УДК 519.6: 504.06

НЕЛИНЕЙНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МОНИТОРИНГА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА РАСПРАСТРАНЕНИЯ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В АТМОСФЕРЕ

Равшанов Н., Шафиев Т., Таштемирова Н.

Мақолада зарарли заррачаларнинг атмосферада кўчиш тезлигини инобатга олган ҳолда атмосфера ва ер сатҳи экологик ҳолатини башоратлаш, мониторинг ва баҳолаш учун математик модель ишлаб чиқилди. Зарарли заррачаларнинг атмосферада кўчиш тезлигини аниқлаш учун заррачаларнинг асосий физик-механик хусусиятларини ва атмосферадаги ҳаво массаси тезлигини инобатга олувчи чизиқсиз тенгламалар системаси олинди. Олинган ечимнинг сифатли таҳлили келтирилиб, компьютерда ҳисоблаш тажрибаларини ўтказиш учун сонли алгоритм ишлаб чиқилди.

Таянч иборалар: математик модель, зарарли заррачаларнинг кўчифши ва диффузияси, об-ҳаво ва иқлим омиллари, сонли алгоритм

В настоящей статье разработана математическая модель, для прогнозирования, мониторинга и оценки экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности пассивными и активными примесями, где учитываются изменчивая скорость перемещения частиц в атмосфере. Для определения скоростей перемещения мелкодисперсных частиц в атмосфере получена система нелинейных уравнений, где учтены основные физико-механические свойства частиц и скорость воздушной массы в атмосфере, которые играют важную роль. Проведен качественный анализ решения и составлена численный алгоритм для проведения вычислительного эксперимента на компьютере.

Ключевые слова: математическая модель, перенос и диффузия вредных веществ, погодно-климатический фактор, численный алгоритм.

Mathematical model for predicting, monitoring and assessing the ecological state of the atmosphere and underlying surface with passive and active impurities is developed in this article; it takes into account the varying rate of particle displacements in the atmosphere. To determine the rate of displacements of fine-dispersed particles in the atmosphere, a system of nonlinear equations has been obtained, which took into account such important factors as: the basic physical-mechanical properties of the particles and the rate of air mass in the atmosphere.

Keywords: mathematical model, transfer and diffusion of harmful substances, climatic factor, numerical algorithm.

I. ВВЕДЕНИЕ

Прогнозирование, мониторинг и оценка экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности пассивными и активными примесями, размещения промышленных предприятий с соблюдением санитарных норм загрязнения регионов являются актуальными в проблеме охраны окружающей среды.

На сегодняшний день анализ данных по окружающей среде показывает, что интенсивный рост объема промышленности оказывает большое влияние на экологический дисбаланс атмосферы промышленных регионов. В основном такие экологические проблемы заметны в высоко развитых промышленных государствах, например, таких как США, Россия, Франция, Индия, Япония, Корея. Рост темпа развития производства негативно влияет на экологическое состояние промышленных регионов. Ухудшение экологии в атмосфере промышленных зон возникает в связи с увеличением концентрации вредных веществ и загазованности атмосферы.

Опасное загрязнение воздуха сказывается на здоровье людей, т. к. различные химические элементы наиболее интенсивно поглощаются организмом именно при дыхании. Таким образом, актуальность математического моделирования процесса распространения вредных аэрозольных частиц очевидна.

Математическим моделированием процесса переноса, диффузии и вредных веществ (углекислые газы, мелкодисперсные аэрозольные пассивные и активные частицы) в атмосферу занимаются в научных школах, созданных под руководством Г.И. Марчука, В.В. Пененко, А.Е. Алояна, Л.Т. Матвеева, В.П. Дымникова И.Э. Нааца, Э.А. Закарина, И.А. Кибеля, Л.Н. Гутмана, Ф.Б. Абуталиева, а также зарубежных ученых W.J. Layton, J.H. Ferziger, J.W. Deardorff, M. Germano, U. Piomelli, L.C. Berselli, G.S. Winckelmans, W.C. Reynolds, Х. Зидиск, К.А. Велдс, К.И. Наппо, Ж. Готаас, М. Мюллиоланд, С. Трап, М. Матиес, В. Эдельман и др.

В частности, автором [1] предложен численный алгоритм решения уравнений распространения примесей в атмосфере. В качестве примера нелинейных разностных схем решения уравнения переноса использована монотонная схема, разработанная Ван Лиром и основанная на нелинейной схеме Фромма, которая аппроксимирует исходное дифференциальное уравнение со вторым порядком точности по пространственным переменным и по времени.

В работах [2,3] изложены достижения в области математического и численного моделирования нестационарного переноса загрязняющих примесей в пограничном слое атмосферы. Авторами разработаны вычислительные модели и соответствующие эффективные алгоритмы для задач прогноза переноса и рассеяния аэрозолей, использующих оперативную информацию метеорологического характера.

В работе [4] рассмотрены виды загрязнителей окружающей среды с точки зрения выбора топливных характеристик для теплоэлектростанций. Указан перечень выбросов крупных промышленных зон по типу загрязнителей и их физико-химические свойств. В исследовании оценка воздействия проводилась с использованием исходных данных для наихудшего случая с помощью формул Гаусса. На основе созданного программного обеспечения проведена оценка качества атмосферного воздуха в рассматриваемых регионах Индии.

