УДК 519.6+51-74:628.395

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПОДЗЕМНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ

Усмонов Л.С.

uslochinbek@gmail.com

Научно-исследовательский институт развития цифровых технологий и искусственного интеллекта,

100125, Узбекистан, г. Ташкент, м-в Буз-2, д. 17А.

В статье представлены математическая модель и алгоритм численного решения задачи для исследования гидродинамического процесса подземного выщелачивания в неоднородной пористой среде. Модель учитывает кинетику массообмена, закон деформации слоя в зависимости от коэффициента упругости, изменение пористости в зависимости от напора, а также проницаемость рудного резервуара. Разработанный математический аппарат позволяет проводить комплексное исследование свойств рудного пласта, оптимизировать расположение эксплуатационных и нагнетательных скважин, определять изменение пористости под действием давления, а также анализировать факторы, обеспечивающие защиту подземных вод от загрязнения. Рассматриваемая модель описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка параболического типа с начальными, граничными и внутренними условиями. Поскольку получение аналитического решения этой задачи затруднительно или невозможно, для численного интегрирования была использована конечно-разностная схема второго порядка точности.

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

Цитирование: *Усмонов Л.С.* Математическое моделирование гидродинамического процесса подземного выщелачивания с учетом изменения гидродинамических параметров пористой среды // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – 2026. – № 2(72). – С. 89-108.

DOI: https://doi.org/10.71310/pcam.2_72.2026.06

1 Введение

Выявление, разработка и эффективное использование ценных геологических ресурсов остаются важнейшим приоритетом для всех обществ. Современные технологические достижения требуют добычи и применения подземных минеральных ресурсов. Следовательно, исследование эффективных методов добычи минералов имеет большое значение. Растущее внедрение метода подземного выщелачивания (ПВ) как сложной технологии требует сложного математического моделирования подземных процессов. Это требует создания сложных математических моделей (ММ), которые требуют значительных вычислительных ресурсов для численного решения. Важно подчеркнуть, что прикладные и фундаментальные научные достижения, посвященные изучению процессов добычи и очистки рудных месторождений с использованием методов подземной добычи, способствующие принятию обоснованных решений, привели к разработке и внедрению математических моделей и методов решения практических задач.

В научных работах [1–3] была построена математическая модель для исследования процесса фильтрация жидкости в пористых средах, которая задается двумерным линейным неоднородным дифференциальным уравнением с частными производными и его начальными и граничными условиями. Для нахождения численного решения этой задачи оно было аппроксимировано конечно-разностной схемой и сведено в систему алгебраической уравнений. Был разработан алгоритм численного решения с использованием метода прогонки для нахождения решения полученной системы уравнений.

Как отмечено в работах [1, 5–8] 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. В данной работе предложены математическая модель, алгоритм численного решения и набор программ для изучения метода подземного выщелачивания.

[9–12] научные исследования показывают, 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 закачки для максимизации выхода раствора.

В работах [13–17] изучаются гидродинамические процессы, происходящие в рудных месторождениях, уделяя особое внимание методу подземного выщелачивания для добыча дорогих металлов, а именно кислотному выщелачиванию. Разработана математическая модель для анализа, наблюдения и прогнозирования поведения жидкостей в пористых средах, которая включает фильтрацию-конвекцию и диффузионные процессы, характерные для подземного потока. Модель учитывает изменения основных гидродинамических параметров, проницаемости и пористости, которые считаются зависимыми от давления и подверженными влиянию кинетики процесса. Анализ показывает, что изменения давления, вызванные введением кислоты и перемешиванием, существенно влияют на фильтрационные свойства рудного слоя.

На основе проведенных литературных анализов объекта исследования в работе предложена математическая модель процесса ПВ, где учтены изменение основных гидродинамических параметров пористой седы связанные с изменения напора и кинетики процесса.

2 Постановка задачи

Исходя из вышеизложенного, для изучения процесса подземного выщелачивания необходимо определить функцию концентрации полезного компонента $C_2(x, y, z, t)$ в ограниченной неоднородной области

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

В этом случае распространение поля напор определяется из уравнений режима упругой фильтрации:

$$\beta h\frac{\partial\,(mH)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial z}\right] + F_1 - F_2, \tag{1}$$

с начальным:

$$H|_{t=0} = H_0, \tag{2}$$

и граничными условиями:

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{x=0} = -\iota_1\xi(H - H_0), \tag{3}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{x=L_x} = \iota_1\xi(H - H_0), \tag{4}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial y}\bigg|_{y=0} = -\iota_2\xi(H - H_0), \tag{5}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial y}\bigg|_{y=L_y} = \iota_2\xi(H - H_0), \tag{6}$$

$$\frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=0} = 0, \tag{7}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=L_z} = \iota_3\xi(H - H_0), \tag{8}$$

где H – величина напора, (м); H_0 – начальное значение напора, (м); m – величина коэффициента пористости; $\varkappa$ – коэффициент фильтрации, (м/сут); t – время (сут). h – мощность рудоносного пласта (м); β – коэффициент упругой емкости, (м^2/кг); $\iota_1, \iota_2, \iota_3$ – константы, принимающие значения 0 или 1; L – характерная длина (m); ξ – коэффициент для приведения в размерности (1/сут);

$$F_1 = F_1(x, y, z, t) = \sum_{j=1}^{N_1} q_{1,j}(t)\delta(x - x_{1,j}, y - y_{1,j}, z - z_{1,j}),$$

$$F_2 = F_2(x, y, z, t) = \sum_{j=1}^{N_2} q_{2,j}(t)\delta(x - x_{2,j}, y - y_{2,j}, z - z_{2,j});$$

$q_{1,i}(t)$ и $q_{2,i}(t)$ – соответственно, дебиты нагнетательной и эксплуатационной 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)-(8) методом конечных разностей введём следующие безразмерные переменные:

$$H^* = \frac{H}{H_0},\ \ x^* = \frac{x}{L_x},\ \ y^* = \frac{y}{L_y},\ \ z^* = \frac{z}{L_z},\ \ \varkappa^* = \frac{\varkappa}{\varkappa_0},\ \ h^* = \frac{h}{h_0},\ \ \tau = \frac{\varkappa_0 t}{L^2},\ \beta^* = \frac{\beta}{\beta_0}$$

$$F_1^* = \sum_{j=1}^{N_1} q_{1,j}{}^*(t)\delta(x - x_{1,j}, y - y_{1,j}, z - z_{1,j}),\ \ q_1{}^* = \frac{q_1 L^2}{\varkappa_0 H_0 h_0},\ \ H_0^* = \frac{H^0}{H_0},$$

$$F_2^* = \sum_{j=1}^{N_2} q_{2,j}{}^*(t)\delta(x - x_{2,j}, y - y_{2,j}, z - z_{2,j}),\ \ q_2{}^* = \frac{q_2 L^2}{\varkappa_0 H_0 h_0},\ \ \xi^* = \frac{\xi L}{\varkappa_0}.$$

Далее, для простоты, мы опускаем «*» в уравнениях (1)–(8) и получим:

$$\beta h\frac{\partial mH}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial y}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\varkappa h\frac{\partial H}{\partial z}\right]+F_1-F_2, \tag{9}$$

с начальным:

$$H|_{t=0}=H_0, \tag{10}$$

и граничными условиями:

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{x=0}=-\iota_1\xi(H-H_0), \tag{11}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial x}\bigg|_{x=L_x}=\iota_1\xi(H-H_0), \tag{12}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial y}\bigg|_{y=0}=-\iota_2\xi(H-H_0), \tag{13}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial y}\bigg|_{y=L_y}=\iota_2\xi(H-H_0), \tag{14}$$

$$\frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=0}=0, \tag{15}$$

$$\varkappa\frac{\partial H}{\partial z}\bigg|_{z=L_z}=\iota_3\xi(H-H_0). \tag{16}$$

Распространение поля реагента определяется путем решения уравнения конвективной диффузии:

$$\begin{gathered}\mu\frac{\partial(mC_1)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{11}\left[\frac{\partial C_1}{\partial x}+\frac{\partial C_1}{\partial y}+\frac{\partial C_1}{\partial z}\right]\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{22}\left[\frac{\partial C_1}{\partial x}+\frac{\partial C_1}{\partial y}+\frac{\partial C_1}{\partial z}\right]\right)+\\+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{33}\left[\frac{\partial C_1}{\partial x}+\frac{\partial C_1}{\partial y}+\frac{\partial C_1}{\partial z}\right]\right)-\frac{\partial(V_xC_1)}{\partial x}-\frac{\partial(V_yC_1)}{\partial y}-\frac{\partial(V_zC_1)}{\partial z},\end{gathered} \tag{17}$$

