

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Новосибирский государственный технический университет  
Кафедра прикладной математики

Уравнения математической физики

Курсовой проект

Факультет	ПМИ
Группа	ПМ-01
Студент	Жигалов П.С.
Преподаватель	Персова М.Г.
Вариант	82, 3

Новосибирск

2013

## Содержание

Содержание.....	2
1. Постановка задачи .....	3
1.1. Формулировка задания .....	3
1.2. Постановка задачи.....	3
2. Теоретическая часть .....	3
2.1. Дискретизация по времени .....	3
2.2. Вариационная постановка .....	3
2.3. Конечноеэлементная дискретизация.....	4
2.4. Переход к локальным матрицам.....	4
2.5. Учет краевых условий .....	5
2.6. Метод решения СЛАУ.....	6
3. Описание разработанной программы.....	6
3.1. Структуры данных, используемые для задания расчетной области и конечноеэлементной сетки .....	6
3.2. Структура основных модулей программы .....	6
3.2.1 fem_module .....	7
3.2.2 cgm_module.....	7
3.2.3 param_module.....	7
4. Описание тестирования программы.....	8
4.1. Тест 1 .....	8
4.2. Тест 2 .....	8
4.3. Тест 3 .....	8
4.4. Тест 4 .....	9
5. Исследования .....	10
5.1. Определение порядка аппроксимации по времени .....	10
6. Выводы .....	10
7. Тексты основных модулей программы .....	10
7.1. fem_module.....	10
7.2. param_module.....	19

## 1. Постановка задачи

### 1.1. Формулировка задания

МКЭ для трёхмерной начально-краевой задачи для уравнения параболического типа в декартовой системе координат. Базисные функции трилинейные на параллелепипедах. Схема Кранка-Николсона для аппроксимации по времени. Краевые условия всех типов. Коэффициент диффузии  $\lambda$  – кусочно-постоянная функция. Матрицу СЛАУ генерировать в разреженном строчном формате. Для решения СЛАУ использовать МСГ или ЛОС с неполной факторизацией.

### 1.2. Постановка задачи

Параболическая начально-краевая задача для функции  $u$  определяется дифференциальным уравнением

$$(1) \quad \sigma \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} u) = f,$$

заданным в некоторой области  $\Omega$  с границей  $S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$ , начальным условием

$$(2) \quad u|_{t=t_0} = u^0$$

и краевыми условиями

$$(3) \quad u|_{S_1} = u_g, \quad (4) \quad \lambda \frac{\partial u}{\partial n}|_{S_2} = \theta, \quad (5) \quad \lambda \frac{\partial u}{\partial n}|_{S_3} + \beta(u|_{S_3} - u_\beta) = 0,$$

в которых  $u|_{S_i}$  – значение искомой функции  $u$  на границе  $S_i$ , а  $\frac{\partial u}{\partial n}|_{S_i}$  – значение на  $S_i$  производной функции  $u$  по

направлению внешней нормали к поверхности  $S_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

Коэффициент  $\lambda$  – кусочно-постоянная функция, коэффициент  $\sigma(x, y, z)$  – некоторая известная функция.

Вид конечных элементов – параллелепипеды.

Вид базисных функций – трилинейные.

## 2. Теоретическая часть

### 2.1. Дискретизация по времени

Положим, что ось времени  $t$  разбита на так называемые временные слои со значениями  $t_j$ ,  $j = 1 \dots J$ , а значения искомой функции  $u$  и параметров  $\lambda$ ,  $\sigma$  и  $f$  уравнения (1) будем обозначать соответственно через  $\lambda^j$ ,  $\sigma^j$  и  $f^j$ , которые уже не зависят от времени  $t$ , но остаются функциями пространственных координат.

Схема Кранка-Николсона для уравнения (1), при условии, что  $\lambda$  и  $\sigma$  не зависят от  $t$ , а  $f$  – зависит, будет выглядеть следующим образом:

$$(6) \quad \sigma \frac{u^j - u^{j-1}}{\Delta t} - \operatorname{div} \left( \lambda \operatorname{grad} \frac{u^j + u^{j-1}}{2} \right) = \frac{f^j + f^{j-1}}{2}, \quad j = 1 \dots J, \quad \Delta t = t^j - t^{j-1}$$

### 2.2. Вариационная постановка

Пусть  $v$  – некоторая пробная функция из пространства  $H_0^1$ , тогда:

$$(7) \quad \int_{\Omega} \sigma \frac{u^j - u^{j-1}}{\Delta t} v d\Omega + \int_{\Omega} -\operatorname{div} \left( \lambda \operatorname{grad} \frac{u^j + u^{j-1}}{2} \right) v d\Omega = \int_{\Omega} \frac{f^j + f^{j-1}}{2} v d\Omega.$$

Применим к (7) формулу Грина, преобразуем и перегруппируем:

$$(8) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \operatorname{grad}(u^j) \operatorname{grad}(v) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \operatorname{grad}(u^{j-1}) \operatorname{grad}(v) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j u^j v dS_3 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^{j-1} u^{j-1} v dS_3 + \\ & + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j u^j v d\Omega - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j u^{j-1} v d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^j v d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^{j-1} v d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^j v dS_2 + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^{j-1} v dS_2 + \\ & + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j u_\beta^j v dS_3 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^{j-1} u_\beta^{j-1} v dS_3 \end{aligned}$$

### 2.3. Конечноэлементная дискретизация

Заменим пространство  $H_0^1$  на конечномерное пространство  $V^h$ , которое определим как линейное пространство, натянутое на базисные функции  $\psi_i$ ,  $i = 1 \dots n$ . Заменим в (8) функцию  $u$  аппроксимирующей ее функцией  $u^h$ , а функцию  $v$  - функцией  $v^h$ .

Поскольку любая функция  $v^h$  может быть представлена в виде линейной комбинации  $v^h = \sum_i q_i^v \psi_i$ , получим:

$$(9) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \text{grad}(u^{hj}) \text{grad}(\psi_i) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \text{grad}(u^{hj-1}) \text{grad}(\psi_i) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j u^{hj} \psi_i dS_3 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^{j-1} u^{hj-1} \psi_i dS_3 + \\ & + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j u^{hj} \psi_i d\Omega - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j u^{hj-1} \psi_i d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^j \psi_i d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^{j-1} \psi_i d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^j \psi_i dS_2 + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^{j-1} \psi_i dS_2 + \\ & + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j u_{\beta}^j \psi_i dS_3 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^{j-1} u_{\beta}^{j-1} \psi_i dS_3 \end{aligned}$$

Решение  $u^h$  может быть представлено в виде: (10)  $u^h = \sum_{k=1}^n q_k \psi_k$ , причем  $n - n_0$  компонент вектора весов  $q$  могут быть фиксированы и определены из условия  $u^h|_{S_1} = u_g$ . Подставляя (10) в (9) получим СЛАУ для вектора весов  $q$ :

$$(11) \quad \begin{aligned} & \sum_{k=1}^n \left( \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \text{grad}(\psi_k) \text{grad}(\psi_i) d\Omega + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j \psi_k \psi_i d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j \psi_k \psi_i dS_3 \right) \cdot q_k^j = \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^j \psi_i d\Omega + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\Omega} f^{j-1} \psi_i d\Omega + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^j \psi_i dS_2 + \frac{1}{2} \int_{S_2} \theta^{j-1} \psi_i dS_2 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j u_{\beta}^j \psi_i dS_3 + \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^{j-1} u_{\beta}^{j-1} \psi_i dS_3 + \\ & + \sum_{k=1}^n \left( \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \sigma^j \psi_k \psi_i d\Omega - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \lambda^j \text{grad}(\psi_k) \text{grad}(\psi_i) d\Omega - \frac{1}{2} \int_{S_3} \beta^j \psi_k \psi_i dS_3 \right) \cdot q_k^{j-1} \end{aligned}$$