В статье [5] разработана математическая модель для определения концентрации загрязняющих веществ в воздухе как функции усреднения времени и частоты. Автор продемонстрировал то, как предложенная модель может использоваться для соотнесения критериев качества воздуха со стандартами качества воздуха и нормами выбросов.

В работе [6] на основе решения нестационарного уравнения турбулентной диффузии с заданными величинами составляющих скорость ветра u, v, w, коэффициента диффузии - μ и коэффициентом турбулентного перемешивания - k, получена новая формула для расчета полей концентраций загрязнений воздуха, создаваемых точечными или иными промышленными источниками, где формула учитывает взаимодействие процессов рассеяния и переноса примеси в направлении осей декартовой системы координат.

Автором найдены расчетные формулы, позволяющие получать поля концентраций над поверхностями любой сложности, при любых метеорологических условиях и скоростях ветра, в том числе и при штиле.

В статье [7] сделан анализ долгосрочного экологического прогнозирования с помощью математического моделирования с использованием доступной фактической информации о многолетней динамике климата. Исследованы процессы описания математической модели гидродинамики в климатической системе, моделями переноса и трансформации влаги, химически и оптически активных загрязняющих примесей в газовых и аэрозольных состояниях. Авторами был разработан комплекс моделей, используемый для решения научных и практических задач, по оценке экологической перспективы индустриальных регионов.

В статье [8] были предложены численные 3D модели для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха выбросами от автотранспорта. Особенностью предложенных численных моделей является возможность прогнозирования уровня загрязнения атмосферного воздуха в условиях застройки. Выбросы от автомобилей автотрассы моделируются серией точечных источников, которые задаются с помощью дельта-функции Дирака. Предложенные модели дают возможность оперативно получить информацию об уровне загрязнения атмосферного воздуха в районах, где проходят автомагистрали.

В статье [9] рассматривается проблемы моделирования процесса загрязнения атмосферы с использованием эколого-биологических моделей логистического типа и типа Гаузе, а также уточнение и прогнозирование развития процесса с помощью метода Прони. Для решения первый проблемы построены две модели: логистическая, которая не учитывает процесс очистки и модель Лотки – Волтерра, в которых процессы очистки уже учтены.

В статье [10] разработана математическая модель расчета загрязнения атмосферы на основе модели типа «факел». Данная модель учитывает возможность расчета загрязнения атмосферы несколькими точечными источниками, скорость выделения загрязняющего вещества, удаленность точки измерения от источника загрязнения, скорость и направление ветра, устойчивость атмосферы, отклонения размеров факела в горизонтальном и вертикальном направлениях.

Авторами работ [11] рассмотрено моделирование состояния качества атмосферного воздуха с использованием различных математических подходов, описывающих физико-химические процессы, которые моделируются в зависимости от вида загрязнения, параметров выбросов, метеорологических, топографических и других условий, влияющих на рассеивание загрязняющих веществ.

В статье [12] рассмотрена охрана воздушного бассейна, основанная на соблюдении нормативов качества атмосферы, в том числе по фактору химического загрязнения. Подчёркивается важным звеном в схеме нормирования чистоты воздуха является расчет концентраций, создаваемых различными источниками, например, трубами промышленных предприятий, автотранспортом и воздушным транспортом.

В статье [13] предложена эффективная модель прямого численного моделирования рассеивания токсичных газов в атмосфере с учётом рельефа местности. Расчёт поля скорости ветрового потока проводиться на базе потенциального течения. Применяемый в модели метод маркирования расчётной области дает возможность формировать любую геометрическую форму рельефа.

В статьях [14,15] рассматривается актуальная проблема, связанная с решением задачи мониторинга и прогнозирования экологического состояния воздушного бассейна промышленных регионов, где имеет место нарушение баланса санитарной нормы окружающей среды вследствие большого количества выбросов вредных веществ. Для решения указанной задачи разработаны математическая модель, описывающая рассматриваемый процесс с помощью уравнений гидромеханики с соответствующими начальными и краевыми условиями.

Подробный анализ научных работ связанных с проблемой математического моделирования процесса переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере показало, что при математическом моделировании и исследовании процесса распространения вредных веществ в атмосфере, во первых, не рассмотрено изменение скорости ветра по направлениям, которые изменяются со временем и в зависимости от изменения скоростей воздушного потока воздуха, во вторых, во всех приведенных математических моделях процесса, коэффициент поглощения аэрозольных частиц брался постоянным, в третьих, предполагалось, что распространение вредных веществ, выброшенных из источников, не достигает рассматриваемых границ области решения задачи и отсутствует приток и отток вредных веществ через них.

Исходя из вышесказанного, целю данной статьи является разработка нелинейной математической модели для мониторинга и прогнозирования процесса переноса и диффузии вредных веществ в атмосфере промышленных регионов. Данная модель должна учитывать возможность расчета загрязнения атмосферы источниками, скорость и направление ветра, осаждение частиц примесей, а также погодно-климатические факторы.

II. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Постановка задачи. Для исследования процесса переноса и диффузии аэрозольных частиц в атмосфере с учетом существенных параметров u, v, w составляющие скорости ветра по направлениям x, y, z соответственно и скорости осаждения мелкодисперсных частиц w_g рассмотрим математическую модель, описывающую на основе закона гидромеханики с помощью многомерного дифференциального уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}+u\frac{\partial\theta}{\partial x}+v\frac{\partial\theta}{\partial y}+\left(w-w_g\right)\frac{\partial\theta}{\partial z}+\sigma\theta=$$
$$=\mu\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\theta}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)+\delta\left(x,y,z\right)Q; \quad (1)$$

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

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

$$m\frac{dw_g}{dt}=-\frac{4}{3}\pi r^3(\rho_n-\rho_в)g-k_f\mu_в\pi r w_g+F_n \quad (4)$$

и соответствующим им начальным и граничным условиям:

$$\theta(x,y,z,0)=\theta_0(x,y,z),$$
$$\hat{u}=u(0),\ \ \hat{v}=v(0),\ \ \hat{w}_g=w_g(0),\ \text{ при } t=0, \tag{5}$$

$$-\mu\frac{\partial\theta}{\partial x}=\xi(\theta_b-\theta) \text{ при x=0}, \tag{6}$$

$$\mu\frac{\partial\theta}{\partial x}=\xi(\theta_b-\theta) \text{ при x=L}_x, \tag{7}$$

$$-\mu\frac{\partial\theta}{\partial y}=\xi(\theta_b-\theta) \text{ при y=0}, \tag{8}$$

$$\mu\frac{\partial\theta}{\partial y}=\xi(\theta_b-\theta) \text{ при y=L}_y, \tag{9}$$

$$-\kappa\frac{\partial\theta}{\partial z}=(\beta\theta-F_0), \quad \text{при } z=0 \tag{10}$$

$$\kappa\frac{\partial\theta}{\partial z}=\xi\left(\theta_b-\theta\right), \text{ при } z=H_z \tag{11}$$

где $U=\sqrt{\hat{u}^2+\hat{v}^2+\hat{w}^2}$.

Здесь m- масса частицы; r- радиус частицы; θ - количество распространяющегося вещества; θ_0- первичная концентрация вредных веществ в атмосфере; σ - коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере; δ- функция Дирака; g - ускорения свободного падания; c_f- коэффициент лобового сопротивления частиц; k_f - коэффициент формы тела для силы сопротивления; F_n - подъёмная сила воздушного потока; ρ_n - плотность частиц; $\rho_в$ - плотность воздуха; $\mu_в$-вязкость воздуха; t – время; $x,y,z-$ координаты; μ- коэффициент диффузии; β- коэффициент взаимодействия с подстилающей поверхности; Q- мощность источников; F_0 - количество аэрозольных частиц оторвавшихся от шероховатости земной поверхности, κ - коэффициент турбулентности, ξ - коэффициент для проведения граничного условия к размерному виду, θ_b - концентрация взвешенных веществ в соседних областях решаемых задач.

Метод решения. Так как, задача (1) - (11) описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, то получить ее решение в аналитической форме затруднительно. Для решения задачи используем неявную конечно-разностную схему по времени со вторым порядком точности соответственно по x,y и z:

$$\frac{\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n}}{\Delta t/3}+u^{n+\frac{1}{3}}\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x}+v^{n+\frac{1}{3}}\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n}-\theta_{i,j,k}^{n}}{\Delta y}+\left(w-w_g^{n+\frac{1}{3}}\right)\frac{\theta_{i,j,k+1}^{n}-\theta_{i,j,k}^{n}}{\Delta z}+$$

$$+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\mu\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-2\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x^2}+\mu\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n}-2\theta_{i,j,k}^{n}+\theta_{i,j-1,k}^{n}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{\kappa_{k+0,5}\theta_{i,j,k+1}^{n}-\left(\kappa_{k+0,5}+\kappa_{k-0,5}\right)\theta_{i,j,k}^{n}+\kappa_{k-0,5}\theta_{i,j,k-1}^{n}}{\Delta z^2}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

Отрывая скобки, получим вид:

$$\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n}+\frac{u^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{u^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{v^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta y}\theta_{i,j+1,k}^{n}-\frac{v^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta y}\theta_{i,j,k}^{n}+\frac{w-w_g^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z}\theta_{i,j,k+1}^{n}-$$

$$-\frac{w-w_g^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z}\theta_{i,j,k}^{n}+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{2\mu}{\Delta x^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j+1,k}^{n}-\frac{2\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j,k}^{n}+$$

$$+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j-1,k}^{n}+\frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k+1}^{n}-\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k}^{n}+\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k-1}^{n}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

Далее введем обозначения:

$$a_{i,j,k}=\frac{\mu}{\Delta x^2};\qquad b_{i,j,k}=\frac{3}{\Delta t}+\frac{2\mu}{\Delta x^2}-\frac{u^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x}+\sigma;\qquad c_{i,j,k}=\frac{\mu}{\Delta x^2}+\frac{u^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x};$$

$$d_{i,j,k}=\left(\frac{3}{\Delta t}+\frac{v^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta y}+\frac{w_g^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z}-\frac{2\mu}{\Delta y^2}-\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\right)\theta_{i,j,k}^{n}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j-1,k}^{n}+$$

$$+\left(\frac{\mu}{\Delta y^2}-\frac{v^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta y}\right)\theta_{i,j+1,k}^{n}+\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k-1}^{n}+\left(\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}-\frac{w-w_g^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z}\right)\theta_{i,j,k+1}^{n}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