с начальным и граничными условиями:

$$C_1|_{t=0}=0, \tag{18}$$

$$C_1=0,\quad (x,y,z)\in G_\Gamma. \tag{19}$$

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

$$\begin{gathered}\mu\frac{\partial(mC_2)}{\partial t}+\frac{\partial N}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{11}\left[\frac{\partial C_2}{\partial x}+\frac{\partial C_2}{\partial y}+\frac{\partial C_1}{\partial z}\right]\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{22}\left[\frac{\partial C_2}{\partial x}+\frac{\partial C_2}{\partial y}+\frac{\partial C_2}{\partial z}\right]\right)+\\+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{33}\left[\frac{\partial C_2}{\partial x}+\frac{\partial C_2}{\partial y}+\frac{\partial C_2}{\partial z}\right]\right)-\frac{\partial(V_xC_2)}{\partial x}-\frac{\partial(V_yC_2)}{\partial y}-\frac{\partial(V_zC_2)}{\partial z}\end{gathered} \tag{20}$$

с начальным

$$C_2|_{t=0}=C_{2,0} \tag{21}$$

и граничными условиями

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial x}\right|_{x=0} = -\iota_1\zeta(C_2 - C_{2,0}), \tag{22}$$

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial x}\right|_{x=L_x} = \iota_1\zeta(C_2 - C_{2,0}), \tag{23}$$

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial y}\right|_{y=0} = -\iota_2\zeta(C_2 - C_{2,0}), \tag{24}$$

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial y}\right|_{y=L_y} = \iota_2\zeta(C_2 - C_{2,0}), \tag{25}$$

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial z}\right|_{z=0} = 0, \tag{26}$$

$$\left.\frac{\partial C_2}{\partial z}\right|_{z=L_z} = \iota_3\zeta(C_2 - C_{2,0}), \tag{27}$$

где C_1 – концентрация заливочной жидкости, C_2 – концентрация полученной смеси, G_{Γ} – граница пласта; D_{11}, D_{22}, D_{33} – коэффициенты диффузии, μ – коэффициент для приведение в размерности поставленной задачи, (сут/м); V_x, V_y, V_z – скорость фильтрации определяется законом Дарси и определяется следующим образом:

$$V_x = -\varkappa\frac{\partial H}{\partial x},\ \ V_y = -\varkappa\frac{\partial H}{\partial y},\ \ V_z = -\varkappa\frac{\partial H}{\partial z};$$

ζ – коэффициент для приведение в размерности поставленной задачи (1/м).

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

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma(C_1)f(C_2, N, t), \quad N|_{t=0} = N_0.$$

Следует отметить, что в процессе ПВ происходит химическая реакция в результате взаимодействия реагента с рудными отложениями, и вещество переходит из одной фазы в другую, в результате чего изменяются гидродинамические параметры поровой среды (коэффициенты фильтрации и пористости) и давление в рудном пласте.

Пористость, считающаяся ключевым гидродинамическим параметром, изменяется в зависимости от давления и кинетики процесса в виде линейной зависимости при низком давлении и экспоненциальное при высоком давлении:

$$\begin{gathered} m = m_0 + \beta_c\,(H - H_0), \\ m = m_0 e^{-\beta_c(H_0 - H)/m_0}, \end{gathered} \tag{28}$$

где N – кинетика процесса, γ – объемная плотность раствора, (кг/м^2), m_0 – коэффициент пористости в $H = H_0$.

3 Метод решения

Поскольку уравнение (9) является комплексным дифференциальным уравнением в частных производных, найти его решение аналитически сложно или невозможно.

Поэтому мы находим решение численно. Для этого мы заменяем область на область сетки.

Введем пространственно-временную сетку:

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

Для получения конечно-разностной задачи уравнения (9) используется алгоритмическая идея неявной схемы для переменных направлений (продольно-поперечная схема) по Ox, Oyи Ozкак указанно в работе [15–17]:

$$\frac{\beta h_{i,j,k}(m_{i,j,k}^{n+1/3} H_{i,j,k}^{n+1/3} - m_{i,j,k}^{n} H_{i,j,k}^{n})}{\Delta\tau/3} =$$
$$= \frac{\varkappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} H_{i-1,j,k}^{n+1/3} - (\varkappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} + \varkappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}) H_{i,j,k}^{n+1/3} + \varkappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k} H_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} +$$
$$+ \frac{\varkappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} H_{i,j-1,k}^{n} - (\varkappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} + \varkappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k}) H_{i,j,k}^{n} + \varkappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k} H_{i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2} +$$
$$+ \frac{\varkappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} H_{i,j,k-1}^{n} - (\varkappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} + \varkappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5}) H_{i,j,k}^{n} + \varkappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5} H_{i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2} +$$
$$\frac{F_{1,i,j,k} - F_{2,i,j,k}}{3},\ \ m_{i+1,j,k} = m_0 + \beta_c \left(H_{i,j,k} - H_0 \right).$$

Группируя подобные члены, как в [15, 16], мы получаем систему треугольных алгебраических уравнений:

$$a_{i,j,k} H_{i-1,j,k}^{n+1/3} - b_{i,j,k} H_{i,j,k}^{n+1/3} + c_{i,j,k} H_{i+1,j,k}^{n+1/3} = -f_{i,j,k}, \tag{29}$$

где

$$a_{i,j,k} = \frac{\varkappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k}}{\Delta x^2},\ \ b_{i,j,k} = \frac{\beta h_{i,j,k} m_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3} + \frac{\varkappa_{i-0.5,j,k} h_{i-0.5,j,k} + \varkappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},$$
$$c_{i,j,k} = \frac{\varkappa_{i+0.5,j,k} h_{i+0.5,j,k}}{\Delta x^2},$$
$$f_{i,j,k} =$$
$$= \frac{\varkappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} H_{i,j-1,k}^{n} - (\varkappa_{i,j-0.5,k} h_{i,j-0.5,k} + \varkappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k}) H_{i,j,k}^{n} + \varkappa_{i,j+0.5,k} h_{i,j+0.5,k} H_{i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2} +$$
$$+ \frac{\varkappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} H_{i,j,k-1}^{n} - (\varkappa_{i,j,k-0.5} h_{i,j,k-0.5} + \varkappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5}) H_{i,j,k}^{n} + \varkappa_{i,j,k+0.5} h_{i,j,k+0.5} H_{i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2} +$$
$$+ \frac{\beta h_{i,j,k} m_{i,j,k}^{n} H_{i,j,k}^{n}}{\Delta\tau/3} + \frac{F_{1,i,j,k} - F_{2,i,j,k}}{3}.$$

Далее, граничное условие (11) аппроксимируем по Ox и получим:

$$\varkappa_{1,j,k} \frac{-3H_{0,j,k}^{n+1/3} + 4H_{1,j,k}^{n+1/3} - H_{2,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x} = -\iota_1 \xi (H_{1,j,k}^{n+1/3} - H_0). \tag{30}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (29) находим $H_{2,j,k}^{n+1/3}$ при $i = 1$:

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

$$H_{2,j,k}^{n+1/3} = -\frac{a_{1,j,k}}{c_{1,j,k}} H_{0,j,k}^{n+1/3} + \frac{b_{1,j,k}}{c_{1,j,k}} H_{1,j,k}^{n+1/3} - \frac{f_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}. \tag{31}$$

Подставив $H_{2,j,k}^{n+1/3}$ из (31) в (30) получим $H_{0,j,k}^{n+1/3}$,

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

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

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

Аналогично аппроксимируя граничное условие (12) по Ox, получим:

$$\varkappa_{N,j,k}\frac{H_{N-2,j,k}^{n+1/3}-4H_{N-1,j,k}^{n+1/3}+3H_{N,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=-\iota_1\xi(H_{N-1,j,k}^{n+1/3}-H_0). \tag{32}$$

