-1,j}^{n} - 2h_x \left(p_j^{n} U_{N_x,j}^{n} - q_j^{n}\right)\right) + \left(1-b_x\right) U_{N_x,j}^{n} + c_x U_{N_x-1,j}^{n}.
\end{aligned}
$$

$$
\left(1 + b_x + 2h_x a_x p_j^{n+1}\right) U_{N_x,j}^{n+1} - (a_x+c_x) U_{N_x-1,j}^{n+1} = \left(1 - b_x - 2h_x a_x p_j^{n}\right) U_{N_x,j}^{n} + (a_x+c_x) U_{N_x-1,j}^{n} + 2a_x h_x \left(q_j^{n+1} + q\right.
$$

$$
\left(1 + b_x + 2h_x a_x p_j^{n+1}\right) U_{N_x,j}^{n+1} - b_x U_{N_x-1,j}^{n+1} = \left(1 - b_x - 2h_x a_x p_j^{n}\right) U_{N_x,j}^{n} + b_x U_{N_x-1,j}^{n} + 2a_x h_x \left(q_j^{n+1} + q_j^{n}\right). \tag{26}
$$

Обозначим $\gamma_1 = -b_x$, $\delta_1 = 1 + b_x + 2h_x a_x p_j^{n+1}$

$$
\delta_1 U_{N_x,j}^{n+1} + \gamma_1 U_{N_x-1,j}^{n+1} = \left(1 - b_x - 2h_x a_x p_j^{n}\right) U_{N_x,j}^{n} + b_x U_{N_x-1,j}^{n} + 2a_x h_x \left(q_j^{n+1} + q_j^{n}\right). \tag{27}
$$

По формуле центральной разности для условия на границе $y = y_0$

$$
\frac{U_{i,1}^{n} - U_{i,-1}^{n}}{2h_y} + p_i^n U_{i,0}^{n} = q_i^n, \qquad U_{i,-1}^{n} = U_{i,1}^{n} - 2h_y \left(p_i^n U_{i,0}^{n} + q_i^n\right)
$$

Подставим в уравнение

$$
\begin{aligned}
-\,a_y U_{i,1}^{n+1} + \left(1+b_y\right) U_{i,0}^{n+1} - c_y \left(U_{i,1}^{n+1} - 2h_y(p_i^{n+1} U_{i,0}^{n+1} + q_i^{n+1})\right) = \\
= a_y U_{i,1}^{n} + \left(1-b_y\right) U_{i,0}^{n} + c_y \left(U_{i,1}^{n} - 2h_y(p^n U_{i,0}^{n} + q_i^{n})\right).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-\,(a_y + c_y) U_{i,1}^{n+1} + \left(1 + b_y + 2c_y h_y p_i^{n+1}\right) U_{i,0}^{n+1} = \\
= (a_y + c_y) U_{i,1}^{n} + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_i^n\right) U_{i,0}^{n} - 2c_y h_y (q_i^{n+1} + q_i^{n}).
\end{aligned}
$$

$$
-b_y U_{i,1}^{n+1} + \left(1 + b_y + 2c_y h_y p_i^{n+1}\right) U_{i,0}^{n+1} = b_y U_{i,1}^{n} + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_i^{n}\right) U_{i,0}^{n} - 2c_y h_y (q_i^{n+1} + q_i^{n}). \tag{28}
$$

Обозначим $\alpha_2 = 1 + b_y + 2c_y h_y p_i^{n+1}$, $\beta_2 = -b_y$

$$\beta_2 U_{i,1}^{n+1} + \alpha_2 U_{i,0}^{n+1} = b_y U_{i,1}^n + (1 - b_y - 2c_y h_y p_i^n)\, U_{i,0}^n - 2c_y h_y (q_i^{n+1} + q_i^n). \tag{29}$$

Аналогично для границы $y = y_1$:

$$\frac{U_{i,N_y+1}^n - U_{i,N_y-1}^n}{2h_y} + p_i^n U_{i,N_y}^n = q_i^n, \qquad U_{i,N_y+1}^n = U_{i,N_y-1}^n - 2h_y \left(p_i^n U_{i,N_y}^n - q_i^n\right)$$

$$-a_y \left(U_{i,N_y-1}^{n+1} - 2h_y \left(p_i^{n+1} U_{i,N_y}^{n+1} - q_i^{n+1}\right)\right) + (1 + b_y)\, U_{i,N_y}^{n+1} - c_y U_{i,N_y-1}^{n+1} =$$
$$= a_y \left(U_{i,N_y-1}^n - 2h_y \left(p_i^n U_{i,N_y}^n - q_i^n\right)\right) + (1 - b_y)\, U_{i,N_y}^n + c_y U_{i,N_y-1}^n.$$

$$\left(1 + b_y + 2h_y a_y p_i^{n+1}\right) U_{i,N_y}^{n+1} - (a_y + c_y) U_{i,N_y-1}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_i^n\right) U_{i,N_y}^n + (a_y + c_y) U_{i,N_y-1}^n + 2a_y h_y \left(q_i^{n+1} + q_i^n\right)$$

$$\left(1 + b_y + 2h_y a_y p_i^{n+1}\right) U_{i,N_y}^{n+1} - b_y U_{i,N_y-1}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_i^n\right) U_{i,N_y}^n + b_y U_{i,N_y-1}^n + 2a_y h_y \left(q_i^{n+1} + q_i^n\right). \tag{30}$$

