№ 1(31) 2021

ISSN 2181-8460

HISOBLASH VA AMALIY MATEMATIKA MUAMMOLARI

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

PROBLEMS OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS

MUHAMMAD AL-XORAZMIY NOMIDAGI
TOSHKENT AXBOROT TEXNOLOGIYALARI
UNIVERSITETI

AXBOROT-KOMMUNIKATSIYA
TEXNOLOGIYALARI
ILMIY-INNOVATSION MARKAZI

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

№ 1(31) 2021

Журнал основан в 2015 году.
Издается 6 раз в год.

Учредитель:
Научно–инновационный центр информационно-коммуникационных технологий.

Журнал зарегистрирован в Узбекском Агентстве по печати и информации.
Регистрационное свидетельство №0856 от 5 августа 2015 года.

ISSN 2181-8460, eISSN 2181-046X

Адрес редакции:
100125, г. Ташкент, м-в. Буз-2, 17А.
Тел.: +(99871) 231-92-45.
E-mail: info@pvpm.uz.
Сайт: www.pvpm.uz.

Дизайн и компьютерная вёрстка:
Шарипов Х. Д., Расулов А. Б.

Отпечатано в типографии НИЦ ИКТ.
Подписано в печать 25.02.2021 г.
Формат 60x84 1/8. Заказ №3.
Тираж 100 экз.

Содержание

УДК 519.6:504.06

НЕЛИНЕЙНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОНИТОРИНГА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ С УЧЁТОМ ОРОГРАФИИ МЕСТНОСТИ

[1]***Равшанов Н.***, [2*]***Шафиев Т.Р.***, [1]***Мурадов Ф.А.***

[*]tursunshafiyev@gmail.com

[1]Научно-инновационный центр информационно-коммуникационных технологий, 100125, Узбекистан, г. Ташкент, м-в. Буз-2, 17А;

[2]Бухарский государственный университет, 200114, Узбекистан, Бухара, улица Мухаммад Икбол 11

В статье рассматривается численное моделирование процесс переноса и диффузии загрязнителей воздуха в пограничном слое атмосферы. Разработанном математическом модели мониторинга и прогнозирования распространения промышленных выбросов в атмосфере учитывается два существенных параметра - скорости перемещения мелкодисперсных субстанции в атмосфере и орография местности рассматриваемого региона. Модель описывается многомерными уравнениями в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями. В работе при выводе модели использовались основные законы гидротермодинамики. Чтобы разработать численное алгоритм решение задачи, использовано методы расщепления по физическим процессам (перенос, диффузия и поглощение), а также неявно конечно-разностная схема второго порядка аппроксимации как по пространственных переменных, так и по времени.

Ключевые слова: математическая модель, перенос и диффузия вредных веществ, физическое расщепления, численный алгоритм.

Цитирование: *Равшанов Н., Шафиев Т.Р., Мурадов Ф.А.* Нелинейная математическая модель и эффективный численный алгоритм для мониторинга и прогнозирования концентрации вредных веществ в атмосфере с учётом орографии местности // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – 2021. – № 1(31). – С. 57-75.

1 Введение

Загрязнение воздуха - от смога над городами до дыма внутри дома - представляет серьезную угрозу для здоровья и климата. Комбинированное воздействие атмосферного (уличного) и бытового загрязнения воздуха вызывает около 7 миллионов преждевременных смертей каждый год, в основном в результате увеличения смертности от инсульта, болезней сердца, хронической обструктивной болезни легких, рака легких и острых респираторных инфекций. Более 80 % людей, живущих в городских районах, которые следят за загрязнением воздуха, подвергаются воздействию уровней качества воздуха, которые превышают рекомендованный ВОЗ уровень 10 мг/м3, причем страны с низким и средним уровнем дохода страдают от самого высокого воздействия. Основными источниками загрязнения окружающей среды являются автомобили, производство электроэнергии, системы отопления зданий, сельское хозяйство / сжигание отходов и промышленность. Кроме того, более 3 миллиардов человек во всем мире используют загрязняющие технологии и топливо (включая биомассу, уголь и керосин) для приготовления пищи, обогрева и освещения в домашних условиях и вымывания загрязняющих веществ на открытом воздухе.

Загрязнение воздуха можно значительно снизить, расширив исследования над «экологической проблемой» мирового масштаба и математическое моделирование может претендовать на роль «решения» этих задач и принятия управленческих решении. Потому что, математическое моделирование, является эффективным инструментом для оценки и анализа качества воздуха и защита их от загрязняющих веществ. Из анализа проведенных многолетних наблюдений следует, что ни одна стратегия сокращения выбросов и контроля не может быть экономически эффективной без серьезного предварительного применения методов математического моделирования выше указанной задачи. За последние годы учёными разработаны математические инструменты для исследования, прогнозирования и мониторинга экологического состояния промышленных регионов, которые основывается на – математическую модель, численного алгоритма и программного средства для проведения вычислительных экспериментов на ЭВМ и получены значительные теоретические и прикладные результаты по выше указанной проблемой.

В частности, статье авторов [1] удалено внимания на задачу мониторинга и прогнозирования экологического состояния промышленных регионов и защиты окружающей среды от техногенных факторов. Авторами разработана математическая модель, учитывающий изменение погодно-климатических факторов, эрозию почвы и параметры, связанные с ними. В статье проведены численные расчеты для исследования процесса эрозии почвы в зависимости от скоростей воздушной массы атмосферы, размера и плотности частиц, а также сил, действующих на них. Полученные результаты показал, что основным триггером ветровой эрозии почвы является вихревая подъемная сила, которая на порядок превышает касательное напряжение и плотность атмосферы и растет по экспоненциальному закону в зависимости от изменения скорости воздушной массы атмосферы.

В работе [2] исследовано распространение и влияние вредных веществ от автозаправочных станций (АЗС) на близлежайшую застройку с учетом аэродинамики потоков ветра. Авторы верно подчёркивают, что изучение данного процесса - распространения вредных веществ в натурных условиях вызывает определенные сложности. Авторами, на основании полученных ранее результатов теоретических и экспериментальных исследований, выполнено численное моделирование распространения загрязняющих веществ, выделяющихся от АЗС, и анализ их влияния на близлежащую застройку с учетом обтекающих воздушных потоков. Полученные результаты авторам позволила сделать оценку состояние окружающей среды в любой точке и на любом расстоянии от АЗС и прогнозировать степень влияния загрязнения атмосферного воздуха на экологическую безопасность жилой застройки при строительстве АЗС.

В статье [3] представлена трехмерная математическая модель переноса и диффузии атмосферных примесей и результаты расчетов загрязнения окружающей среды от твердотопливных ракетных двигателей в различные периоды года в регионе с характерными для него метеорологическими параметрами. В численных экспериментах варьировались шаг сетки по пространственным координатам, шаг сетки по времени, некоторые параметры численной схемы.

В работе [4] приведены результаты экспериментальных исследований атмосферного загрязнения снежного покрова взвешенными веществами, ионными компонентами, полиароматическими углеводородами в зимнем сезоне 2016/17 гг. в окрестностях Искитимского цементного завода. Проведено исследования на определения содержание макро- микроэлементов, а также полиароматических углеводородов (ПАУ) в пробах снежного покрова, отобранных в районе цементного завода; по полученным данным оценено уровень техногенной нагрузки, создаваемой цементным заводом на прилежащую территорию. Сделано сравнительный анализ измеренных и вычисленная концентрация осадка, суммы растворённого кальция и нитратов в пробах снега.

В работе авторов [5] определены классы информационных задач, обеспечивающих оперативный контроль и ретроспективный анализ состояния атмосферы на территориях промышленных регионов. Определены подходы к построению программных систем в составе автоматизированных систем мониторинга. Приведено описание алгоритмического обеспечения для анализа территориальной и временной изменчивости состояния территорий на основе мер подобия и характеристик статистической взаимосвязи параметров состояния. Представлены результаты вычислительных экспериментов с использованием предлагаемых подходов для анализа экологического состояния территорий крупных городов Республики Азербайджана и Республики Башкортостана.

В статье [6] спрогнозирован распространения загрязнителей за пределы санитарно-защитной зоны хвостохранилищ (хвостохранилище - комплекс специальных сооружений и оборудования, предназначенный для хранения или захоронения радиоактивных, токсичных и других отвальных отходов обогащения полезных ископаемых) предприятий. Авторы с помощью математических моделей Гаусса и градиентного переноса проводили расчет рассеяния примесей в условиях развитого турбулентного обмена. На основе вычислительного экспириментов осуществлен прогноз объемной концентрации поллютантов в приземном слое атмосферного воздуха за счет дефляционных процессов. В работе авторов [7] рассмотрены две одномерные математические модели, работающие на основе функции экспоненциального вида и Гауссового типа для процесса загрязнения эко сферы города Кызыла дымом ТЭЦ. Оценивание неизвестных параметров модельных функций распределения концентрации загрязняющих веществ проводилось на базе экспериментальных данных по пробам снега. С помощью метода статистического анализа для нелинейных модельных функций получены результаты их идентификации по загрязняющему элементу «Ртуть» в четырех направлениях (румбах) по азимуту от трубы ТЭЦ. Приведён алгоритм определения доли вклада дыма ТЭЦ и других источников в общее загрязнение атмосферы рассматриваемого региона.

