УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПОДЗЕМНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ

Равшанов Н.[1], [+] *Усмонов Л.*[1], *Курбонов Н.М.*[1]

[1] НИИ развития цифровых технологий и искусственного интеллекта, Ташкент, Узбекистан

[+] uslochinbek@gmail.com

Аннотация. В статье представлена математическая модель и численные алгоритмы решения трехмерной задачи фильтрации жидкости в пористой среде на примере гидродинамического процесса подземного выщелачивания (ПВ). Разработанный математический аппарат позволяет всесторонне изучить параметры разработки рудного пласта, выбрать оптимальное размещение инъекционных и добывающих скважин, оценить скорость их течения, учесть фактор обеспечения защиты подземных вод от источников загрязнения. Так как поставленная задача описывается системой многомерных квазилинейных уравнений в частных производных, получение аналитического решения является сложной задачей. Для численного интегрирования задача построения алгоритма, основанного на конечно-разностной схеме с использованием методов покомпонентного распределения и потоковой прогонки. Предложенный математический аппарат можно использовать как инструмент анализа и прогнозирования параметров разработки рудных месторождений и добычи полезных ископаемых.

Ключевые слова: подземное выщелачивание, математическое моделирование, фильтрация, диффузия, кинетика, полезная компонента, численные методы.

1 ВВЕДЕНИЕ

В современном мире определяющей характеристикой экономического развития является растущая ценность традиционных ресурсов. Ежегодный спрос на минеральные ресурсы увеличивается, что разработка месторождений требует более низких затрат и более сложных, в том числе осуществляется на значительных глубинах и в сложных геологических условиях. В таких условиях целесообразно применять геотехнологические методы добычи и переработки полезных ископаемых, основанные на переводе их в подвижное состояние.

В статье [1] двумерная задача представлена в виде цепочки одномерных задач, а вычислительные эксперименты проведены в вычислительном кластере, а результаты расчетов представлены в виде графиков. Численный анализ показывает, что начальная активность струйной струи при разработке полезных ископаемых локализуется вокруг ствола скважины. Однако наша расчетная модель показывает, что эта область со временем расширяется под влиянием проницаемости и пористости коллектора.

Математическая модель (ММ), алгоритмы расчета и соответствующее программное обеспечение, представленные в [2], применимы к аналогичным проблемам ПВ. Эта модель предлагает ценный инструмент для оценки и обоснования гидродинамических методов разработки месторождений полезных ископаемых путем подземного выщелачивания и особенно полезна для оптимизации схем добычи и размещения скважин для подземного выщелачивания месторождений драгоценных металлов.

В [2] научных исследованиях ключевыми задачами в этой области остаются расширение границ применения метода ПВ и изыскание путей и средств его использования на месторождениях, содержащих ценные полезные ископаемые. Мониторинг уровней подземных вод в районах ПВ является важным аспектом гидрогеологических исследований. Этот мониторинг позволяет оценить методы и скорости фильтрации технологических растворов, возможные потери технологических растворов, гидравлические связи между продуктивными водоносными горизонтами и безрудными горизонтами, устойчивость гидродинамического режима на изучаемой территории.

В [3] научных исследованиях ключевыми задачами в этой области остаются расширение границ применения метода ПВ и изыскание путей и средств его использования на месторождениях, содержащих ценные полезные ископаемые. Мониторинг уровней подземных вод в районах ПВ является важным аспектом гидрогеологических исследований. Этот мониторинг позволяет оценить методы и скорости фильтрации технологических растворов, возможные потери технологических растворов, гидравлические связи между продуктивными водоносными горизонтами и безрудными горизонтами, устойчивость гидродинамического режима на изучаемой территории.

В [4] подробно описываются исследования сложных, взаимозависимых технических систем (например, последовательные конфигурации скважины-насосной станции-концентратора реагентов), охватывающие несколько подсистем в промышленных процессах промывки. Эти исследования демонстрируют взаимосвязанную природу этих подсистем, подчеркивая, что неисправность даже одной из них может остановить весь рабочий цикл. Следовательно, передовые методы разработки многокомпонентных систем, такие как ПВ, получают значительное внимание. Этот подход обеспечивает превосходную экономическую эффективность и экологические преимущества по сравнению с альтернативами, избегая ущерба окружающей среде. Его широкое использование в добыче урана подчеркивает его значительную экономическую значимость.

Выщелачивание целевого компонента ПВ осуществляется путем нанесения химического реагента с последующим удалением образующихся соединений из зоны реакции текущим растворителем. Этот процесс включает несколько сложных технологических стадий, включая фильтрацию, диффузию и кинетику реакции [5–7].

Ссылки [10-12] указывают, что оптимальное давление в насосных скважинах при извлечении металла остается нерешенной проблемой. Повышенное давление увеличивает дебит скважины, но снижает производительность раствора. И наоборот, пониженное давление пропорционально уменьшает количество скважин, демонстрирующих повышенную концентрацию металла в растворе, а также снижает скорость фильтрации и выщелачивания. Таким образом, существует оптимальное давление, зависящее от выбранного критерия. Модель вычисляет необходимый дебит скважины закалки для максимизации выхода раствора.

В данной работе рассматривается математическая модель и численные алгоритмы решения трехмерной задачи фильтрации жидкости в пористой среде на примере гидродинамического процесса подземного выщелачивания.

2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исходя из вышеизложенного, для изучения процесса подземного выщелачивания необходимо определить функцию концентрации полезного компонента в ограниченной неоднородной области:

$$G=\left\{(x,y,z,t),\ 0<x<L_x,\ \ 0<y<L_y,\ 0<z<L_z,\ 0<t\le T\right\}.$$

В этом случае распространение поля давления $H(x,y,z,t)$ определяется из уравнений режима упругой фильтрации:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\right]+$$
$$+\frac{\partial}{\partial z}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\right]=\beta m(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial t}+ \tag{1}$$
$$+Q(x,y,z,t),\qquad [x,y,z]\in G,$$

удовлетворяющий начальным

$$H(x,y,z,t)=H^0(x,y,z),\ \ t=0, \tag{2}$$

и граничным условиям:

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\bigg|_{x=0}=-\iota_1\xi(H-H_0),\ \kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\bigg|_{x=L_x}=\iota_1\xi(H-H_0), \tag{3}$$

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\bigg|_{y=0}=-\iota_2\xi(H-H_0),\ \kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\bigg|_{y=L_y}=\iota_2\xi(H-H_0), \tag{4}$$

$$\left.\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\right|_{z=0}=0, \quad \kappa(x,y,z)\left.\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\right|_{z=L_z}=\iota_3\xi(H-H_0), \tag{5}$$

где: $H(x,y,z,t)$ – величина давления, (м); $H^0(x,y,z)$ – начальное значение давления, (м); m – величина коэффициента пористости; $\kappa(x,y,z)$ – коэффициент фильтрации, (м/сут); t – время (сут); $h(x,y,z)$ – мощность рудоносного горизонта (м); β – коэффициент упругой емкости, ($м^2/кг$); ι_1,ι_2,ι_3 – константы, принимающие значения 0 или 1; L_x – характерная длина по Ox (м); L_y – характерная длина по Oy (м); L_z – характерная длина по Oz (м); ξ – коэффициент для приведение в размерности уравнений (1/сут); $Q(x,y,z,t)=\sum_i^{N_q} q_i(t)\delta(x-x_i,y-y_i,z-z_i)$, $i=\overline{1,N_q}$; $q_i(t)$ – дебит скважин; $\delta=\begin{cases}1, x=x_i, y=y_i, z=z_i\\ 0, x\neq x_i, y\neq y_i, z\neq z_i\end{cases}$ – дельта-функция Дирака.

Для численного решения задачи (1)-(5) методом конечных разностей введём следующие безразмерные переменные:

$$H^*=\frac{H}{H_0},\ x^*=\frac{x}{L_x},\ y^*=\frac{y}{L_y},\ z^*=\frac{z}{L_z},\ \kappa^*=\frac{\kappa}{\kappa_0},\ h^*=\frac{h}{h_0},\ \tau=\frac{\kappa_0 t}{L^2},$$

$$q_i^*=\frac{q_i L^2}{\kappa_0 H_0 h_0},\quad Q^*=\sum_i^{N_q} q^*_i(t)\delta(x-x_i,y-y_i,z-z_i),\quad H^{*0}=\frac{H^0}{H_0},\quad \xi^*=\frac{\xi L}{\kappa_0}.$$

Подставив эти замены в уравнения (1)-(3), получим следующее:

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial x^*}\left[\kappa^*(x,y,z)h^*(x,y,z)\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial x^*}\right]+\frac{\partial}{\partial y^*}\left[\kappa^*(x,y,z)h^*(x,y,z)\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial y^*}\right]+\\ +\frac{\partial}{\partial z^*}\left[\kappa^*(x,y,z)h^*(x,y,z)\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial z^*}\right]=\beta m(x,y,z)h^*(x,y,z)\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial t}+\\ +Q^*(x,y,z,t),\quad [x,y,z]\in G,\end{gathered} \tag{6}$$