Обозначим $\gamma_2 = -b_y$, $\delta_2 = 1 + b_y + 2h_y a_y p_i^{n+1}$

$$\delta_2 U_{i,N_y}^{n+1} + \gamma_2 U_{i,N_y-1}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_i^n\right) U_{i,N_y}^n + b_y U_{i,N_y-1}^n + 2a_y h_y \left(q_i^{n+1} + q_i^n\right). \tag{31}$$

Объединяя формулы (21) – (31) заключаем, что задача (17) – (20) сводится к следующему виду:

$$-a_x U_{i+1,j}^* + (1 + b_x)\, U_{i,j}^* - c_x U_{i-1,j}^* = a_x U_{i+1,j}^n + c_x U_{i-1,j}^n + 2a_y U_{i,j+1}^n + 2c_y U_{i,j-1}^n + (1 - b_x - 2b_y) U_{i,j}^n,$$
$$-a_y U_{i,j+1}^{n+1} + (1 + b_y)\, U_{i,j}^{n+1} - c_y U_{i,j-1}^{n+1} = U_{i,j}^* - a_y U_{i,j+1}^n - c_y U_{i,j-1}^n + b_y U_{i,j}^n,$$

где $i = \overline{1, N_x - 1}$, $j = \overline{1, N_y - 1}$, $n = \overline{0, T}$; $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x = a_x + c_x$ $a_y = \frac{\tau D_y^+}{2h^2}, c_y = \frac{\tau D_y^-}{2h^2}, b_y = a_y + c_y$.

Начальные условия

$$U_{ij}^0 = \psi_{ij}, \quad i = \overline{1, N_x - 1}, \ j = \overline{1, N_y - 1}.$$

Примеры граничных условий первого рода на границах $x = x_0$, $x = x_1$, $y = y_0$ и $y = y_1$ соответственно:

$$U_{0j}^n = \varphi_j^n, \qquad U_{N_x j}^n = \varphi_j^n, \qquad U_{i0}^n = \varphi_i^n, \qquad U_{iN_y}^n = \varphi_i^n,$$

где $j = \overline{1, N_y - 1}$, $n = \overline{0, T}$.

Примеры граничных условий третьего рода на границах $x = x_0$, $x = x_1$, $y = y_0$ и $y = y_1$ соответственно:

$$\beta_1 U_{1,j}^{n+1} + \alpha_1 U_{0,j}^{n+1} = b_x U_{1,j}^n + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p_j^n\right) U_{0,j}^n - 2c_x h_x (q_j^{n+1} + q_j^n).$$
$$\delta_1 U_{N_x,j}^{n+1} + \gamma_1 U_{N_x-1,j}^{n+1} = \left(1 - b_x - 2h_x a_x p_j^n\right) U_{N_x,j}^n + b_x U_{N_x-1,j}^n + 2a_x h_x \left(q_j^{n+1} + q_j^n\right).$$
$$\beta_2 U_{i,1}^{n+1} + \alpha_2 U_{i,0}^{n+1} = b_y U_{i,1}^n + (1 - b_y - 2c_y h_y p_i^n)\, U_{i,0}^n - 2c_y h_y (q_i^{n+1} + q_i^n).$$
$$\delta_2 U_{i,N_y}^{n+1} + \gamma_2 U_{i,N_y-1}^{n+1} = (1 - b_y - 2h_y a_y p_i^n)\, U_{i,N_y}^n + b_y U_{i,N_y-1}^n + 2a_y h_y \left(q_i^{n+1} + q_i^n\right).$$

где $n = \overline{0, T}$, $\alpha_1 = 1 + b_x + 2c_x h_x p_j^{n+1}$, $\beta_1 = -b_x$, $\gamma_1 = -b_x$, $\delta_1 = 1 + b_x + 2h_x a_x p_j^{n+1}$, $\alpha_2 = 1 + b_y + 2c_y h_y p_i^{n+1}$, $\beta_2 = -b_y$, $\gamma_2 = -b_y$, $\delta_2 = 1 + b_y + 2h_y a_y p_i^{n+1}$

---

4 Схема Дугласа – Ганна

В трёхменрном случае задача приобретает вид:

$$\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}U(t,x,y,z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}U(t,x,y,z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}U(t,x,y,z) + H(t,x,y,z), \quad (32)$$

$$x \in \Omega = [x_0, x_1] \times [y_0, y_1] \times [z_0, z_1], \ \partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 \quad (33)$$

$$U(0,x,y,z) = g(x,y,z), \quad (34)$$

$$U(t,x,y,z)\big|_{(x,y,z)\in\partial\Omega_1} = \varphi(t,x,y,z), \quad (35)$$

$$\left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial \vec{n}}\right|_{(x,y,z)\in\partial\Omega_2} + p(t)\, U(t,x,y)\big|_{(x,y,z)\in\partial\Omega_2} = \varphi(t,x,y). \quad (36)$$

Многошаговая реализация метода Дугласа – Ганна имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{U^*-U^n}{\tau} & = \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + L_2U^n + L_3U^n + H^n \\ \frac{U^{**}-U^n}{\tau} & = \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}L_2U^{**} + \frac{1}{2}L_2U^n + L_3U^n \\ \frac{U^{n+1}-U^n}{\tau} & = \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}L_2U^{**} + \frac{1}{2}L_2U^n + \frac{1}{2}L_3U^{n+1} + \frac{1}{2}L_3U^n + \frac{1}{2}\left(H^{n+1} + H^n\right) \end{cases}$$