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

$$H_{N-1,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-1,j,k}H_{N,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-1,j,k}, \tag{33}$$

$$\begin{gathered}H_{N-2,j,k}^{n+1/3}=\alpha_{N-2,j,k}H_{N-1,j,k}^{n+1/3}+\beta_{N-2,j,k}=\\=\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}H_{N,j,k}^{n+1/3}+\alpha_{N-2j,k}\beta_{N-1j,k}+\beta_{N-2,j,k}.\end{gathered} \tag{34}$$

Подставляем $H_{N-1,j,k}^{n+1/3}$ из (33) и $H_{N-2,j,k}^{n+1/3}$ из (34) в (32) и находим $H_{N,j,k}^{n+1/3}$

$$\begin{gathered}H_{N,j,k}^{n+1/3}=\\=\frac{4\beta_{N-1,j,k}\varkappa_{N,j,k}-2\iota_1\xi\Delta x\beta_{N-1,j,k}+2\iota_1\xi\Delta xH_0-\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}\varkappa_{N,j,k}-\beta_{N-2,j,k}\varkappa_{N,j,k}}{\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\varkappa_{N,j,k}+3\varkappa_{N,j,k}-4\alpha_{N-1,j,k}\varkappa_{N,j,k}+2\iota_1\xi\Delta x\alpha_{N-1,j,k}}.\end{gathered} \tag{35}$$

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

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

Аналогично аппроксимируем уравнение (13) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою $n+2/3$ и группируем подобные члены, получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$\overline{a}_{i,j,k}H_{i,j-1,k}^{n+2/3}-\overline{b}_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+2/3}+\overline{c}_{i,j,k}H_{i,j+1,k}^{n+2/3}=-\overline{f}_{i,j,k}, \tag{36}$$

где

$$\begin{gathered}\overline{a}_{i,j,k}=\frac{\varkappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}}{\Delta y^2},\ \ \overline{b}_{i,j,k}=\frac{\beta m_{i,j,k}^{n+2/3}h_{i,j,k}}{\Delta\tau/3}+\frac{\varkappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}+\varkappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},\\ \overline{c}_{i,j,k}=\frac{\varkappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}}{\Delta y^2},\\ \overline{f}_{i,j,k}=\\=\frac{\varkappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}H_{i-1,j,k}^{n+1/3}-(\varkappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}+\varkappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k})H_{i,j,k}^{n+1/3}+\varkappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k}H_{i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+\\ \frac{\varkappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}H_{i,j,k-1}^{n+1/3}-(\varkappa_{i,j,k-0.5}h_{i,j,k-0.5}+\varkappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5})H_{i,j,k}^{n+1/3}+\varkappa_{i,j,k+0.5}h_{i,j,k+0.5}H_{i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2}+\\ +\frac{\beta m_{i,j,k}^{n+2/3}h_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}+\frac{F_{1,i,j,k}-F_{2,i,j,k}}{3}.\end{gathered}$$

Далее, граничное условие (14) аппроксимируем по Oy и получим:

$$\varkappa_{i,1,k}\frac{-3H_{i,0,k}^{n+2/3}+4H_{i,1,k}^{n+2/3}-H_{i,2,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota_2\xi(H_{i,1,k}^{n+2/3}-H_0). \tag{37}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (36) находим $H_{i,2,k}^{n+2/3}$ при $j=1$:

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

$$H_{i,2,k}^{n+2/3}=-\frac{\overline{a}_{i,1,k}}{\overline{c}_{i,1,k}}H_{i,0,k}^{n+2/3}+\frac{\overline{b}_{i,1,k}}{\overline{c}_{i,1,k}}H_{i,1,k}^{n+2/3}-\frac{\overline{f}_{i,1,k}}{\overline{c}_{i,1,k}}. \tag{38}$$

Подставив $H_{i,2,k}^{n+2/3}$ из (38) в (37) получим $H_{i,0,k}^{n+2/3}$,

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

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

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

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

$$\varkappa_{i,N,k}\frac{H_{i,N-2,k}^{n+2/3} - 4H_{i,N-1,k}^{n+2/3} + 3H_{i,N,k}^{n+2/3}}{2\Delta y} = -\iota_2\xi(H_{i,N-1,k}^{n+2/3} - H_0). \tag{39}$$

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

$$H_{i,N-1,k}^{n+2/3} = \overline{\alpha}_{i,N-1,k}H_{i,N,k}^{n+2/3} + \overline{\beta}_{i,N-1,k}, \tag{40}$$

$$H_{i,N-2,k}^{n+2/3} = \overline{\alpha}_{i,N-2,k}H_{i,N-1,k}^{n+2/3} + \overline{\beta}_{i,N-2,k} = \\ = \overline{\alpha}_{i,N-2,k}\overline{\alpha}_{i,N-1,k}H_{i,N,k}^{n+2/3} + \overline{\alpha}_{i,N-2,k}\overline{\beta}_{i,N-1,k} + \overline{\beta}_{i,N-2,k}. \tag{41}$$

Подставляем $H_{i,N-1,k}^{n+2/3}$ из (40) и $H_{i,N-2,k}^{n+2/3}$ из (41) в (39) и находим $H_{i,N,k}^{n+2/3}$,

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

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

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

Аналогично аппроксимируем уравнение (9) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою $n+1$ и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$\overline{\overline{a}}_{i,j,k}H_{i,j,k-1}^{n+1} - \overline{\overline{b}}_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+1} + \overline{\overline{c}}_{i,j,k}H_{i,j,k+1}^{n+1} = -\overline{\overline{f}}_{i,j,k}, \tag{42}$$

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

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

$$\overline{\overline{f}}_{i,j,k} = \frac{\varkappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}H_{i-1,j,k}^{n+2/3} - (\varkappa_{i-0.5,j,k}h_{i-0.5,j,k}+\varkappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k})H_{i,j,k}^{n+2/3} + \varkappa_{i+0.5,j,k}h_{i+0.5,j,k}H_{i+1,j,k}^{n+2/3}}{\Delta x^2} + \\ + \frac{\varkappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}H_{i,j-1,k}^{n+2/3} - (\varkappa_{i,j-0.5,k}h_{i,j-0.5,k}+\varkappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k})H_{i,j,k}^{n+2/3} + \varkappa_{i,j+0.5,k}h_{i,j+0.5,k}H_{i,j+1,k}^{n+2/3}}{\Delta y^2} + \\ + \frac{\beta m_{i,j,k}^{n+2/3}h_{i,j,k}H_{i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta\tau/3} + \frac{F_{1,i,j,k} - F_{2,i,j,k}}{3}.$$

Далее, граничное условие (15) аппроксимируем по Oz и получим:

$$-3H_{i,j,0}^{n+1}+4H_{i,j,1}^{n+1}-H_{i,j,2}^{n+1}=0. \tag{43}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (42) находим $H_{i,j,2}^{n+1}$ при $k=1$:

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

$$H_{i,j,2}^{n+1}=-\frac{\overline{\overline{a}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}H_{i,j,0}^{n+1}+\frac{\overline{\overline{b}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}H_{i,j,1}^{n+1}-\frac{\overline{\overline{f}}_{i,j,1}}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}. \tag{44}$$

Подставив $H_{i,j,2}^{n+1}$ из (44) в (43) получим $H_{i,j,0}^{n+1}$,

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

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

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

Аналогично аппроксимируем граничное условие (16) по Oz, получим:

$$\varkappa_{i,j,N}\frac{H_{i,j,N-2}^{n+1}-4H_{i,j,N-1}^{n+1}+3H_{i,j,N}^{n+1}}{2\Delta z}=-\iota_3\xi(H_{i,j,N-1}^{n+1}-H_0). \tag{45}$$

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

$$H_{i,j,N-1}^{n+1}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}H_{i,j,N}^{n+1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}, \tag{46}$$

$$\begin{gathered}H_{i,j,N-2}^{n+1}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}H_{i,j,N-1}^{n+1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-2}=\\=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-1}H_{i,j,N}^{n+1}+\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,N-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,N-2}.\end{gathered} \tag{47}$$

Подставляем $H_{i,j,N-1}^{n+1}$ из (46) и $H_{i,j,N-2}^{n+1}$ из (47) в (45) и находим $H_{i,j,N}^{n+1}$,