В работе [8] предложены модели оценивания атмосферного загрязнения территорий площадными источниками. На основе исследования авторов лежит различные асимптотики решений полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии в приземном и пограничном слоях атмосферы. Выполнен численный анализ результатов мониторинговых исследований загрязнения снежного покрова рассматриваемого региона. Полученные результаты численных экспериментов показали, что уровни загрязнения на преобладающих направлениях сноса вредных примесей весьма значительны даже на расстояниях нескольких десятков километров от городских территорий. Выявленные зависимости позволяют ограниченными средствами выполнить интегральные оценки выносов рассматриваемых примесей от Новосибирска за длительный промежуток времени и оценить степень антропогенной нагрузки на окружающие территории.

В статье [9] приведены характеристики, причины возникновения и математические методы моделирования динамики двуокиси углерода в биосфере и глобального потепления. С помощью математической модели глобального цикла углерода в биосфере получены прогнозы вероятных вариантов развития глобального потепления. Проанализированы планы и возможности уменьшения глобального потепления при реализации Парижского климатического соглашения 2015 года. Показано, что сокращение выбросов CO2 в развивающихся странах не может проводиться без высокотехнологичного развития и уменьшения выбросов загрязнений в развивающихся странах.

В работе [10] авторов исследовано экологическое состояния атмосферы городов, находящихся вблизи акватории озера Байкал. По полученным результатам можно сказать, что ветер в нижних слоях атмосферы является непосредственным переносчиком загрязняющих примесей от малых и средних промышленных объектов. Для оценок влияния различных метеорологических ситуаций на процессы переноса примесей на акваторию используется мезомасштабная модель динамики атмосферы и переноса примесей, разработанный в институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук. Представлены результаты численного моделирования локальных циркуляций ветра в Байкальском регионе в летний период. Показана пространственная и временная изменчивость ветрового потока и динамика распределения примесей в условиях модельного сценария.

Качественный обзор научных исследований посвящённых к математическом моделированию экологического состояния атмосферы регионов показало, что во многих работах при моделирования исследуемого процесса не учитывается существенно влияющие параметры, такие как физико-механические свойства рассматриваемых частиц, изменяющий по времени коэффициент поглощения, скорость воздушного потока, подъемная сила воздушного потока и орография местности рассматриваемого региона. Исходя из этого, целью данного статьи является разработка математического модели учитывающий вышеуказанных параметров.

2 Постановка задачи

Для исследования процесса переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере с учетом существенных параметров $u_ч$, $v_ч$, $w_ч$ составляющие скорости частиц по направлениям x, y, z соответственно и орографии месности рассмотрим математическую модель, описывающую на основе закона гидромеханики с помощью многомерного дифференциального уравнения в частных производных [11–13]:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}+u_ч\frac{\partial h\theta}{\partial x}+v_ч\frac{\partial h\theta}{\partial y}+w_ч\frac{\partial h\theta}{\partial z}+\sigma h\theta=\mu\left(\frac{\partial^2 h\theta}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 h\theta}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\varkappa\frac{\partial h\theta}{\partial z}\right)+\delta Q; \quad (1)$$

$$m\frac{du_ч}{dt}=c_f\pi r^2\rho_в(u_ч-U)^2; \quad (2)$$

$$m\frac{dv_ч}{dt}=c_f\pi r^2\rho_в(v_ч-U)^2; \quad (3)$$

$$m\frac{dw_ч}{dt}=-\frac{4}{3}\pi r^3(\rho_ч-\rho_в)g-k_f\mu_в\pi r w_ч+F_n; \quad (4)$$

с соответствующими начальными

$$\theta(x,y,z,0)=\theta^0(x,y,z),\ \ u_ч(0)=u_ч^0,\ \ v_ч(0)=v_ч^0,\ \ w_ч(0)=w_ч^0, \text{при t} = 0; \quad (5)$$

и граничными условиями

$$-\mu\frac{\partial h\theta}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta\right); \qquad \mu\frac{\partial h\theta}{\partial x}\bigg|_{x=L_x} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta\right); \tag{6}$$

$$-\mu\frac{\partial h\theta}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta\right); \qquad \mu\frac{\partial h\theta}{\partial y}\bigg|_{y=L_y} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta\right); \tag{7}$$

$$-\varkappa\frac{\partial h\theta}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \xi h\left(\beta\theta - F_0\right); \qquad \varkappa\frac{\partial \theta h}{\partial z}\bigg|_{z=H} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta\right); \tag{8}$$

Здесь $U = \sqrt{u^2+v^2+w^2}$; t – время; x, y, z– координаты; θ - концентрация распространяющегося вещества; h-параметр для определения рельефа местности; σ - коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере; μ- коэффициент диффузии; $\varkappa$ - коэффициент турбулентности; δ- функция Дирака; Q- мощность источников; θ^0- первичная концентрация вредных веществ в атмосфере; m- масса частицы; c_f- коэффициент лобового сопротивления частиц; r- радиус частицы; $\rho_{\text{в}}$- плотность воздуха; $\rho_{\text{ч}}$ - плотность частиц; g - ускорения свободного падания; k_f - коэффициент формы тела для силы сопротивления; $\mu_{\text{в}}$-вязкость воздуха; F_n - подъёмная сила воздушного потока; β- коэффициент взаимодействия с подстилающей поверхности; F_0 - количество аэрозольных частиц оторвавшихся от шероховатости земной поверхности; ξ - коэффициент для проведения граничного условия к размерному виду; $\theta_{\text{в}}$ - концентрация взвешенных веществ в соседних областях решаемых задач.

Параметр для определения рельефа местности определяется при помощи соотношении [14, 15]:

$$h = \begin{cases} 0, \text{если слой находиться под землой;} \\ 1, \text{Если слой находится в атмосфере;} \\ (\eta - z_{k-0,5})/\Delta z\text{-Если слой находиться} \\ \text{под орографические поверхности.} \end{cases}$$

Здесь η – высота возвышенности над плоскостью, параллельной уровню моря, а $\Delta z = z_{k+0,5} - z_{k-0,5}$. Для каждого слоя вводится множитель h $(0 \leqslant h \leqslant 1)$, определяющий степень блокирования воздушного потока.

Так как, поставленная задача (1)-(8) описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, то найти ее точное решение в аналитической форме затруднительно.

При этом, можно видит, что в уравнения (1) описывается три физических процесса – перенос субстанции по направлению движения воздушной массы атмосферы, молекулярная диффузия субстанции в атмосфере и поглощения вредных веществ в атмосфере.

Учитывая вышеуказанных обстоятельств, для решения задачи используем метод расщепления по физическим процессам на каждом временном слое. Поэтому для эффективного решения поставленной задачи расщепим её по физическим процессами – на конвекционную часть, диффузионную часть и часть поглощения субстанции в атмосфере.

Метод расщепления по физическим процессам базируется на аппроксимации высоко порядка [16], обосновании аддитивность процессов для достаточно малых шагов по времени [17] и доказательстве суммарной аппроксимацией исходного уравнения вследствие расщепления. Общая теория расщепления полно изложено в [18], а особенности расщепления для задачи конвекции в прямоугольных областях и параллелепипедах в [19–21].

Для численного решения поставленной задачи (1)-(9) будем считать, что искомое решение – это гладкая функция во всем пространстве. Используя аддитивность принципиально различных физических процессов переноса и диффузии масс в атмосфере в малом интервале времени $t_n \leqslant t \leqslant t_{n+1}$, мы рассмотрим их как отдельные задачи. Процесс переноса субстанции с ее сохранением вдоль траектории будем рассматривать как задачу А:

$$\frac{\partial h\theta_1}{\partial t} + u_ч \frac{\partial h\theta_1}{\partial x} + v_ч \frac{\partial h\theta_1}{\partial y} + w_ч \frac{\partial h\theta_1}{\partial z} = \frac{1}{3}\delta Q; \tag{9}$$

$$m\frac{du_ч}{dt} = c_f \pi r^2 \rho_в (u_ч - U)^2; \tag{10}$$

$$m\frac{dv_ч}{dt} = c_f \pi r^2 \rho_в (v_ч - U)^2; \tag{11}$$

$$m\frac{dw_ч}{dt} = -\frac{4}{3}\pi r^3 (\rho_ч - \rho_в) g - k_f \mu_в \pi r w_ч + F_n; \tag{12}$$

с соответствующими начальными

$$\theta_1^0 = \theta_3^n; \quad u_ч = u_ч(t_n),\ v_ч = v_ч(t_n),\ w_ч = w_ч(t_n), \quad t = t_n; \tag{13}$$

и граничными условиями

$$-\mu \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta_1\right); \qquad \mu \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial x}\right|_{x=L_x} = \xi h\left(\theta_в - \theta_1\right); \tag{14}$$

$$-\mu \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial y}\right|_{y=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta_1\right); \qquad \mu \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial y}\right|_{y=L_y} = \xi h\left(\theta_в - \theta_1\right); \tag{15}$$

$$-\varkappa \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial z}\right|_{z=0} = \xi h\left(\beta\theta_1 - F_0\right); \qquad \varkappa \left.\frac{\partial h\theta_1}{\partial z}\right|_{z=H} = \xi h\left(\theta_в - \theta_1\right). \tag{16}$$

Процесс диффузии субстанции в атмосфере рассмотрим, как задачу Б:

$$\frac{\partial h\theta_2}{\partial t} = \mu\left(\frac{\partial^2 h\theta_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h\theta_2}{\partial y^2}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varkappa\frac{\partial h\theta_2}{\partial z}\right) + \frac{1}{3}\delta Q; \tag{17}$$