в результате уравнения можно свести к трехдиагональной системе линейных алгебраических уравнений вида:

$$a_{i,j,k}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-b_{i,j,k}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+c_{i,j,k}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=-d_{i,j,k}\tag{12}$$

Теперь аппроксимируя граничное условие (6) получим:

$$-\mu\frac{-3\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+4\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{2\Delta x}=\xi\left(\theta_b-\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}\right)$$

или

$$3\mu\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-4\mu\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\mu\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=2\Delta x\xi\theta_b-2\Delta x\xi\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}} \tag{13}$$

Далее из уравнения (12) найдем $\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$:

$$\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=-\frac{a_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{b_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{d_{1,j,k}}{c_{1,j,k}}. \tag{14}$$

Подставив $\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ из (14) в (13) найдем $\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ следующим способом:

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

или

$$\left(-\frac{a_{1,j,k}\mu}{c_{1,j,k}}+2\Delta x\xi+3\mu\right)\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\left(-\frac{b_{1,j,k}\mu}{c_{1,j,k}}+4\mu\right)\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{d_{1,j,k}\mu}{c_{1,j,k}}+2\Delta x\xi\theta_b;$$

в конечном итоге получим:

$$\theta_{0,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{b_{1,j,k}\mu-4\mu c_{1,j,k}}{a_{1,j,k}\mu-2\Delta\xi x c_{1,j,k}-3\mu c_{1,j,k}}\theta_{1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{-2\Delta x\xi\theta_b c_{1,j,k}-d_{1,j,k}\mu}{a_{1,j,k}\mu-2\Delta x\xi c_{1,j,k}-3\mu c_{1,j,k}}\;.$$

Величины $\alpha_{0,j,k}$ и $\beta_{0,j,k}$ определяются следующим способом:

$$\alpha_{0,j,k}=\frac{b_{1,j,k}\mu-4\mu c_1}{a_{1,j,k}\mu-2\Delta x\xi c_{1,j,k}-3\mu c_{1,j,k}};\quad \beta_{0,j,k}=\frac{-2\Delta x\xi\theta_b c_{1,j,k}-d_{1,j,k}\mu}{a_{1,j,k}\mu-2\Delta x\xi c_{1,j,k}-3\mu c_{1,j,k}}. \tag{15}$$

Теперь аппроксимируя граничное условие (7) получим:

$$\mu\frac{\theta_{N-2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-4\theta_{N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+3\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{2\Delta x}=\xi\left(\theta_b-\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}\right)$$

или

$$\mu\theta_{N-2,j,k}-4\mu\theta_{N-1,j,k}+3\mu\theta_{N,j,k}=2\Delta x\xi\theta_b-2\Delta x\xi\theta_{N,j,k} \tag{16}$$

Применяя метод прогонки для последовательности *N*, *N-1* и *N-2* найдем $\theta_{N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ и $\theta_{N-2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$:

$$\theta_{N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\alpha_{N-1,j,k}\theta_{N-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\beta_{N-1,j,k}; \tag{17}$$

$$\begin{aligned}\theta_{N-2,j,k}&=\alpha_{N-2,j,k}\theta_{N-1,j,k}+\beta_{N-2,j,k}=\alpha_{N-2,j,k}\left(\alpha_{N-1,j,k}\theta_{N,j,k}+\beta_{N-1,j,k}\right)+\\&+\beta_{N-2,j,k}=\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\theta_{N,j,k}+\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}+\beta_{N-2,j,k}.\end{aligned} \tag{18}$$

Подставив $\theta_{2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ и $\theta_{N-2,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$ из (18), (19) в (17) найдем $\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}$:

$$\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\mu\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}\mu+\beta_{N-2,j,k}\mu-4\alpha_{N-1,j,k}\mu\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-$$

$$-4\beta_{N-1,j,k}\mu+3\mu\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=2\Delta x\xi\theta_b-2\Delta x\xi\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}};$$

$$\left(\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\mu-4\alpha_{N-1,j,k}\mu+2\Delta x\xi+3\mu\right)\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=$$
$$=2\Delta x\xi\theta_b-\beta_{N-2,j,k}\mu-\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}\mu+4\beta_{N-1,j,k}\mu;$$

$$\theta_{N,j,k}^{n+\frac{1}{3}}=\frac{2\Delta x\xi\theta_b-\beta_{N-2,j,k}\mu-\alpha_{N-2,j,k}\beta_{N-1,j,k}\mu+4\beta_{N-1,j,k}\mu}{\alpha_{N-2,j,k}\alpha_{N-1,j,k}\mu-4\alpha_{N-1,j,k}\mu+2\Delta x\xi+3\mu}; \tag{19}$$