Каждое из уравнений системы — аппроксимация полного уравнения диффузии => не нужно модификаций для граничных условий. Проведём разделение известных и неизвестных переменных для каждого из уравнений.

$$\begin{cases} \frac{U^*}{\tau} - \frac{1}{2}L_1U^* & = \frac{U^n}{\tau} + \frac{1}{2}L_1U^n + L_2U^n + L_3U^n \\ \frac{U^{**}}{\tau} - \frac{1}{2}L_2U^{**} & = \frac{U^n}{\tau} + \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}L_2U^n + L_3U^n \\ \frac{U^{n+1}}{\tau} - \frac{1}{2}L_3U^{n+1} & = \frac{U^n}{\tau} + \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_1U^n + \frac{1}{2}L_2U^{**} + \frac{1}{2}L_2U^n + \frac{1}{2}L_3U^n \end{cases}$$

Сгруппируем операторы

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* & = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2 + L_3\right)U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} & = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2 + L_3\right)U^n + \frac{1}{2}L_1U^* \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_3\right)U^{n+1} & = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2 + \frac{1}{2}L_3\right)U^n + \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_2U^{**} \end{cases}$$

Вычтем первое уравнение из второго и второе из третьего:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2 + L_3\right)U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} - \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* = \\ \qquad = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2 + L_3\right)U^n + \frac{1}{2}L_1U^* - \\ \qquad - \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2 + L_3\right)U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_3\right)U^{n+1} - \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} = \\ \qquad = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2 + \frac{1}{2}L_3\right)U^n + \frac{1}{2}L_1U^* + \frac{1}{2}L_2U^{**} - \\ \qquad - \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + \frac{1}{2}L_2 + L_3\right)U^n - \frac{1}{2}L_1U^* \end{cases}$$

Отсюда

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* & = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2 + L_3\right)U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} - \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* & = -\frac{1}{2}L_2U^n + \frac{1}{2}L_1U^* \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_3\right)U^{n+1} - \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} & = -\frac{1}{2}L_3U^n + \frac{1}{2}L_2U^{**} \end{cases}$$

Переносим вычитаемые в правую часть и сокращаем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_1\right)U^* & = \left(\frac{1}{\tau}I + \frac{1}{2}L_1 + L_2 + L_3\right)U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_2\right)U^{**} & = \frac{1}{\tau}U^* - \frac{1}{2}L_2U^n \\ \left(\frac{1}{\tau}I - \frac{1}{2}L_3\right)U^{n+1} & = \frac{1}{\tau}U^{**} - \frac{1}{2}L_3U^n \end{cases}$$

Домножим все части на τ:

$$\begin{cases} \left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* & = \left(I + \frac{\tau}{2}L_1 + \tau L_2 + \tau L_3\right)U^n \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{**} & = U^* - \frac{\tau}{2}L_2U^n \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_3\right)U^{n+1} & = U^{**} - \frac{\tau}{2}L_3U^n \end{cases}$$

Операторы L_1, L_2 и L_3 имеют вид:

$$L_1U = \frac{D_x^+\frac{U_{i+1,j,k}-U_{i,j,k}}{h} - D_x^-\frac{U_{i,j,k}-U_{i-1,j,k}}{h}}{h} = \frac{D_x^+}{h^2}U_{i+1,j,k} - \frac{D_x^+}{h^2}U_{i,j,k} - \frac{D_x^-}{h^2}U_{i,j,k} + \frac{D_x^-}{h^2}U_{i-1,j,k}, \quad \forall i,j,k;$$
$$L_2U = \frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j+1,k} - \frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j,k} - \frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j,k} + \frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j-1,k}, \quad \forall i,j,k;$$
$$L_3U = \frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k+1} - \frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k} - \frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k} + \frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k-1}, \quad \forall i,j,k;$$

Перепишем левые части уравнений системы (4) в виде, удобном для заполнения матриц

$$\begin{aligned} \left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* = U^*_{i,j,k} - \frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h^2}U^*_{i+1,j,k} - \frac{D_x^+}{h^2}U^*_{i,j,k} - \frac{D_x^-}{h^2}U^*_{i,j,k} + \frac{D_x^-}{h^2}U^*_{i-1,j,k}\right] = \\ = -\frac{\tau D_x^+}{2h^2}U^*_{i+1,j,k} + \left(1 + \frac{\tau D_x^+}{2h^2} + \frac{\tau D_x^-}{2h^2}\right)U^*_{i,j,k} - \frac{\tau D_x^-}{2h^2}U^*_{i-1,j,k}, \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{**} = -\frac{\tau D_y^+}{2h^2}U^{**}_{i,j+1,k} + \left(1 + \frac{\tau D_y^+}{2h^2} + \frac{\tau D_y^-}{2h^2}\right)U^{**}_{i,j,k} - \frac{\tau D_y^-}{2h^2}U^{**}_{i,j-1,k} \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_3\right)U^{n+1} = -\frac{\tau D_z^+}{2h^2}U^{n+1}_{i,j,k+1} + \left(1 + \frac{\tau D_z^+}{2h^2} + \frac{\tau D_z^-}{2h^2}\right)U^{n+1}_{i,j,k} - \frac{\tau D_z^-}{2h^2}U^{n+1}_{i,j,k-1} \end{aligned}$$