удовлетворяющий начальным

$$H^*(x,y,z,t)=H^{*0}(x,y,z),\ t=0, \tag{7}$$

и граничным условиям:

$$\kappa^*(x,y,z)\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial x^*}\right|_{x=0}=-\iota_1\xi^*(H^*-H_0^*),\ \kappa(x,y,z)\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial x^*}\right|_{x=L_x}=\iota_1\xi^*(H^*-H_0^*), \tag{8}$$

$$\kappa^*(x,y,z)\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial y^*}\right|_{y=0}=-\iota_2\xi^*(H^*-H_0^*),\ \kappa^*(x,y,z)\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial y^*}\right|_{y=L_y}=\iota_2\xi^*(H^*-H_0^*), \tag{9}$$

$$\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial z^*}\right|_{z=0}=0, \quad \kappa^*(x,y,z)\left.\frac{\partial H^*(x,y,z,t)}{\partial z^*}\right|_{z=L_z}=\iota_3\xi^*(H^*-H_0^*). \tag{10}$$

Далее, для простоты, мы опускаем «*» в уравнениях и выражаем уравнения (6)–(10) как:

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial x}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\right]+\\ +\frac{\partial}{\partial z}\left[\kappa(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\right]=\beta m(x,y,z)h(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial t}+\\ +Q(x,y,z,t),\quad [x,y,z]\in G,\end{gathered} \tag{11}$$

удовлетворяющий начальным

$$H(x,y,z,t)=H^0(x,y,z),\ t=0, \tag{12}$$

и граничным условиям:

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\bigg|_{x=0}=-\iota_1\xi(H-H_0), \tag{13}$$

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x}\bigg|_{x=L_x}=\iota_1\xi(H-H_0), \tag{14}$$

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\bigg|_{y=0}=-\iota_2\xi(H-H_0), \tag{15}$$

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y}\bigg|_{y=L_y}=\iota_2\xi(H-H_0), \tag{16}$$

$$\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\bigg|_{z=0}=0, \tag{17}$$

$$\kappa(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z}\bigg|_{z=L_z}=\iota_3\xi(H-H_0). \tag{18}$$

Распространение поля реагента определяется путем решения уравнения конвективной диффузии:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x}\left[D_{11}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{12}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial y}+D_{13}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+\\
&+\frac{\partial}{\partial y}\left[D_{22}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial y}+D_{21}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{23}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+\\
&+\frac{\partial}{\partial z}\left[D_{33}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial z}+D_{31}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{32}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial y}\right]-\\
&-\frac{\partial(V_1(x,y,z,t)C_1(x,y,z,t))}{\partial x}-\frac{\partial(V_2(x,y,z,t)C_1(x,y,z,t))}{\partial y}-\frac{\partial(V_3(x,y,z,t)C_1(x,y,z,t))}{\partial z}=\\
&=m_g\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial t},\qquad [x,y,z]\in G,
\end{aligned} \tag{19}$$

с начальным

$$C_1(x,y,z,t)=0,\qquad t=0, \tag{20}$$

граничным

$$C_1(x,y,z,t)=0\ ,\qquad (x,y,z)\in G_k, \tag{21}$$

а также внутренние условия в скважинах

$$C_1(x,y,z,t)=C_{3i},\qquad (x,y,z)\in G_0, \tag{22}$$

$$\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial x}=0,\qquad (x,y,z)\in G_u, \tag{23}$$

$$\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial y}=0,\qquad (x,y,z)\in G_u, \tag{24}$$

$$\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial z}=0,\quad (x,y,z)\in G_u. \tag{25}$$

Искомое распределение функции концентрации полезного компонента определяется путем решения следующего уравнения:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x}\left[D_{11}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{12}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}+D_{13}(x,y,z)\frac{\partial C_1(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+\\
&+\frac{\partial}{\partial y}\left[D_{22}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}+D_{21}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{23}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+\\
&+\frac{\partial}{\partial z}\left[D_{33}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial z}+D_{31}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}+D_{32}(x,y,z)\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right]-
\end{aligned}$$

$$-\frac{\partial(V_1(x,y,z,t)C_2(x,y,z,t))}{\partial x}-\frac{\partial(V_2(x,y,z,t)C_2(x,y,z,t))}{\partial y}-\frac{\partial(V_3(x,y,z,t)C_2(x,y,z,t))}{\partial z}=$$
$$=m_c\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial t}+\frac{\partial N}{\partial t},\qquad [x,y,z]\in G, \tag{26}$$

с начальным

$$C_2(x,y,z,t)=C_2^0,\ \ t=0, \tag{27}$$

и граничными условиями

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}\right|_{x=0}=-\iota(C_2-c_2^0), \tag{28}$$

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}\right|_{x=L_x}=\iota(C_2-c_2^0), \tag{29}$$

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right|_{y=0}=-\iota(C_2-c_2^0), \tag{30}$$

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right|_{y=L_y}=\iota(C_2-c_2^0), \tag{31}$$

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right|_{z=0}=0, \tag{32}$$

$$\left.\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right|_{z=L_z}=\iota(C_2-c_2^0), \tag{33}$$

а также внутренние условия в скважинах

$$C_2(x,y,z,t)=C_{4i},\ \ (x,y,z)\in G_0, \tag{34}$$

$$\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial x}=0,\qquad (x,y,z)\in G_u, \tag{35}$$

$$\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial y}=0,\qquad (x,y,z)\in G_u, \tag{36}$$

$$\frac{\partial C_2(x,y,z,t)}{\partial z}=0,\qquad (x,y,z)\in G_u, \tag{37}$$

Уравнение кинетики массообмена, определяющее скорость перехода вещества из одной фазы в другую, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial N(x,y,t)}{\partial t}=\gamma(C_1)f(C_2,N,t),\ \ N(x,y,t)=N^0(x,y),\ \ t=0,\quad [x,y]\in G,$$

где: C_1 – концентрация заливочной жидкости, C_2 – концентрация полученной смеси, $D_{11},D_{12},D_{13},D_{21},D_{22},D_{23},D_{31},D_{32},D_{33}$ – коэффициенты фильтрации соответственно по *x,y,z*, N – кинетик процесса, V_1,V_2,V_3 – скорость фильтрации определяется законом Дарси и определяется следующим образом (*м/сут*)

$$V_1(x,y,z,t)=-k(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial x},\ V_2(x,y,z,t)=-k(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial y},$$
$$V_3(x,y,z,t)=-k(x,y,z)\frac{\partial H(x,y,z,t)}{\partial z},$$

γ – объемная плотность раствора, ($кг/м^2$), ι – коэффициент для приведения в размерности уравнений, (1/*м*).

Следует отметить, что в процессе подземного выщелачивания за счет воздействия реагента на рудные залежи происходит химическая реакция и переход вещества из одной фазы в другую, в результате чего изменяются гидродинамические параметры пористой среды (коэффициенты фильтрации и пористости), а также напора в рудосборнике.

Скорость изменения этих гидродинамических параметров зависит от давления; проявляя экспоненциальное поведение при высоком давлении и линейное поведение при низком давлении.

Как отмечено в [2], изменение пористости в зависимости от напора можно выразить с помощью уравнения:

$$m = m_0 + \beta_c\left(H - H_0\right),$$

а при значительных изменениях давления изменение пористости описывается уравнением:

$$m = m_0 e^{-\beta_c\left(H_0 - H\right)/m_0},$$

где m_0 - коэффициент пористости при $H = H_0$. Анализ экспериментальных данных показал, что не только пористость, но и проницаемость рудного резервуара существенно зависит от пластового давления и при небольших изменениях его величины это можно записать в виде линейной зависимости:

$$\kappa = \kappa_0\left[1 - a_K\left(H_0 - H\right)\right],$$

a для больших – экспоненциальный

$$\kappa = \kappa_0\, \mathrm{e}^{-a_K\left(H - H_0\right)}.$$

3 МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для получения конечно-разностной задачи уравнения (1) используется алгоритмическая идея неявной схемы для переменных направлений (продольно-поперечная схема). Переход от n - го временного слоя к n+1 слою совершается в три этапа с шагом 1/3. В результате получается последовательное решение трех систем конечно-разностных уравнений. Первое конечно-разностное уравнение для n+1/3-го слоя для внутренних узлов принимает следующий вид.