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

Аналогично, используя выше указанную технологию по координате OY и получим:

$$\frac{\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta t/3}+u^{n+\frac{2}{3}}\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x}+v^{n+\frac{2}{3}}\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y}+\left(w-w_g^{n+\frac{2}{3}}\right)\frac{\theta_{i,j,k+1}^{n+\frac{1}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z}+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}=$$

$$=\mu\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-2\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x^2}+\mu\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-2\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{\kappa_{k+0,5}\theta_{i,j,k+1}^{n+\frac{1}{3}}-\left(\kappa_{k+0,5}+\kappa_{k-0,5}\right)\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\kappa_{k-0,5}\theta_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z^2}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q$$

Откроем скобки, получим вид:

$$\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{u^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{u^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{v^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y}\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{v^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+$$

$$+\frac{w-w_g^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta z}\theta_{i,j,k+1}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{w-w_g^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta z}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}=\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}-\frac{2\cdot\mu}{\Delta x^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+$$

$$+\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{2\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k+1}^{n+\frac{1}{3}}-$$

$$-\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

введём следующие обозначения:

$$\bar{a}_{i,j,k}=\frac{\mu}{\Delta y^2};\qquad \bar{b}_{i,j,k}=\frac{3}{\Delta t}+\frac{2\mu}{\Delta y^2}-\frac{v^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y}+\sigma;\qquad \bar{c}_{i,j,k}=\frac{\mu}{\Delta y^2}+\frac{v^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y};$$

$$\bar{d}_{i,j,k}=\left(\frac{3}{\Delta t}+\frac{u^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x}+\frac{w_g^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta z}-\frac{2\mu}{\Delta x^2}-\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\right)\theta_{i,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+\left(\frac{\mu}{\Delta x^2}-\frac{u^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x}\right)\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{3}}+$$

$$+\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{3}}+\left(\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}-\frac{w-w_g^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta z}\right)\theta_{i,j,k+1}^{n+\frac{1}{3}}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

в результате уравнение можно свести к трехдиагональной системе линейных алгебраических уравнений:

$$\bar{a}_{i,j,k}\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\bar{b}_{i,j,k}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\bar{c}_{i,j,k}\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}=-\bar{d}_{i,j,k} \tag{20}$$

Теперь аппроксимируя граничное условие (8) получим:

$$-\mu\frac{-3\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}+4\theta_{i,1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\theta_{i,2,k}^{n+\frac{2}{3}}}{2\Delta y}=\xi\left(\theta_b-\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}\right)$$

или

$$3\mu\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}-4\mu\theta_{i,1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\mu\theta_{i,2,k}^{n+\frac{2}{3}}=2\Delta y\xi\theta_b-2\Delta y\xi\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}} \tag{21}$$

Далее из уравнения (20) найдем $\theta_{i,2,k}^{n+\frac{2}{3}}$:

$$\theta_{i,2,k}^{n+\frac{2}{3}}=-\frac{\bar{a}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\bar{b}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}\theta_{i,1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{\bar{d}_{i,1,k}}{\bar{c}_{i,1,k}}. \tag{22}$$

Подставив $\theta_{i,2,k}^{n+\frac{2}{3}}$ из (22) в (21) найдем $\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}$:

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

или

$$\left(-\frac{\bar{a}_{i,1,k}\mu}{\bar{c}_{i,1,k}}+2\Delta y\xi+3\right)\theta_{i,0,k}^{n+\frac{2}{3}}=\left(-\frac{\bar{b}_{i,1,k}\mu}{\bar{c}_{i,1,k}}+4\mu\right)\theta_{i,1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\bar{d}_{i,1,k}\mu}{\bar{c}_{i,1,k}}+2\Delta y\xi\theta_b;$$

в конечном итоге получим:

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

где, $\bar{\alpha}_{i,0,k}$ и $\bar{\beta}_{i,0,k}$ определяются следующим способом:

$$\bar{\alpha}_{i,0,k}=\frac{\bar{b}_{i,1,k}\mu-4\mu\bar{c}_{i,1,k}}{\bar{a}_{i,1,k}\mu-2\Delta y\xi\bar{c}_{i,1,k}-3\mu\bar{c}_{i,1,k}};\qquad \bar{\beta}_{i,0,k}=\frac{-2\Delta y\xi\theta_b\bar{c}_{i,1,k}-\bar{d}_{i,1,k}\mu}{\bar{a}_{i,1,k}\mu-2\Delta y\xi\bar{c}_{i,1,k}-3\mu\bar{c}_{i,1,k}}; \tag{23}$$

Теперь аппроксимируя граничное условие (9) получим:

$$\mu\frac{\theta_{i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}-4\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+3\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}}{2\Delta y}=\xi\left(\theta_b-\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}\right)$$

или

$$\mu\theta_{i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}-4\mu\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+3\mu\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}=2\Delta y\xi\theta_b-2\Delta y\xi\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}} \qquad (24)$$

Применяя метод прогонки для последовательности *M*, *M-1* и *M-2* найдем $\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}$ и $\theta_{i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}$:

$$\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}=\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}+\overline{\beta}_{i,M-1,k}; \qquad (25)$$

$$\theta_{i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}=\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\overline{\beta}_{i,M-2,k}=\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\left(\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}+\overline{\beta}_{i,M-1,k}\right)+$$
$$+\overline{\beta}_{i,M-2,k}=\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}+\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\beta}_{i,M-1,k}+\overline{\beta}_{i,M-2,k}. \qquad (26)$$