Обозначим $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}$, $a_y = \frac{\tau D_y^+}{2h^2}, c_y = \frac{\tau D_y^-}{2h^2}$ и $a_z = \frac{\tau D_z^+}{2h^2}, c_z = \frac{\tau D_z^-}{2h^2}$ соответственно. Тогда

$$\begin{aligned} \left(I - \frac{\tau}{2}L_1\right)U^* = -a_xU^*_{i+1,j,k} + (1 + a_x + c_x)U^*_{i,j,k} - c_xU^*_{i-1,j,k}, \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_2\right)U^{**} = -a_yU^{**}_{i,j+1,k} + (1 + a_y + c_y)U^{**}_{i,j,k} - c_yU^{**}_{i,j-1,k} \\ \left(I - \frac{\tau}{2}L_3\right)U^{n+1} = -a_zU^{n+1}_{i,j,k+1} + (1 + a_z + c_z)U^{n+1}_{i,j,k} - c_zU^{n+1}_{i,j,k-1} \end{aligned}$$

Распишем правую часть первого уравнения системы (4)

$$\left(I+\frac{\tau}{2}L_1+\tau L_2+\tau L_3\right)U = U_{i,j,k}+\frac{\tau}{2}\left[\frac{D_x^+}{h^2}U_{i+1,j,k}-\frac{D_x^+}{h^2}U_{i,j,k}-\frac{D_x^-}{h^2}U_{i,j,k}+\frac{D_x^-}{h^2}U_{i-1,j,k}\right]+$$
$$+\tau\left[\frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j+1,k}-\frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j,k}-\frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j,k}+\frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j-1,k}\right]+$$
$$+\tau\left[\frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k+1}-\frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k}-\frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k}+\frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k-1}\right]=$$
$$=\frac{\tau D_x^+}{2h^2}U_{i+1,j,k}+\frac{\tau D_x^-}{2h^2}U_{i-1,j,k}+\frac{\tau D_y^+}{h^2}U_{i,j+1,k}+\frac{\tau D_y^-}{h^2}U_{i,j-1,k}+\frac{\tau D_z^+}{h^2}U_{i,j,k+1}+\frac{\tau D_z^-}{h^2}U_{i,j,k-1}+$$
$$+\left[1-\frac{\tau D_x^+}{2h^2}-\frac{\tau D_x^-}{2h^2}-\frac{\tau D_y^+}{h^2}-\frac{\tau D_y^-}{h^2}-\frac{\tau D_z^+}{h^2}-\frac{\tau D_z^-}{h^2}\right]U_{i,j,k}=$$
$$=a_xU_{i+1,j,k}+c_xU_{i-1,j,k}+2a_yU_{i,j+1,k}+2c_yU_{i,j-1,k}+2a_zU_{i,j,k+1}+2c_zU_{i,j,k-1}+$$
$$+\left[1-a_x-c_x-2a_y-2c_y-2a_z-2c_z\right]U_{i,j,k},\quad \forall i,j,k;$$

То же для остальных уравнений:

$$U^*-\frac{\tau}{2}L_2U=U^*_{i,j,k}-\frac{\tau}{2}\left[\frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j+1,k}-\frac{D_y^+}{h^2}U_{i,j,k}-\frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j,k}+\frac{D_y^-}{h^2}U_{i,j-1,k}\right]=$$
$$=U^*_{i,j,k}-a_yU_{i,j+1,k}+(a_y+c_y)\,U_{i,j,k}-c_yU_{i,j-1,k}=$$
$$=U^*_{i,j,k}-a_yU_{i,j+1,k}+b_yU_{i,j,k}-c_yU_{i,j-1,k}$$

$$U^{**}-\frac{\tau}{2}L_3U=U^{**}_{i,j,k}-\frac{\tau}{2}\left[\frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k+1}-\frac{D_z^+}{h^2}U_{i,j,k}-\frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k}+\frac{D_z^-}{h^2}U_{i,j,k-1}\right]=$$
$$=U^{**}_{i,j,k}-a_zU_{i,j,k+1}+(a_z+c_z)\,U_{i,j,k}-c_zU_{i,j,k-1}=$$
$$=U^{**}_{i,j,k}-a_zU_{i,j,k+1}+b_zU_{i,j,k}-c_zU_{i,j,k-1}$$

Обозначая $b_x=a_x+c_x$, $b_y=a_y+c_y$ и $b_z=a_z+c_z$
Окончательно на n-ом шаге имеем:

$$-a_xU^*_{i+1,j,k}+(1+b_x)\,U^*_{i,j,k}-c_xU^*_{i-1,j,k}=a_xU_{i+1,j,k}+c_xU_{i-1,j,k}+2a_yU_{i,j+1,k}+2c_yU_{i,j-1,k}+$$
$$+2a_zU_{i,j,k+1}+2c_zU_{i,j,k-1}+\left[1-b_x-2b_y-2b_z\right]U_{i,j,k}\quad(37)$$

$$-a_yU^{**}_{i,j+1,k}+(1+b_y)\,U^{**}_{i,j,k}-c_yU^{**}_{i,j-1,k}=U^*_{i,j,k}-a_yU_{i,j+1,k}+b_yU_{i,j,k}-c_yU_{i,j-1,k}$$
$$-a_zU^{n+1}_{i,j,k+1}+(1+b_z)\,U^{n+1}_{i,j,k}-c_zU^{n+1}_{i,j,k-1}=U^{**}_{i,j,k}-a_zU_{i,j,k+1}+b_zU_{i,j,k}-c_zU_{i,j,k-1}$$

где $a_x=\frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x=\frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x=a_x+c_x$, $a_y=\frac{\tau D_y^+}{2h^2}, c_y=\frac{\tau D_y^-}{2h^2}, b_y=a_y+c_y$ и $a_z=\frac{\tau D_z^+}{2h^2}, c_z=\frac{\tau D_z^-}{2h^2}, b_z=a_z+c_z$ соответственно.