Введем пространственно-временную сетку:

$$\Omega_{xyz\tau} = \left\{\left(x_i = i\Delta x,\ y_j = j\Delta y,\ z_k = k\Delta z,\right); i = \overline{1, N_x};\ \ j = \overline{1, M_y},\ \ k = \overline{1, L_z},\right\},$$

Аппроксимация уравнения в слое $n+1/3$ по Ox:

$$\frac{\beta m_{i,j,k} h_{i,j,k}\left(H_{i,j,k}^{n+1/3} - H_{i,j,k}^{n}\right)}{\Delta\tau/3} =$$

$$= \frac{\kappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} H_{i-1,j,k}^{n+1/3} - \left(\kappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} + \kappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}\right) H_{i,j,k}^{n+1/3} + \kappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k} H_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} +$$

$$+ \frac{\kappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} H_{i,j-1,k}^{n} - \left(\kappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} + \kappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k}\right) H_{i,j,k}^{n} + \kappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k} H_{i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2} +$$

$$+ \frac{\kappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} H_{i,j,k-1}^{n} - \left(\kappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} + \kappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5}\right) H_{i,j,k}^{n} + \kappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5} H_{i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2} - \frac{Q_{i,j,k}}{3}.$$

Группируя подобные члены, получим систему трехдиагональных алгебраических уравнений:

$$a_{i,j,k} H_{i-1,j,k}^{n+1/3} - b_{i,j,k} H_{i,j,k}^{n+1/3} + c_{i,j,k} H_{i+1,j,k}^{n+1/3} = -f_{i,j,k}, \tag{38}$$

где:

$$a_{i,j,k} = \frac{\kappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k}}{\Delta x^2},\quad b_{i,j,k} = \frac{\beta m_{i,j,k} h_{i,j,k}}{\Delta\tau/3} + \frac{\kappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} + \kappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},\quad c_{i,j,k} = \frac{\kappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},$$

$$f_{i,j,k} = \frac{\kappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} H_{i,j-1,k}^{n} - \left(\kappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} + \kappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k}\right) H_{i,j,k}^{n} + \kappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k} H_{i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2} +$$

$$\frac{\kappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} H_{i,j,k-1}^{n} - \left(\kappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} + \kappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5}\right) H_{i,j,k}^{n} + \kappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5} H_{i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2} +$$

$$+ \frac{\beta m_{i,j,k} h_{i,j,k} H_{i,j,k}^{n}}{\Delta\tau/3} - \frac{Q_{i,j,k}}{3}.$$

Далее, граничное условие (13) аппроксимируем по Ox и получим:

$$\kappa_{1,j,k}\frac{-3H_{0,j,k}^{n+1/3}+4H_{1,j,k}^{n+1/3}-H_{2,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=-\iota_1\xi(H_{1,j,k}^{n+1/3}-H_0). \quad (39)$$

Из системы трехдиагональных уравнений (38) находим $H_{2,j,k}^{n+1/3}$ при i=1:

$$a_{1,j,k}H_{0,j,k}^{n+1/3}-b_{1,j,k}H_{1,j,k}^{n+1/3}+c_{1,j,k}H_{2,j,k}^{n+1/3}=-f_{1,j,k},$$

$$H_{2,j,k}^{n+1/3}=-\frac{a_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}H_{0,j,k}^{n+1/3}+\frac{b_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}H_{1,j,k}^{n+1/3}-\frac{f_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}. \quad (40)$$

Подставив $H_{2,j,k}^{n+1/3}$ из (40) в (39) получим $H_{0,j,k}^{n+1/3}$,

$$H_{0,j,k}^{n+1/3}=\frac{\kappa_{1,j,k}b_{1,j,k}-4\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}-2\iota_1\Delta x\xi c_{1,j,k}}{\kappa_{1,j,k}a_{1,j,k}-3\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}}H_{1,j,k}^{n+1/3}+\frac{2\iota_1\Delta x\xi c_{1,j,k}H_0-\kappa_{1,j,k}f_{1,j,k}}{\kappa_{1,j,k}a_{1,j,k}-3\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}},$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{0,j,k}$, $\beta_{0,j,k}$ вычисляется с помощью формул:

$$\alpha_{0,j,k}=\frac{\kappa_{1,j,k}b_{1,j,k}-4\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}-2\iota_1\Delta x\xi c_{1,j,k}}{\kappa_{1,j,k}a_{1,j,k}-3\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}},\quad \beta_{0j,k}=\frac{2\Delta x\iota_1\xi c_{1,j,k}H_0-\kappa_{1,j,k}f_{1,j,k}}{\kappa_{1,j,k}a_{1,j,k}-3\kappa_{1,j,k}c_{1,j,k}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (14) по Ox, получим:

$$\kappa_{N,j,k}\frac{H_{N-2,j,k}^{n+1/3}-4H_{N-1,j,k}^{n+1/3}+3H_{N,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=-\iota_1\xi(H_{N-1,j,k}^{n+1/3}-H_0). \quad (41)$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $H_{N-1,j,k}^{n+1/3}$ и $H_{N-2,j,k}^{n+1/3}$

$$H_{N-1,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-1,j,k}H_{N,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-1,j,k}, \quad (42)$$

$$H_{N-2,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-2,j,k}H_{N-1,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-2,j,k}=\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}H_{N,j,k}^{n+1/3}+\alpha_{N-2j,k}\beta_{N-1j,k}+\beta_{N-2,j,k}. \quad (43)$$

Подставляем $H_{N-1,j,k}^{n+1/3}$ из (42) и $H_{N-2,j,k}^{n+1/3}$ из (43) в (40) и находим $H_{N,j,k}^{n+1/3}$

$$H_{N,j,k}^{n+1/3}=\frac{4\beta_{N-1,j,k}\kappa_{N,j,k}-2\iota_1\xi\Delta x\beta_{N-1,j,k}+2\iota_1\xi\Delta xH_0-\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}\kappa_{N,j,k}-\beta_{N-2,j,k}\kappa_{N,j,k}}{\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\kappa_{N,j,k}+3\kappa_{N,j,k}-4\alpha_{N-1,j,k}\kappa_{N,j,k}+2\iota_1\xi\Delta x\alpha_{N-1,j,k}}. \quad (44)$$

Значения напор $H_{N-1,j,k}^{n+1/3}$, $H_{N-2,j,k}^{n+1/3}$, …, $H_{1,j,k}^{n+1/3}$ последовательно в порядке убывания индекса i по обратному пути пробега следующим образом:

$$H_{i,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{i,j,k}H_{i+1,j,k}^{n+1/3}+\beta_{i,j,k},\quad i=\overline{N-1,1},\quad j=\overline{0,M},\quad k=\overline{0,L}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (1) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+2/3 и группируем подобные члены, получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$\bar{a}_{i,j,k}H_{i,j-1,k}^{n+2/3}-\bar{b}_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+2/3}+\bar{c}_{i,j,k}H_{i,j+1,k}^{n+2/3}=-\bar{f}_{i,j,k}, \quad (45)$$

где:

$$\bar{a}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}}{\Delta y^2},\ \bar{b}_{i,j,k}=\frac{\beta m_{i,j,k}h_{i,j,k}}{\Delta\tau/3}+\frac{\kappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}+\kappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},\ \bar{c}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},$$

$$\bar{f}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}H_{i-1,j,k}^{n+1/3}-(\kappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}+\kappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k})H_{i,j,k}^{n+1/3}+\kappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k}H_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+$$

$$\frac{\kappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}H_{i,j,k-1}^{n+1/3}-(\kappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}+\kappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5})H_{i,j,k}^{n+1/3}+\kappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5}H_{i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{\beta m_{i,j,k}h_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}-\frac{Q_{i,j,k}}{3}.$$

Далее, граничную условию (15) аппроксимируем по Oy и получим:

$$\kappa_{i,1,k}\frac{-3H_{i,0,k}^{n+2/3}+4H_{i,1,k}^{n+2/3}-H_{i,2,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota_2\xi(H_{i,1,k}^{n+2/3}-H_0). \tag{46}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (45) находим $H_{i,2,k}^{n+2/3}$ при j=1:

$$\bar{a}_{i,1,k}H_{i,0,k}^{n+2/3}-\bar{b}_{i,1,k}H_{i,1,k}^{n+2/3}+\bar{c}_{i,1,k}H_{i,2,k}^{n+2/3}=-\bar{f}_{i,1,k}, \tag{47}$$

$$H_{i,2,k}^{n+2/3}=-\frac{\bar{a}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}H_{i,0,k}^{n+2/3}+\frac{\bar{b}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}H_{i,1,k}^{n+2/3}-\frac{\bar{f}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}. \tag{48}$$

Подставив $H_{i,2,k}^{n+2/3}$ из (48) в (46) получим $H_{i,0,k}^{n+2/3}$,

$$H_{i,0,k}^{n+2/3}=\frac{\kappa_{i,1,k}\bar{b}_{i,1,k}-4\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}-2\iota_2\xi\Delta y\bar{c}_{i,1,k}}{\kappa_{i,1,k}\bar{a}_{i,1,k}-3\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}}H_{i,1,k}^{n+2/3}+\frac{2\iota_2\xi\Delta y\bar{c}_{i,1,k}H_0-\kappa_{i,1,k}\bar{f}_{i,1,k}}{\kappa_{i,1,k}\bar{a}_{i,1,k}-3\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}}.$$

Используя метод прогонки, вычисляем $\bar{\alpha}_{i,0,k}$ и $\bar{\beta}_{i,0,k}$ следующим образом:

$$\bar{\alpha}_{i,0,k}=\frac{\kappa_{i,1,k}\bar{b}_{i,1,k}-4\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}-2\iota_2\xi\Delta y\bar{c}_{i,1,k}}{\kappa_{i,1,k}\bar{a}_{i,1,k}-3\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}},\quad \bar{\beta}_{i,0,k}=\frac{2\iota_2\xi\Delta y\bar{c}_{i,1,k}H_0-\kappa_{i,1,k}\bar{f}_{i,1,k}}{\kappa_{i,1,k}\bar{a}_{i,1,k}-3\kappa_{i,1,k}\bar{c}_{i,1,k}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (14) по Oy, получим:

$$\kappa_{i,N,k}\frac{H_{i,N-2,k}^{n+2/3}-4H_{i,N-1,k}^{n+2/3}+3H_{i,N,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota_2\xi(H_{i,N-1,k}^{n+2/3}-H_0). \tag{49}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $H_{i,N-1,k}^{n+2/3}$ и $H_{i,N-2,k}^{n+2/3}$:

$$H_{i,N-1,k}^{n+2/3}=\bar{\alpha}_{i,N-1,k}H_{i,N,k}^{n+2/3}+\bar{\beta}_{i,N-1,k}, \tag{50}$$

$$H_{i,N-2,k}^{n+2/3}=\bar{\alpha}_{i,N-2,k}H_{i,N-1,k}^{n+2/3}+\bar{\beta}_{i,N-2,k}=\bar{\alpha}_{i,N-2,k}\bar{\alpha}_{i,N-1,k}H_{i,N,k}^{n+2/3}+\bar{\alpha}_{i,N-2,k}\bar{\beta}_{i,N-1,k}+\bar{\beta}_{i,N-2,k}. \tag{51}$$