Подставив $\theta_{i,M-1,k}^{n+\frac{2}{3}}$ и $\theta_{i,M-2,k}^{n+\frac{2}{3}}$ из (25), (26) вместо (24) найдем $\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}$:

$$\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}+\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu+\overline{\beta}_{i,M-2,k}\mu-$$
$$-4\cdot\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}-4\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu+3\mu\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}=2\Delta y\xi\theta_b-2\Delta y\xi\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}};$$
$$\left(\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu-4\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu+2\Delta y\xi+3\mu\right)\overline{\theta}_{i,M,k}=$$
$$=2\Delta y\xi\theta_b-\overline{\beta}_{i,M-2,k}\mu-\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu+4\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu;$$

$$\theta_{i,M,k}^{n+\frac{2}{3}}=\frac{2\Delta y\xi\theta_b-\overline{\beta}_{i,M-2,k}\mu-\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu+4\overline{\beta}_{i,M-1,k}\mu}{\overline{\alpha}_{i,M-2,k}\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu-4\overline{\alpha}_{i,M-1,k}\mu+2\cdot\Delta y\xi+3\mu}; \qquad (27)$$

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

Аналогично, используя выше указанную технологию по координате OZ и получим:

$$\frac{\theta_{i,j,k}^{n+1}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta t/3}+u^{n+1}\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x}+v^{n+1}\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y}+\left(w-w_g^{n+1}\right)\frac{\theta_{i,j,k+1}^{n+1}-\theta_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z}+$$

$$+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+1}=\mu\frac{\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-2\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x^2}+\mu\frac{\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-2\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y^2}+$$

$$+\frac{\kappa_{k+0,5}\theta_{i,j,k+1}^{n+1}-\left(\kappa_{k+0,5}+\kappa_{k-0,5}\right)\theta_{i,j,k}^{n+1}+\kappa_{k-0,5}\theta_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q$$

Или имеем:

$$\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n+1}-\frac{3}{\Delta t}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{u^{n+1}}{\Delta x}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{u^{n+1}}{\Delta x}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{v^{n+1}}{\Delta y}\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{v^{n+1}}{\Delta y}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+$$

$$+\frac{w-w_g^{n+1}}{\Delta z}\theta_{i,j,k+1}^{n+1}-\frac{w-w_g^{n+1}}{\Delta z}\theta_{i,j,k}^{n+1}+\sigma\theta_{i,j,k}^{n+1}=\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{2\mu}{\Delta x^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+$$

$$\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}-\frac{2\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k+1}^{n+1}-$$

$$-\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k}^{n+1}+\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2}\theta_{i,j,k-1}^{n+1}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

введём следующие обозначения:

$$\bar{\bar{a}}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{k-0,5}}{\Delta z^2};\qquad \bar{\bar{b}}_{i,j,k}=\frac{3}{\Delta t}+\frac{\kappa_{k-0,5}+\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}-\frac{w-w_g^{n+1}}{\Delta z}+\sigma;\qquad \bar{\bar{c}}_{i,j,k}=\frac{\kappa_{k+0,5}}{\Delta z^2}+\frac{w-w_g^{n+1}}{\Delta z};$$

$$\bar{\bar{d}}_{i,j,k}=\left(\frac{3}{\Delta t}+\frac{u^{n+1}}{\Delta x}+\frac{v^{n+1}}{\Delta y}-\frac{2\mu}{\Delta x^2}-\frac{2\mu}{\Delta y^2}\right)\theta_{i,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\mu}{\Delta x^2}\theta_{i-1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+$$

$$+\left(\frac{\mu}{\Delta x^2}-\frac{u^{n+1}}{\Delta x}\right)\theta_{i+1,j,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{\mu}{\Delta y^2}\theta_{i,j-1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\left(\frac{\mu}{\Delta y^2}-\frac{v^{n+1}}{\Delta y}\right)\theta_{i,j+1,k}^{n+\frac{2}{3}}+\frac{1}{3}\delta_{i,j,k}Q;$$

В результате уравнение можно свести к трех диагональной системе линейных алгебраических уравнений относительно OZ:

$$\bar{\bar{a}}_{i,j,k}\theta_{i,j,k-1}^{n+1}-\bar{\bar{b}}_{i,j,k}\theta_{i,j,k}^{n+1}+\bar{\bar{c}}_{k}\theta_{i,j,k+1}^{n+1}=-\bar{\bar{d}}_{i,j,k} \tag{28}$$

Теперь, аппроксимируя граничное условие (10) получим:

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

или

$$3\kappa\theta_{i,j,0}^{n+1}-4\kappa\theta_{i,j,1}^{n+1}+\kappa\theta_{i,j,2}^{n+1}=2\Delta z\beta\theta_{i,j,0}^{n+1}-2\Delta zF_0; \tag{29}$$

далее, из уравнения (28) найдем $\theta_{i,j,2}^{n+1}$:

$$\theta_{i,j,2}^{n+1}=-\frac{\bar{\bar{a}}_{i,j,1}}{\bar{\bar{c}}_{i,j,1}}\theta_{i,j,0}^{n+1}+\frac{\bar{\bar{b}}_{i,j,1}}{\bar{\bar{c}}_{i,j,1}}\theta_{i,j,1}^{n+1}-\frac{\bar{\bar{d}}_{i,j,1}}{\bar{\bar{c}}_{i,j,1}}; \tag{30}$$