с начальным

$$\theta_2^0 = \theta_1^{n+1}; \tag{18}$$

и граничными условиями

$$-\mu \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial x}\right|_{x=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta_2\right); \qquad \mu \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial x}\right|_{x=L_x} = \xi h\left(\theta_в - \theta_2\right); \tag{19}$$

$$-\mu \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial y}\right|_{y=0} = \xi h\left(\theta_в - \theta_2\right); \qquad \mu \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial y}\right|_{y=L_y} = \xi h\left(\theta_в - \theta_2\right); \tag{20}$$

$$-\varkappa \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial z}\right|_{z=0} = \xi h\left(\beta\theta_2 - F_0\right); \qquad \varkappa \left.\frac{\partial h\theta_2}{\partial z}\right|_{z=H} = \xi h\left(\theta_в - \theta_2\right). \tag{21}$$

Процесс поглощения частиц в воздушной массе рассмотрим, как задачу B:

$$\frac{\partial h\theta_3}{\partial t} + \sigma h\theta_3 = \frac{1}{3}\delta Q; \tag{22}$$

с начальным

$$\theta_3^0 = \theta_2^{n+1}; \tag{23}$$

и граничными условиями

$$-\mu \frac{\partial h\theta_3}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta_3\right); \qquad \mu \frac{\partial h\theta_3}{\partial x}\bigg|_{x=L_x} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta_3\right); \tag{24}$$

$$-\mu \frac{\partial h\theta_3}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta_3\right); \qquad \mu \frac{\partial h\theta_3}{\partial y}\bigg|_{y=L_y} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta_3\right); \tag{25}$$

$$-\varkappa \frac{\partial h\theta_3}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \xi h\left(\beta\theta_3 - F_0\right); \qquad \varkappa \frac{\partial h\theta_3}{\partial z}\bigg|_{z=H} = \xi h\left(\theta_{\text{в}} - \theta_3\right). \tag{26}$$

Таким образом, после расщепления исходной задачи по физическим процессам получили три подзадачи (9) - (16), (17) - (21) и (22) – (26) которые можно решать независимо друг от друга конечно-разностным методом.

3 Метод решения

Задачи (9) - (16), (17) - (21) и (22) – (26) будем решать используя неявную конечно-разностную схему по времени и со вторым порядком точности по координатам, заменяя непрерывную область изменения искомых переменных на сеточную с шагом Δx; Δy; Δz:

$$\begin{aligned}\Omega_{xyzt} = \Big\{ &(x_i = i\Delta x,\ y_j = j\Delta y,\ z_k = k\Delta z,\ \tau_n = n\ \Delta t);\\ &i = \overline{1, N_x};\ j = \overline{1, M_y},\ k = \overline{1, L_z},\ n = \overline{0, N_t},\ \ \Delta t = \tfrac{1}{N_t} \Big\}.\end{aligned}$$

Тогда, для задачи A, сначала вычислим скорости частиц $u_{\text{ч}}, v_{\text{ч}}, w_{\text{ч}}$используя неявную схему:

$$\frac{{u_{\text{ч}}}^{n+\frac{1}{3}} - {u_{\text{ч}}}^{n}}{\Delta t/3} = \frac{c_f \pi r^2 \rho_{\text{в}} \left(2\tilde{u} u_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}} - \tilde{u}^2 - 2u_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}} U + U^2\right)}{m};$$

Отрыв скобки и упростив схожие элементы уравнения, можно найти значения $u_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}$:

$$u_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}} = \frac{3m}{3m - 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t + 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t} u_{\text{ч}}^n - \frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}^2\Delta t + c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m - 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t + 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t}.$$

Аналогично, эту последовательность операции выполним для нахождения $v_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}$ и $w_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}$:

$$v_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}} = \frac{3m}{3m - 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t + 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t} v_{\text{ч}}^n - \frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}^2\Delta t + c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m - 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t + 2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t};$$

$$w_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}} = \frac{9m}{9m + 3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t} w_{\text{ч}}^n - \frac{4\pi r^3\left(\rho_{\text{п}} - \rho_{\text{в}}\right) g\Delta t - 3F_n\Delta t}{9m + 3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t}.$$

Далее, для уравнения (10) получим конечно-разностная схему высокого порядка точности как по времени и по пространственный переменным:

$$\frac{1}{2}\frac{\theta_{1,i,j,k}^{n+1/3}-\theta_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta t/3}+\frac{1}{2}\frac{\theta_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}-\theta_{1,i+1,j,k}^{n}}{\Delta t/3}+\left(\frac{u_{ч}^{n+1/3}-\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4}\right)\frac{h_{i+0,5,j,k}\theta_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}-h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x}+$$
$$+\left(\frac{u_{ч}^{n+1/3}-\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4}\right)\frac{h_{i+0,5,j,k}\theta_{1,i+1,j,k}^{n}-h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta x}+$$
$$+\left(\frac{u_{ч}^{n+1/3}+\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4}\right)\frac{h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n+1/3}-h_{i-0,5,j,k}\theta_{1,i-1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x}+$$
$$+\left(\frac{u_{ч}^{n+1/3}+\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4}\right)\frac{h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}-h_{i-0,5,j,k}\theta_{1,i-1,j,k}^{n}}{\Delta x}+$$
$$+\left(\frac{v_{ч}^{n+1/3}-\left|v_{ч}^{n+1/3}\right|}{2}\right)\frac{h_{i,j+0,5,k}\theta_{1,i,j+1,k}^{n}-h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta y}+$$
$$+\left(\frac{v_{ч}^{n+1/3}+\left|v_{ч}^{n+1/3}\right|}{2}\right)\frac{h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}-h_{i,j-0,5,k}\theta_{1,i,j-1,k}^{n}}{\Delta y}+$$
$$+\left(\frac{w_{ч}^{n+1/3}-\left|w_{ч}^{n+1/3}\right|}{2}\right)\frac{h_{i,j,k+0,5}\theta_{1,i,j,k+1}^{n}-h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta z}+$$
$$+\left(\frac{w_{ч}^{n+1/3}+\left|w_{ч}^{n+1/3}\right|}{2}\right)\frac{h_{i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n}-h_{i,j,k-0,5}\theta_{1,i,j,k-1}^{n}}{\Delta z}=\frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Открыв скобки, группируя схожие члены уравнения, полученное в результате уравнение можно свести к трехдиагональной системе линейных алгебраических уравнений:

$$a_{1,i,j,k}\theta_{1,i-1,j,k}^{n+1/3}-b_{1,i,j,k}\theta_{1,i,j,k}^{n+1/3}+c_{1,i,j,k}\theta_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}=-d_{1,i,j,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$a_{1,i,j,k}=\frac{u_{ч}^{n+1/3}+\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i-0,5,j,k};\quad b_{1,i,j,k}=\frac{\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta x}+\frac{3}{2\Delta t};$$

$$c_{1,i,j,k}=-\frac{u_{ч}^{n+1/3}-\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i+0,5,j,k}-\frac{3}{2\Delta t};$$

$$d_{1,i,j,k}=\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta x}-\frac{\left|v_{ч}^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta y}-\frac{\left|w_{ч}^{n+1/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta z}\right)\theta_{1,i,j,k}^{n}+$$
$$+\left(\frac{u_{ч}^{n+1/3}+\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i-0,5,j,k}\right)\theta_{1,i-1,j,k}^{n}+\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{u_{ч}^{n+1/3}-\left|u_{ч}^{n+1/3}\right|}{4\Delta x}h_{i+0,5,j,k}\right)\theta_{1,i+1,j,k}^{n}+$$
$$+\frac{v_{ч}^{n+1/3}+\left|v_{ч}^{n+1/3}\right|}{2\Delta y}h_{i,j-0,5,k}\theta_{1,i,j-1,k}^{n}-\frac{v_{ч}^{n+1/3}-\left|v_{ч}^{n+1/3}\right|}{2\Delta y}h_{i,j+0,5,k}\theta_{1,i,j+1,k}^{n}+$$
$$+\frac{w_{ч}^{n+1/3}+\left|w_{ч}^{n+1/3}\right|}{2\Delta z}h_{i,j,k-0,5}\theta_{1,i,j,k-1}^{n}-\frac{w_{ч}^{n+1/3}-\left|w_{ч}^{n+1/3}\right|}{2\Delta z}h_{i,j,k+0,5}\theta_{1,i,j,k+1}^{n}+\frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Граничное условие (14) аппроксимируем по x и при $i=0$ получим

$$-\mu\frac{-3h_{0,j,k}\theta_{1,0,j,k}^{n+1/3}+4h_{0,5,j,k}\theta_{1,1,j,k}^{n+1/3}-h_{1,j,k}\theta_{1,2,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=\xi h_{0,j,k}\theta_{в}-\xi h_{0,j,k}\theta_{1,0,j,k}^{n+1/3};$$

в конечном итоге получим

$$\theta_{1,0,j,k}^{n+1/3}=\frac{4\mu c_{1,1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}}\theta_{1,1,j,k}^{n+1/3}+$$

$$+\frac{d_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{1,0,j,k}$ и $\beta_{1,0,j,k}$ вычисляется с помощью:

$$\alpha_{1,0,j,k}=\frac{4\mu c_{1,1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}};$$

$$\beta_{1,0,j,k}=\frac{d_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{1,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{1,1,j,k}h_{0,j,k}};$$

Далее, аппроксимируем граничное условие (14) по направлению Ox и при $i=N$ получим:

$$\mu\frac{h_{N-1,j,k}\theta^{n+1/3}_{1,N-2,j,k}-4h_{N-0,5,j,k}\theta^{n+1/3}_{1,N-1,j,k}+3h_{N,j,k}\theta^{n+1/3}_{1,N,j,k}}{2\Delta x}=\xi h_{N,j,k}\theta_{\text{в}}-\xi h_{N,j,k}\theta^{n+1/3}_{1,N,j,k}.$$

Упростив полученное выражение, найдем значения концентрации на границе оси Ox:

$$\theta^{n+1/3}_{1,N,j,k}=\frac{2\Delta x\xi h_{N,j,k}\theta_{\text{в}}-\left(\alpha_{1,N-2,j,k}\beta_{1,N-1,j,k}h_{N-1,j,k}+\beta_{1,N-2,j,k}h_{N-1,j,k}-4\beta_{1,N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k}\right)\mu}{\left(\alpha_{1,N-2,j,k}\alpha_{1,N-1,j,k}h_{1,N-1,j,k}-4\alpha_{1,N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k}+3h_{N,j,k}\right)\mu+2\Delta x\xi h_{N,j,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{1,N-1,j,k}$, $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{1,N-2,j,k}$, ..., $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{1,1,j,k}$ определяются методом обратной прогонки.