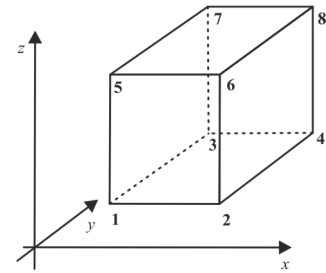
### 2.4. Переход к локальным матрицам

Введем локальную нумерацию узлов в соответствии с рисунком и определим базисные функции на конечном элементе. На отрезках  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $[y_j, y_{j+1}]$ ,  $[z_k, z_{k+1}]$  зададим по две одномерные линейные функции:

$$(12.1) \quad X_1(x) = \frac{x_{i+1} - x}{h_x}, \quad X_2(x) = \frac{x - x_i}{h_x}, \quad h_x = x_{i+1} - x_i,$$

$$(12.2) \quad Y_1(y) = \frac{y_{j+1} - y}{h_y}, \quad Y_2(y) = \frac{y - y_j}{h_y}, \quad h_y = y_{j+1} - y_j,$$

$$(12.3) \quad Z_1(z) = \frac{z_{k+1} - z}{h_z}, \quad Z_2(z) = \frac{z - z_k}{h_z}, \quad h_z = z_{k+1} - z_k.$$



Тогда трилинейные базисные функции представляются в виде произведения функций (12.1)-(12.3). Так как функции (12.1)-(12.3) заданы на конечном элементе, во всех прочих конечных элементах они будут равны нулю. Таким образом, трилинейные базисные функции на каждом конечном элементе могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{x_{i+1} - x}{h_x} \cdot \frac{y_{j+1} - y}{h_y} \cdot \frac{z_{k+1} - z}{h_z}, & \psi_2 &= \frac{x - x_i}{h_x} \cdot \frac{y_{j+1} - y}{h_y} \cdot \frac{z_{k+1} - z}{h_z}, & \psi_3 &= \frac{x_{i+1} - x}{h_x} \cdot \frac{y - y_j}{h_y} \cdot \frac{z_{k+1} - z}{h_z}, \\ \psi_4 &= \frac{x - x_i}{h_x} \cdot \frac{y - y_j}{h_y} \cdot \frac{z_{k+1} - z}{h_z}, & \psi_5 &= \frac{x_{i+1} - x}{h_x} \cdot \frac{y_{j+1} - y}{h_y} \cdot \frac{z - z_k}{h_z}, & \psi_6 &= \frac{x - x_i}{h_x} \cdot \frac{y_{j+1} - y}{h_y} \cdot \frac{z - z_k}{h_z}, \\ \psi_7 &= \frac{x_{i+1} - x}{h_x} \cdot \frac{y - y_j}{h_y} \cdot \frac{z - z_k}{h_z}, & \psi_8 &= \frac{x - x_i}{h_x} \cdot \frac{y - y_j}{h_y} \cdot \frac{z - z_k}{h_z} \end{aligned} \quad (13)$$

Выражения для вычисления компонент локальных матриц в этом случае принимают вид:

$$(14) \quad \hat{G}_{ij} = \int_{\Omega_k} \lambda_k \left( \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial x} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial y} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial y} + \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial z} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial z} \right) dx dy dz - \text{матрица жесткости}$$

$$(15) \quad \hat{M}_{ij} = \int_{\Omega_k} \gamma_k \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j dx dy dz - \text{матрица массы}$$

Компоненты локальных матриц будут иметь размерность 8x8 и примут вид:

$$\hat{G}_{ij} = \lambda_k \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \left( \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial x} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial y} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial y} + \frac{\partial \hat{\psi}_i}{\partial z} \frac{\partial \hat{\psi}_j}{\partial z} \right) dx dy dz \quad \hat{M}_{ij} = \gamma_k \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j dx dy dz$$

После вычислений итоговые матрицы примут вид:

$$(16) \quad \hat{G} = \frac{\lambda_k h_x h_y h_z}{36} \left( \frac{1}{h_x^2} \hat{G}^x + \frac{1}{h_y^2} \hat{G}^y + \frac{1}{h_z^2} \hat{G}^z \right) \quad (17) \quad \hat{M} = \frac{\gamma_k h_x h_y h_z}{216} \hat{M}^1$$

$$\hat{G}^x = \begin{pmatrix} 4 & -4 & 2 & -2 & 2 & -2 & 1 & -1 \\ -4 & 4 & -2 & 2 & -2 & 2 & -1 & 1 \\ 2 & -2 & 4 & -4 & 1 & -1 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & -4 & 4 & -1 & 1 & -2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 & -1 & 4 & -4 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & -1 & 1 & -4 & 4 & -2 & 2 \\ 1 & -1 & 2 & -2 & 2 & -2 & 4 & -4 \\ -1 & 1 & -2 & 2 & -2 & 2 & -4 & 4 \end{pmatrix} \quad \hat{G}^y = \begin{pmatrix} 4 & 2 & -4 & -2 & 2 & 1 & -2 & -1 \\ 2 & 4 & -2 & -4 & 1 & 2 & -1 & -2 \\ -4 & -2 & 4 & 2 & -2 & -1 & 2 & 1 \\ -2 & -4 & 2 & 4 & -1 & -2 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & -2 & -1 & 4 & 2 & -4 & -2 \\ 1 & 2 & -1 & -2 & 2 & 4 & -2 & -4 \\ -2 & -1 & 2 & 1 & -4 & -2 & 4 & 2 \\ -1 & -2 & 1 & 2 & -2 & -4 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}^z = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 & -4 & -2 & -2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 2 & -2 & -4 & -1 & -2 \\ 2 & 1 & 4 & 2 & -2 & -1 & -4 & -2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 & -1 & -2 & -2 & -4 \\ -4 & -2 & -2 & -1 & 4 & 2 & 2 & 1 \\ -2 & -4 & -1 & -2 & 2 & 4 & 1 & 2 \\ -2 & -1 & -4 & -2 & 2 & 1 & 4 & 2 \\ -1 & -2 & -2 & -4 & 1 & 2 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad \hat{M}^1 = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 4 & 2 & 4 & 2 & 2 & 1 \\ 4 & 8 & 2 & 4 & 2 & 4 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 8 & 4 & 2 & 1 & 4 & 2 \\ 2 & 4 & 4 & 8 & 1 & 2 & 2 & 4 \\ 4 & 2 & 2 & 1 & 8 & 4 & 4 & 2 \\ 2 & 4 & 1 & 2 & 4 & 8 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 2 & 4 & 2 & 8 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 4 & 2 & 4 & 4 & 8 \end{pmatrix}$$

$f$  также раскладываем по базису:  $f = \sum_{i=1}^n f_i \hat{\psi}_i$ , тогда вектор правой части имеет вид (18)  $F = \frac{h_x h_y h_z}{216} \hat{M}^1 \begin{bmatrix} f_1 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}$ .