Подставив $\theta^{n+1}_{i,j,2}$ из (30) в (29) найдем $\theta^{n+1}_{i,j,0}$:

$$3\kappa\theta^{n+1}_{i,j,0}-4\kappa\theta^{n+1}_{i,j,1}-\frac{\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}\theta^{n+1}_{i,j,0}+\frac{\overline{\overline{b}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}\theta^{n+1}_{i,j,1}-\frac{\overline{\overline{d}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}=2\Delta z\beta\theta^{n+1}_{i,j,0}-2\Delta zF_0;$$

или

$$\left(3\kappa-\frac{\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}-2\Delta z\beta\right)\theta^{n+1}_{i,j,0}=\left(4\kappa-\frac{\overline{\overline{b}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}\right)\theta^{n+1}_{i,j,1}+\frac{\overline{\overline{d}}_{i,j,1}\kappa}{\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}-2\Delta zF_0;$$

в конечном итоге получим:

$$\theta^{n+1}_{i,j,0}=\frac{4\kappa\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{b}}_{i,j,1}\kappa}{3\kappa\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa-2\Delta z\beta}\theta^{n+1}_{i,j,1}+\frac{\overline{\overline{d}}_{i,j,1}\kappa+2F_0\Delta z\overline{\overline{c}}_{i,j,1}}{3\kappa\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa-2\Delta z\beta};\tag{31}$$

где $\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,0}$ и $\overline{\overline{\beta}}_{i,j,0}$ определяются следующим способом:

$$\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,0}=\frac{4\kappa\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{b}}_{i,j,1}\kappa}{3\kappa_1\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa_1-2\Delta z\beta};\ \overline{\overline{\beta}}_{i,j,0}=\frac{\overline{\overline{d}}_{i,j,1}\kappa+2\Delta z\overline{\overline{c}}_{i,j,1}F_0}{3\kappa\overline{\overline{c}}_{i,j,1}-\overline{\overline{a}}_{i,j,1}\kappa-2\Delta z\beta}.\tag{32}$$

Теперь, аппроксимируя граничное условие (11) получим:

$$\kappa\frac{\theta^{n+1}_{i,j,L-2}-4\theta^{n+1}_{i,j,L-1}+3\theta^{n+1}_{i,j,L}}{2\Delta z}=\xi(\theta_b-\theta);\tag{33}$$

Применяя метод прогонки для последовательности *L*, *L-1*, и *L-2* найдем $\theta^{n+1}_{i,j,L-1}$ и $\theta^{n+1}_{i,j,L-2}$:

$$\theta^{n+1}_{i,j,L-2}-4\theta^{n+1}_{i,j,L-1}+3\theta^{n+1}_{i,j,L}=0;$$

$$\theta^{n+1}_{i,j,L-1}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{i,j,L}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1};\tag{34}$$

$$\begin{aligned}\theta^{n+1}_{i,j,L-2}&=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\theta^{n+1}_{i,j,L-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\left(\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{i,j,L}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}\right)+\\&+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2}=\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{i,j,L}+\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2};\end{aligned}\tag{35}$$

Подставив $\theta^{n+1}_{i,j,L-1}$ и $\theta^{n+1}_{i,j,L-2}$ из (34), (35) вместо (33) найдем $\theta^{n+1}_{i,j,L}$:

$$\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{i,j,L}+\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2}-4\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}\theta^{n+1}_{i,j,L}+\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}+3\theta^{n+1}_{i,j,L}=0;$$

$$\left(\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}-4\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}+3\right)\theta^{n+1}_{i,j,L}=4\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}-\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}-\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2};$$

$$\theta^{n+1}_{i,j,L}=\frac{4\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}-\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}-\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2}}{\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}-4\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}+3}=\frac{\left(4-\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}\right)\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-1}-\overline{\overline{\beta}}_{i,j,L-2}}{\left(\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-2}-4\right)\overline{\overline{\alpha}}_{i,j,L-1}+3}.\tag{36}$$

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

Для решения уравнения (2) используем неявную схему:

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

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

$$\frac{u^{n+1}-u^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta t/3}=\frac{c_{f}\pi r^{2}\rho_{в}\left(2\tilde{u}u^{n+1}-\tilde{u}^{2}-2u^{n+1}U+U^{2}\right)}{m}.$$

Далее, для решения уравнения (3) используем неявную схему:

$$\frac{v^{n+\frac{1}{3}}-v^{n}}{\Delta t/3}=\frac{c_{f}\pi r^{2}\rho_{в}\left(2\tilde{v}v^{n+\frac{1}{3}}-\tilde{v}^{2}-2v^{n+\frac{1}{3}}U+U^{2}\right)}{m};$$

$$\frac{v^{n+\frac{2}{3}}-v^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta t/3}=\frac{c_{f}\pi r^{2}\rho_{в}\left(2\tilde{v}v^{n+\frac{2}{3}}-\tilde{v}^{2}-2v^{n+\frac{2}{3}}U+U^{2}\right)}{m};$$

$$\frac{v^{n+1}-v^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta t/3}=\frac{c_{f}\pi r^{2}\rho_{в}\left(2\tilde{v}v^{n+1}-\tilde{v}^{2}-2v^{n+1}U+U^{2}\right)}{m}.$$