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

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

$$H_{i,j,k}^{n+1}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,k}H_{i,j,k+1}^{n+1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,k};\ \ i=\overline{0,\,N},\ \ j=\overline{0,\,N},\ \ k=\overline{N-1,\,1}.$$

Для численного интегрирования уравнений (17) заменяем дифференциальный оператор для $n+1/3$ слоя на конечно-разностное и получим.

$$\begin{aligned}
\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+1/3}C_{1,i,j,k}^{n+1/3}-m_{i,j,k}^{n}C_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta\tau/3} &= \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n+1/3}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{1,i,j,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+\\
&+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n}}{\Delta x\Delta y}+\\
&+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n}}{\Delta x\Delta z}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k}^{n}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C_{1,i,j,k}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n}}{\Delta x\Delta y}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k-1}^{n}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k+1}^{n}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k-1}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k+1}^{n}}{\Delta y\Delta z}+\\
&+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j,k-1}^{n}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{1,i,j,k}^{n}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2}+\\
&+\frac{D_{33,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n}-D_{33,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n}-D_{33,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n}+D_{33,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n}}{\Delta x\Delta z}+\\
&+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k-1}^{n}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k+1}^{n}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k-1}^{n}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k+1}^{n}}{\Delta y\Delta z}+\\
&+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{1,i,j-1,k}^{n}-V_{2,i,j+05,k}C_{1,i,j+1,k}^{n}}{2\Delta y}+\\
&+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{1,i,j,k-1}^{n}-V_{3,i,j,k+05}C_{1,i,j,k+1}^{n}}{2\Delta z},
\end{aligned}$$

и сгруппировав это равенство, получим следующее

$$a'_{i,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n+1/3}-b'_{i,j,k}C_{1,i,j,k}^{n+1/3}+c'_{i,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}=-f'_{i,j,k}, \tag{48}$$

где $a'_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}}{\Delta x^2}$, $b'_{i,j,k}=\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})}{\Delta x^2}$, $c'_{i,j,k}=\frac{D_{11,i+0.5,j,k}}{\Delta x^2}$,

$$\begin{aligned}
f'_{i,j,k} &= \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+\\
&+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k}^{n}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C_{1,i,j,k}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k}^{n}}{\Delta y^2}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n}}{\Delta x\Delta y}+\\
&+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k-1}^{n}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k+1}^{n}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k-1}^{n}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k+1}^{n}}{\Delta y\Delta z}+\\
&+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j,k-1}^{n}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{1,i,j,k}^{n}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j,k+1}^{n}}{\Delta z^2}+\\
&+\frac{D_{33,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n}-D_{33,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n}-D_{33,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n}+D_{33,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n}}{\Delta x\Delta z}+\\
&+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k-1}^{n}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k+1}^{n}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k-1}^{n}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k+1}^{n}}{\Delta y\Delta z}+\\
&+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{1,i,j-1,k}^{n}-V_{2,i,j+05,k}C_{1,i,j+1,k}^{n}}{2\Delta y}+\\
&+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{1,i,j,k-1}^{n}-V_{3,i,j,k+05}C_{1,i,j,k+1}^{n}}{2\Delta z}+\mu\frac{m_{i,j,k}^{n}C_{1,i,j,k}^{n}}{\Delta\tau/3}.
\end{aligned}$$

Далее, граничное условие (19) аппроксимируем по и получим:

$$\frac{-3C_{1,0,j,k}^{n+1/3}+4C_{1,1,j,k}^{n+1/3}-C_{1,2,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}=0. \tag{49}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (48) находим $C_{1,2,j,k}^{n+1/3}$ при $i=1$:

$$\begin{gathered}
a'_{1,j,k}C_{1,0,j,k}^{n+1/3}-b'_{1,j,k}C_{1,1,j,k}^{n+1/3}+c'_{1,j,k}C_{1,2,j,k}^{n+1/3}=-f'_{1,j,k},\\
C_{1,2,j,k}^{n+1/3}=-\frac{a'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}C_{1,0j,k}^{n+1/3}+\frac{b'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}C_{1,1,j,k}^{n+1/3}-\frac{f'_{1,j,k}}{c'_{1,j,k}}.
\end{gathered} \tag{50}$$

Подставив $C_{1,2,j,k}^{n+1/3}$ из (50) в (49) получим $C_{1,0,j,k}^{n+1/3}$

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

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 аппроксимируем граничное условие (19) по Ox, получим:

$$\frac{C_{1,N-2,j,k}^{n+1/3} - 4C_{1,N-1,j,k}^{n+1/3} + 3C_{1,N,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x} = 0. \tag{51}$$

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

$$C_{1,N-1,j,k}^{n+1/3} = \alpha'_{N-1,j,k} C_{1,N,j,k}^{n+1/3} + \beta'_{N-1,j,k}, \tag{52}$$

$$\begin{gathered} C_{1,N-2,j,k}^{n+1/3} = \alpha'_{N-2,j,k} C_{1,N-1,j,k}^{n+1/3} + \beta'_{N-2,j,k} = \\ \alpha'_{N-2,j,k}\alpha'_{N-1,j,k} C_{1,N,j,k}^{n+1/3} + \alpha'_{N-2,j,k}\beta'_{N-1,j,k} + \beta'_{N-2,j,k}. \end{gathered} \tag{53}$$

Подставляем $C_{1,N-1,j,k}^{n+1/3}$ из (52) и $C_{1,N-2,j,k}^{n+1/3}$ из (53) в (51) и находим $C_{1,N,j,k}^{n+1/3}$,

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

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

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

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:

$$a''_{i,j,k} C_{1,i,j-1,k}^{n+2/3} - b''_{i,j,k} C_{1,i,j,k}^{n+2/3} + c''_{i,j,k} C_{1,i,j+1,k}^{n+2/3} = -f''_{i,j,k}, \tag{54}$$

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

$$\begin{gathered}
f''_{i,j,k} = \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n+1/3} - (D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{1,i,j,k}^{n+1/3} + D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2} + \\
+ \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n+1/3} - D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n+1/3} - D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n+1/3} + D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x \Delta y} + \\
+ \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k-1}^{n+1/3} - D_{11,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k+1}^{n+1/3} - D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k-1}^{n+1/3} + D_{11,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x \Delta z} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j-1,k}^{n+1/3} - D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i-1,j+1,k}^{n+1/3} - D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j-1,k}^{n+1/3} + D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x \Delta y} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k-1}^{n+1/3} - D_{22,i,j-0.5,k}C_{1,i,j-1,k+1}^{n+1/3} - D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k-1}^{n+1/3} + D_{22,i,j+0.5,k}C_{1,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y \Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j,k-1}^{n+1/3} - (D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{1,i,j,k}^{n+1/3} + D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i-1,j,k-1}^{n+1/3} - D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i-1,j,k+1}^{n+1/3} - D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i+1,j,k-1}^{n+1/3} + D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x \Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k-1}^{n+1/3} - D_{33,i,j,k-0.5}C_{1,i,j-1,k+1}^{n+1/3} - D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k-1}^{n+1/3} + D_{33,i,j,k+0.5}C_{1,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y \Delta z} + \\
+ \frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{1,i-1,j,k}^{n+1/3} - V_{1,i+0.5,j,k}C_{1,i+1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x} + \frac{V_{2,i,j-05,k}C_{1,i,j-1,k}^{n+1/3} - V_{2,i,j+05,k}C_{1,i,j+1,k}^{n+1/3}}{2\Delta y} + \\
+ \frac{V_{3,i,j,k-05}C_{1,i,j,k-1}^{n+1/3} - V_{3,i,j,k+05}C_{1,i,j,k+1}^{n+1/3}}{2\Delta z} + \mu \frac{m_{i,j,k}^{n+1/3} C_{1,i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}.
\end{gathered}$$

Далее, граничное условие (19) аппроксимируем по Oy и получим:

$$\frac{-3C^{n+2/3}_{1,i,0,k}+4C^{n+2/3}_{1,i,1,k}-C^{n+2/3}_{1,i,2,k}}{2\Delta y}=0. \tag{55}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (54) находим $C^{n+2/3}_{1,i,2,k}$ при $j=1$:

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

$$C^{n+2/3}_{1,i,2,k}=-\frac{a''{}_{i,1,k}}{c''{}_{i,1,k}}C^{n+2/3}_{1,i,0,k}+\frac{b''{}_{i,1,k}}{c''{}_{i,1,k}}C^{n+2/3}_{1,i,1,k}-\frac{f''{}_{i,1,k}}{c''{}_{i,1,k}}. \tag{56}$$

Подставив $C^{n+2/3}_{1,i,2,k}$ из (56) в (55), получим $C^{n+2/3}_{1,i,0,k}$

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

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

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

Аналогично аппроксимируя граничное условие (27) по Oy, получим:

$$\frac{C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}-4C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}+3C^{n+2/3}_{1,i,N,k}}{2\Delta y}=0. \tag{57}$$

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

$$C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}=\alpha''_{i,N-1,k}C^{n+2/3}_{1,i,N,k}+\beta''_{i,N-1,k}, \tag{58}$$

$$\begin{gathered}C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}=\alpha''{}_{i,N-2,k}C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}+\beta''{}_{i,N-2,k}=\\ =\alpha''{}_{i,N-2,k}\alpha''{}_{i,N-1,k}C^{n+2/3}_{1,i,N,k}+\alpha''{}_{i,N-2,k}\beta''{}_{i,N-1,k}+\beta''{}_{i,N-2,k}.\end{gathered} \tag{59}$$

Подставляем $C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}$ из (58) и $C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}$ из (59) в (57) 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 $C^{n+2/3}_{1,i,N-1,k}, C^{n+2/3}_{1,i,N-2,k}, \ldots, C^{n+2/3}_{1,i,1,k}$ последовательно в порядке убывания индекса j по обратному пути пробега следующим образом:

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

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:

$$a'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k-1}-b'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k}+c'''_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k+1}=-f'''_{i,j,k}, \tag{60}$$

где $a'''_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k-0.5}}{\Delta z^2}$, $b'''_{i,j,k}=\mu\frac{m^{n+1}_{i,j,k}}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})}{\Delta z^2}$, $c'''_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k+0.5}}{\Delta z^2}$,

$$
\begin{gathered}
f'''_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C^{n+2/3}_{1,i,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k}}{\Delta x^2}+\\
+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j-1,k}-D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j+1,k}-D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j-1,k}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+\\
+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k-1}-D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k+1}-D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k-1}+D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+\\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^{n+2/3}_{1,i,j,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}}{\Delta y^2}+\\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j-1,k}-D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j+1,k}-D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j-1,k}+D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y}+\\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k-1}-D_{22,i,j-0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k+1}-D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k-1}+D_{22,i,j+0.5,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+\\
+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k-1}-D_{33,i,j-0.5,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k+1}-D_{33,i,j+0.5,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k-1}+D_{33,i,j+0.5,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z}+\\
+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k-1}-D_{33,i,j,k-0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k+1}-D_{33,i,j,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k-1}+D_{33,i,j,k+0.5}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z}+\\
+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i-1,j,k}-V_{1,i+0.5,j,k}C^{n+2/3}_{1,i+1,j,k}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C^{n+2/3}_{1,i,j-1,k}-V_{2,i,j+05,k}C^{n+2/3}_{1,i,j+1,k}}{2\Delta y}+\\
+\frac{V_{3,i,j,k-05}C^{n+2/3}_{1,i,j,k-1}-V_{3,i,j,k+05}C^{n+2/3}_{1,i,j,k+1}}{2\Delta z}+\mu\frac{m^{n+2/3}_{i,j,k}C^{n+2/3}_{1,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.
\end{gathered}
$$

Далее, граничное условие (19) аппроксимируем по Oz и получим:

$$\frac{-3C^{n+1}_{1,i,j,0}+4C^{n+1}_{1,i,j,1}-C^{n+1}_{1,i,j,2}}{2\Delta z}=0. \tag{61}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (60) находим $C^{n+1}_{1,i,j,2}$ при $k=1$:

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

$$C^{n+1}_{1,i,j,2}=-\frac{a'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}C^{n+1}_{1,i,j,0}+\frac{b'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}C^{n+1}_{1,i,j,1}-\frac{f'''_{i,j,1}}{c'''_{i,j,1}}. \tag{62}$$

Подставив $C^{n+1}_{1,i,j,2}$ из (62) в (61) получим $C^{n+1}_{1,i,j,0}$

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

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

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

Аналогично аппроксимируем граничное условие (19) по Oy, получим:

$$\frac{C^{n+1}_{1,i,j,N-2}-4C^{n+1}_{1,i,j,N-1}+3C^{n+1}_{1,i,j,N}}{2\Delta z}=0. \tag{63}$$

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

$$C^{n+1}_{1,i,j,N-1}=\alpha'''_{i,j,N-1}C^{n+1}_{1,i,j,N}+\beta'''_{i,j,N-1}, \tag{64}$$

$$
\begin{gathered}
C^{n+1}_{1,i,j,N-2}=\alpha'''_{i,j,N-2}C^{n+1}_{1,i,j,N-1}+\beta'''_{i,j,N-2}=\\
=\alpha'''_{i,j,N-2}\alpha'''_{i,j,N-1}C^{n+1}_{1,i,j,N}+\alpha'''_{i,j,N-2}\beta'''_{i,j,N-1}+\beta'''_{i,j,N-2}.
\end{gathered} \tag{65}
$$

Подставляем $C^{n+1}_{1,i,j,N-1}$ из (64) и $C^{n+1}_{1,i,j,N-2}$ из (65) в (63) и находим $C^{n+2/3}_{1,i,N,k}$,

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

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

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

Для численного интегрирования уравнений (20) замена дифференциального оператора для $n+1$ слое на конечно-разностное получим:

$$\begin{gathered}
\mu\frac{m^{n+1/3}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i,j,k} - m^{n}_{i,j,k}C^{n}_{2,i,j,k}}{\Delta\tau/3} = \\
= \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k} - (D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C^{n+1/3}_{2,i,j,k} + D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k}}{\Delta x^2} + \\
+ \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j-1,k} - D_{11,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j+1,k} - D_{11,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j-1,k} + D_{11,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y} + \\
+ \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j,k-1} - D_{11,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j,k+1} - D_{11,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j,k-1} + D_{11,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k} - (D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^{n}_{2,i,j,k} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k}}{\Delta y^2} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i-1,j-1,k} - D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i-1,j+1,k} - D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i+1,j-1,k} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k-1} - D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k+1} - D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k-1} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j,k-1} - (D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^{n}_{2,i,j,k} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j,k+1}}{\Delta z^2} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i-1,j,k-1} - D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i-1,j,k+1} - D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i+1,j,k-1} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j-1,k-1} - D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j-1,k+1} - D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j+1,k-1} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z} + \\
+ \frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j,k} - V_{1,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j,k}}{2\Delta x} + \frac{V_{2,i,j-05,k}C^{n}_{2,i,j-1,k} - V_{2,i,j+05,k}C^{n}_{2,i,j+1,k}}{2\Delta y} + \\
+ \frac{V_{3,i,j,k-05}C^{n}_{2,i,j,k-1} - V_{3,i,j,k+05}C^{n}_{2,i,j,k+1}}{2\Delta z},
\end{gathered}$$

и сгруппировав это равенство, получим следующее

$$\widetilde{a}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k} - \widetilde{b}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i,j,k} + \widetilde{c}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k} = -\widetilde{f}_{i,j,k}, \tag{66}$$