Глобальная матрица собирается путем добавления к ней локальных матриц в соответствующие места элементов. Профиль матрицы формируется следующим образом:  $A_{ij} \neq 0$ , если  $i$  и  $j$  узлы находятся в одном локальном элементе.

## 2.5. Учет краевых условий

Краевые условия первого рода будем учитывать следующим образом: в глобальной матрице и глобальном векторе находим соответствующую глобальному номеру краевого узла строку, и ставим в диагональный элемент глобальной матрицы единицу, а в вектор правой части значение краевого условия, заданное в исходном узле. Строку матрицы необходимо обнулить, при этом учесть симметричную структуру матрицы. Краевые условия первого рода должны быть учтены в последнюю очередь.

Рассмотрим краевые условия третьего рода (5). Необходимо вычислить интегралы  $\int_{S_3} \beta u_{\beta} \psi_i dS$  и  $\int_{S_3} \beta \psi_j \psi_i dS$ .

Положим параметр  $\beta$  константой на каждом конечном элементе, а функцию  $u_{\beta}$  разложим по базису  $u_{\beta} = \sum_{i=1}^n u_{\beta i} \psi_i$ .

В данном случае, базис получится вырожденным в билинейный, так как краевые условия заданы на гранях, т.е. одна из переменных фиксирована.

Вычислив интеграл  $\int_{S_3} \beta \psi_j \psi_i dS$ , получим локальную матрицу:  $\hat{C} = \beta \frac{h_1 h_2}{36} \hat{C}^1$ , где:

$$\hat{C}^1 = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{Умножив } \hat{C} \text{ на } \begin{bmatrix} u_{\beta 1} \\ \dots \\ u_{\beta n} \end{bmatrix} \text{ получим добавку в вектор правой части, а сама матрица } \hat{C} \text{ будет до-}$$

бавкой в глобальную матрицу (или правую часть, необходимо учесть (11)).

Рассмотрим краевые условия второго рода (4). Необходимо вычислить интеграл  $\int_{S_2} \theta \psi_i dS$ . Производится это аналогично третьим, с той разницей, что добавка есть лишь в правую часть.

## 2.6. Метод решения СЛАУ

Для решения СЛАУ использован метод сопряженных градиентов с предобуславливанием неполным разложением Хо-лесского ( $LL^T$ -разложение). Данный метод является достаточно эффективным для данной задачи, так как в СЛАУ используется симметричная матрица.

## 3. Описание разработанной программы

### 3.1. Структуры данных, используемые для задания расчетной области и конечноэлементной сетки

Для задания расчетной области и конечноэлементной сетки в программе используются следующие структуры (упрощенно):

1) для описания конечных элементов используется тип данных *local\_area*, содержащий в себе номера узлов и значения параметра  $\lambda$  в данной области

```
type :: local_area ! конечные элементы
integer :: mas_(8) ! номера узлов
double precision :: lambda_ ! lambda в области
end type
```

2) для хранения координат узлов используется тип данных *cross*, содержащий в себе координаты  $x$ ,  $y$  и  $z$ .

```
type :: cross ! координаты узлов
double precision :: mas_(3) ! x,y,z соотв.
end type
```

3) тип данных *fem* используется для хранения массивов типа *local\_area* и *cross*.

```
type :: fem
type(local_area), private, allocatable :: matr(:) ! конечные элементы
type(cross), private, allocatable :: set(:) ! координаты узлов
end type
```

Для внешнего хранения или ввода расчетной области и конечноэлементной сетки используются файлы следующего назначения:

Имя файла	Что хранится	Способ задания данных
cross.txt	Узлы сетки	Первая строка – число узлов, последующие – их координаты.
local.txt	Конечные элементы	Первая строка – число конечных элементов, далее номера узлов, определяющих конечные элементы и значения $\lambda$ .
bound1.txt	Первые краевые	Номер узла, на котором задано условие
bound2.txt	Вторые краевые	Четыре номера узла, задающих грань
bound3.txt	Третьи краевые	Четыре номера узла, задающих грань, значение $\beta$

### 3.2. Структура основных модулей программы

Основные модули программы:

- *fem\_module* – основной модуль программы;
- *cgm\_module* – модуль решения СЛАУ методом МСГ;
- *list\_module* – модуль, реализующий класс «список»;
- *param\_module* – модуль, в котором задаются все необходимые параметры;

### 3.2.1 fem\_module

Основной модуль программы, содержит описание и реализацию основного класса программы – *fem*, основные и вспомогательные типы данных для представления расчетной области и конечноэлементной сетки, все необходимые данные, такие как локальные матрицы.

Структура всех типов данных и классов:

type :: local_area	конечные элементы
integer :: mas_(8)	номера узлов
double precision :: lambda_	lambda в области
end type	
type :: cross	координаты узлов
double precision :: mas_(3)	x, y, z соотв.
end type	
type :: limits	границы, для вторых-третьих краевых
double precision :: min_(3), max_(3)	
end type	
type :: local_matrix	локальные матрицы
double precision :: m_1(8,8)	матрица массы
double precision :: g_x(8,8)	матрица жесткости (x)
double precision :: g_y(8,8)	матрица жесткости (y)
double precision :: g_z(8,8)	матрица жесткости (z)
double precision :: c_1(4,4)	матрица c_1
end type	
type :: fem	
type(slae) :: gl_matr	СЛАУ
type(local_area), private, allocatable :: matr(:)	конечные элементы
type(cross), private, allocatable :: set(:)	координаты узлов
type(local_matrix), private :: lc_matr	локальные матрицы
double precision :: t_curr = 0d0, t_old = 0d0	значение времени
double precision, allocatable :: q_curr(:), q_old(:)	вектора весов
type(limits), private :: lim	границы, для вторых-третьих краевых
contains	
procedure :: calc_	функция запуска вычислений
procedure :: read_	функция считывания исходных данных (кроме краевых)
procedure, private :: do_make_matrix	формирование матрицы
procedure, private :: do_make_bound	учет краевых условий
procedure, private :: add	добавление эл -та x к (i, j) эл -ту матрицы
procedure :: dealloc_	освобождение памяти
procedure :: grid_gen	генератор сеток
end type	

### 3.2.2 cgm\_module

Модуль программы, обеспечивающий решение СЛАУ в разреженном строчно-столбцовом формате методом сопряженных градиентов с предобуславливанием неполным разложением Холецкого ( $LL^T$ -разложение).

Структура всех типов данных и классов:

type :: slae	СЛАУ
integer :: n	
integer, allocatable :: ig(:), jg(:)	
double precision, allocatable :: di(:), gg(:), f(:), x(:)	
contains	
procedure :: calc_cgm	решение СЛАУ методом МСГ
procedure :: alloc_all	выделение памяти под СЛАУ
procedure :: dealloc_all	освобождение памяти
procedure, private :: do_holessky_decompose	выполнение разложения Холецкого
procedure, private :: do_solve_slae	решение СЛАУ для матрицы с разложением Холецкого
procedure, private :: mult_mtr_vctr	умножение матрицы на вектор
procedure, private :: mult_scalar	вычисление скалярного произведения
procedure, private :: residual	вычисление невязки
procedure, private :: norm_2	вычисление квадрата нормы вектора
end type	

### 3.2.3 param\_module

Модуль программы, обеспечивающий хранение и использования всех параметров для работы программы.