Аналогично, для решения уравнения (4) используем неявную схему:

$$\frac{w_{g}^{n+\frac{1}{3}}-w_{g}^{n}}{\Delta t/3}=\frac{-4\pi r^{3}\left(\rho_{n}-\rho_{в}\right)g-3\kappa_{f}\mu_{в}\pi r w_{g}^{n+\frac{1}{3}}+3F_{n}}{3m};$$

$$\frac{w_{g}^{n+\frac{2}{3}}-w_{g}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta t/3}=\frac{-4\pi r^{3}\left(\rho_{n}-\rho_{в}\right)g-3k_{f}\mu_{в}\pi r w_{g}^{n+\frac{2}{3}}+3F_{n}}{3m};$$

$$\frac{w_{g}^{n+1}-w_{g}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta t/3}=\frac{-4\pi r^{3}\left(\rho_{n}-\rho_{в}\right)g-3k_{f}\mu_{в}\pi r w_{g}^{n+1}+3F_{n}}{3m}.$$

Сходимость итерационного процесса проверяться с помощью условий:

$$\left|u^{(s+1)}-u^{(s)}\right|<\varepsilon;\left|v^{(s+1)}-v^{(s)}\right|<\varepsilon;\ \left|w_{g}^{(s+1)}-w_{g}^{(s)}\right|<\varepsilon.$$

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

III. ВЫВОДЫ

Для прогнозирования, мониторинга и оценки экологического состояния атмосферы и подстилающей поверхности пассивными и активными примесями, разработана математическая модель, где учитываются изменяющаяся скорость перемещения частиц в атмосфере.

Для определения скоростей перемещения мелкодисперсных частиц в атмосфере получена система нелинейных уравнений, где учтены основные физико-механические свойства частиц и скорость перемещения воздушной массы атмосферы, которые играют важную роль.

Так как разработанная нелинейная математическая модель мониторинга и прогнозирования процесса распространения аэрозольных частиц в атмосфере описывается многомерным нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных с соответствующими начальными и краевыми условиями, для ее решения разработан численный алгоритм с использованием неявной конечно-разностной схемы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Алоян А.Е.* Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере / Курс лекций. – М.: ИВМ РАН, 2002. – 201 с.,

[2] *Наац В. И., Наац И. Э., Рыскаленко Р. А., Ярцева Е. П.* Математические модели и вычислительный эксперимент в проблеме контроля и прогноза экологического состояния атмосферы: монография / СКФУ, 2016. – 376 с.

[3] *Наац В.И., Наац И. Э.* Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 328 с.

[4] *С. Анан К.В.* Математического моделирования загрязнения воздуха проекта в тепловые энергетики: дис. ... канд./тех. наук. Университет Шри Венкатешвара, Тирупати, 2014.

[5] *Р.И. Ларсен.* Новая математическая модель с учётом времени и частоты усреднения концентрации загрязнителей воздуха //Журнал Ассоциации по контролю загрязнения воздуха. 2012. №19. с. 24-30.

[6] *Степаненко С.Н., Волошин В.Г.* Эйлерова K-GDM модель расчета концентрации в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах промышленных предприятий // Украинский гидрометеорологический журнал. – 2009. –№5. с. 5-14.

[7] *Пененко В.В., Цветовой Е.А.* Математические модели для изучения рисков загрязнения природной среды. // прикладная механика и техническая физика. 2004. Т. 45, №2,с. 136-146

[8] *Беляев Н. Н.* Численные модели для прогноза загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта / Наука и прогресс транспорта. — 2016. — № 6 (66). с. 25—32.

[9] *Мишигова Г.В.* Моделирование процесса загрязнения атмосферы. //Вестник ДГТУ. 2012. №8(69).-с. 12-17.

[10] *Кондраков О.В., Крючин О.В., Волосатов М.Ю., Клетров С.Ю. М*оделирование распространения загрязняющих веществ в атмосфере на основании модели «факела» // Вестник ТГУ. 2011. №1.с. 196-199.

[11] *Хаширова Т.Ю., Акбашева Г.А., Шакова О.А., Акбашева Е.А.* Моделирование загрязненности атмосферного воздуха / Журнал "Фундаментальные исследования". 2017. №8.- с. 325-330.

[12] *Беспалов М.С.* Моделирование распространения примеси в атмосфере как инструмент воздухоохранной деятельности / ПЭММЭ, № 1, 2016.

[13] *Машихина П. Б.* Моделирование распространения примеси в атмосфере с учетом рельефа местности // Вестник Днепропетровского национального университета железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна. — 2009. — №27. с. 138—142.

[14] *Равшанов Н., Мурадов Ф.А., Набибулина Л.М.* Численное моделирование процесса переноса и диффузии активных аэрозолных частиц в пограничном слое атмосферы. Проблемы вычислительной математики и прикладной информатики. 2016. №2.- с.47-59.