Далее, аналогичные действия выполняем для направлении Oy и Oz.

Для направления Oy уравнении (10) – (12) сводится к следующему:

$$u_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t}u_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t};$$

$$v_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t}v_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t};$$

$$w_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}=\frac{9m}{9m+3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t}w_{\text{ч}}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{4\pi r^3\left(\rho_{\text{п}}-\rho_{\text{в}}\right)g\Delta t-3F_n\Delta t}{9m+3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t}.$$

Аналогично, для уравнения (9) используя вышеуказанную технологию по координате Oy и получим:

$$\bar{a}_{1,i,j,k}\theta^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-\bar{b}_{1,i,j,k}\theta^{n+2/3}_{1,i,j,k}+\bar{c}_{1,i,j,k}\theta^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}=-\bar{d}_{1,i,j,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{a}_{1,i,j,k}=\frac{v_{\text{ч}}^{n+2/3}+\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{4\Delta y}h_{i,j-0,5,k};\quad \bar{b}_{1,i,j,k}=\frac{\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta y}+\frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{c}_{1,i,j,k}=-\frac{v_{\text{ч}}^{n+2/3}-\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{4\Delta y}h_{i,j+0,5,k}-\frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{d}_{1,i,j,k}=\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{\left|u_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta x}-\frac{\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|h_{i,j,k}}{2\Delta y}-\frac{\left|w_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|h_{i,j,k}}{\Delta z}\right)\theta^{n+1/3}_{1,i,j,k}+$$

$$+\frac{u_{\text{ч}}^{n+2/3}+\left|u_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{2\Delta x}h_{i-0,5,\,j,\,k}\theta_{i-1,\,j,\,k}^{n+1/3}-\frac{u_{\text{ч}}^{n+2/3}-\left|u_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{2\Delta x}h_{i+0,5,\,j,\,k}\theta_{1,i+1,\,j,\,k}^{n+1/3}+$$

$$+\frac{v_{\text{ч}}^{n+2/3}+\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{4\Delta y}h_{i,\,j-0,5,\,k}\theta_{1,i,\,j-1,\,k}^{n+1/3}+\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{v_{\text{ч}}^{n+2/3}-\left|v_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{4\Delta y}h_{i,\,j+0,5,\,k}\right)\theta_{1,i,\,j+1,\,k}^{n+1/3}+$$

$$+\frac{w_{\text{ч}}^{n+2/3}+\left|w_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{2\Delta z}h_{i,\,j,\,k-0,5}\theta_{1,i,\,j,\,k-1}^{n+1/3}-\frac{w_{\text{ч}}^{n+2/3}-\left|w_{\text{ч}}^{n+2/3}\right|}{2\Delta z}h_{i,\,j,\,k+0,5}\theta_{1,i,\,j,\,k+1}^{n+1/3}+\frac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Граничное условие (15) аппроксимируем по Oy и при $y=0$ получим значения $\theta_{1,i,\,0,\,k}^{n+2/3}$:

$$\theta_{1,i,\,0,\,k}^{n+2/3}=\frac{4\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,5,\,k}-\bar{b}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}}{3\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}}\theta_{1,i,\,1,\,k}^{n+2/3}+$$

$$+\frac{\bar{d}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\bar{\alpha}_{1,i,\,0,\,k}$ и $\bar{\beta}_{1,i,\,0,\,k}$ вычисляется с помощью:

$$\bar{\alpha}_{1,i,\,0,\,k}=\frac{4\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,5,\,k}-\bar{b}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}}{3\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}};$$

$$\bar{\beta}_{1,i,\,0,\,k}=\frac{\bar{d}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{1,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{1,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}}.$$

Далее, аппроксимируя граничное условие (15) при $y=L_y$, открывая скобки, группируя схожие члены уравнения получим значения $\theta_{1,i,\,M,\,k}^{n+2/3}$:

$$\theta_{1,i,\,M,\,k}^{n+2/3}=\frac{2\Delta y\xi h_{i,\,M,\,k}\theta_{\text{в}}-\left(\bar{\alpha}_{1,i,\,M-2,\,k}\bar{\beta}_{1,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}+\bar{\beta}_{1,i,\,M-2,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}-4\bar{\beta}_{1,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-0,5,\,k}\right)\mu}{\left(\bar{\alpha}_{1,i,\,M-2,\,k}\bar{\alpha}_{1,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}-4\bar{\alpha}_{1,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-0,5,\,k}+3h_{i,\,M,\,k}\right)\mu+2\Delta y\xi h_{i,\,M,\,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta_{1,i,\,M-1,\,k}^{n+\frac{2}{3}}$, $\theta_{1,i,\,M-2,\,k}^{n+\frac{2}{3}}$, ..., $\theta_{1,i,\,1,\,k}^{n+\frac{2}{3}}$ определяются методом обратной прогонки.

Аналогично, для вычисления скорости перемещения частиц по вертикали получим:

$$u_{\text{ч}}^{n+1}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t}u_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{u}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t};$$

$$v_{\text{ч}}^{n+1}=\frac{3m}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t}v_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}^2\Delta t+c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U^2\Delta t}{3m-2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}\tilde{v}\Delta t+2c_f\pi r^2\rho_{\text{в}}U\Delta t};$$

$$w_{\text{ч}}^{n+1}=\frac{9m}{9m+3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t}w_{\text{ч}}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{4\pi r^3\left(\rho_{\text{п}}-\rho_{\text{в}}\right)g\Delta t-3F_n\Delta t}{9m+3k_f\mu_{\text{в}}\pi r\Delta t}.$$

Аналогично, используя вышеуказанную технологию по координате Oz и получим:

$$\bar{\bar{a}}_{1,\,i,\,j,\,k}\theta_{1,\,i,\,j,\,k-1}^{n+1}-\bar{\bar{b}}_{1,\,i,\,j,\,k}\theta_{1,\,i,\,j,\,k}^{n+1}+\bar{\bar{c}}_{1,\,i,\,j,\,k}\theta_{1,\,i,\,j,\,k+1}^{n+1}=-\bar{\bar{d}}_{1,\,i,\,j,\,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{\bar{a}}_{1,\,i,\,j,\,k} = \tfrac{w_{\text{ч}}^{n+1}+\left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{4\Delta z} h_{i,\,j,\,k-0{,}5}; \quad \bar{\bar{b}}_{1,\,i,\,j,\,k} = \tfrac{\left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right| h_{i,\,j,\,k}}{2\Delta z} + \tfrac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{\bar{c}}_{1,\,i,\,j,\,k} = -\frac{w_{\text{ч}}^{n+1} - \left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{4\Delta z} h_{i,\,j,\,k+0{,}5} - \frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{\bar{d}}_{1,\,i,\,j,\,k} = \left(\tfrac{3}{2\Delta t} - \tfrac{\left|u_{\text{ч}}^{n+1}\right| h_{i,\,j,\,k}}{\Delta x} - \tfrac{\left|v_{\text{ч}}^{n+1}\right| h_{i,\,j,\,k}}{\Delta y} - \tfrac{\left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right| h_{i,\,j,\,k}}{2\Delta z} \right) \theta_{1,i,\,j,\,k}^{n+2/3} +$$

$$+ \tfrac{u_{\text{ч}}^{n+1}+\left|u_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{2\Delta x} h_{i-0{,}5,\,j,\,k} \theta_{1,i-1,\,j,\,k}^{n+2/3} - \tfrac{u_{\text{ч}}^{n+1}-\left|u_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{2\Delta x} h_{i+0{,}5,\,j,\,k} \theta_{1,i+1,\,j,\,k}^{n+2/3} +$$

$$+ \tfrac{v_{\text{ч}}^{n+1}+\left|v_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{2\Delta y} h_{i,\,j-0{,}5,\,k} \theta_{1,i,\,j-1,\,k}^{n+2/3} - \tfrac{v_{\text{ч}}^{n+1}-\left|v_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{2\Delta y} h_{i,\,j+0{,}5,\,k} \theta_{1,i,\,j+1,\,k}^{n+2/3} +$$

$$+ \tfrac{w_{\text{ч}}^{n+1}+\left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{4\Delta z} h_{i,\,j,\,k-0{,}5} \theta_{1,i,\,j-1,\,k}^{n+2/3} + \left(\tfrac{3}{2\Delta t} - \tfrac{w_{\text{ч}}^{n+1}-\left|w_{\text{ч}}^{n+1}\right|}{4\Delta z} h_{i,\,j,\,k+0{,}5} \right) \theta_{1,i,\,j+1,\,k}^{n+2/3} + \tfrac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k} Q.$$