Структура всех типов данных и классов:

double precision, parameter :: t_start = 0d0, t_delta = 0.0125d0, t_end = 1d0	<
double precision, parameter :: x_start = 0d0, x_delta = 1d0, x_end = 10d0	< параметры
double precision, parameter :: y_start = 0d0, y_delta = 1d0, y_end = 10d0	< генератора
double precision, parameter :: z_start = 0d0, z_delta = 1d0, z_end = 10d0	< сеток
double precision, parameter :: lambda_grid = 1d0	<
function u(x, y, z, t)	функция $u$
function f(x, y, z, t)	функция правой части уравнения
function sigma(x, y, z, t)	функция параметра $\sigma$
function grad_u(x, y, z, t)	функция градиента $u$

## 4. Описание тестирования программы

### 4.1. Тест 1

Цель теста: проверка вклада  $\text{div}(\text{grad})$

Параметры теста:  $u = x^2 + y^2 + z^2 + t$ ,  $f = -6$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\sigma = 0$

Параметры области:  $x \in [0, 2]$ ,  $h_x = 1$ ,  $y \in [0, 2]$ ,  $h_y = 1$ ,  $z \in [0, 2]$ ,  $h_z = 1$  (27 узлов)

Параметры времени:  $t \in [0, 1]$ ,  $h_t = 0.1$

Краевые условия: везде первые

Результаты:

Временной слой	Относительная погрешность
Time = 0.100000E+00	Diff = 0.145E-16
Time = 0.200000E+00	Diff = 0.143E-16
Time = 0.300000E+00	Diff = 0.282E-16
Time = 0.400000E+00	Diff = 0.278E-16
Time = 0.500000E+00	Diff = 0.137E-16
Time = 0.600000E+00	Diff = 0.135E-16
Time = 0.700000E+00	Diff = 0.266E-16
Time = 0.800000E+00	Diff = 0.394E-16
Time = 0.900000E+00	Diff = 0.259E-16
Time = 0.100000E+01	Diff = 0.000E+00

### 4.2. Тест 2

Цель теста: проверка вклада  $\sigma$

Параметры теста:  $u = 2x + yt + z + 3t^2 + t - 2$ ,  $f = \sigma(y + 6t + 1)$ ,  $\lambda = 0$ ,  $\sigma = 12$

Параметры области:  $x \in [0, 2]$ ,  $h_x = 1$ ,  $y \in [0, 2]$ ,  $h_y = 1$ ,  $z \in [0, 2]$ ,  $h_z = 1$  (27 узлов)

Параметры времени:  $t \in [0, 1]$ ,  $h_t = 0.1$

Краевые условия: везде первые

Результаты:

Временной слой	Относительная погрешность
Time = 0.100000E+00	Diff = 0.582E-16
Time = 0.200000E+00	Diff = 0.162E-15
Time = 0.300000E+00	Diff = 0.977E-16
Time = 0.400000E+00	Diff = 0.174E-15
Time = 0.500000E+00	Diff = 0.514E-16
Time = 0.600000E+00	Diff = 0.158E-15
Time = 0.700000E+00	Diff = 0.217E-15
Time = 0.800000E+00	Diff = 0.695E-16
Time = 0.900000E+00	Diff = 0.322E-15
Time = 0.100000E+01	Diff = 0.243E-15

### 4.3. Тест 3

Цель теста: проверка вторых и третьих краевых условий

Параметры теста:  $u = x^2 + y^2 + z^2 + t^2$ ,  $f = 2\sigma t - 6$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\sigma = 10^5$

Параметры области:  $x \in [0, 2]$ ,  $h_x = 1$ ,  $y \in [0, 2]$ ,  $h_y = 1$ ,  $z \in [0, 2]$ ,  $h_z = 1$  (27 узлов)

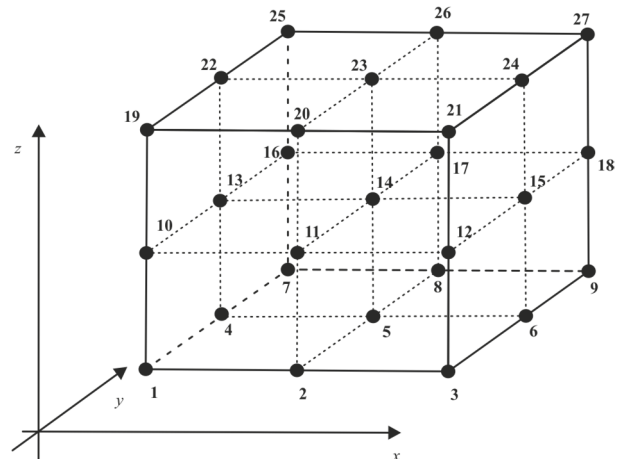
Параметры времени:  $t \in [0, 1]$ ,  $h_t = 0.1$

Краевые условия:

- первые: узлы 1 - 9, 13, 15, 19 - 27
- вторые: грань 1 - 3 - 19 - 21
- третьи: грань 7 - 9 - 25 - 27

Результаты:

Временной слой	Относительная погрешность
Time = 0.100000E+00	Diff = 0.155E-05
Time = 0.200000E+00	Diff = 0.308E-05
Time = 0.300000E+00	Diff = 0.459E-05
Time = 0.400000E+00	Diff = 0.606E-05
Time = 0.500000E+00	Diff = 0.748E-05
Time = 0.600000E+00	Diff = 0.883E-05
Time = 0.700000E+00	Diff = 0.101E-04
Time = 0.800000E+00	Diff = 0.113E-04
Time = 0.900000E+00	Diff = 0.124E-04
Time = 0.100000E+01	Diff = 0.135E-04





#### 4.4. Тест 4

Цель теста: проверка работы на большом тесте

Параметры теста:  $u = 2x + yt + z^2 + x^2t^2 + 3t^2 + t - 2$ ,  $f = \sigma(2tx^2 + y + 6t + 1) - 2t^2 - 2$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\sigma = 1$

Параметры области:  $x \in [0, 10]$ ,  $h_x = 0.5$ ,  $y \in [0, 10]$ ,  $h_y = 0.5$ ,  $z \in [0, 10]$ ,  $h_z = 0.5$  (9261 узел)

Параметры времени:  $t \in [0, 100]$ ,  $h_t = 1$

Краевые условия: везде первые

Результаты:

Временной слой	Относительная погрешность	Временной слой	Относительная погрешность
Time = 0.1000000E+01	Diff = 0.228E-10	Time = 0.6300000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.2000000E+01	Diff = 0.635E-11	Time = 0.6400000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.3000000E+01	Diff = 0.322E-11	Time = 0.6500000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.4000000E+01	Diff = 0.251E-11	Time = 0.6600000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.5000000E+01	Diff = 0.206E-11	Time = 0.6700000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.6000000E+01	Diff = 0.182E-11	Time = 0.6800000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.7000000E+01	Diff = 0.161E-11	Time = 0.6900000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.8000000E+01	Diff = 0.698E-12	Time = 0.7000000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.9000000E+01	Diff = 0.379E-12	Time = 0.7100000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1000000E+02	Diff = 0.263E-12	Time = 0.7200000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1100000E+02	Diff = 0.198E-12	Time = 0.7300000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1200000E+02	Diff = 0.179E-12	Time = 0.7400000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1300000E+02	Diff = 0.161E-12	Time = 0.7500000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1400000E+02	Diff = 0.157E-12	Time = 0.7600000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1500000E+02	Diff = 0.151E-12	Time = 0.7700000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1600000E+02	Diff = 0.150E-12	Time = 0.7800000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1700000E+02	Diff = 0.146E-12	Time = 0.7900000E+02	Diff = 0.131E-13
Time = 0.1800000E+02	Diff = 0.146E-12	Time = 0.8000000E+02	Diff = 0.520E-14
Time = 0.1900000E+02	Diff = 0.144E-12	Time = 0.8100000E+02	Diff = 0.267E-14
Time = 0.2000000E+02	Diff = 0.144E-12	Time = 0.8200000E+02	Diff = 0.194E-14
Time = 0.2100000E+02	Diff = 0.143E-12	Time = 0.8300000E+02	Diff = 0.147E-14
Time = 0.2200000E+02	Diff = 0.143E-12	Time = 0.8400000E+02	Diff = 0.142E-14
Time = 0.2300000E+02	Diff = 0.143E-12	Time = 0.8500000E+02	Diff = 0.124E-14
Time = 0.2400000E+02	Diff = 0.142E-12	Time = 0.8600000E+02	Diff = 0.127E-14
Time = 0.2500000E+02	Diff = 0.142E-12	Time = 0.8700000E+02	Diff = 0.115E-14
Time = 0.2600000E+02	Diff = 0.570E-13	Time = 0.8800000E+02	Diff = 0.119E-14
Time = 0.2700000E+02	Diff = 0.289E-13	Time = 0.8900000E+02	Diff = 0.113E-14
Time = 0.2800000E+02	Diff = 0.209E-13	Time = 0.9000000E+02	Diff = 0.116E-14
Time = 0.2900000E+02	Diff = 0.157E-13	Time = 0.9100000E+02	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3000000E+02	Diff = 0.153E-13	Time = 0.9200000E+02	Diff = 0.115E-14
Time = 0.3100000E+02	Diff = 0.136E-13	Time = 0.9300000E+02	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3200000E+02	Diff = 0.139E-13	Time = 0.9400000E+02	Diff = 0.113E-14
Time = 0.3300000E+02	Diff = 0.131E-13	Time = 0.9500000E+02	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3400000E+02	Diff = 0.135E-13	Time = 0.9600000E+02	Diff = 0.113E-14
Time = 0.3500000E+02	Diff = 0.131E-13	Time = 0.9700000E+02	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3600000E+02	Diff = 0.133E-13	Time = 0.9800000E+02	Diff = 0.112E-14
Time = 0.3700000E+02	Diff = 0.130E-13	Time = 0.9900000E+02	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3800000E+02	Diff = 0.132E-13	Time = 0.1000000E+03	Diff = 0.111E-14
Time = 0.3900000E+02	Diff = 0.130E-13		
Time = 0.4000000E+02	Diff = 0.132E-13		
Time = 0.4100000E+02	Diff = 0.130E-13		
Time = 0.4200000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4300000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4400000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4500000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4600000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4700000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4800000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.4900000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5000000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5100000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5200000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5300000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5400000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5500000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5600000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5700000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5800000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.5900000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.6000000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.6100000E+02	Diff = 0.131E-13		
Time = 0.6200000E+02	Diff = 0.131E-13		

## 5. Исследования

### 5.1. Определение порядка аппроксимации по времени

Параметры теста:  $u = \sin(x + y + z + t^2)$ ,  $f = 2\sigma t \cos(t^2 + x + y + z) + 3\sin(t^2 + x + y + z)$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\sigma = 10^5$

Параметры области:  $x \in [0, 10]$ ,  $h_x = 1$ ,  $y \in [0, 10]$ ,  $h_y = 1$ ,  $z \in [0, 10]$ ,  $h_z = 1$  (1331 узел)

Параметры времени:  $t \in [0, 1]$ ,  $h_t = 0.05$

Краевые условия: везде первые

Результаты:

$t$	$\ u^* - u_{ht}\  / \ u^*\ $	$\ u^* - u_{ht/2}\  / \ u^*\ $	$\ u^* - u_{ht/4}\  / \ u^*\ $	$\log_2(\Delta_{ht} / \Delta_{ht/2})$	$\log_2(\Delta_{ht/2} / \Delta_{ht/4})$
0.05	2.730E-06	7.640E-07	2.720E-07	1.837	1.490
0.10	1.070E-05	2.840E-06	8.720E-07	1.914	1.703
0.15	2.390E-05	6.230E-06	1.800E-06	1.940	1.791
0.20	4.240E-05	1.090E-05	3.060E-06	1.960	1.833
0.25	6.610E-05	1.690E-05	4.640E-06	1.968	1.865
0.30	9.510E-05	2.430E-05	6.550E-06	1.968	1.891
0.35	1.290E-04	3.290E-05	8.780E-06	1.971	1.906
0.40	1.690E-04	4.280E-05	1.130E-05	1.981	1.921
0.45	2.130E-04	5.400E-05	1.420E-05	1.980	1.927
0.50	2.630E-04	6.650E-05	1.740E-05	1.984	1.934
0.55	3.170E-04	8.020E-05	2.090E-05	1.983	1.940
0.60	3.770E-04	9.520E-05	2.470E-05	1.986	1.946
0.65	4.410E-04	1.110E-04	2.890E-05	1.990	1.941
0.70	5.100E-04	1.290E-04	3.330E-05	1.983	1.954
0.75	5.840E-04	1.470E-04	3.790E-05	1.990	1.956
0.80	6.620E-04	1.670E-04	4.290E-05	1.987	1.961
0.85	7.430E-04	1.870E-04	4.800E-05	1.990	1.962
0.90	8.290E-04	2.080E-04	5.340E-05	1.995	1.962
0.95	9.170E-04	2.310E-04	5.900E-05	1.989	1.969
1.00	1.010E-03	2.530E-04	6.470E-05	1.997	1.967

## 6. Выводы

Фактический порядок аппроксимации по времени у реализованного метода получился второй. Однако, в зависимости от коэффициентов уравнения, вида функции и временной сетки, схема может давать как худшую, так и лучшую аппроксимацию.

Следует отметить, что при малых значениях  $\sigma$  или при недостаточной мелкости разбиения временной сетки, схема может давать значительную погрешность в виде осцилляций решения во времени.