где $\widetilde{a}_{i,j,k} = \frac{D_{11,i-0.5,j,k}}{\Delta x^2}$, $\widetilde{b}_{i,j,k} = \mu\frac{m^{n+1/3}_{i,j,k}}{\Delta\tau/3} + \frac{(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})}{\Delta x^2}$, $\widetilde{c}_{i,j,k} = \frac{D_{11,i+0.5,j,k}}{\Delta x^2}$,

$$\begin{gathered}
\widetilde{f}_{i,j,k} = \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j-1,k} - D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j+1,k} - D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j-1,k} + D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y} + \\
+ \frac{D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k-1} - D_{11,i-0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i-1,j,k+1} - D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k-1} + D_{11,i+0.5,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k} - (D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C^{n}_{2,i,j,k} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k}}{\Delta y^2} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i-1,j-1,k} - D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i-1,j+1,k} - D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i+1,j-1,k} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i+1,j+1,k}}{\Delta x\Delta y} + \\
+ \frac{D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k-1} - D_{22,i,j-0.5,k}C^{n}_{2,i,j-1,k+1} - D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k-1} + D_{22,i,j+0.5,k}C^{n}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j,k-1} - (D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C^{n}_{2,i,j,k} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j,k+1}}{\Delta z^2} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i-1,j,k-1} - D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i-1,j,k+1} - D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i+1,j,k-1} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i+1,j,k+1}}{\Delta x\Delta z} + \\
+ \frac{D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j-1,k-1} - D_{33,i,j,k-0.5}C^{n}_{2,i,j-1,k+1} - D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j+1,k-1} + D_{33,i,j,k+0.5}C^{n}_{2,i,j+1,k+1}}{\Delta y\Delta z} + \\
+ \frac{V_{1,i-0.5,j,k}C^{n}_{2,i-1,j,k} - V_{1,i+0.5,j,k}C^{n}_{2,i+1,j,k}}{2\Delta x} + \frac{V_{2,i,j-05,k}C^{n}_{2,i,j-1,k} - V_{2,i,j+05,k}C^{n}_{2,i,j+1,k}}{2\Delta y} + \\
+ \frac{V_{3,i,j,k-05}C^{n}_{2,i,j,k-1} - V_{3,i,j,k+05}C^{n}_{2,i,j,k+1}}{2\Delta z} + \mu\frac{m^{n}_{i,j,k}C^{n}_{2,i,j,k}}{\Delta\tau/3}.
\end{gathered}$$

Далее, граничное условие (22) аппроксимируем по Ox и получим:

$$\frac{-3C^{n+1/3}_{2,0,j,k}+4C^{n+1/3}_{2,1,j,k}-C^{n+1/3}_{2,2,j,k}}{2\Delta x}=-\iota_1\zeta(C_{2,1,j,k}-C^0_2). \tag{67}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (66) находим $C^{n+1/3}_{2,2,j,k}$ при $i=1$:

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

$$C^{n+1/3}_{2,2,j,k}=-\frac{\widetilde{a}_{1,j,k}}{\widetilde{c}_{1,j,k}}C^{n+1/3}_{2,0,j,k}+\frac{\widetilde{b}_{1,j,k}}{\widetilde{c}_{1,j,k}}C^{n+1/3}_{2,1,j,k}-\frac{\widetilde{f}_{1,j,k}}{\widetilde{c}_{1,j,k}}. \tag{68}$$

Подставив $C^{n+1/3}_{2,2,j,k}$ из (68) в (67) получим $C^{n+1/3}_{2,0,j,k}$:

$$C^{n+1/3}_{2,0,j,k}=\frac{\widetilde{b}_{1,j,k}-4\widetilde{c}_{1,j,k}-2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{c}_{1,j,k}}{\widetilde{a}_{1,j,k}-3\widetilde{c}_{1,j,k}}C^{n+1/3}_{2,1,j,k}+\frac{2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{c}_{1,j,k}C^0_2-\widetilde{f}_{1,j,k}}{\widetilde{a}_{1,j,k}-3\widetilde{c}_{1,j,k}}.$$

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

$$\widetilde{\alpha}_{0,j,k}=\frac{\widetilde{b}_{1,j,k}-4\widetilde{c}_{1,j,k}-2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{c}_{1,j,k}}{\widetilde{a}_{1,j,k}-3\widetilde{c}_{1,j,k}},\ \ \widetilde{\beta}_{0,j,k}=\frac{2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{c}_{1,j,k}C^0_2-\widetilde{f}_{1,j,k}}{\widetilde{a}_{1,j,k}-3\widetilde{c}_{1,j,k}}.$$

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

$$\frac{C^{n+1/3}_{2,N-2,j,k}-4C^{n+1/3}_{2,N-1,j,k}+3C^{n+1/3}_{2,N,j,k}}{2\Delta x}=-\iota_1\zeta(C_{2,N-1,j,k}-C^0_2). \tag{69}$$

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

$$C^{n+1/3}_{2,N-1,j,k}=\widetilde{\alpha}_{N-1,j,k}C^{n+1/3}_{1,N,j,k}+\widetilde{\beta}_{N-1,j,k}, \tag{70}$$

$$\begin{gathered}C^{n+1/3}_{2,N-2,j,k}=\widetilde{\alpha}_{N-2,j,k}C^{n+1/3}_{2,N-1,j,k}+\widetilde{\beta}_{N-2,j,k}=\\=\widetilde{\alpha}_{N-2,j,k}\widetilde{\alpha}_{N-1,j,k}C^{n+1/3}_{2,N,j,k}+\widetilde{\alpha}_{N-2,j,k}\widetilde{\beta}_{N-1,j,k}+\widetilde{\beta}_{N-2,j,k}.\end{gathered} \tag{71}$$

Подставляем $C^{n+1/3}_{2,N-1,j,k}$ из (70) и $C^{n+1/3}_{2,N-2,j,k}$ из (71) в (69) и находим $C^{n+1/3}_{2,N,j,k}$,

$$C^{n+1/3}_{2,N,j,k}=\frac{4\widetilde{\beta}_{N-1,j,k}-2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{\beta}_{N-1,j,k}+2\iota_1\zeta\Delta xC^0_2-\widetilde{\alpha}_{N-2,j,k}\widetilde{\beta}_{N-1,j,k}-\widetilde{\beta}_{N-2,j,k}}{\widetilde{\alpha}_{N-2,j,k}\widetilde{\alpha}_{N-1,j,k}+2\iota_1\zeta\Delta x\widetilde{\alpha}_{N-1,j,k}-4\widetilde{\alpha}_{N-1,j,k}+3}.$$

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

$$C^{n+1/3}_{2,i,j,k}=\widetilde{\alpha}_{i,j,k}C^{n+1/3}_{2,i+1,j,k}+\widetilde{\beta}_{i,j,k},\ \ i=\overline{N-1,1},\ \ j=\overline{0,N},\ \ k=\overline{0,N}.$$

Аналогично аппроксимируем уравнение (20) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою $n+2/3$ и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$\widetilde{\widetilde{a}}_{i,j,k}C^{n+2/3}_{2,i,j-1,k}-\widetilde{\widetilde{b}}_{i,j,k}C^{n+2/3}_{2,i,j,k}+\widetilde{\widetilde{c}}_{i,j,k}C^{n+2/3}_{2,i,j+1,k}=-\widetilde{\widetilde{f}}_{i,j,k}, \tag{72}$$

где: $\widetilde{\widetilde{a}}_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j-0.5,k}}{\Delta y^2}$, $\widetilde{\widetilde{b}}_{i,j,k}=\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})}{\Delta y^2}$, $\widetilde{\widetilde{c}}_{i,j,k}=\frac{D_{22,i,j+0.5,k}}{\Delta y^2}$,

$$\widetilde{\widetilde{f}}_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{2,i,j,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}}{\Delta x^2}+$$
$$+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$
$$+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$
$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+1/3}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+1/3}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+1/3}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta y}+$$
$$+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$
$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j,k-1}^{n+1/3}-(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})C_{2,i,j,k}^{n+1/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta z^2}+$$
$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+1/3}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+1/3}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+1/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+1/3}}{\Delta x\Delta z}+$$
$$+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+1/3}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+1/3}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+1/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+1/3}}{\Delta y\Delta z}+$$
$$+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+1/3}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+1/3}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{2,i,j-1,k}^{n+1/3}-V_{2,i,j+05,k}C_{2,i,j+1,k}^{n+1/3}}{2\Delta y}+$$
$$+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{2,i,j,k-1}^{n+1/3}-V_{3,i,j,k+05}C_{2,i,j,k+1}^{n+1/3}}{2\Delta z}+\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+1/3}C_{2,i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta\tau/3}.$$

Далее, граничное условие (24) аппроксимируем по и получим:

$$\frac{-3C_{2,i,0,k}^{n+2/3}+4C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-C_{2,i,2,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota_2\zeta(C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-C_2^0). \tag{73}$$

Из системы трехдиагональных уравнений (72) находим $C_{2,i,2,k}^{n+2/3}$ при $j=1$:

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

$$C_{2,i,2,k}^{n+2/3}=-\frac{\widetilde{\widetilde{a}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,0,k}^{n+2/3}+\frac{\widetilde{\widetilde{b}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,1,k}^{n+2/3}-\frac{\widetilde{\widetilde{f}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}. \tag{74}$$