Подставляем $H_{i,N-1,k}^{n+2/3}$ из (50) и $H_{i,N-2,k}^{n+2/3}$ из (51) в (49) и находим $H_{i,N,k}^{n+2/3}$,

$$H_{i,N,k}^{n+2/3}=\frac{4\bar{\beta}_{i,N-1,k}\kappa_{i,N,k}-2\iota_2\xi\Delta y\bar{\beta}_{i,N-1,k}+2\iota_2\xi\Delta yH_0-\bar{\alpha}_{i,N-2,k}\bar{\beta}_{i,N-1,k}\kappa_{i,N,k}-\bar{\beta}_{i,N-2,k}\kappa_{i,N,k}}{\bar{\alpha}_{i,N-2,k}\bar{\alpha}_{i,N-1,k}\kappa_{i,N,k}+3\kappa_{i,N,k}-4\bar{\alpha}_{i,N-1,k}\kappa_{i,N,k}+2\iota_2\xi\Delta y\bar{\alpha}_{i,N-1,k}}.$$

Значения напор $H_{i,N-1,k}^{n+2/3}$, $H_{i,N-1,k}^{n+2/3}$,…, $H_{i,1,k}^{n+2/3}$ последовательно в порядке убывания индекса j по обратному пути пробега следующим образом:

$$H_{i,j,k}^{n+2/3}=\bar{\alpha}_{i,j,k}H_{i,j+1,k}^{n+2/3}+\bar{\beta}_{i,j,k},;\qquad i=\overline{0,M},\quad j=\overline{N-1,1},\quad k=\overline{0,L}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (1) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+1 и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$\bar{\bar{a}}_{i,j,k}H_{i,j,k-1}^{n+1}-\bar{\bar{b}}_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+1}+\bar{\bar{c}}_{i,j,k}H_{i,j,k+1}^{n+1}=-\bar{\bar{f}}_{i,j,k}, \tag{52}$$

где:

$$\bar{\bar{a}}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}H_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2},\quad \bar{\bar{b}}_{i,j,k}=\frac{\beta m_{i,j,k}h_{i,j,k}}{\Delta\tau/3}+\frac{\kappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}+\kappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5}}{\Delta z^2},$$

$$\bar{\bar{c}}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5}}{\Delta z^2},$$

$$\overline{\overline{f}}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}H^{n+2/3}_{i-1,j,k}-(\kappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}+\kappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k})H^{n+2/3}_{i,j,k}+\kappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k}H^{n+2/3}_{i+1,j,k}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{\kappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}H^{n+2/3}_{i,j-1,k}-(\kappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}+\kappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k})H^{n+2/3}_{i,j,k}+\kappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}H^{n+2/3}_{i,j+1,k}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{\beta m_{i,j,k}h_{i,j,k}H^{n+2/3}_{i,j,k}}{\Delta\tau/3}-\frac{Q_{i,j,k}}{3}.$$

Далее, граничную условию (17) аппроксимируем по Oz и получим:

$$-3H^{n+1}_{i,j,0}+4H^{n+1}_{i,j,1}-H^{n+1}_{i,j,2}=0. \tag{53}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (52) находим $H^{n+1}_{i,j,2}$ при k=1:

$$\overline{\overline{a}}_{i,j,1}H^{n+1}_{i,j,0}-\overline{\overline{b}}_{i,j,1}H^{n+1}_{i,j,1}+\overline{\overline{c}}_{i,j,1}H^{n+1}_{i,j,2}=-\overline{\overline{f}}_{i,j,1},$$

$$H^{n+1}_{i,j,2}=-\frac{\overline{\overline{a}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}H^{n+1}_{i,j,0}+\frac{\overline{\overline{b}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}H^{n+1}_{i,j,1}-\frac{\overline{\overline{f}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}. \tag{54}$$

Подставив $H^{n+1}_{i,j,2}$ из (54) в (53) получим $H^{n+1}_{i,j,0}$,

$$H^{n+1}_{i,j,0}=\frac{(4\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{b}}_{i,j,1})}{(3\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1})}H^{n+1}_{i,j,1}+\frac{\overline{\overline{f}}_{i,j,1}}{(3\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1})}.$$

где прогоночные коэффициенты $\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,0}$, $\overline{\overline{\beta}}_{i,j,0}$ вычисляется с помощью формул:

$$\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,0}=\frac{(4\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{b}}_{i,j,1})}{(3\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1})},\quad \overline{\overline{\beta}}_{i,j,0}=\frac{\overline{\overline{f}}_{i,j,1}}{(3\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1})}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (18) по Oz, получим:

$$\kappa_{i,j,N}\frac{H^{n+1}_{i,j,N-2}-4H^{n+1}_{i,j,N-1}+3H^{n+1}_{i,j,N}}{2\Delta z}=-\iota_3\xi(H^{n+1}_{i,j,N-1}-H_0). \tag{55}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $H^{n+1}_{i,j,N-1}$ и $H^{n+1}_{i,j,N-2}$:

$$H^{n+1}_{i,j,N-1}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}H^{n+1}_{i,j,N}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}, \tag{56}$$

$$H^{n+1}_{i,j,N-2}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}H^{n+1}_{i,j,N-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-2}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}H^{n+1}_{i,j,N}+\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-2}. \tag{57}$$

Подставляем $H^{n+1}_{i,j,N-1}$ из (56) и $H^{n+1}_{i,j,N-2}$ из (57) в (55) и находим $H^{n+1}_{i,j,N}$,

$$H^{n+1}_{i,j,N,}=\frac{4\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}\kappa_{i,j,N}-2\iota_3\xi\Delta z\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}+2\iota_3\xi\Delta zH_0-\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}\kappa_{i,N,k}-\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-2}\kappa_{i,j,N}}{\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}\kappa_{i,j,N}+3\kappa_{i,j,N}-4\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}\kappa_{i,j,N}+2\iota_3\xi\Delta z\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}}.$$

Значения напор $H^{n+1}_{i,j,N-1}$, $H^{n+1}_{i,j,N-1}$,…, $H^{n+1}_{i,j,1}$ последовательно в порядке убывания индекса k по обратному пути пробега следующим образом:

$$H^{n+1}_{i,j,k}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,k}H^{n+1}_{i,j,k+1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,k},;\qquad i=\overline{0,L},\quad j=\overline{0,M},\quad k=\overline{N-1,1}.$$

Для численного интегрирования уравнений (19) замена дифференциальное оператор для n+1/3 слое на конечно-разностное получим:

$$m_g\frac{C^{n+1/3}_{1,i,j,k}-C^n_{1,i,j,k}}{\Delta\tau/3}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j,k}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C^{n+1/3}_{1,i,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j-1,k}-D_{12,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j+1,k}-D_{12,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j-1,k}+D_{12,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j,k-1}-D_{13,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j,k+1}-D_{13,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j,k-1}+D_{13,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^n_{1,i,j,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j-1,k}-D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j+1,k}-D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j-1,k}+D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k-1}-D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k+1}-D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k-1}+D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j,k-1}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^n_{1,i,j,k}+D_{33,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j,k+1}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j,k-1}-D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j,k+1}-D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j,k-1}+D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j-1,k-1}-D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j-1,k+1}-D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j+1,k-1}+D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^n_{1,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^n_{1,i,j+1,k}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^n_{1,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^n_{1,i,j,k+1}}{2\Delta z},$$

и сгруппировав это равенство, получим следующее

$$a'_{i,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j,k}-b'_{i,j,k}C^{n+1/3}_{1,i,j,k}+c'_{i,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k}=-f'_{i,j,k}, \tag{58}$$

где:

$$a'_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}}{\Delta x^2},\quad b'_{i,j,k}=\frac{m_g}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})}{\Delta x^2},\quad c'_{i,j,k}=\frac{D_{11,i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},$$

$$f'_{i,j,k}=\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j-1,k}-D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j+1,k}-D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j-1,k}+D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j,k-1}-D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j,k+1}-D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k-1}+D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^n_{1,i,j,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j-1,k}-D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j+1,k}-D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j-1,k}+D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k-1}-D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{1,i,j-1,k+1}-D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k-1}+D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j,k-1}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^n_{1,i,j,k}+D_{33,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j,k+1}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j,k-1}-D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{1,i-1,j,k+1}-D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j,k-1}+D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j-1,k-1}-D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{1,i,j-1,k+1}-D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j+1,k-1}+D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^n_{1,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^n_{1,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^n_{1,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^n_{1,i,j+1,k}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^{n}_{1,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^{n}_{1,i,j,k+1}}{2\Delta z}+\frac{m_g C^{n}_{1,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничное условие (23) аппроксимируем по Ox и получим:

$$\frac{-3C^{n+1/3}_{1,0,j,k}+4C^{n+1/3}_{1,1,j,k}-C^{n+1/3}_{1,2,j,k}}{2\Delta x}=0. \tag{59}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (58) находим $C^{n+1/3}_{1,2,j,k}$ при i=1:

$$a'_{1,j,k}C^{n+1/3}_{1,0,j,k}-b'_{1,j,k}C^{n+1/3}_{1,1,j,k}+c'_{1,j,k}C^{n+1/3}_{1,2,j,k}=-f'_{1,j,k},$$

$$C^{n+1/3}_{1,2,j,k}=-\frac{a'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}C^{n+1/3}_{1,0j,k}+\frac{b'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}C^{n+1/3}_{1,1,j,k}-\frac{f'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}. \tag{60}$$