## 7. Тексты основных модулей программы

### 7.1. fem\_module

```
#if __GFORTRAN__ == 1 && __GNUPC__ == 4 && __GNUPC_MINOR__ < 5
#define class type
#endif
module fem_module
  use cgm_module
  use param_module
  implicit none

  type :: local_area ! конечные элементы
    integer :: mas_(8) ! номера узлов
    double precision :: lambda_ ! lambda в области
  end type

  type :: cross ! координаты узлов
    double precision :: mas_(3) ! x, y, z соотв.
  end type

  type :: limits ! границы, для вторых-третьих краевых
    double precision :: min_(3), max_(3)
  end type

  type :: local_matrix ! локальные матрицы
    double precision :: m_1(8,8)=reshape(source=(&
      8d0,4d0,4d0,2d0,4d0,2d0,2d0,1d0,&
      4d0,8d0,2d0,4d0,2d0,4d0,1d0,2d0,&
      4d0,2d0,8d0,4d0,2d0,1d0,4d0,2d0,&
      2d0,4d0,4d0,8d0,1d0,2d0,2d0,4d0,&
      4d0,2d0,2d0,1d0,8d0,4d0,4d0,2d0,&
      2d0,4d0,1d0,2d0,4d0,8d0,2d0,4d0,&
      2d0,1d0,4d0,2d0,4d0,2d0,8d0,4d0,&
      1d0,2d0,2d0,4d0,2d0,4d0,4d0,8d0 &
      /),shape=(/8,8/)) ! матрица массы
```

```

double precision :: g_x(8,8)=reshape(source=(&
4d0,-4d0,2d0,-2d0,2d0,-2d0,1d0,-1d0,&
-4d0,4d0,-2d0,2d0,-2d0,2d0,-1d0,1d0,&
2d0,-2d0,4d0,-4d0,1d0,-1d0,2d0,-2d0,&
-2d0,2d0,-4d0,4d0,-1d0,1d0,-2d0,2d0,&
2d0,-2d0,1d0,-1d0,4d0,-4d0,2d0,-2d0,&
-2d0,2d0,-1d0,1d0,-4d0,4d0,-2d0,2d0,&
1d0,-1d0,2d0,-2d0,2d0,-2d0,4d0,-4d0,&
-1d0,1d0,-2d0,2d0,-2d0,2d0,-4d0,4d0 &
/),shape=(/8,8/)) ! матрица жесткости (x)
double precision :: g_y(8,8)=reshape(source=(&
4d0,2d0,-4d0,-2d0,2d0,1d0,-2d0,-1d0,&
2d0,4d0,-2d0,-4d0,1d0,2d0,-1d0,-2d0,&
-4d0,-2d0,4d0,2d0,-2d0,-1d0,2d0,1d0,&
-2d0,-4d0,2d0,4d0,-1d0,-2d0,1d0,2d0,&
2d0,1d0,-2d0,-1d0,4d0,2d0,-4d0,-2d0,&
1d0,2d0,-1d0,-2d0,2d0,4d0,-2d0,-4d0,&
-2d0,-1d0,2d0,1d0,-4d0,-2d0,4d0,2d0,&
-1d0,-2d0,1d0,2d0,-2d0,-4d0,2d0,4d0 &
/),shape=(/8,8/)) ! матрица жесткости (y)
double precision :: g_z(8,8)=reshape(source=(&
4d0,2d0,2d0,1d0,-4d0,-2d0,-2d0,-1d0,&
2d0,4d0,1d0,2d0,-2d0,-4d0,-1d0,-2d0,&
2d0,1d0,4d0,2d0,-2d0,-1d0,-4d0,-2d0,&
1d0,2d0,2d0,4d0,-1d0,-2d0,-2d0,-4d0,&
-4d0,-2d0,-2d0,-1d0,4d0,2d0,2d0,1d0,&
-2d0,-4d0,-1d0,-2d0,2d0,4d0,1d0,2d0,&
-2d0,-1d0,-4d0,-2d0,2d0,1d0,4d0,2d0,&
-1d0,-2d0,-2d0,-4d0,1d0,2d0,2d0,4d0 &
/),shape=(/8,8/)) ! матрица жесткости (z)
double precision :: c_1(4,4)=reshape(source=(&
4d0,2d0,2d0,1d0,&
2d0,4d0,1d0,2d0,&
2d0,1d0,4d0,2d0,&
1d0,2d0,2d0,4d0 &
/),shape=(/4,4/)) ! матрица c_1
end type

type :: fem
type(slae) :: gl_matr ! СЛАУ
type(local_area), private, allocatable :: matr(:) ! конечные элементы
type(cross), private, allocatable :: set(:) ! координаты узлов
type(local_matrix), private :: lc_matr ! локальные матрицы
double precision :: t_curr = 0d0, t_old = 0d0 ! значение времени
double precision, allocatable :: q_curr(:), q_old(:) ! вектора весов
type(limits), private :: lim ! границы, для вторых-третьих краевых
contains
procedure :: calc_ ! функция запуска вычислений
procedure :: read_ ! функция считывания исходных данных (кроме краевых)
procedure, private :: do_make_matrix ! формирование матрицы
procedure, private :: do_make_bound ! учет краевых условий
procedure, private :: add ! добавление эл -та x к (i, j) эл -ту матрицы
procedure :: dealloc_ ! освобождение памяти
procedure :: grid_gen ! генератор сеток
end type

contains

subroutine grid_gen(this)
implicit none
class(fem) :: this
integer, allocatable :: grid(:,:,:)
integer :: num_x, num_y, num_z, i, j, k, number_loc
num_x = ceiling((x_end - x_start) / x_delta)
num_y = ceiling((y_end - y_start) / y_delta)
num_z = ceiling((z_end - y_start) / z_delta)
allocate(grid(num_x+1, num_y+1, num_z+1))
! Координаты
open(100, file = 'cross.txt', status = 'unknown')
write(100,*) (num_x+1) * (num_y+1) * (num_z+1)
number_loc = 1
do i = 0, num_z, 1
do j = 0, num_y, 1
do k = 0, num_x, 1
write(100,*) x_start + dble(k) * x_delta, y_start + dble(j) * y_delta, z_start + dble(i) * z_delta
grid(k+1, j+1, i+1) = number_loc
number_loc = number_loc + 1
end do
end do
end do
write(100,*)
close(100)
! КЭ
open(100, file = 'local.txt', status = 'unknown')
write(100,*) (num_x) * (num_y) * (num_z)
do i = 1, num_z, 1
do j = 1, num_y, 1
do k = 1, num_x, 1
write(100,*) grid(k, j, i), grid(k+1, j, i), grid(k, j+1, i), grid(k+1, j+1, i), &
grid(k, j, i+1), grid(k+1, j, i+1), grid(k, j+1, i+1), grid(k+1, j+1, i+1)
write(100,*) lambda_grid
end do
end do
end do