Граничное условие (16) аппроксимируем по Oz и при $k = 0$ получим:

$$-\varkappa_1 \frac{-3h_{i,\,j,\,0}\theta_{1,i,\,j,\,0}^{n+1} + 4h_{i,\,j,\,0{,}5}\theta_{1,i,\,j,\,1}^{n+1} - h_{i,\,j,\,1}\theta_{1,i,\,j,\,2}^{n+1}}{2\Delta z} = \beta h_{i,\,j,\,0}\theta_{1,i,\,j,\,0}^{n+1} - h_{i,\,j,\,0} F_0;$$

и в конечном итоге получим:

$$\theta_{1,i,\,j,\,0}^{n+1} = \frac{4\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,\,i,\,j,\,1} h_{i,\,j,\,0{,}5} - \bar{\bar{b}}_{1,\,i,\,j,\,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} - \bar{\bar{a}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0}} \theta_{1,i,\,j,\,1}^{n+1} +$$

$$+ \frac{\bar{\bar{d}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} F_0}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} - \bar{\bar{a}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0}};$$

С помощью метода прогонки найдем значения прогоночных коэффициентов $\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,j,0}$ и $\bar{\bar{\beta}}_{1,i,\,j,\,0}$:

$$\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,j,0} = \frac{4\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0{,}5} - \bar{\bar{b}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} - \bar{\bar{a}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0}};$$

$$\bar{\bar{\beta}}_{1,i,\,j,\,0} = \frac{\bar{\bar{d}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} F_0}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0} - \bar{\bar{a}}_{1,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{1,i,j,1} h_{i,\,j,\,0}}.$$

Далее, граничное условие (16) аппроксимируем по Oz со вторим порядок аппроксимации и при $z = H$ получим:

$$\varkappa_L \frac{h_{i,\,j,\,L-1}\theta_{1,i,\,j,\,L-2}^{n+1} - 4h_{i,\,j,\,L-0{,}5}\theta_{1,i,\,j,\,L-1}^{n+1} + 3h_{i,\,j,\,L}\theta_{1,i,\,j,\,L}^{n+1}}{2\Delta z} = \xi h_{i,\,j,\,L}\theta_{\text{в}} - \xi h_{i,\,j,\,L}\theta_{1,i,\,j,\,L}^{n+1}; \quad (27)$$

в конечном итоге из выражение (27) найдем значения концентрации на границе оси Oz:

$$\theta_{1,i,\,j,\,L}^{n+1} = \frac{2\Delta z \xi h_{i,\,j,\,L}\theta_{\text{в}} - \left(\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,\,j,\,L-2}\bar{\bar{\beta}}_{1,i,\,j,\,L-1} h_{i,\,j,\,L-1} + \bar{\bar{\beta}}_{1,i,\,j,\,L-2} h_{i,\,j,\,L-1} - 4\bar{\bar{\beta}}_{1,i,\,j,\,L-1} h_{i,\,j,\,L-0{,}5}\right)\mu}{\left(\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,\,j,\,L-2}\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,\,j,\,L-1} h_{i,\,j,\,L-1} - 4\bar{\bar{\alpha}}_{1,i,\,j,\,L-1} h_{i,\,j,\,L-0{,}5} + 3h_{i,\,j,\,L}\right)\mu + 2\Delta z \xi h_{i,\,j,\,L}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta_{1,i,\,j,\,L-1}^{n+1}$, $\theta_{1,i,\,j,\,L-2}^{n+1}$,..., $\theta_{1,i,\,j,\,1}^{n+1}$ определяются методом обратной прогонки.

Для решения задачи Б – процесс диффузии субстанции используем неявную конечно-разностную схему второго порядка аппроксимации по времени и получим следующие:

$$\frac{1}{2}\frac{\theta_{2,i,j,k}^{n+1/3}-\theta_{i,j,k}^{n}}{\Delta t/3}+\frac{1}{2}\frac{\theta_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}-\theta_{2,i+1,j,k}^{n}}{\Delta t/3}=$$

$$=\frac{\mu}{\Delta x^2}\Big(h_{i+0,5,j,k}\theta_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}-\left(h_{i+0,5,j,k}+h_{i-0,5,j,k}\right)\theta_{2,i,j,k}^{n+1/3}+$$

$$+h_{i-0,5,j,k}\theta_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}\Big)+\frac{\mu}{\Delta y^2}\left(h_{i,j+0,5,k}\theta_{2,i,j+1,k}^{n}-\right.$$

$$\left.-\left(h_{i,j+0,5,k}+h_{i,j-0,5,k}\right)\theta_{2,i,j,k}^{n}+h_{i,j-0,5,k}\theta_{2,i,j-1,k}^{n}\right)+$$

$$+\frac{1}{\Delta z^2}\left(\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}\theta_{2,i,j,k+1}^{n}-\left(\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}+\varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}\right)\theta_{2,i,j,k}^{n}+\right.$$

$$\left.+\varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}\theta_{2,i,j,k-1}^{n}\right)+\frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Открыв скобки, группируя схожие члены уравнения, полученый результат можно приводить к трехдиагональной системе алгебраических уровнении:

$$a_{2,i,j,k}\theta_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-b_{2,i,j,k}\theta_{2,i,j,k}^{n+1/3}+c_{2,i,j,k}\theta_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}=-d_{2,i,j,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$a_{2,i,j,k}=\tfrac{\mu h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2};\qquad b_{2,i,j,k}=\tfrac{\mu h_{i+0,5,j,k}+\mu h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2}+\tfrac{3}{2\Delta t};$$

$$c_{2,i,j,k}=\frac{\mu h_{i+0,5,j,k}}{\Delta x^2}-\frac{3}{2\Delta t};$$

$$d_{2,i,j,k}=\left(\tfrac{3}{2\Delta t}-\tfrac{h_{i,j+0,5,k}+h_{i,j-0,5,k}}{\Delta y^2}\mu-\tfrac{\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}+\varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}}{\Delta z^2}\right)\theta_{2,i,j,k}^{n}+$$
$$+\tfrac{3}{2\Delta t}\theta_{2,i+1,j,k}^{n}+\tfrac{\mu}{\Delta y^2}h_{i,j-0,5,k}\theta_{2,i,j-1,k}^{n}+\tfrac{\mu}{\Delta y^2}h_{i,j+0,5,k}\theta_{2,i,j+1,k}^{n}+$$
$$+\tfrac{\varkappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}h_{i,j,k-0,5}\theta_{2,i,j,k-1}^{n}+\tfrac{\varkappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}h_{i,j,k+0,5}\theta_{2,i,j,k+1}^{n}+\tfrac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Граничное условие (19) аппроксимируем по Ox и при $i=0$ получим

$$-\mu\frac{-3h_{0,j,k}\theta_{2,0,j,k}^{n+1/3}+4h_{0,5,j,k}\theta_{2,1,j,k}^{n+1/3}-h_{1,j,k}\theta_{2,2,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=\xi h_{0,j,k}\theta_{\text{в}}-\xi h_{0,j,k}\theta_{2,0,j,k}^{n+1/3};$$

в конечном итоге получем

$$\theta_{2,0,j,k}^{n+1/3}=\frac{4\mu c_{2,1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}}\theta_{2,1,j,k}^{n+1/3}+$$

$$+\frac{d_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{2,0,j,k}$ и $\beta_{2,0,j,k}$ вычисляется с помощью:

$$\alpha_{2,0,j,k}=\frac{4\mu c_{2,1,j,k}h_{0,5,j,k}-b_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}}{3\mu c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}};$$

$$\beta_{2,0,j,k}=\frac{d_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}-a_{2,1,j,k}\mu h_{1,j,k}+2\Delta x\xi c_{2,1,j,k}h_{0,j,k}}.$$

Далее, аппроксимируя граничное условия (19) при $x = L_x$, открывая скобки, группируя схожие члены уравнения получим значения $\theta_{2,N,j,k}^{n+1/3}$:

$$\theta_{2,N,j,k}^{n+1/3} = \frac{2\Delta x\xi h_{N,j,k}\theta_{\text{в}} - \left(\alpha_{2,N-2,j,k}\beta_{2,N-1,j,k}h_{N-1,j,k} + \beta_{2,N-2,j,k}h_{N-1,j,k} - 4\beta_{2,N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k}\right)\mu}{\left(\alpha_{2,N-2,j,k}\alpha_{2,N-1,j,k}h_{N-1,j,k} - 4\alpha_{2,N-1,j,k}h_{N-0,5,j,k} + 3h_{N,j,k}\right)\mu + 2\Delta x\xi h_{N,j,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta_{2,N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$, $\theta_{2,N-2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$, ..., $\theta_{2,1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ определяются методом обратной прогонки.

Далее, аналогичные действия выполняем для навравления Oy и Oz.