Подставив $C^{n+1/3}_{1,2,j,k}$ из (60) в (59) получим $C^{n+1/3}_{1,0,j,k}$

$$C^{n+1/3}_{1,0,j,k}=\frac{(b'_{1,j,k}-4c'_{1,j,k})}{(a'_{1,j,k}-3c'_{1,j,k})}C^{n+1/3}_{1,1,j,k}+\frac{f'_{1,j,k}}{(3c'_{1,j,k}-a'_{1,j,k})}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha'_{0,j,k}$, $\beta'_{0,j,k}$ вычисляется с помощью формул:

$$\alpha'_{0,j,k}=\frac{(b'_{1,j,k}-4c'_{1,j,k})}{(a'_{1,j,k}-3c'_{1,j,k})},\quad \beta'_{0,j,k}=\frac{f'_{1,j,k}}{(3c'_{1,j,k}-a'_{1,j,k})}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (23) по Ox, получим:

$$\frac{C^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}-4C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}+3C^{n+1/3}_{1,N,j,k}}{2\Delta x}=0. \tag{61}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}$ и $C^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}$:

$$C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}=\alpha'_{N-1,j,k}C^{n+1/3}_{1,N,j,k}+\beta'_{N-1,j,k}, \tag{62}$$

$$C^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}=\alpha'_{N-2,j,k}C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}+\beta'_{N-2,j,k}=\alpha'_{N-2,j,k}\alpha'_{N-1,j,k}C^{n+1/3}_{1,N,j,k}+\alpha'_{N-2,j,k}\beta'_{N-1,j,k}+\beta'_{N-2,j,k}. \tag{63}$$

Подставляем $C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}$ из (62) и $C^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}$ из (63) в (61) и находим $C^{n+1/3}_{1,N,j,k}$,

$$C^{n+1/3}_{1,N,j,k}=\frac{4\beta'_{N-1,j,k}-\alpha'_{N-2,j,k}\beta'_{N-1,j,k}-\beta'_{N-2,j,k}}{\alpha'_{N-2,j,k}\alpha'_{N-1,j,k}-4\alpha'_{N-1,j,k}+3}.$$

Значения концентрация $C^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}$, $C^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}$,…, $C^{n+1/3}_{1,1,j,k}$ последовательно в порядке убывания индекса i по обратному пути пробега следующим образом:

$$C^{n+1/3}_{1,i,j,k}=\alpha'_{i,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k}+\beta'_{i,j,k};\qquad i=\overline{N-1,1},\quad j=\overline{0,M},\quad k=\overline{0,L}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (19) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+2/3 и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$a''_{i,j,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-b''_{i,j,k}C^{n+2/3}_{1,i,j,k}+c''_{i,j,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}=-f''_{i,j,k}, \tag{64}$$

где:

$$a''_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j-0.5,k}}{\Delta y^2},\quad b''_{i,j,k}=\frac{m_g}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})}{\Delta y^2},\quad c''_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},$$

$$f''_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i-1,j,k}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C^{n+1/3}_{1,i,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{1,i+1,j,k}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{12,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{12,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{12,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{13,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{13,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{13,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{21,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{21,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{21,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{23,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{23,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{23,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j,k-1}^{n+1/3}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{1,i,j,k}^{n+1/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{31,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{31,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{31,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{32,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{32,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{32,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n+1/3}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{1,i,j-1,k}^{n+1/3}-V_{2,i,j+05,k}C_{1,i,j+1,k}^{n+1/3}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{1,i,j,k-1}^{n+1/3}-V_{3,i,j,k+05}C_{1,i,j,k+1}^{n+1/3}}{2\Delta z}+\frac{m_g C_{1,i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничную условию (24) аппроксимируем по Oy и получим:

$$\frac{-3C_{1,i,0,k}^{n+2/3}+4C_{1,i,1,k}^{n+2/3}-C_{1,i,2,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=0. \tag{65}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (64) находим $C_{1,i,2,k}^{n+2/3}$ при j=1:

$$a''_{i,1,k}C_{1,i,0,k}^{n+2/3}-b''_{i,1,k}C_{1,i,1,k}^{n+2/3}+c''_{i,1,k}C_{1,i,2,k}^{n+2/3}=-f''_{i,1,k},$$

$$C_{1,i,2,k}^{n+2/3}=-\frac{a''_{i,1,k}}{c''_{i,1,k}}C_{1,i,0,k}^{n+2/3}+\frac{b''_{i,1,k}}{c''_{i,1,k}}C_{1,i,1,k}^{n+2/3}-\frac{f''_{i,1,k}}{c''_{i,1,k}}. \tag{66}$$

Подставив $C_{1,i,2,k}^{n+2/3}$ из (66) в (65) получим $C_{1,i,0,k}^{n+2/3}$

$$C_{1,i,0,k}^{n+2/3}=\frac{(b''_{i,1,k}-4c''_{i,1,k})}{(a''_{i,1,k}-3c''_{i,1,k})}C_{1,i,1,k}^{n+2/3}+\frac{f''_{i,1,k}}{(3c''_{i,1,k}-a''_{i,1,k})}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha''_{i,0,k}$, $\beta''_{i,0,k}$ вычисляются с помощью формул:

$$\alpha''_{i,0,k}=\frac{(b''_{i,1,k}-4c''_{i,1,k})}{(a''_{i,1,k}-3c''_{i,1,k})},\quad \beta''_{i,0,k}=\frac{f''_{i,1,k}}{(3c''_{i,1,k}-a''_{i,1,k})}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (24) по Oy, получим:

$$\frac{C_{1,i,N-2,k}^{n+2/3}-4C_{1,i,N-1,k}^{n+2/3}+3C_{1,i,N,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=0. \tag{67}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C_{1,i,N-1,k}^{n+2/3}$ и $C_{1,i,N-2,k}^{n+2/3}$:

$$C_{1,i,N-1,k}^{n+2/3}=\alpha''_{i,N-1,k}C_{1,i,N,k}^{n+2/3}+\beta''_{i,N-1,k}, \tag{68}$$

$$C_{1,i,N-2,k}^{n+2/3}=\alpha''_{i,N-2,k}C_{1,i,N-1,k}^{n+2/3}+\beta''_{i,N-2,k}=\alpha''_{i,N-2,k}\alpha''_{i,N-1,k}C_{1,i,N,k}^{n+2/3}+\alpha''_{i,N-2,k}\beta''_{i,N-1,k}+\beta''_{i,N-2,k}. \tag{69}$$

Подставляем $C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}$ из (68) и $C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}$ из (69) в (67) и находим $C^{n+2/3}_{1,i,N,k}$,

$$C^{n+2/3}_{1,i,N,k}=\frac{4\beta''_{i,N-1,k}-\alpha''_{i,N-2,k}\beta''_{i,N-1,k}-\beta''_{i,N-2,k}}{\alpha''_{i,N-2,k}\alpha''_{i,N-1,k}-4\alpha''_{i,N-1,k}+3}.$$

Значения концентрации $C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}$, $C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}$,…, $C^{n+2/3}_{1,i,1,k}$ последовательно находим в порядке убывания индекса j по обратному пути пробега следующим образом:

$$C^{n+2/3}_{1,i,j,k}=\alpha''_{i,j,k}\,C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}+\beta''_{i,j,k};\qquad i=\overline{0,N},\quad j=\overline{M-1,1},\quad k=\overline{0,L}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (19) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+1 и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$a'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k-1}-b'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k}+c'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k+1}=-f'''_{i,j,k}, \tag{70}$$

где:

$$a'''_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k-0.5}}{\Delta z^2},\quad b'''_{i,j,k}=\frac{m_g}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})}{\Delta z^2},\quad c'''_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k+0.5}}{\Delta z^2},$$

$$f'''_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C^{n+2/3}_{1,i,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j-1,k}-D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j+1,k}-D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j-1,k}+D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k-1}-D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k+1}-D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k-1}+D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^{n+2/3}_{1,i,j,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j-1,k}-D_{21,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j+1,k}-D_{21,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j-1,k}+D_{21,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k-1}-D_{23,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k+1}-D_{23,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k-1}+D_{23,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k-1}-D_{31,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k+1}-D_{31,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k-1}+D_{31,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k-1}-D_{32,i,j,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k+1}-D_{32,i,j,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k-1}+D_{32,i,j,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^{n+2/3}_{1,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^{n+2/3}_{1,i,j,k+1}}{2\Delta z}+\frac{m_g C^{n+2/3}_{1,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничное условие (25) аппроксимируем по Oz и получим:

$$\frac{-3C^{n+1}_{1,i,j,0}+4C^{n+1}_{1,i,j,1}-C^{n+1}_{1,i,j,2}}{2\Delta z}=0. \tag{71}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (70) находим $C^{n+1}_{1,i,j,2}$ при k=1:

$$a'''_{i,j,1}C^{n+1}_{1,i,j,0}-b'''_{i,j,1}C^{n+1}_{1,i,j,1}+c'''_{i,j,1}C^{n+1}_{1,i,j,2}=-f'''_{i,j,1},$$

$$C^{n+1}_{1,i,j,2}=-\frac{a'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}C^{n+1}_{1,i,j,0}+\frac{b'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}C^{n+1}_{1,i,j,1}-\frac{f'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}. \tag{72}$$