```

```

end do
write(100,*)
close(100)
! Краевые
open(100, file = 'bound1.txt', status = 'unknown')
do j = 1, num_y+1, 1
  do k = 1, num_x+1, 1
    write(100,*) grid(k, j, 1)
    write(100,*) grid(k, j, num_z+1)
  end do
end do
do i = 2, num_z, 1
  do k = 1, num_x+1, 1
    write(100,*) grid(k, 1, i)
    write(100,*) grid(k, num_y+1, i)
  end do
end do
do i = 2, num_z, 1
  do j = 2, num_y, 1
    write(100,*) grid(1, j, i)
    write(100,*) grid(num_x+1, j, i)
  end do
end do
write(100,*)
close(100)

deallocate(grid)
end subroutine

subroutine read_(this) ! функция считывания исходных данных (кроме краевых)
use list_module
implicit none
common / counters / c_local, c_cross
class(fem) :: this
integer :: i, j, c_local, c_cross, gg_size, i1, j1, k, tmp
double precision :: q_l, x_l, y_l, z_l
class(list), allocatable :: profile(:)
! Считывание координат узлов
open(10, file = 'cross.txt', status = 'old')
rewind 10
read(10, * ) c_cross
this%gl_matr%n = c_cross
allocate(this%set(c_cross))
do i = 1, c_cross
  read(10, *) (this%set(i)%mas_(j), j = 1, 3)
  do j = 1, 3
    this%lim%max_(j) = max(this%set(i)%mas_(j), this%lim%max_(j))
    this%lim%min_(j) = min(this%set(i)%mas_(j), this%lim%min_(j))
  end do
end do
close(10)
! Считывание нумерации
open(20, file = 'local.txt', status = 'old')
rewind 20
read(20, * ) c_local
allocate(this%matr(c_local))
do i = 1, c_local
  read(20, *) (this%matr(i)%mas_(j), j = 1, 8)
  read(20, *) this%matr(i)%lambda_
end do
close(20)

! Формирование профиля
gg_size = 0
allocate(profile(this%gl_matr%n))
do k = 1, c_local
  do i = 1, 8
    do j = i + 1, 8, 1
      i1 = this%matr(k)%mas_(i)
      j1 = this%matr(k)%mas_(j)
      if(i1 .lt. j1)then
        tmp = i1
        i1 = j1
        j1 = tmp
      end if
      if(profile(i1 -1)%elem_count(j1) .eq. 0) then
        call profile(i1 -1)%add(j1)
        gg_size = gg_size + 1
      end if
    end do
  end do
end do
do i = 1, this%gl_matr%n, 1
  call profile(i)%sort()
end do
! Выделение памяти
call this%gl_matr%alloc_all(gg_size)
! Формирование ig и jg
this%gl_matr%ig(1) = 1
this%gl_matr%ig(2) = 1
tmp = 1
do i = 1, this%gl_matr%n - 1
  k = 0

```

```

        do j = 1, i
            if(profile(i)%elem_count(j) .ne. 0) then
                this%gl_matr%jg(tmp) = j
                tmp = tmp + 1
                k = k + 1
            end if
        end do
        this%gl_matr%ig(i + 2) = this%gl_matr%ig(i + 1) + k
    end do
    deallocate(profile)

    ! И еще немного памяти
    allocate(this%q_curr(this%gl_matr%n))
    allocate(this%q_old(this%gl_matr%n))
    this%t_curr = t_start + t_delta
    this%t_old = t_start

    ! Начальные условия
    do i = 1, c_cross
        x_l = this%set(i)%mas_(1)
        y_l = this%set(i)%mas_(2)
        z_l = this%set(i)%mas_(3)
        q_l = u(x_l, y_l, z_l, t_start)
        this%q_curr(i) = q_l
    end do
end subroutine

subroutine calc_(this) ! функция запуска вычислений
    implicit none
    class(fem) :: this
    integer i, j, num_t
    double precision :: diff, x_l, y_l, z_l, u_l, norm
    open(90, file = 'solution.txt', status = 'unknown')
    open(95, file = 'diff.txt', status = 'unknown')
    num_t = ceiling((t_end - t_start) / t_delta)

    write(90, *) '==== t = ', t_start, '====='
    do j = 1, this%gl_matr%n
        write(90, *) this%q_curr(j)
    end do

    do i = 1, num_t, 1
        this%q_old = this%q_curr
        this%gl_matr%di = 0d0
        this%gl_matr%df = 0d0
        this%gl_matr%gg = 0d0
        this%gl_matr%x = 0d0

        call this%do_make_matrix()
        call this%do_make_bound()
        call this%gl_matr%calc_cgm()

        this%q_curr = this%gl_matr%x
        diff = 0d0
        norm = 0d0
        do j = 1, this%gl_matr%n
            x_l = this%set(j)%mas_(1)
            y_l = this%set(j)%mas_(2)
            z_l = this%set(j)%mas_(3)
            u_l = u(x_l, y_l, z_l, this%t_curr)
            diff = diff + (this%q_curr(j) - u_l) ** 2
            norm = norm + u_l ** 2
        end do
        diff = dsqrt(diff) / dsqrt(norm)
        write(*, '(a7,e14.7,a9,e10.3)') 'Time = ', this%t_curr, ' Diff = ', diff
        write(95, '(a7,e14.7,a9,e10.3)') 'Time = ', this%t_curr, ' Diff = ', diff

        write(90, *) '==== t = ', this%t_curr, '====='
        do j = 1, this%gl_matr%n
            x_l = this%set(j)%mas_(1)
            y_l = this%set(j)%mas_(2)
            z_l = this%set(j)%mas_(3)
            u_l = u(x_l, y_l, z_l, this%t_curr)
            write(90, *) this%q_curr(j), u_l
        end do

        this%t_old = this%t_curr
        this%t_curr = t_start + t_delta * dble(i+1)
    end do
    close(90)
    close(95)
end subroutine

subroutine add(this, i, j, x) ! добавление эл -та x к (i, j) эл -ту матрицы
    implicit none
    class(fem) :: this
    double precision :: x
    integer :: i, j, k
    do k = this%gl_matr%ig(i), this%gl_matr%ig(i + 1) - 1
        if(this%gl_matr%jg(k) .eq. j) goto 100
    end do
    continue
    this%gl_matr%gg(k) = this%gl_matr%gg(k) + x