Подставив $C_{2,i,2,k}^{n+2/3}$ из (74) в (73) получим $C_{2,i,0,k}^{n+2/3}$:

$$C_{2,i,0,k}^{n+2/3}=\frac{\widetilde{\widetilde{b}}_{i,1,k}-4\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}-2\iota_2\zeta\Delta y\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{a}}_{i,1,k}-3\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}C_{2,i,1,k}^{n+2/3}+\frac{2\iota_2\zeta\Delta y\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}C_2^0-\widetilde{\widetilde{f}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{a}}_{i,1,k}-3\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}},$$

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

$$\widetilde{\widetilde{\alpha}}_{i,0,k}=\frac{\widetilde{\widetilde{b}}_{i,1,k}-4\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}-2\iota_2\zeta\Delta y\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{a}}_{i,1,k}-3\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}},\quad \widetilde{\widetilde{\beta}}_{i,0,k}=\frac{2\iota_2\zeta\Delta y\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}C_2^0-\widetilde{\widetilde{f}}_{i,1,k}}{\widetilde{\widetilde{a}}_{i,1,k}-3\widetilde{\widetilde{c}}_{i,1,k}}.$$

Аналогично аппроксимируем граничное условие (25) по Oy, получим:

$$\frac{C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}-4C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}+3C_{2,i,N,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}=-\iota_2\zeta(C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}-C_2^0). \tag{75}$$

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

$$C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}=\widetilde{\widetilde{\alpha}}_{i,N-1,k}C_{2,i,N,k}^{n+2/3}+\widetilde{\widetilde{\beta}}_{i,N-1,k}, \tag{76}$$

$$
\begin{gathered}
C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}=\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-2,k}C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}+\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-2,k}= \\
=\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-2,k}\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-1,k}C_{2,i,N,k}^{n+2/3}+\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-2,k}\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-1,k}+\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-2,k}.
\end{gathered}
\tag{77}
$$

Подставляем $C_{2,i,N-1,k}^{n+2/3}$ из (76) и $C_{2,i,N-2,k}^{n+2/3}$ из (77) в (75) и находим $C_{2,i,N,k}^{n+2/3}$,

$$
C_{2,i,N,k}^{n+2/3}=\frac{4\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-1,k}-2\iota_2\zeta\Delta y\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-1,k}+2\iota_2\zeta\Delta yC_2^0-\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-2,k}\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-1,k}-\tilde{\tilde{\beta}}_{i,N-2,k}}{\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-2,k}\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-1,k}+2\iota_2\zeta\Delta y\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-1,k}-4\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,N-1,k}+3}.
$$

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

$$
C_{2,i,j,k}^{n+2/3}=\tilde{\tilde{\alpha}}_{i,j,k}C_{1,i,j+1,k}^{n+2/3}+\tilde{\tilde{\beta}}_{i,j,k},\ \ i=\overline{0,\ N},\ \ j=\overline{N-1,\ 1},\ \ k=\overline{0,\ N}.
$$

Аналогично мы аппроксимируем уравнение (20) в терминах конечно-разностных соотношений по временному слою $n+1$ и группируем подобные члены, чтобы получить систему трехдиагональных алгебраических уравнений относительно требуемых переменных:

$$
\widehat{a}_{i,j,k}C_{2,i,j,k-1}^{n+1}-\widehat{b}_{i,j,k}C_{2,i,j,k}^{n+1}+\widehat{c}_{i,j,k}C_{2,i,j,k+1}^{n+1}=-\widehat{f}_{i,j,k},
\tag{78}
$$

где $\widehat{a}_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k-0.5}}{\Delta z^2}$, $\widehat{b}_{i,j,k}=\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta\tau/3}+\frac{(D_{33,i,j,k-0.5}+D_{33,i,j,k+0.5})}{\Delta z^2}$, $\widehat{c}_{i,j,k}=\frac{D_{33,i,j,k+0.5}}{\Delta z^2}$,

$$
\begin{gathered}
\widehat{f}_{i,j,k}=\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+2/3}-(D_{11,i-0.5,j,k}+D_{11,i+0.5,j,k})C_{2,i,j,k}^{n+2/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+2/3}}{\Delta x^2}+ \\
+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+2/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+2/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+2/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+2/3}}{\Delta x\Delta y}+ \\
+\frac{D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+2/3}-D_{11,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+2/3}-D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+2/3}+D_{11,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+2/3}}{\Delta x\Delta z}+ \\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k}^{n+2/3}-(D_{22,i,j-0.5,k}+D_{22,i,j+0.5,k})C_{2,i,j,k}^{n+2/3}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k}^{n+2/3}}{\Delta y^2}+ \\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j-1,k}^{n+2/3}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i-1,j+1,k}^{n+2/3}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j-1,k}^{n+2/3}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i+1,j+1,k}^{n+2/3}}{\Delta x\Delta y}+ \\
+\frac{D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+2/3}-D_{22,i,j-0.5,k}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+2/3}-D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+2/3}+D_{22,i,j+0.5,k}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+2/3}}{\Delta y\Delta z}+ \\
+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i-1,j,k-1}^{n+2/3}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i-1,j,k+1}^{n+2/3}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i+1,j,k-1}^{n+2/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i+1,j,k+1}^{n+2/3}}{\Delta x\Delta z}+ \\
+\frac{D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k-1}^{n+2/3}-D_{33,i,j,k-0.5}C_{2,i,j-1,k+1}^{n+2/3}-D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k-1}^{n+2/3}+D_{33,i,j,k+0.5}C_{2,i,j+1,k+1}^{n+2/3}}{\Delta y\Delta z}+ \\
+\frac{V_{1,i-0.5,j,k}C_{2,i-1,j,k}^{n+2/3}-V_{1,i+0.5,j,k}C_{2,i+1,j,k}^{n+2/3}}{2\Delta x}+\frac{V_{2,i,j-05,k}C_{2,i,j-1,k}^{n+2/3}-V_{2,i,j+05,k}C_{2,i,j+1,k}^{n+2/3}}{2\Delta y}+ \\
+\frac{V_{3,i,j,k-05}C_{2,i,j,k-1}^{n+2/3}-V_{3,i,j,k+05}C_{2,i,j,k+1}^{n+2/3}}{2\Delta z}+\mu\frac{m_{i,j,k}^{n+2/3}C_{2,i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta\tau/3}.
\end{gathered}
$$

Далее, граничное условие (26) аппроксимируем по Oz и получим:

$$
\frac{-3C_{2,i,j,0}^{n+1}+4C_{2,i,j,1}^{n+1}-C_{2,i,j,2}^{n+1}}{2\Delta z}=0.
\tag{79}
$$

Из системы трехдиагональных уравнений (78) находим $C_{2,i,j,2}^{n+1}$ при $k=1$:

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

$$
C_{2,i,j,2}^{n+1}=-\frac{\widehat{a}_{i,j,1}}{\widehat{c}_{i,j,1}}C_{2,i,j,0}^{n+1}+\frac{\widehat{b}_{i,j,1}}{\widehat{c}_{i,j,1}}C_{2,i,j,1}^{n+1}-\frac{\widehat{f}_{i,j,1}}{\widehat{c}_{i,j,1}}.
\tag{80}
$$

Подставив $C^{n+1}_{2,i,j,2}$ из (80) в (79) получим $C^{n+1}_{2,i,j,0}$

$$C^{n+1}_{2,i,j,0}=\frac{\widehat{b}_{i,j,1}-4\widehat{c}_{i,j,1}}{\widehat{a}_{i,j,1}-3\widehat{c}_{i,j,1}}C^{n+1}_{2,i,j,1}+\frac{\widehat{f}_{i,j,1}}{3\widehat{c}_{i,j,1}-\widehat{a}_{i,j,1}}.$$

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

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

Аналогично аппроксимируем граничное условие (27) по Oz, получим:

$$\frac{C^{n+1}_{2,i,j,N-2}-4C^{n+1}_{2,i,j,N-1}+3C^{n+1}_{2,i,j,N}}{2\Delta z}=-\iota_3\zeta(C^{n+1}_{2,i,j,N-1}-C^0_2). \tag{81}$$