Начальные условия

$$U^0_{ijk}=\psi_{ijk},\quad i=\overline{1,N_x-1},\ j=\overline{1,N_y-1},\ k=\overline{1,N_z-1}.\quad(38)$$

Примеры граничных условий первого рода:

$$U^n_{0jk}=\varphi^n_{jk},\qquad U^n_{N_xjk}=\varphi^n_{jk},\qquad U^n_{i0k}=\varphi^n_{ik},\qquad U^n_{iN_yk}=\varphi^n_{ik},\qquad U^n_{ij0}=\varphi^n_{ij},\qquad U^n_{ijN_z}=\varphi^n_{ij},$$

где $i=\overline{1,N_x-1},\ j=\overline{1,N_y-1},\ k=\overline{1,N_z-1},\ n=\overline{0,T}.$

Рассмотрим примеры граничных условий третьего рода:

$$\left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial x}\right|_{x=x_0}+p(t)U(t,x_0,y,z)=q(t,y,z),\ \left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial x}\right|_{x=x_1}+p(t)U(t,x_1,y,z)=q(t,y,z),$$
$$\left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial y}\right|_{y=y_0}+p(t)U(t,x,y_0,z)=q(t,x,z),\ \left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial y}\right|_{y=y_1}+p(t)U(t,x,y_1,z)=q(t,x,z),$$
$$\left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial z}\right|_{z=z_0}+p(t)U(t,x,y,z_0)=q(t,x,y),\ \left.\frac{\partial U(t,x,y,z)}{\partial z}\right|_{z=z_1}+p(t)U(t,x,y,z_1)=q(t,x,y),$$

где $x\in[x_0,x_1], y\in[y_0,y_1], z\in[z_0,z_1], t\in[t_0,t_1]$.

По формуле центральной разности для условия на границе $x=x_0$

$$\frac{U^n_{1,j,k}-U^n_{-1,j,k}}{2h_x}+p^n_jU^n_{0,j,k}=q^n_{jk},\qquad U^n_{-1,j,k}=U^n_{1,j,k}-2h_x\left(p^n_{jk}U^n_{0,j,k}+q^n_{jk}\right)$$

Подставим в уравнение

$$\begin{aligned}-a_xU^{n+1}_{1,j,k}+(1+b_x)\,U^{n+1}_{0,j,k}-c_x\left(U^{n+1}_{1,j,k}-2h_x(p^{n+1}_{jk}U^{n+1}_{0,j,k}+q^{n+1}_{jk})\right)=\\=a_xU^n_{1,j,k}+(1-b_x)\,U^n_{0,j,k}+c_x\left(U^n_{1,j,k}-2h_x(p^n_{jk}U^n_{0,j,k}+q^n_{jk})\right).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}-(a_x+c_x)U^{n+1}_{1,j,k}+\left(1+b_x+2c_xh_xp^{n+1}_{jk}\right)U^{n+1}_{0,j,k}=\\=(a_x+c_x)U^n_{1,j,k}+\left(1-b_x-2c_xh_xp^n_{jk}\right)U^n_{0,j,k}-2c_xh_x(q^{n+1}_{jk}+q^n_{jk}).\end{aligned}$$

$$-b_xU^{n+1}_{1,j,k}+\left(1+b_x+2c_xh_xp^{n+1}_{jk}\right)U^{n+1}_{0,j,k}=b_xU^n_{1,j,k}+\left(1-b_x-2c_xh_xp^n_{jk}\right)U^n_{0,j,k}-2c_xh_x(q^{n+1}_{jk}+q^n_{jk}). \tag{39}$$

Обозначим $\alpha_1=1+b_x+2c_xh_xp^{n+1}_{jk}$, $\beta_1=-b_x$

$$\beta_1U^{n+1}_{1,j,k}+\alpha_1U^{n+1}_{0,j,k}=b_xU^n_{1,j,k}+\left(1-b_x-2c_xh_xp^n_{jk}\right)U^n_{0,j,k}-2c_xh_x(q^{n+1}_{jk}+q^n_{jk}). \tag{40}$$

Аналогично для границы $x=x_1$:

$$\frac{U^n_{N_x+1,j,k}-U^n_{N_x-1,j,k}}{2h_x}+p^n_{jk}U^n_{N_x,j,k}=q^n_{jk},\qquad U^n_{N_x+1,j,k}=U^n_{N_x-1,j,k}-2h_x\left(p^n_{jk}U^n_{N_x,j,k}-q^n_{jk}\right)$$

$$\begin{aligned}-a_x\left(U^{n+1}_{N_x-1,j,k}-2h_x\left(p^{n+1}_{jk}U^{n+1}_{N_x,j,k}-q^{n+1}_{jk}\right)\right)+(1+b_x)\,U^{n+1}_{N_x,j,k}-c_xU^{n+1}_{N_x-1,j,k}=\\=a_x\left(U^n_{N_x-1,j,k}-2h_x\left(p^n_{kj}U^n_{N_x,j,k}-q^n_{jk}\right)\right)+(1-b_x)\,U^n_{N_x,j,k}+c_xU^n_{N_x-1,j,k}.\end{aligned}$$

$$\left(1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}_{jk}\right)U^{n+1}_{N_x,j,k}-(a_x+c_x)U^{n+1}_{N_x-1,j,k}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^n_{jk}\right)U^n_{N_x,j,k}+(a_x+c_x)U^n_{N_x-1,j,k}+2a_xh_x\left(q^{n+}_{jk}\right.$$

$$\left(1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}_{jk}\right)U^{n+1}_{N_x,j,k}-b_xU^{n+1}_{N_x-1,j,k}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^n_{jk}\right)U^n_{N_x,j,k}+b_xU^n_{N_x-1,j,k}+2a_xh_x\left(q^{n+1}_{jk}+q^n_{jk}\right). \tag{41}$$