Для направления Oy первое уравнение задачи (17) сводится к следующему:

$$\bar{a}_{2,i,j,k}\theta_{2,i,j-1,k}^{n+2/3} - \bar{b}_{2,i,j,k}\theta_{2,i,j,k}^{n+2/3} + \bar{c}_{2,i,j,k}\theta_{2,i,j+1,k}^{n+2/3} = -\bar{d}_{2,i,j,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{a}_{2,i,j,k} = \frac{\mu h_{i,j-0,5,k}}{\Delta y^2}; \quad \bar{b}_{2,i,j,k} = \frac{\mu h_{i,j+0,5,k} + \mu h_{i,j-0,5,k}}{\Delta y^2} + \frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{c}_{2,i,j,k} = \frac{\mu h_{i,j+0,5,k}}{\Delta y^2} - \frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{d}_{2,i,j,k} = \left(\frac{3}{2\Delta t} - \frac{\mu h_{i+0,5,j,k} + \mu h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2} - \frac{\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5} + \varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}}{\Delta z^2}\right)\theta_{2,i,j,k}^{n+1/3} +$$
$$+ \frac{\mu}{\Delta x^2}h_{i-0,5,j,k}\theta_{2,i-1,j,k}^{n+1/3} + \frac{\mu}{\Delta x^2}h_{i+0,5,j,k}\theta_{2,i+1,j,k}^{n+1/3} + \frac{3}{2\Delta t}\theta_{2,i,j+1,k}^{n+1/3} +$$
$$+ \frac{\varkappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}h_{i,j,k-0,5}\theta_{2,i,j,k-1}^{n+1/3} + \frac{\varkappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}h_{i,j,k+0,5}\theta_{2,i,j,k+1}^{n+1/3} + \frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Граничное условие (20) аппроксимируем по Oy и при $y = 0$ получим значения $\theta_{2,i,0,k}^{n+2/3}$:

$$\theta_{2,i,0,k}^{n+2/3} = \frac{4\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,5,k} - \bar{b}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k}}{3\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k} - \bar{a}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}}\theta_{2,i,1,k}^{n+2/3} +$$
$$+ \frac{\bar{d}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k} - \bar{a}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\bar{\alpha}_{2,i,0,k}$ и $\bar{\beta}_{2,i,0,k}$ вычисляется с помощью:

$$\bar{\alpha}_{2,i,0,k} = \frac{4\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,5,k} - \bar{b}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k}}{3\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k} - \bar{a}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}};$$

$$\bar{\beta}_{2,i,0,k} = \frac{\bar{d}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k} - \bar{a}_{2,i,1,k}\mu h_{i,1,k} + 2\Delta y\xi\bar{c}_{2,i,1,k}h_{i,0,k}}.$$

Далее, аппроксимируем граничное условие (20) по слою Oy и при $y = L_y$ получим значения $\theta_{2,i,M,k}^{n+2/3}$:

$$\theta_{2,i,M,k}^{n+2/3} = \frac{2\Delta y\xi h_{i,M,k}\theta_{\text{в}} - \left(\bar{\alpha}_{2,i,M-2,k}\bar{\beta}_{2,i,M-1,k}h_{i,M-1,k} + \bar{\beta}_{2,i,M-2,k}h_{i,M-1,k} - 4\bar{\beta}_{2,i,M-1,k}h_{i,M-0,5,k}\right)\mu}{\left(\bar{\alpha}_{2,i,M-2,k}\bar{\alpha}_{2,i,M-1,k}h_{i,M-1,k} - 4\bar{\alpha}_{2,i,M-1,k}h_{i,M-0,5,k} + 3h_{i,M,k}\right)\mu + 2\Delta y\xi h_{i,M,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta_{2,i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}$, $\theta_{2,i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}$, ..., $\theta_{2,i,1,k}^{n+\frac{2}{3}}$ определяются методом обратной прогонки.

Для направления Oz первое уравнение задачи (17) сводится к виду:

$$\bar{\bar{a}}_{2,i,j,k}\theta_{i,j,k-1}^{n+1} - \bar{\bar{b}}_{2,i,j,k}\theta_{i,j,k}^{n+1} + \bar{\bar{c}}_{2,i,j,k}\theta_{i,j,k+1}^{n+1} = -\bar{\bar{d}}_{2,i,j,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{\bar{a}}_{2,i,j,k}=\frac{\varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}}{\Delta z^2};\qquad \bar{\bar{b}}_{2,i,j,k}=\frac{\varkappa_{k-0,5}h_{i,j,k-0,5}+\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}}{\Delta z^2}+\frac{3}{2\Delta t};$$
$$\bar{\bar{c}}_{2,i,j,k}=\frac{\varkappa_{k+0,5}h_{i,j,k+0,5}}{\Delta z^2}-\frac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{\bar{d}}_{2,i,j,k}=\left(\frac{3}{2\Delta t}-\frac{h_{i+0,5,j,k}+h_{i-0,5,j,k}}{\Delta x^2}\mu-\frac{h_{i,j+0,5,k}+h_{i,j-0,5,k}}{\Delta y^2}\mu\right)\theta^{n+2/3}_{2,i,j,k}+$$
$$+\frac{\mu}{\Delta x^2}h_{i-0,5,j,k}\theta^{n+2/3}_{2,i-1,j,k}+\frac{\mu}{\Delta x^2}h_{i+0,5,j,k}\theta^{n+2/3}_{2,i+1,j,k}+\frac{\mu}{\Delta y^2}h_{i,j-0,5,k}\theta^{n+2/3}_{2,i,j-1,k}+$$
$$+\frac{\mu}{\Delta y^2}h_{i,j+0,5,k}\theta^{n+2/3}_{2,i,j+1,k}+\frac{3}{2\Delta t}\theta^{n+2/3}_{2,i,j+1,k}+\frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Граничное условие (16) аппроксимируем по Oz и при $z=0$ получим:

$$-\varkappa_1\frac{-3h_{i,j,0}\theta^{n+1}_{2,i,j,0}+4h_{i,j,0,5}\theta^{n+1}_{2,i,j,1}-h_{i,j,1}\theta^{n+1}_{2,i,j,2}}{2\Delta z}=\beta h_{i,j,0}\theta^{n+1}_{2,i,j,0}-h_{i,j,0}F_0;$$

и в конечном итоге получим:

$$\theta^{n+1}_{2,i,j,0}=\frac{4\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0,5}-\bar{\bar{b}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}-\bar{\bar{a}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}}\theta^{n+1}_{2,i,j,1}+$$
$$+\frac{\bar{\bar{d}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}+2\Delta z\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}F_0}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}-\bar{\bar{a}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}}.$$

С помощью метода прогонки найдем значения прогоночных коэффициентов $\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,0}$ и $\bar{\bar{\beta}}_{2,i,j,0}$:

$$\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,0}=\frac{4\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0,5}-\bar{\bar{b}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}-\bar{\bar{a}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}};$$

$$\bar{\bar{\beta}}_{2,i,j,0}=\frac{\bar{\bar{d}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}-2\Delta z\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}F_0}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}-\bar{\bar{a}}_{2,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,j,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{2,i,j,1}h_{i,j,0}}.$$

Далее, граничное условие (16) аппроксимируем по Oz со вторим порядок аппроксимации и при $z=H$ получим:

$$\varkappa_L\frac{h_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{2,i,j,L-2}-4h_{i,j,L-0,5}\theta^{n+1}_{2,i,j,L-1}+3h_{i,j,L}\theta^{n+1}_{2,i,j,L}}{2\Delta z}=\xi h_{i,j,L}\theta_{\text{в}}-\xi h_{i,j,L}\theta^{n+1}_{2,i,j,L};\quad(28)$$

в конечном итоге из выражение (28) найдем значения концентрации на границе оси Oz:

$$\theta^{n+1}_{2,i,j,L}=\frac{2\Delta z\xi h_{i,j,L}\theta_{\text{в}}-\left(\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,L-2}\bar{\bar{\beta}}_{2,i,j,L-1}h_{i,j,L-1}+\bar{\bar{\beta}}_{2,i,j,L-2}h_{i,j,L-1}-4\bar{\bar{\beta}}_{2,i,j,L-1}h_{i,j,L-0,5}\right)\mu}{\left(\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,L-2}\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,L-1}h_{i,j,L-1}-4\bar{\bar{\alpha}}_{2,i,j,L-1}h_{i,j,L-0,5}+3h_{i,j,L}\right)\mu+2\Delta z\xi h_{i,j,L}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta^{n+1}_{2,i,j,L-1}$, $\theta^{n+1}_{2,i,j,L-2}$,..., $\theta^{n+1}_{2,i,j,1}$ определяются методом обратной прогонки.

Аналогично, для решения задачи В - поглощения частиц в воздушной массе, используем неявную конечно-разностную схему второго порядка аппроксимации по времени и получим следующие:

$$\frac{1}{2}\frac{\theta^{n+1/3}_{3,i,j,k}-\theta^{n}_{3,i,j,k}}{\Delta t/3}+\frac{1}{2}\frac{\theta^{n+1/3}_{3,i+1,j,k}-\theta^{n}_{3,i+1,j,k}}{\Delta t/3}+h_{i,j,k}\sigma\theta^{n+1/3}_{3,i,j,k}=\frac{1}{9}\delta_{i,j,k}Q.$$

Открыв скобки, группируя схожие члены уравнения, полученное в результате уравнение можно свести к трехдиагональной системе линейных алгебраических уравнений:

$$a_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,\,i-1,\,j,\,k} - b_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,\,i,\,j,\,k} + c_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,\,i+1,\,j,\,k} = -d_{3,\,i,\,j,\,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$a_{3,\,i,\,j,\,k} = 0; \quad b_{3,\,i,\,j,\,k} = \tfrac{3}{2\Delta t} + h_{i,\,j,\,k}\sigma; \quad c_{3,\,i,\,j,\,k} = -\tfrac{3}{2\Delta t};$$
$$d_{3,\,i,\,j,\,k} = \tfrac{3}{2\Delta t}\theta^{n}_{3,\,i,\,j,\,k} + \tfrac{3}{2\Delta t}\theta^{n}_{3,\,i+1,\,j,\,k} + \tfrac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Граничное условие (24) аппроксимируем по Ox и при $i = 0$ получим:

$$-\mu\frac{-3h_{0,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,0,\,j,\,k} + 4h_{0{,}5,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,1,\,j,\,k} - h_{1,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,2,\,j,\,k}}{2\Delta x} = \xi h_{0,\,j,\,k}\theta_{\text{в}} - \xi h_{0,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,0,\,j,\,k}.$$