Подставив $C_{1,i,j,2}^{n+1}$ из (72) в (71) получим $C_{1,i,j,0}^{n+1}$

$$C_{1,i,j,0}^{n+1}=\frac{b'''_{i,j,1}-4c'''_{i,j,1}}{a'''_{i,j,1}-3c'''_{i,j,1}}C_{1,i,j,1}^{n+1}+\frac{f'''_{i,j,1}}{3c'''_{i,j,1}-a'''_{i,j,1}}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha'''_{i,j,0}$, $\beta'''_{i,j,0}$ вычисляются с помощью формул:

$$\alpha'''_{i,j,0}=\frac{b'''_{i,j,1}-4c'''_{i,j,1}}{a'''_{i,j,1}-3c'''_{i,j,1}},\qquad \beta'''_{i,j,0}=\frac{f'''_{i,j,1}}{3c'''_{i,j,1}-a'''_{i,j,1}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (24) по Oy , получим:

$$\frac{C_{1,i,j,N-2}^{n+1}-4C_{1,i,j,N-1}^{n+1}+3C_{1,i,j,N}^{n+1}}{2\Delta z}=0. \tag{73}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C_{1,i,j,N-1}^{n+1}$ и $C_{1,i,j,N-2}^{n+1}$:

$$C_{1,i,j,N-1}^{n+1}=\alpha'''_{i,j,N-1}C_{1,i,j,N}^{n+1}+\beta'''_{i,j,N-1}, \tag{74}$$

$$C_{1,i,j,N-2}^{n+1}=\alpha'''_{i,j,N-2}C_{1,i,j,N-1}^{n+1}+\beta'''_{i,j,N-2}=\alpha'''_{i,j,N-2}\alpha'''_{i,j,N-1}C_{1,i,j,N}^{n+1}+\alpha'''_{i,j,N-2}\beta'''_{i,j,N-1}+\beta'''_{i,j,N-2}. \tag{75}$$

Подставляем $C_{1,i,j,N-1}^{n+1}$ из (74) и $C_{1,i,j,N-2}^{n+1}$ из (75) в (73) и находим $C_{1,i,N,k}^{n+2/3}$,

$$C_{1,i,j,N}^{n+1}=\frac{4\beta'''_{i,j,N-1}-\alpha'''_{i,j,N-2}\beta'''_{i,j,N-1}-\beta'''_{i,j,N-2}}{\alpha'''_{i,j,N-2}\alpha'''_{i,j,N-1}-4\alpha'''_{i,j,N-1}+3}.$$

Значения концентрации $C_{1,i,j,N-1}^{n+1}$, $C_{1,i,j,N-2}^{n+1}$,..., $C_{1,i,j,1}^{n+1}$ последовательно находим в порядке убывания индекса k по обратному пути пробега следующим образом:

$$C_{1,i,j,k}^{n+1}=\alpha'''_{i,j,k}\;C_{1,i,j,k+1}^{n+1}+\beta''_{i,j,k}{}';\qquad i=\overline{0,N},\quad j=\overline{0,M},\quad k=\overline{L-1,1}.$$

Для численного интегрирования уравнения (26) заменив дифференциальный оператор для n+1 слое на конечно-разностное получим:

$$m_g\frac{C_{2,i,j,k}^{n+1/3}-C_{2,i,j,k}^{n}}{\Delta\tau/3}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{2,i,j,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n}-D_{12,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n}-D_{12,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n}+D_{12,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n}-D_{13,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n}-D_{13,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n}+D_{13,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k}^{n}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C_{2,i,j,k}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n}-D_{21,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n}-D_{21,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n}+D_{21,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k-1}^{n}-D_{23,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k+1}^{n}-D_{23,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k-1}^{n}+D_{23,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k+1}^{n}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j,k-1}^{n}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{2,i,j,k}^{n}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n}-D_{31,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n}-D_{31,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n}+D_{31,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j-1,k-1}-D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j-1,k+1}-D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j+1,k-1}+D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^n_{2,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^n_{2,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^n_{2,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^n_{2,i,j+1,k}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^n_{2,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^n_{2,i,j,k+1}}{2\Delta z},$$

и сгруппировав это равенство, получим следующее

$$a_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k}-\tilde{b}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i,j,k}+\tilde{c}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k}=-f_{i,j,k}, \tag{76}$$

где:

$$a_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}}{\Delta x^2},\quad \tilde{b}_{i,j,k}=\frac{m_g}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})}{\Delta x^2},\quad \tilde{c}_{i,j,k}=\frac{D_{11,i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},$$

$$f_{i,j,k}=\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j-1,k}-D_{12,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j+1,k}-D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j-1,k}+D_{12,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k-1}-D_{13,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k+1}-D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k-1}+D_{13,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^n_{2,i,j-1,k}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^n_{2,i,j,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^n_{2,i,j+1,k}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{2,i-1,j-1,k}-D_{21,i,j-0.5,k}C^n_{2,i-1,j+1,k}-D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{2,i+1,j-1,k}+D_{21,i,j+0.5,k}C^n_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{2,i,j-1,k-1}-D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{2,i,j-1,k+1}-D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{2,i,j+1,k-1}+D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j,k-1}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^n_{2,i,j,k}+D_{33,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j,k+1}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{2,i,j-1,k-1}-D_{23,i,j-0.5,k}C^n_{2,i,j-1,k+1}-D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{2,i,j+1,k-1}+D_{23,i,j+0.5,k}C^n_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j,k-1}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^n_{2,i,j,k}+D_{33,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j,k+1}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{2,i-1,j,k-1}-D_{31,i,j-0.5,k}C^n_{2,i-1,j,k+1}-D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{2,i+1,j,k-1}+D_{31,i,j+0.5,k}C^n_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j-1,k-1}-D_{32,i,j,k-0.5}C^n_{2,i,j-1,k+1}-D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j+1,k-1}+D_{32,i,j,k+0.5}C^n_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^n_{2,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^n_{2,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^n_{2,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^n_{2,i,j+1,k}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^n_{2,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^n_{2,i,j,k+1}}{2\Delta z}+\frac{m_g C^n_{2,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничное условие (28) аппроксимируем по Ox и получим:

$$\frac{-3C^{n+1/3}_{2,0,j,k}+4C^{n+1/3}_{2,1,j,k}-C^{n+1/3}_{2,2,j,k}}{2\Delta x}=-\iota(C_{2,1,j,k}-C^0_2). \tag{77}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (76) находим $C^{n+1/3}_{2,2,j,k}$ при i=1:

$$a_{1,j,k}C^{n+1/3}_{2,0,j,k}-\tilde{b}_{1,j,k}C^{n+1/3}_{2,1,j,k}+\tilde{c}_{1,j,k}C^{n+1/3}_{2,2,j,k}=-f_{1,j,k},$$

$$C_{2,2,j,k}^{n+1/3}=-\frac{a_{1,j,k}}{\tilde{c}_{1,j,k}}C_{2,0,j,k}^{n+1/3}+\frac{\tilde{b}_{1,j,k}}{\tilde{c}_{1,j,k}}C_{2,1,j,k}^{n+1/3}-\frac{f_{1,j,k}}{\tilde{c}_{1,j,k}}. \tag{78}$$

Подставив $C_{2,2,j,k}^{n+1/3}$ из (78) в (77) получим $C_{2,0,j,k}^{n+1/3}$:

$$C_{2,0,j,k}^{n+1/3}=\frac{\tilde{b}_{1,j,k}-4\tilde{c}_{1,j,k}-2\iota\Delta x\tilde{c}_{1,j,k}}{a_{1,j,k}-3\tilde{c}_{1,j,k}}C_{2,1,j,k}^{n+1/3}+\frac{2\iota\Delta x\tilde{c}_{1,j,k}C_2^0-f_{1,j,k}}{a_{1,j,k}-3\tilde{c}_{1,j,k}}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{0,j,k}$, $\beta_{0,j,k}$ вычисляются с помощью формул:

$$\alpha_{0,j,k}=\frac{\tilde{b}_{1,j,k}-4\tilde{c}_{1,j,k}-2\iota\Delta x\tilde{c}_{1,j,k}}{a_{1,j,k}-3\tilde{c}_{1,j,k}},\qquad \beta_{0,j,k}=\frac{2\iota\Delta x\tilde{c}_{1,j,k}C_2^0-f_{1,j,k}}{a_{1,j,k}-3\tilde{c}_{1,j,k}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (29) по Ox, получим:

$$\frac{C_{2,N-2,j,k}^{n+1/3}-4C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}+3C_{2,N,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=-\iota\left(C_{2,N-1,j,k}-C_2^0\right). \tag{79}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}$ и $C_{2,N-2,j,k}^{n+1/3}$:

$$C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-1,j,k}C_{1,N,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-1,j,k}, \tag{80}$$

$$C_{2,N-2,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-2,j,k}C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-2,j,k}=\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}C_{2,N,j,k}^{n+1/3}+\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}+\beta_{N-2,j,k}. \tag{81}$$