Обозначим $\gamma_1=-b_x$, $\delta_1=1+b_x+2h_xa_xp^{n+1}_{jk}$

$$\delta_1U^{n+1}_{N_x,j,k}+\gamma_1U^{n+1}_{N_x-1,j,k}=\left(1-b_x-2h_xa_xp^n_{jk}\right)U^n_{N_x,j,k}+b_xU^n_{N_x-1,j,k}+2a_xh_x\left(q^{n+1}_{jk}+q^n_{jk}\right). \tag{42}$$

По формуле центральной разности для условия на границе $y=y_0$

$$\frac{U^n_{i,1,k}-U^n_{i,-1,k}}{2h_y}+p^n_{ik}U^n_{i,0,k}=q^n_{ik},\qquad U^n_{i,-1,k}=U^n_{i,1,k}-2h_y\left(p^n_{ik}U^n_{i,0,k}+q^n_{ik}\right)$$

Подставим в уравнение

$$
\begin{aligned}
&- a_y U_{i,1,k}^{n+1} + (1+b_y)\, U_{i,0,k}^{n+1} - c_y \left(U_{i,1,k}^{n+1} - 2h_y (p_{ik}^{n+1} U_{i,0,k}^{n+1} + q_{ik}^{n+1}) \right) = \\
&\qquad = a_y U_{i,1,k}^{n} + (1-b_y)\, U_{i,0,k}^{n} + c_y \left(U_{i,1,k}^{n} - 2h_y (p_{ik}^{n} U_{i,0,k}^{n} + q_{ik}^{n}) \right).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- (a_y + c_y) U_{i,1,k}^{n+1} + \left(1 + b_y + 2c_y h_y p_{ik}^{n+1}\right) U_{i,0,k}^{n+1} = \\
&\qquad = (a_y + c_y) U_{i,1,k}^{n} + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_{ik}^{n+1}\right) U_{i,0,k}^{n} - 2c_y h_y (q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^{n}).
\end{aligned}
$$

$$
-b_y U_{i,1,k}^{n+1} + \left(1 + b_y + 2c_y h_y p_{ik}^{n+1}\right) U_{i,0,k}^{n+1} = b_y U_{i,1,k}^{n} + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_{ik}^{n}\right) U_{i,0,k}^{n} - 2c_y h_y (q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^{n}). \tag{43}
$$

Обозначим $\alpha_2 = 1 + b_y + 2c_y h_y p_{ik}^{n+1}$, $\beta_2 = -b_y$

$$
\beta_2 U_{i,1,k}^{n+1} + \alpha_2 U_{i,0,k}^{n+1} = b_y U_{i,1,k}^{n} + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_{ik}^{n}\right) U_{i,0,k}^{n} - 2c_y h_y (q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^{n}). \tag{44}
$$

Аналогично для границы $y = y_1$:

$$
\frac{U_{i,N_y+1,k}^{n} - U_{i,N_y-1,k}^{n}}{2h_y} + p_{ik}^{n} U_{i,N_y,k}^{n} = q_{ik}^{n}, \qquad U_{i,N_y+1,k}^{n} = U_{i,N_y-1,k}^{n} - 2h_y \left(p_{ik}^{n} U_{i,N_y,k}^{n} - q_{ik}^{n} \right)
$$

$$
\begin{aligned}
&- a_y \left(U_{i,N_y-1,k}^{n+1} - 2h_y \left(p_{ik}^{n+1} U_{i,N_y,k}^{n+1} - q_{ik}^{n+1} \right) \right) + (1+b_y)\, U_{i,N_y,k}^{n+1} - c_y U_{i,N_y-1,k}^{n+1} = \\
&\qquad = a_y \left(U_{i,N_y-1,k}^{n} - 2h_y \left(p_{ik}^{n} U_{i,N_y,k}^{n} - q_{ik}^{n} \right) \right) + (1-b_y)\, U_{i,N_y,k}^{n} + c_y U_{i,N_y-1,k}^{n}.
\end{aligned}
$$

$$
\left(1 + b_y + 2h_y a_y p_{ik}^{n+1}\right) U_{i,N_y,k}^{n+1} - (a_y + c_y) U_{i,N_y-1,k}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_{ik}^{n}\right) U_{i,N_y,k}^{n} + (a_y + c_y) U_{i,N_y-1,k}^{n} + 2a_y h_y \left(q_{ik}^{n+1}\right.
$$

$$
\left(1 + b_y + 2h_y a_y p_{ik}^{n+1}\right) U_{i,N_y,k}^{n+1} - b_y U_{i,N_y-1,k}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_{ik}^{n}\right) U_{i,N_y,k}^{n} + b_y U_{i,N_y-1,k}^{n} + 2a_y h_y \left(q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^{n} \right). \tag{45}
$$