Открывая скобки, группируя схожие члены уравнения получим значения $\theta^{n+1/3}_{3,0,\,j,\,k}$:

$$\theta^{n+1/3}_{3,0,\,j,\,k} = \frac{4\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0{,}5,\,j,\,k} - b_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k}}{3\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k} - a_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}}\theta^{n+1/3}_{3,1,\,j,\,k} +$$
$$+\frac{d_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k} - a_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\alpha_{3,\,0,\,j,\,k}$ и $\beta_{3,\,0,\,j,\,k}$ вычисляется с помощью:

$$\alpha_{3,0,\,j,\,k} = \frac{4\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0{,}5,\,j,\,k} - b_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k}}{3\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k} - a_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}};$$

$$\beta_{3,0,\,j,\,k} = \frac{d_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k} - a_{3,1,\,j,\,k}\mu h_{1,\,j,\,k} + 2\Delta x\xi c_{3,1,\,j,\,k}h_{0,\,j,\,k}}.$$

Далее, аппроксимируем граничное условие (24) по слою x и при $x = L_x$получим:

$$\mu\frac{h_{N-1,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,N-2,\,j,\,k} - 4h_{N-0{,}5,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,N-1,\,j,\,k} + 3h_{N,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,N,\,j,\,k}}{2\Delta x} = \xi h_{N,\,j,\,k}\theta_{\text{в}} - \xi h_{N,\,j,\,k}\theta^{n+1/3}_{3,N,\,j,\,k};$$

Упростим полученное выражение и найдем значения концентрации на границе оси Ox:

$$\theta^{n+1/3}_{3,N,\,j,\,k} = \frac{2\Delta x\xi h_{N,\,j,\,k}\theta_{\text{в}} - \left(\alpha_{3,N-2,\,j,\,k}\beta_{3,N-1,\,j,\,k}h_{N-1,\,j,\,k} + \beta_{3,N-2,\,j,\,k}h_{N-1,\,j,\,k} - 4\beta_{3,N-1,\,j,\,k}h_{N-0{,}5,\,j,\,k}\right)\mu}{\left(\alpha_{3,N-2,\,j,\,k}\alpha_{3,N-1,\,j,\,k}h_{N-1,\,j,\,k} - 4\alpha_{3,N-1,\,j,\,k}h_{N-0{,}5,\,j,\,k} + 3h_{N,\,j,\,k}\right)\mu + 2\Delta x\xi h_{N,\,j,\,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{3,N-1,\,j,\,k}$, $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{3,N-2,\,j,\,k}$, ..., $\theta^{n+\frac{1}{3}}_{3,1,\,j,\,k}$ определяются методом обратной прогонки.

Далее, аналогичные действия выполняем для направлении Oy и Oz.

Для направления Oy первое уравнение задачи (22) сводится к следующему:

$$\frac{1}{2}\frac{\theta^{n+2/3}_{3,i,\,j,\,k} - \theta^{n+1/3}_{3,i,\,j,\,k}}{\Delta t/3} + \frac{1}{2}\frac{\theta^{n+2/3}_{3,i,\,j+1,\,k} - \theta^{n+1/3}_{3,i,\,j+1,\,k}}{\Delta t/3} + h_{i,\,j,\,k}\sigma\theta^{n+2/3}_{3,i,\,j,\,k} = \frac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Полученное в результате уравнение сводится к системе:

$$\bar{a}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+2/3}_{3,\,i,\,j-1,\,k} - \bar{b}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+2/3}_{3,\,i,\,j,\,k} + \bar{c}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+2/3}_{3,\,i,\,j+1,\,k} = -\bar{d}_{3,\,i,\,j,\,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{a}_{3,\,i,\,j,\,k}=0;\qquad \bar{b}_{3,\,i,\,j,\,k}=\tfrac{3}{2\Delta t}+h_{i,\,j,\,k}\sigma;\qquad \bar{c}_{3,\,i,\,j,\,k}=-\tfrac{3}{2\Delta t};$$

$$\bar{d}_{3,\,i,\,j,\,k}=\frac{3}{2\Delta t}\theta^{n+1/3}_{3,\,i,\,j,\,k}+\frac{3}{2\Delta t}\theta^{n+1/3}_{3,\,i,\,j+1,\,k}+\frac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Граничное условие (25) аппроксимируем по Oy и при $y=0$ получим

$$\theta^{n+2/3}_{3,i,\,0,\,k}=\frac{4\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0{,}5,\,k}-\bar{b}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}}{3\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}}\theta^{n+2/3}_{3,i,\,1,\,k}+$$

$$+\frac{\bar{d}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}};$$

где прогоночные коэффициенты $\bar{\alpha}_{3,i,\,0,\,k}$ и $\bar{\beta}_{3,i,\,0,\,k}$ вычисляется с помощью:

$$\bar{\alpha}_{3,i,\,0,\,k}=\frac{4\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0{,}5,\,k}-\bar{b}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}}{3\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}};$$

$$\bar{\beta}_{3,i,\,0,\,k}=\frac{\bar{d}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}\theta_{\text{в}}}{3\mu\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}-\bar{a}_{3,i,\,1,\,k}\mu h_{i,\,1,\,k}+2\Delta y\xi\bar{c}_{3,i,\,1,\,k}h_{i,\,0,\,k}}.$$

Далее, аппроксимируем граничное условие (25) по слою Oy и при $y=L_y$ получим:

$$\theta^{n+2/3}_{3,i,\,M,\,k}=\frac{2\Delta y\xi h_{i,\,M,\,k}\theta_{\text{в}}-\left(\bar{\alpha}_{3,i,\,M-2,\,k}\bar{\beta}_{3,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}+\bar{\beta}_{3,i,\,M-2,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}-4\bar{\beta}_{3,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-0{,}5,\,k}\right)\mu}{\left(\bar{\alpha}_{3,i,\,M-2,\,k}\bar{\alpha}_{3,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-1,\,k}-4\bar{\alpha}_{3,i,\,M-1,\,k}h_{i,\,M-0{,}5,\,k}+3h_{i,\,M,\,k}\right)\mu+2\Delta y\xi h_{i,\,M,\,k}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta^{n+\frac{2}{3}}_{3,i,\,M-1,\,k}$, $\theta^{n+\frac{2}{3}}_{3,i,\,M-2,\,k}$, ..., $\theta^{n+\frac{2}{3}}_{3,i,\,1,\,k}$ определяются методом обратной прогонки.

Для слоя Oz первое уравнение задачи (22) сводится к виду

$$\frac{1}{2}\frac{\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,k}-\theta^{n+2/3}_{3,i,\,j,\,k}}{\Delta t/3}+\frac{1}{2}\frac{\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,k+1}-\theta^{n+2/3}_{3,i,\,j,\,k+1}}{\Delta t/3}+h_{i,\,j,\,k}\sigma\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,k}=\frac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Полученное в результате уравнение упрощаем до трехдиагональной системы

$$\bar{\bar{a}}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1}_{i,\,j,\,k-1}-\bar{\bar{b}}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1}_{i,\,j,\,k}+\bar{\bar{c}}_{3,\,i,\,j,\,k}\theta^{n+1}_{i,\,j,\,k+1}=-\bar{\bar{d}}_{3,\,i,\,j,\,k},$$

где коэффициенты и свободный член уравнения

$$\bar{\bar{a}}_{3,\,i,\,j,\,k}=0;\quad \bar{\bar{b}}_{3,\,i,\,j,\,k}=\tfrac{3}{2\Delta t}+h_{i,\,j,\,k}\sigma;\quad \bar{\bar{c}}_{3,\,i,\,j,\,k}=-\tfrac{3}{2\Delta t};$$
$$\bar{\bar{d}}_{3,\,i,\,j,\,k}=\tfrac{3}{2\Delta t}\theta^{n+2/3}_{3,\,i,\,j,\,k}+\tfrac{3}{2\Delta t}\theta^{n+2/3}_{3,\,i,\,j+1,\,k}+\tfrac{1}{9}\delta_{i,\,j,\,k}Q.$$

Граничное условие (26) аппроксимируем по Oz и при $z=0$ получим:

$$-\varkappa_1\frac{-3h_{i,\,j,\,0}\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,0}+4h_{i,\,j,\,0{,}5}\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,1}-h_{i,\,j,\,1}\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,2}}{2\Delta z}=\beta h_{i,\,j,\,0}\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,0}-h_{i,\,j,\,0}F_0;$$

и в конечном итоге получим:

$$\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,0}=\frac{4\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0{,}5}-\bar{\bar{b}}_{3,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0}-\bar{\bar{a}}_{3,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0}}\theta^{n+1}_{3,i,\,j,\,1}+$$

$$+\frac{\bar{\bar{d}}_{3,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}-2\Delta z\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0}F_0}{3\varkappa_1\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0}-\bar{\bar{a}}_{3,i,j,1}\varkappa_1 h_{i,\,j,\,1}-2\Delta z\beta\bar{\bar{c}}_{3,i,j,1}h_{i,\,j,\,0}}.$$

С помощью метода прогонки найдем значения прогоночных коэффициентов $\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,0}$ и $\bar{\bar{\beta}}_{3,i,j,0}$:

$$\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,0} = \frac{4\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0{,}5} - \bar{\bar{b}}_{3,i,j,1} \varkappa_1 h_{i,j,1}}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0} - \bar{\bar{a}}_{3,i,j,1} \varkappa_1 h_{i,j,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0}};$$

$$\bar{\bar{\beta}}_{3,i,j,0} = \frac{\bar{\bar{d}}_{3,i,j,1} \varkappa_1 h_{i,j,1} - 2\Delta z \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0} F_0}{3\varkappa_1 \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0} - \bar{\bar{a}}_{3,i,j,1} \varkappa_1 h_{i,j,1} - 2\Delta z \beta \bar{\bar{c}}_{3,i,j,1} h_{i,j,0}}.$$