Подставляем $C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}$ из (80) и $C_{2,N-2,j,k}^{n+1/3}$ из (81) в (79) и находим $C_{2,N,j,k}^{n+1/3}$,

$$C_{2,N,j,k}^{n+1/3}=\frac{4\beta_{N-1,j,k}-2\iota\Delta x\beta_{N-1,j,k}+2\iota\Delta xC_2^0-\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}-\beta_{N-2,j,k}}{\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}+2\iota\Delta x\alpha_{N-1,j,k}-4\alpha_{N-1,j,k}+3}.$$

Значения концентраций $C_{2,N-1,j,k}^{n+1/3}$, $C_{2,N-2,j,k}^{n+1/3}$,..., $C_{2,1,j,k}^{n+1/3}$ последовательно находим в порядке убывания индекса i по обратному пути пробега следующим образом:

$$C_{2,i,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{i,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}+\beta_{i,j,k},\qquad i=\overline{N-1,1},\quad j=\overline{0,M},\quad k=\overline{0,L}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (26) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+2/3 и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$a_{i,j,k}C_{2,i,j-1,k}^{n+2/3}-\tilde{\tilde{b}}_{i,j,k}C_{2,i,j,k}^{n+2/3}+\tilde{\tilde{c}}_{i,j,k}C_{2,i,j+1,k}^{n+2/3}=-f_{i,j,k}, \tag{82}$$

где:

$$a_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j-0.5,k}}{\Delta y^2},\quad \tilde{\tilde{b}}_{i,j,k}=\frac{m_g}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})}{\Delta y^2},\quad \tilde{\tilde{c}}_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},$$

$$f_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{2,i,j,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+$$

$$+\frac{D_{12,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{12,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{12,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{12,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{13,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{13,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{13,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{13,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{21,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{21,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{21,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{21,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$

$$+\frac{D_{23,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{23,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{23,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{23,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j,k-1}^{n+1/3}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{2,i,j,k}^{n+1/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2}+$$

$$+\frac{D_{31,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{31,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{31,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{31,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$

$$+\frac{D_{32,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{32,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{32,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{32,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$

$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{2,i,j-1,k}^{n+1/3}-V_{2,i,j+05,k}C_{2,i,j+1,k}^{n+1/3}}{2\Delta y}+$$

$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{2,i,j,k-1}^{n+1/3}-V_{3,i,j,k+05}C_{2,i,j,k+1}^{n+1/3}}{2\Delta z}+\frac{m_g C_{2,i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничное условие (30) аппроксимируем по Oy и получим:

$$\frac{-3C_{2,i,0,k}^{n+2/3}+4C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-C_{2,i,2,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota(C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-C_2^0). \tag{83}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (82) находим $C_{2,i,2,k}^{n+2/3}$ при j=1:

$$a_{i,1,k}C_{2,i,0,k}^{n+2/3}-\tilde{\tilde{b}}_{i,1,k}C_{2,i,1,k}^{n+2/3}+\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}C_{2,2,j,k}^{n+2/3}=-f_{i,1,k},$$

$$C_{2,i,2,k}^{n+2/3}=-\frac{a_{i,1,k}}{\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,0,k}^{n+2/3}+\frac{\tilde{\tilde{b}}_{i,1,k}}{\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-\frac{f_{i,1,k}}{\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}. \tag{84}$$

Подставив $C_{2,i,2,k}^{n+2/3}$ из (84) в (83) получим $C_{2,i,0,k}^{n+2/3}$:

$$C_{2,i,0,k}^{n+2/3}=\frac{\tilde{\tilde{b}}_{i,1,k}-4\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}-2\iota\Delta y\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}{a_{i,1,k}-3\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,1,k}^{n+2/3}+\frac{2\iota\Delta y\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}C_2^0-f_{i,1,k}}{a_{i,1,k}-3\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{i,0,k}$, $\beta_{i,0,k}$ вычисляются с помощью формул:

$$\alpha_{i,0,k}=\frac{\tilde{\tilde{b}}_{i,1,k}-4\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}-2\iota\Delta y\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}{a_{i,1,k}-3\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}},\quad \beta_{i,0,k}=\frac{2\iota\Delta y\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}C_2^0-f_{i,1,k}}{a_{i,1,k}-3\tilde{\tilde{c}}_{i,1,k}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (31) по Oy, получим:

$$\frac{C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}-4C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}+3C_{2,i,N,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota(C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}-C_2^0). \tag{85}$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}$ и $C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}$:

$$C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}=\alpha_{i,N-1,k}C_{2,i,N,k}^{n+2/3}+\beta_{i,N-1,k}, \tag{86}$$

$$C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}=\alpha_{i,N-2,k}C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}+\beta_{i,N-2,k}=\alpha_{i,N-2,k}\alpha_{i,N-1,k}C_{2,i,N,k}^{n+2/3}+\alpha_{i,N-2,k}\beta_{i,N-1,k}+\beta_{i,N-2,k}. \tag{87}$$

Подставляем $C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}$ из (86) и $C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}$ из (87) в (85) и находим $C_{2,i,N,k}^{n+2/3}$,

$$C_{2,i,N,k}^{n+2/3}=\frac{4\beta_{i,N-1,k}-2\iota\Delta y\beta_{i,N-1,k}+2\iota\Delta y C_2^0-\alpha_{i,N-2,k}\beta_{i,N-1,k}-\beta_{i,N-2,k}}{\alpha_{i,N-2,k}\alpha_{i,N-1,k}+2\iota\Delta y\alpha_{i,N-1,k}-4\alpha_{i,N-1,k}+3}.$$

Значения концентрация $C^{n+2/3}_{2,i,N-1,k}$, $C^{n+2/3}_{2,i,N-2,k}$,…, $C^{n+2/3}_{2,i,1,k}$ последовательно в порядке убывания индекса i по обратному пути пробега следующим образом:

$$C^{n+2/3}_{2,i,j,k} = \alpha_{i,j,k} C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k} + \beta_{i,j,k}, \quad i = \overline{0,N}, \quad j = \overline{M-1,1}, \quad k = \overline{0,L}.$$

Аналогично мы аппроксимируем уравнение (26) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою n+1 и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$a_{i,j,k} C^{n+1}_{2,i,j,k-1} - \hat{b}_{i,j,k} C^{n+1}_{2,i,j,k} + \hat{c}_{i,j,k} C^{n+1}_{2,i,j,k+1} = -f_{i,j,k}, \tag{88}$$

где:

$$a_{i,j,k} = \frac{D_{33,i,j,k-0.5}}{\Delta z^2}, \quad \hat{b}_{i,j,k} = \frac{m_g}{\Delta\tau/3} + \frac{(D_{33,i,j,k-0.5} + D_{33,i,j,k+0.5})}{\Delta z^2}, \quad \hat{c}_{i,j,k} = \frac{D_{33,i,j,k+0.5}}{\Delta z^2},$$

$$f_{i,j,k} = \frac{D_{11,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k} - (D_{11,i-0.5,j,k} + D_{11,i+0.5,j,k}) C^{n+2/3}_{2,i,j,k} + D_{11,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k}}{\Delta x^2} +$$

$$+ \frac{D_{12,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j-1,k} - D_{12,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j+1,k} - D_{12,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j-1,k} + D_{12,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x \Delta y} +$$

$$+ \frac{D_{13,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k-1} - D_{13,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k+1} - D_{13,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k-1} + D_{13,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x \Delta z} +$$

$$+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k} - (D_{22,i,j-0.5,k} + D_{22,i,j+0.5,k}) C^{n+2/3}_{2,i,j,k} + D_{22,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k}}{\Delta y^2} +$$

$$+ \frac{D_{21,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j-1,k} - D_{21,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j+1,k} - D_{21,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j-1,k} + D_{21,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x \Delta y} +$$

$$+ \frac{D_{23,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k-1} - D_{23,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k+1} - D_{23,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k-1} + D_{23,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y \Delta z} +$$

$$+ \frac{D_{31,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k-1} - D_{31,i,j-0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k+1} - D_{31,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k-1} + D_{31,i,j+0.5,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x \Delta z} +$$

$$+ \frac{D_{32,i,j,k-0.5} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k-1} - D_{32,i,j,k-0.5} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k+1} - D_{32,i,j,k+0.5} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k-1} + D_{32,i,j,k+0.5} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y \Delta z} +$$

$$+ \frac{V_{1,i-0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i-1,j,k} - V_{1,i+0.5,j,k} C^{n+2/3}_{2,i+1,j,k}}{2\Delta x} + \frac{V_{2,i,j-05,k} C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k} - V_{2,i,j+05,k} C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k}}{2\Delta y} +$$

$$+ \frac{V_{3,i,j,k-05} C^{n+2/3}_{2,i,j,k-1} - V_{3,i,j,k+05} C^{n+2/3}_{2,i,j,k+1}}{2\Delta z} + \frac{m_g C^{n+2/3}_{2,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничную условию (32) аппроксимируем по Oz и получим:

$$\frac{-3C^{n+1}_{2,i,j,0} + 4C^{n+1}_{2,i,j,1} - C^{n+1}_{2,i,j,2}}{2\Delta z} = 0. \tag{89}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (88) находим $C^{n+1}_{2,i,j,2}$ при k=1:

$$a_{i,j,1} C^{n+1}_{2,i,j,0} - \hat{b}_{i,j,1} C^{n+1}_{2,i,j,1} + \hat{c}_{i,j,1} C^{n+1}_{2,i,j,2} = -f_{i,j,1},$$

$$C^{n+1}_{2,i,j,2} = -\frac{a_{i,j,1}}{\hat{c}_{i,j,1}} C^{n+1}_{2,i,j,0} + \frac{\hat{b}_{i,j,1}}{\hat{c}_{i,j,1}} C^{n+1}_{2,i,j,1} - \frac{f_{i,j,1}}{\hat{c}_{i,j,1}}. \tag{90}$$