Обозначим $\gamma_2 = -b_y$, $\delta_2 = 1 + b_y + 2h_y a_y p_{ik}^{n+1}$

$$
\delta_2 U_{i,N_y,k}^{n+1} + \gamma_2 U_{i,N_y-1,k}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_{ik}^{n}\right) U_{i,N_y,k}^{n} + b_y U_{i,N_y-1,k}^{n} + 2a_y h_y \left(q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^{n} \right). \tag{46}
$$

По формуле центральной разности для условия на границе $z = z_0$

$$
\frac{U_{i,j,1}^{n} - U_{i,j,-1}^{n}}{2h_z} + p_{ij}^{n} U_{i,j,0}^{n} = q_{ij}^{n}, \qquad U_{i,j,-1}^{n} = U_{i,j,1}^{n} - 2h_z \left(p_{ij}^{n} U_{i,j,0}^{n} + q_{ij}^{n} \right)
$$

Подставим в уравнение

$$
\begin{aligned}
&- a_z U_{i,j,1}^{n+1} + (1+b_z)\, U_{i,j,0}^{n+1} - c_z \left(U_{i,j,1}^{n+1} - 2h_z (p_{ij}^{n+1} U_{i,j,0}^{n+1} + q_{ij}^{n+1}) \right) = \\
&\qquad = a_z U_{i,j,1}^{n} + (1-b_z)\, U_{i,j,0}^{n} + c_z \left(U_{i,j,1}^{n} - 2h_z (p_{ij}^{n} U_{i,j,0}^{n} + q_{ij}^{n}) \right).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- (a_z + c_z) U_{i,j,1}^{n+1} + \left(1 + b_z + 2c_z h_z p_{ij}^{n+1}\right) U_{i,j,0}^{n+1} = \\
&\qquad = (a_z + c_z) U_{i,j,1}^{n} + \left(1 - b_z - 2c_z h_z p_{ij}^{n}\right) U_{i,j,0}^{n} - 2c_z h_z (q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^{n}).
\end{aligned}
$$

$$
-b_z U_{i,j,1}^{n+1} + \left(1 + b_z + 2c_z h_z p_{ij}^{n+1}\right) U_{i,j,0}^{n+1} = b_z U_{i,j,1}^{n} + \left(1 - b_z - 2c_z h_z p_{ij}^{n}\right) U_{i,j,0}^{n} - 2c_z h_z (q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^{n}). \tag{47}
$$

Обозначим $\alpha_3 = 1 + b_z + 2c_z h_z p_{ij}^{n+1}$, $\beta_3 = -b_z$

$$\beta_3 U_{i,j,1}^{n+1} + \alpha_3 U_{i,j,0}^{n+1} = b_z U_{i,j,1}^n + \left(1 - b_z - 2c_z h_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,0}^n - 2c_z h_z (q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^n). \qquad (48)$$

Аналогично для границы $z = z_1$:

$$\frac{U_{i,j,N_z+1}^n - U_{i,j,N_z-1}^n}{2h_z} + p_{ij}^n U_{i,j,N_z}^n = q_{ij}^n, \qquad U_{i,j,N_z+1}^n = U_{i,j,N_z-1}^n - 2h_z \left(p_{ij}^n U_{i,j,N_z}^n - q_{ij}^n\right)$$

$$- a_z \left(U_{i,j,N_z-1}^{n+1} - 2h_z \left(p_{ij}^{n+1} U_{i,j,N_z}^{n+1} - q_{ij}^{n+1}\right)\right) + (1 + b_z) U_{i,j,N_z}^{n+1} - c_z U_{i,j,N_z-1}^{n+1} =$$
$$= a_z \left(U_{i,j,N_z-1}^n - 2h_z \left(p_{ij}^n U_{i,j,N_z}^n - q_{ij}^n\right)\right) + (1 - b_z) U_{i,j,N_z}^n + c_z U_{i,j,N_z-1}^n.$$

$$\left(1 + b_z + 2h_z a_z p_{ij}^{n+1}\right) U_{i,j,N_z}^{n+1} - (a_z + c_z) U_{i,j,N_z-1}^{n+1} = \left(1 - b_z - 2h_z a_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,N_z}^n + (a_z + c_z) U_{i,j,N_z-1}^n + 2a_z h_z \left(q_{ij}^{n+1} +\right.$$

$$\left(1 + b_z + 2h_z a_z p_{ij}^{n+1}\right) U_{i,j,N_z}^{n+1} - b_z U_{i,j,N_z-1}^{n+1} = \left(1 - b_z - 2h_z a_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,N_z}^n + b_z U_{i,j,N_z-1}^n + 2a_z h_z \left(q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^n\right). \qquad (49)$$

Обозначим $\gamma_3 = -b_z$, $\delta_3 = 1 + b_z + 2h_z a_z p_{ij}^{n+1}$

$$\delta_3 U_{i,j,N_z}^{n+1} + \gamma_3 U_{i,j,N_z-1}^{n+1} = \left(1 - b_z - 2h_z a_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,N_z}^n + b_z U_{i,j,N_z-1}^n + 2a_z h_z \left(q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^n\right). \qquad (50)$$