Далее, граничное условие (26) аппроксимируем по Oz со вторим порядок аппроксимации и при $z = H$ получим:

$$\varkappa_L \frac{h_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{3,i,j,L-2} - 4h_{i,j,L-0{,}5}\theta^{n+1}_{3,i,j,L-1} + 3h_{i,j,L}\theta^{n+1}_{3,i,j,L}}{2\Delta z} = \xi h_{i,j,L}\theta_{\text{в}} - \xi h_{i,j,L}\theta^{n+1}_{3,i,j,L}; \quad (29)$$

в конечном итоге из выражение (29) и найдем значения концентрации на границе оси z:

$$\theta^{n+1}_{3,i,j,L} = \frac{2\Delta z \xi h_{i,j,L}\theta_{\text{в}} - \left(\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,L-2}\bar{\bar{\beta}}_{3,i,j,L-1}h_{i,j,L-1} + \bar{\bar{\beta}}_{3,i,j,L-2}h_{i,j,L-1} - 4\bar{\bar{\beta}}_{3,i,j,L-1}h_{i,j,L-0{,}5}\right)\mu}{\left(\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,L-2}\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,L-1}h_{i,j,L-1} - 4\bar{\bar{\alpha}}_{3,i,j,L-1}h_{i,j,L-0{,}5} + 3h_{i,j,L}\right)\mu + 2\Delta z \xi h_{i,j,L}}.$$

Значения последовательности концентрации $\theta^{n+1}_{3,i,j,L-1}$, $\theta^{n+1}_{3,i,j,L-2}$,..., $\theta^{n+1}_{3,i,j,1}$ определяются методом обратной прогонки.

Для решения уравнение (10)-(12) используем итерационный метод, где условия сходимости итерационного метода проверяется с помощью:

$$\left|u_{\text{ч}}{}^{(s+1)} - u_{\text{ч}}{}^{(s)}\right| < \varepsilon; \ \left|\upsilon_{\text{ч}}{}^{(s+1)} - \upsilon_{\text{ч}}{}^{(s)}\right| < \varepsilon; \ \left|w^{(s+1)}_{\text{ч}} - w^{(s)}_{\text{ч}}\right| < \varepsilon;$$

здесь ε - требуемая точность решения, S- число итерации, при этом начальное итерационное значение выбирается равным решению на предыдущем временном слое.

4 Выводы

Разработана математическая модель для мониторинга, прогнозирования, и оценки экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности, где учитываются орография местности и изменяющаяся скорость перемещения частиц в атмосфере.

Для решения разработанного нелинейного математического модели разработан вычислительный алгоритм решения, который основан на методе расщепление задачи по физическому процессу.

Полученные результаты в виде математического программного обеспечения могут быть успешно использованы для: оптимального размещения вновь построенных объектов в промышленных регионах; оценки масштабов промышленных выбросов в окружающую среду; оценки концентраций вредных веществ в атмосфере и на подстилающей поверхности с последующим принятием решений по минимизации рисков нарушения окружающей среды.

Литература

[1] *Хамдамов Р. Х., Равшанов З. Н., Таштемирова Н. Н.* Моделирование и исследование основных параметров в процессе распространения соле-пылевых частиц в атмосфере// Проблемы вычислительной и прикладной математики, 2020. № 2(20). С. 78–98.

[2] *Бакаева Н. В., Пилипенко О. В., Гармонов К. В.* Численное моделирование распространения газовоздушных потоков на территории автозаправочных станций и анализ их влияния на застройку местности// Строительство и реконструкция, 2018. № 5. С. 79–87.

[3] *Рязанов В. И.* Численное моделирование загрязнения окружающей среды от выбросов твердотопливных ракетных двигателей в тёплый и холодный периоды года// Московский экономический журнал, 2020. №. 10. С. 120–130.

[4] *Морозов С. В.,Рапута В. Ф.,Коковкин В. В.* Оценка выпадений органических и неорганическихпримесей в окрестностях цементного завода// Интерэкспо Гео-Сибирь, 2019. №. 1. С. 113–120.

[5] *Агаев Т. и др.* Программные модули и математическое обеспечение для анализа состояния воздушного бассейна урбанизированных территорий// Вестник УГАТУ, 2019. № 3(85). С. 103–111.

[6] *Огородник А. Н.* Прогнозирование распространения поллютантов за пределы санитарно-защитной зоны хвостохранилищ предприятий// Известия ТулГУ, 2013. №. 11. С. 261–266.

[7] *Жданок А. И.,Хурума А. К.* Некоторые результаты математического моделирования загрязнения экосферы города Кызыла дымом ТЭЦ на примере ртути// Природные ресурсы, среда и общество, 2019. № 4. С. 63–75.

[8] *Рапута В. Ф.,Ярославцева Т. В.,Амикишиева Р. А.* Задача оценивания поля концентрации примеси от площадного источника// Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики, 2019. С. 400–405.

[9] *Тарко А. М.* Моделирование глобального цикла двуокиси углерода и Парижское климатическое соглашение// Nor. J. Dev. Int. Sci., 2019.№. (36-1). С. 14–24.

[10] *Pyanova E..,Penenko V..,Faleychik L..* Summer scenario of modeling dispersion of impurities from emissions sources in the central environmental zone of the Baikal natural territory// Interexpo GEO-Siberia, 2019.№. 4. С. 126–133.

[11] *Ravshanov N..,Shafiev T. R.* Nonlinear mathematical model for monitoring and predicting the process of transfer and diffusion of fine-dispersed aerosol particles in the atmosphere// Journal of Physics: Conference Series, 2019.

[12] *Шафиев Т. Р.* Математическая модель для мониторинга и прогнозирования процесса распространения аэрозольных частиц в атмосфере// Проблемы вычислительной и прикладной математики, 2019. № 1(25). С. 69–84.

[13] *Равшанов Н..,Шафиев Т. Р, Таштемирова Н.* Нелинейная математическая модель для мониторинга и прогнозирования процесса распространения аэрозольных частиц в атмосфере// Вестник ТУИТ, 2019. № 2. С. 45–60.

[14] *Равшанов Н..,Таштемирова Н..,Ахмедов Д..* Информация, информационные технологии и моделирование как инструмент для анализа и прогнозирования экологического состояния окружающей среды// Экологические чтения, 2012. С. 199–207.

[15] *Таштемирова Н. Н.* Разработка математической модели и численных алгоритмов для прогнозирования процесса распространения вредных веществ в атмосфере с учетом эрозии почвы// Диссертация доктора философии (PhD) по техническим наукам. НИЦ ИКТ при ТУИТ, 2019.

[16] *Яненко Н. Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики// Наука, 2067. С. 196.

[17] *Самарский А. А.* О принципе аддитивности для построения экономичных разностных схем// Докл. АН СССР, 1965. Т. 165. № 6. С. 226–232.

[18] *Марчук Г. И.* Методы расщепления М.: Наука, 1988. 263 с.

[19] *Воеводин А. Ф.,Гончарова О. Н.* Метод расчета двумерных задач конвекции на основе расщепления по физическим процессам// Вычислительные технологии, 2002. № 7(1). С. 69–75.

[20] *Гончарова О. Н.* Метод расщепления по физическим процессам для расчета трехмерных задач конвекции// Известия Алтайского государственного университета, 2007. № 1. С. 39–44.

[21] *Ravshanov N. ., Muradov F. A., Akhmedov D. .* Operator splitting method for numerical solving the atmospheric pollutant dispersion problem// XIII International Scientific and Technical Conference "Applied Mechanics and Systems Dynamics, 2019. Т. 1441. № 1. С. 5-7.

Поступила в редакцию 20.12.2020

UDC 519.6:504.06

NONLINEAR MATHEMATICAL MODEL AND EFFECTIVE NUMERICAL ALGORITHM FOR MONITORING AND FORECASTING THE CONCENTRATION OF HARMFUL SUBSTANCES IN THE ATMOSPHERE, TAKING INTO ACCOUNT THE OROGRAPHY OF THE AREA

[1]***Ravshanov N.***, [2*]***Shafiev T.R.***, [1]***Muradov F.A.***
[*]tursunshafiyev@gmail.com
[1]Research and Innovation Center for Information and Communication Technologies,
100125, Uzbekistan, Tashkent, m-v. Buz-2, 17A, address;
[2]Bukhara State University,
Muhammad Ikbol 11, Bukhara, 200114, Uzbekistan

The article deals with the numerical modeling of the process of transport and diffusion of air pollutants in the boundary layer of the atmosphere. The developed mathematical model for monitoring and predicting the spread of industrial emissions in the atmosphere takes into account two essential parameters – the speed of movement of fine substances in the atmosphere and the orography of the area of the region under consideration. The model is described by multidimensional partial differential equations with appropriate initial and boundary conditions. In the work, when deriving the model, the basic laws of hydrothermodynamics were used. To develop a numerical algorithm for solving the problem, the methods of splitting into physical processes (transfer, diffusion, and absorption) were used, as well as an implicit finite-difference scheme of the second order of approximation both in spatial variables and in time.

Keywords: mathematical model, transport and diffusion of harmful substances, physical splitting, numerical algorithm.

Citation: Ravshanov N., Shafiev T.R., Muradov F.A. 2021. Nonlinear mathematical model and effective numerical algorithm for monitoring and forecasting the concentration of harmful substances in the atmosphere, taking into account the orography of the area. *Problems of Computational and Applied Mathematics.* 1(31): 57-75.