Подставив $C^{n+1}_{2,i,j,2}$ из (90) в (89) получим $C^{n+1}_{2,i,j,0}$

$$C_{2,i,j,0}^{n+1} = \frac{\hat{b}_{i,j,1} - 4\hat{c}_{i,j,1}}{a_{i,j,1} - 3\hat{c}_{i,j,1}} C_{2,i,j,1}^{n+1} + \frac{f_{i,j,1}}{3\hat{c}_{i,j,1} - a_{i,j,1}}.$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{i,j,0}$, $\beta_{i,j,0}$ вычисляются с помощью формул:

$$\alpha_{i,j,0} = \frac{\hat{b}_{i,j,1} - 4\hat{c}_{i,j,1}}{a_{i,j,1} - 3\hat{c}_{i,j,1}}, \qquad \beta_{i,j,0} = \frac{f_{i,j,1}}{3\hat{c}_{i,j,1} - a_{i,j,1}}.$$

Аналогично аппроксимируя граничное условие (33) по Oz, получим:

$$\frac{C_{2,i,j,N-2}^{n+1} - 4C_{2,i,j,N-1}^{n+1} + 3C_{2,i,j,N}^{n+1}}{2\Delta z} = -\iota(C_{2,i,j,N-1}^{n+1} - C_2^0). \quad (91)$$

Применяя метод прогонки для последовательности при N, N-1 и N-2, найдем $C_{2,i,j,N-1}^{n+1}$ и $C_{2,i,j,N-2}^{n+1}$:

$$C_{2,i,j,N-1}^{n+1} = \alpha_{i,j,N-1} C_{2,i,j,N}^{n+1} + \beta_{i,j,N-1}, \quad (92)$$

$$C_{2,i,j,N-2}^{n+1} = \alpha_{i,j,N-2} C_{2,i,j,N-1}^{n+2/3} + \beta_{i,j,N-2} = \alpha_{i,j,N-2}\alpha_{i,j,N-1} C_{2,i,j,N}^{n+1} + \alpha_{i,j,N-2}\alpha_{i,j,N-1} + \alpha_{i,j,N-2}. \quad (93)$$

Подставляем $C_{2,i,j,N-1}^{n+1}$ из (92) и $C_{2,i,j,N-2}^{n+1}$ из (93) в (91) и находим $C_{2,i,j,N}^{n+1}$,

$$C_{2,i,j,N}^{n+1} = \frac{4\beta_{i,j,N-1} - 2\iota\Delta z \beta_{i,j,N-1} + 2\iota\Delta z C_2^0 - \alpha_{i,j,N-2}\beta_{i,j,N-1} - \beta_{i,j,N-2}}{\alpha_{i,j,N-2}\alpha_{i,j,N-1} + 2\iota\Delta z \alpha_{i,j,N-1} - 4\alpha_{i,j,N-1} + 3}.$$

Значения концентрации $C_{2,i,j,N-1}^{n+1}$, $C_{2,i,j,N-2}^{n+1}, \ldots,$ $C_{2,i,j,1}^{n+1}$ последовательно находим в порядке убывания индекса k по обратному пути пробега следующим образом:

$$C_{2,i,j,k}^{n+1} = \alpha_{i,j,k} C_{1,i,j,k+1}^{n+1} + \beta_{i,j,k}, \qquad i = \overline{0,N}, \quad j = \overline{0,M}, \quad k = \overline{L-1,1}.$$

Таким образом, разработан эффективный устойчивый численный алгоритм на основе метода конечных разностей высокого порядка точности для решения трехмерной задачи подземного выщелачивания рудных залежей.

4 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведённого исследования разработана математическая модель гидродинамического процесса подземного выщелачивания и фильтрации жидкости в пористой среде, описываемая системой дифференциальных уравнений в частных производных с начальными и краевыми условиями третьего рода. Предложенный подход позволяет всесторонне анализировать параметры разработки рудного пласта, оптимизировать размещение инъекционных и добывающих скважин, а также учитывать защиту подземных вод от загрязнения.

Для численной реализации задачи применён конечно-разностный алгоритм, основанный на методах покомпонентного расщепления и потоковой прогонки. Разработанный математический и численный аппарат может быть эффективно использован в качестве инструмента анализа и прогнозирования процессов освоения рудных месторождений и управления добычей полезных ископаемых.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Равшанов Н., Холматова И.И., Курбонов Н.М., Исламов Ю.Н.* Математическое моделирование процесса подземного выщелачивания с учетом изменения гидродинамических параметров пористой среды //Проблемы вычислительной и прикладной математики № 2(56) 2024.

[2] *Равшанов Н., Холматова И.И.* Математическая модель и численные алгоритмы для исследования гидродинамического процесса подземного выщелачивания // Проблемы вычислительной и прикладной математики № 6(53) 2023.

[3] *Алимов И., Пирназарова Т., Холматова И.* О численном методе решения гидродинамической задачи ИСЛ // Журнал физики: Конференция Серия 1260 (2019) 102001.

[4] *Исманова К.Д., Исомаддинов У.М., Дедаханов А.О.* Модели принятия решений для управления процессом подземного выщелачивания нефти. Природные и летучие вещества // Нефти, 2021;8(4): 16235-16243.

[5] *Розиков Р.* Исследование гидродинамических процессов в СПВ урана // E3S Web of Conferences 525, 01008 (2024).

[6] *Бахуров В.Г., Руднева И.К.* Химическая добыча полезных ископаемых. –М.: Недра, 1972. 136.

[7] *Алимов И.* Математическое моделирование гидродинамических процессов подземного выщелачивания. – Ташкент, изд. «ФАН», 1991. – 82 с.

[8] *Веригин Н.Н. и др.* Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород . . –М.: Недра, 1977. 271 с.

[9] *Бунашев В., Кайтаров З.Д.* Математическое моделирование многофазной фильтрации с учетом деформации пористой среды// Узбекский журнал Проблемы вычислительной и прикладной математики, 2022. - №3 (41) – с. 5-20 .

[10] *Муханов Б., Омирбекова Ж., Оракбаев Е., Алиманова М., Побребняк В.* Численное моделирование рудного тела и разработка гидродинамических моделей процесса подземного выщелачивания // 14-я Международная конференция по электронике, компьютерам и вычислениям, ICECCO 2018, 2018, 8634795.

[11] *Муханов Б.К., Омирбекова Ж. Ж., Оракбаев Ю.Ж., Кангтарбай М.Б.* Моделирование процесса ИСП различных режимов // 15-я международная научная конференция Информационные технологии и управление 2017.

[12] *Муханов Б.К., Омирбекова Ж.Ж., Усенов А.К, Вуйчик W.* Simulating ISL Process Using COMSOL Multiphysics // Intl Journal of Electronics and Telecommunications, 2014, Vol. 60, NO. 3, Pp. 213-217.

[13] *Ravshanov , N., & Usmonov , L.* (2025). Review of research on mathematical modeling of the process of in-situ leaching of mineral resources. International Journal of Theoretical and Applied Issues of Digital Technologies, 8(1), 22–36. https://doi.org/10.62132/ijdt.v8i1.230.

Поступила в редакцию 12.03.2025

Цитирование: *Равшанов Н., Усмонов Л.* (2025). Математическая модель и численный алгоритм исследования гидродинамического процесса подземного выщелачивания. *Международный журнал теоретических и прикладных вопросов цифровых технологий*, 8(2), –С. 17-36. https://doi.org/10.62132/ijdt.v8i2.260.

MATHEMATICAL MODEL AND NUMERICAL ALGORITHM FOR THE STUDY OF THE HYDRODYNAMIC PROCESS OF IN-SITU LEACHING

Ravshanov N.[1],[+] *Usmonov L.*[1], *Kurbonov N.M.*[1]

[1] Digital technologies and artificial intelligence development research institute, Tashkent, Uzbekistan

[+] uslochinbek@gmail.com

Abstract. This article presents a mathematical model and numerical algorithms for solving a three-dimensional fluid filtration problem in a porous medium, using the hydrodynamic process of in-situ leaching (ISL) as an example. The developed mathematical framework enables a comprehensive analysis of ore body development parameters, optimal placement of injection and production wells, estimation of fluid flow rates, and consideration of groundwater protection from contamination sources. Since the formulated problem is described by a system of multidimensional quasilinear partial differential equations, obtaining an analytical solution is challenging. For numerical integration, an algorithm based on a finite-difference scheme with component-wise splitting and streamline sweeping methods is constructed. The proposed mathematical approach can serve as an effective tool for analyzing and forecasting the parameters of ore deposit development and mineral extraction.

Keywords: in-situ leaching, mathematical modeling, filtration, diffusion, kinetics, valuable component, numerical methods.