Объединяя формулы (37) – (50) заключаем, что задача (32) – (36) сводится к следующему виду:

$$- a_x U_{i+1,j,k}^* + (1 + b_x) U_{i,j,k}^* - c_x U_{i-1,j,k}^* = a_x U_{i+1,j,k} + c_x U_{i-1,j,k} + 2a_y U_{i,j+1,k} + 2c_y U_{i,j-1,k} +$$
$$+ 2a_z U_{i,j,k+1} + 2c_z U_{i,j,k-1} + [1 - b_x - 2b_y - 2b_z] U_{i,j,k}$$

$$-a_y U_{i,j+1,k}^{**} + (1 + b_y) U_{i,j,k}^{**} - c_y U_{i,j-1,k}^{**} = U_{i,j,k}^* - a_y U_{i,j+1,k} + b_y U_{i,j,k} - c_y U_{i,j-1,k}$$
$$-a_z U_{i,j,k+1}^{n+1} + (1 + b_z) U_{i,j,k}^{n+1} - c_z U_{i,j,k-1}^{n+1} = U_{i,j,k}^{**} - a_z U_{i,j,k+1} + b_z U_{i,j,k} - c_z U_{i,j,k-1}$$

где $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x = a_x + c_x$, $a_y = \frac{\tau D_y^+}{2h^2}, c_y = \frac{\tau D_y^-}{2h^2}, b_y = a_y + c_y$ и $a_z = \frac{\tau D_z^+}{2h^2}, c_z = \frac{\tau D_z^-}{2h^2}, b_z = a_z + c_z$ соответственно.

Начальные условия

$$U_{ijk}^0 = \psi_{ijk}, \quad i = \overline{1, N_x - 1},\ j = \overline{1, N_y - 1},\ k = \overline{1, N_z - 1}.$$

Примеры граничных условий первого рода на границах $x = x_0$, $x = x_1$, $y = y_0$, $y = y_1$, $z = z_0$ и $z = z_1$ соответственно:

$$U_{0jk}^n = \varphi_{jk}^n, \qquad U_{N_x jk}^n = \varphi_{jk}^n, \qquad U_{i0k}^n = \varphi_{ik}^n, \qquad U_{iN_y k}^n = \varphi_{ik}^n, \qquad U_{ij0}^n = \varphi_{ij}^n, \qquad U_{ijN_z}^n = \varphi_{ij}^n,$$

где $i = \overline{1, N_x - 1},\ j = \overline{1, N_y - 1},\ k = \overline{1, N_z - 1},\ n = \overline{0, T}$.

$$\beta_1 U_{1,j,k}^{n+1} + \alpha_1 U_{0,j,k}^{n+1} = b_x U_{1,j,k}^n + \left(1 - b_x - 2c_x h_x p_{jk}^n\right) U_{0,j,k}^n - 2c_x h_x (q_{jk}^{n+1} + q_{jk}^n).$$
$$\delta_1 U_{N_x,j,k}^{n+1} + \gamma_1 U_{N_x-1,j,k}^{n+1} = \left(1 - b_x - 2h_x a_x p_{jk}^n\right) U_{N_x,j,k}^n + b_x U_{N_x-1,j,k}^n + 2a_x h_x \left(q_{jk}^{n+1} + q_{jk}^n\right).$$
$$\beta_2 U_{i,1,k}^{n+1} + \alpha_2 U_{i,0,k}^{n+1} = b_y U_{i,1,k}^n + \left(1 - b_y - 2c_y h_y p_{ik}^n\right) U_{i,0,k}^n - 2c_y h_y (q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^n).$$
$$\delta_2 U_{i,N_y,k}^{n+1} + \gamma_2 U_{i,N_y-1,k}^{n+1} = \left(1 - b_y - 2h_y a_y p_{ik}^n\right) U_{i,N_y,k}^n + b_y U_{i,N_y-1,k}^n + 2a_y h_y \left(q_{ik}^{n+1} + q_{ik}^n\right).$$
$$\beta_3 U_{i,j,1}^{n+1} + \alpha_3 U_{i,j,0}^{n+1} = b_z U_{i,j,1}^n + \left(1 - b_z - 2c_z h_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,0}^n - 2c_z h_z (q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^n).$$
$$\delta_3 U_{i,j,N_z}^{n+1} + \gamma_3 U_{i,j,N_z-1}^{n+1} = \left(1 - b_z - 2h_z a_z p_{ij}^n\right) U_{i,j,N_z}^n + b_z U_{i,j,N_z-1}^n + 2a_z h_z \left(q_{ij}^{n+1} + q_{ij}^n\right).$$

где $a_x = \frac{\tau D_x^+}{2h^2}, c_x = \frac{\tau D_x^-}{2h^2}, b_x = a_x + c_x$, $a_y = \frac{\tau D_y^+}{2h^2}, c_y = \frac{\tau D_y^-}{2h^2}, b_y = a_y + c_y$ и $a_z = \frac{\tau D_z^+}{2h^2}, c_z = \frac{\tau D_z^-}{2h^2}, b_z = a_z + c_z$, $\alpha_1 = 1 + b_x + 2c_x h_x p_{jk}^{n+1}$, $\beta_1 = -b_x$, $\gamma_1 = -b_x$, $\delta_1 = 1 + b_x + 2h_x a_x p_{jk}^{n+1}$, $\alpha_2 = 1 + b_y + 2c_y h_y p_{ik}^{n+1}$, $\beta_2 = -b_y$, $\gamma_2 = -b_y$, $\delta_2 = 1 + b_y + 2h_y a_y p_{ik}^{n+1}$, $\alpha_3 = 1 + b_z + 2c_z h_z p_{ij}^{n+1}$, $\beta_3 = -b_z$, $\gamma_3 = -b_z$, $\delta_3 = 1 + b_z + 2h_z a_z p_{ij}^{n+1}$.

Список литературы

[1] Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. М.: КноРус, 2014. 312 с.