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

$$C^{n+1}_{2,i,j,N-1}=\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}C^{n+1}_{2,i,j,N}+\widehat{\beta}_{i,j,N-1}, \tag{82}$$

$$\begin{gathered}C^{n+1}_{2,i,j,N-2}=\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}C^{n+2/3}_{2,i,j,N-1}+\widehat{\beta}_{i,j,N-2}=\\=\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}C^{n+1}_{2,i,j,N}+\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}+\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}.\end{gathered} \tag{83}$$

Подставляем $C^{n+1}_{2,i,j,N-1}$ из (82) и $C^{n+1}_{2,i,j,N-2}$ из (83) в (81) и находим $C^{n+1}_{2,i,j,N}$,

$$C^{n+1}_{2,i,j,N}=\frac{4\widehat{\beta}_{i,j,N-1}-2\iota_3\zeta\Delta z\widehat{\beta}_{i,j,N-1}+2\iota_3\zeta\Delta zC^0_2-\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}\widehat{\beta}_{i,j,N-1}-\widehat{\beta}_{i,j,N-2}}{\widehat{\alpha}_{i,j,N-2}\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}+2\iota_3\zeta\Delta z\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}-4\widehat{\alpha}_{i,j,N-1}+3}.$$

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

$$C^{n+1}_{2,i,j,k}=\widehat{\alpha}_{i,j,k}C^{n+1}_{1,i,j,k+1}+\widehat{\beta}_{i,j,k},\ \ i=\overline{0,N},\ \ j=\overline{0,N},\ \ k=\overline{N-1,1}.$$

Таким образом, была разработана математическая модель и эффективный, устойчивый численный алгоритм, основанный на методе конечных разностей второго порядка точности по пространственным переменным для мониторинга и прогнозирования процесса подземного выщелачивания и принятия управленческих решений, используемых при разработке рудных месторождений.

4 Заключение

Для комплексного исследования, мониторинга и прогнозирования гидродинамического процесса подземного перемешивания и фильтрации жидкости в пористых средах была разработана математическая модель, характеризующаяся системой дифференциальных уравнений в частных производных с начальными и граничными условиями.

Предложенная математическая модель позволяет комплексно изучать параметры рудного пласта, выбирать оптимальное местоположение питающих и приемных скважин, оценивать их расход, изучать пористость как функцию давления и учитывать защиту грунтовых вод от жидкости кислоты. Для решения задачи была использована неявная схема метода конечных разностей, полученная система алгебраической уравнений была сведена к трехдиагональной матрице, где был решен методом прогонки.

Анализ проблемы показывает, что изменения давления в рудном месторождении, вызванные добычей и растворением, напрямую влияют на коэффициенты проницаемости и пористости пласта.

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. – 2024. – № 2(56).

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

[3] *Алимов И., Пирназарова Т., Холматова И.* О численном методе решения гидродинамической задачи ИСЛ // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1260. – 012001.

[4] *Исманова К.Д., Исомаддинов У.М., Дедаханов А.О.* Модели принятия решений для управления процессом подземного выщелачивания нефти // Natural Volatiles and Essential Oils. – 2021. – № 8(4). – С. 16235-16243.

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

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

[7] *Алимов И.* Математическое моделирование гидродинамических процессов подземного выщелачивания. – Ташкент: 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 // 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 // 14th International Conference on Electronics, Computer and Computation (ICECCO). – 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 В.* Simulating ISL Process Using COMSOL Multiphysics // International Journal of Electronics and Telecommunications. – 2014. – Vol. 60. – № 3. – P. 213-217.

[13] *Ravshanov N., Usmonov L.* 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. – 2025. – Vol. 8. – No. 1. – P. 22-36.

[14] *Ravshanov N., Usmonov L.* Multidimensional mathematical model for monitoring and forecasting the process of underground leaching in a porous medium // Hisoblash va amaliy matematika muammolari. – 2025. – № 2/2(66).

[15] *Равшанов Н., Усмонов Л., Курбонов Н.М.* Математическая модель и численный алгоритм для исследования гидродинамического процесса подземного выщелачивания //

Международный журнал теоретических и прикладных вопросов цифровых технологий. – 2025. – № 8. – № 2.

[16] *Равшанов Н., Усмонов Л.С.* Трёхмерная математическая модель и алгоритм численного решения для мониторинга и прогнозирования процессов подземного выщелачивания в пористой среде // Проблемы вычислительной и прикладной математики. – 2025. – № 6(70).

[17] *Usmonov L.* Three-dimensional mathematical model for in-situ leaching processes in porous media // Bulletin of the branch of National Research Nuclear University "MEPhI" in Tashkent. – 2025. – № 2.

UDC 519.6+51-74:628.395

MATHEMATICAL MODELING OF THE HYDRODYNAMIC PROCESS OF IN-SITU LEACHING TAKING INTO ACCOUNT THE CHANGES IN HYDRODYNAMIC PARAMETERS OF A POROUS MEDIUM

Usmonov L.S.
uslochinbek@gmail.com
Digital Technologies and Artificial Intelligence Development Research Institute,
17A, Buz-2, Tashkent, 100125 Uzbekistan.

This article presents a mathematical model and algorithm for numerically solving a problem for studying the hydrodynamic process of in-situ leaching in a heterogeneous porous medium, taking into account mass transfer kinetics, the law of layer deformation dependent on the elastic coefficient, changes in porosity depending on pressure, and the permeability of the ore reservoir for the purpose of developing ore deposits. The developed mathematical apparatus allows for a comprehensive study of the properties of the ore seam, optimization of the location of production and injection wells, determination of changes in porosity under pressure, and analysis and provision of a factor ensuring the protection of groundwater from pollution. The model under consideration is described using a system of second-order parabolic partial differential equations with initial, boundary, and internal conditions. Since the analytical solution to this problem was too complex or impossible for numerical integration, a second-order finite-difference scheme was used.

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

Citation: Usmonov L.S. 2026. Mathematical modeling of the hydrodynamic process of in-situ leaching taking into account the changes in hydrodynamic parameters of a porous medium. *Problems of Computational and Applied Mathematics.* 2(72): 89-108.

DOI: https://doi.org/10.71310/pcam.2_72.2026.06

№ 2(72) 2026 ISSN 2181-8460

HISOBLASH VA AMALIY MATEMATIKA MUAMMOLARI

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

PROBLEMS OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS

AiRI
RAQAMLI TEXNOLOGIYALAR VA SUN'IY INTELLEKTNI RIVOJLANTIRISH ILMIY-TADQIQOT INSTITUTI

ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

№ 2(72) 2026

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

Учредитель:
Научно-исследовательский институт развития цифровых технологий и искусственного интеллекта.

Главный редактор:
Равшанов Н.

Заместители главного редактора:
Арипов М.М., Шадиметов Х.М., Ахмедов Д.Д.

Ответственный секретарь:
Убайдуллаев М.Ш.

Журнал зарегистрирован в Агентстве информации и массовых коммуникаций при Администрации Президента Республики Узбекистан.
Свидетельство №0856 от 5 августа 2015 года.

ISSN 2181-8460, eISSN 2181-046X

Адрес редакции:
100125, г. Ташкент, м-в. Буз-2, 17А.
Тел.: +(998) 71 263-41-98.
Э-почта: journals@airi.uz.
Веб-сайт: https://journals.airi.uz.

Дизайн и вёрстка:
Шарипов Х.Д.

Отпечатано в типографии НИИ РЦТИИ.
Подписано в печать 22.04.2026 г.
Формат 60x84 1/8. Заказ №2. Тираж 100 экз.

PROBLEMS OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS

No. 2(72) 2026

The journal was established in 2015.
6 issues are published per year.

Founder:
Digital Technologies and Artificial Intelligence Development Research Institute.

The journal is registered by Agency of Information and Mass Communications under the Administration of the President of the Republic of Uzbekistan.
Certificate of Registration No. 0856 of 5 August 2015.

ISSN 2181-8460, eISSN 2181-046X

Address:
100125, Tashkent, Buz-2, 17A.
Tel.: +(998) 71 263-41-98.
E-mail: journals@airi.uz.
Web-site: https://journals.airi.uz.

Layout design:
Sharipov Kh.D.

DTAIRI printing office.
Signed for print 22.04.2026
Format 60x84 1/8. Order No. 2. Print run of 100 copies.

Содержание

Contents