```

end subroutine

```

subroutine do_make_matrix(this) ! формирование матрицы
implicit none
common / counters / c_local, c_cross
class(fem) :: this
integer :: i, j, c_local, c_cross, k, i1, j1, l, flag
double precision :: h(3), b_k, c_k, fr(8), tmp_vector_1(8), tmp_vector_2(8)
double precision :: tmpmatr(8,8), sigma_1

! Вычисление шага h
do i = 1, this%gl_matr%n
    this%gl_matr%di(i) = 0d0
    this%gl_matr%f(i) = 0d0
end do
do i = 1, this%gl_matr%ig(this%gl_matr%n)
    this%gl_matr%gg(i) = 0d0
end do
do k = 1, c_local
    do i = 1, 3
        flag = 1
        do j = 2, 8
            if(flag .eq. 1)then
                flag = 0
                do l = 1, 3 ! проверяем, лежат ли точки на нужном ребре
                    if(i .ne. 1 .and. this%set(this%matr(k)%mas_(1))%mas_(1) .ne.
this%set(this%matr(k)%mas_(j))%mas_(1))then
                        flag = 1
                    end if
                end do
            end if
        end do
        if(flag .eq. 0)then
            h(i) = dabs(this%set(this%matr(k)%mas_(1))%mas_(i) - this%set(this%matr(k)%mas_(j-1))%mas_(i))
        end if
    end do

    ! заполнение массива gg
    b_k = this%matr(k)%lambda_ * h(1) * h(2) * h(3) / 36d0
    c_k = h(1) * h(2) * h(3) / 216d0

    ! вектор правой части для локал. матрицы
    do i = 1, 8
        tmp_vector_1(i) = f_(this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(1), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(2), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(3), this%t_curr)
        tmp_vector_2(i) = f_(this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(1), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(2), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(3), this%t_old)
    end do
    fr = c_k * (matmul(this%lc_matr%m_1, tmp_vector_1) + matmul(this%lc_matr%m_1, tmp_vector_2)) / 2d0

    ! Сигма на текущем КЭ
    sigma_1 = 0d0
    do i = 1, 8, 1
        sigma_1 = sigma_1 + sigma_(this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(1), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(2), &
            this%set(this%matr(k)%mas_(i))%mas_(3), &
            this%t_curr)
    end do
    sigma_1 = sigma_1 / 8d0
    ! Матрица для добавки в правую часть
    tmpmatr = 1d0 / (this%t_curr - this%t_old) * c_k * sigma_1 * this%lc_matr%m_1 - &
        1d0 / 2d0 * b_k * (1d0 / (h(1) ** 2) * this%lc_matr%g_x + &
            1d0 / (h(2) ** 2) * this%lc_matr%g_y + &
            1d0 / (h(3) ** 2) * this%lc_matr%g_z)

    ! (1/dt*M-1/2*G)*q^(j-1)
    do i = 1, 8, 1
        tmp_vector_1(i) = this%q_old(this%matr(k)%mas_(i))
    end do
    fr = fr + matmul(tmpmatr, tmp_vector_1)

    ! Локальная матрица
    tmpmatr = 1d0 / (this%t_curr - this%t_old) * c_k * sigma_1 * this%lc_matr%m_1 + &
        1d0 / 2d0 * b_k * (1d0 / (h(1) ** 2) * this%lc_matr%g_x + &
            1d0 / (h(2) ** 2) * this%lc_matr%g_y + &
            1d0 / (h(3) ** 2) * this%lc_matr%g_z)

    do i = 1, 8
        do j = 1, i -1, 1
            i1 = this%matr(k)%mas_(i)
            j1 = this%matr(k)%mas_(j)
            ! добавка в gg
            if(i1 .lt. j1)then
                call this%add(j1, i1, tmpmatr(i, j))
            else
                call this%add(i1, j1, tmpmatr(i, j))
            end if
        end do
        ! добавка в диагональ
        this%gl_matr%di(this%matr(k)%mas_(i)) = this%gl_matr%di(this%matr(k)%mas_(i)) + tmpmatr(i, i)
        ! добавка в правую часть
        this%gl_matr%f(this%matr(k)%mas_(i)) = this%gl_matr%f(this%matr(k)%mas_(i)) + fr(i)
    end do
end do

```

```

end do
end subroutine

subroutine do_make_bound(this) ! учет краевых условий
implicit none
common / counters / c_local, c_cross
class(fem) :: this
integer :: c_local, c_cross, i, j, cr(4)
double precision :: teta(4), beta, vec_tet(4), hplane, h1, h2, tmp, grad(4), teta_old(4), grad_old(4)
integer :: i_s, i_e, cur_row, p
! учет вторых краевых условий
open(30, file = 'bound2.txt', status = 'old', err = 100)
rewind 30
!print *, '2 bound detected!'
do while(.true.)
  read(30, *, err = 100, end = 100) (cr(i), i = 1, 4)

  ! 2-4-6-8
  if(this%set(cr(1))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
    this%set(cr(2))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
    this%set(cr(3))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
    this%set(cr(4))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1)) then
    do i = 1, 4
      grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
      grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
      do j = 1, c_local
        if(this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(1) .and. &
          this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(2) .and. &
          this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(3) .and. &
          this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 40
      end do
      continue
      teta(i) = grad(1) * this%matr(j)%lambda_
      teta_old(i) = grad_old(1) * this%matr(j)%lambda_
    end do
  end if
  ! 1-3-5-7
  if(this%set(cr(1))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
    this%set(cr(2))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
    this%set(cr(3))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
    this%set(cr(4))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1)) then
    do i = 1, 4
      grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
      grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
      do j = 1, c_local
        if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
          this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(2) .and. &
          this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(3) .and. &
          this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(4)) goto 41
      end do
      continue
      teta(i) = - grad(1) * this%matr(j)%lambda_
      teta_old(i) = - grad_old(1) * this%matr(j)%lambda_
    end do
  end if
  ! 3-4-7-8
  if(this%set(cr(1))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
    this%set(cr(2))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
    this%set(cr(3))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
    this%set(cr(4))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2)) then
    do i = 1, 4
      grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
      grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
      do j = 1, c_local
        if(this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(1) .and. &
          this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(2) .and. &
          this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(3) .and. &
          this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 42
      end do
      continue
      teta(i) = grad(2) * this%matr(j)%lambda_
      teta_old(i) = grad_old(2) * this%matr(j)%lambda_
    end do
  end if
  ! 1-2-5-6
  if(this%set(cr(1))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
    this%set(cr(2))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
    this%set(cr(3))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
    this%set(cr(4))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2)) then
    do i = 1, 4
      grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
      grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
      do j = 1, c_local
        if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
          this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(2) .and. &
          this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(3) .and. &
          this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(4)) goto 43
      end do
      continue
      teta(i) = - grad(2) * this%matr(j)%lambda_
      teta_old(i) = - grad_old(2) * this%matr(j)%lambda_
    end do
  end if
end if

```

```

! 5-6-7-8
if(this%set(cr(1))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 44
    end do
    continue
    teta(i) = grad(3) * this%matr(j)%lambda_
    teta_old(i) = grad_old(3) * this%matr(j)%lambda_
  end do
end if
! 1-2-3-4
if(this%set(cr(1))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(4)) goto 45
    end do
    continue
    teta(i) = - grad(3) * this%matr(j)%lambda_
    teta_old(i) = - grad_old(3) * this%matr(j)%lambda_
  end do
end if

h1 = 0d0
h2 = 0d0
do i = 1, 3
  tmp = dabs(this%set(cr(1))%mas_(i) - this%set(cr(2))%mas_(i))
  if(tmp .gt. eps)then
    h1 = h1 + tmp
  end if
  tmp = dabs(this%set(cr(1))%mas_(i) - this%set(cr(3))%mas_(i))
  if(tmp .gt. eps)then
    h2 = h2 + tmp
  end if
end do
! добавка в правую часть
hplane = h1 * h2 / 36d0
vec_tet = (matmul(this%lc_matr%c_1, teta) + matmul(this%lc_matr%c_1, teta_old)) / 2d0
do i = 1, 4
  this%gl_matr%f(cr(i)) = this%gl_matr%f(cr(i)) + hplane * vec_tet(i)
end do
end do
close(30)
continue
! учет третьих краевых условий
open(40, file = 'bound3.txt', status = 'old', err = 200)
rewind 40
!print *, '3 bound detected!'
do while(.true.)
  read(40, *, err = 200, end = 200) (cr(i), i = 1, 4)
  read(40, *, err = 200, end = 200) beta

! 2-4-6-8
if(this%set(cr(1))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(1) .eq. this%lim%max_(1)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 60
    end do
    continue
    teta(i) = grad(1) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    teta_old(i) = grad_old(1) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
  end do
end if
! 1-3-5-7
if(this%set(cr(1))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1) .and. &

```



```

this%set(cr(4))%mas_(1) .eq. this%lim%min_(1)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(4)) goto 61
    end do
61    continue
    teta(i) = - grad(1) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    teta_old(i) = - grad_old(1) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
  end do
end if
! 3-4-7-8
if(this%set(cr(1))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(2) .eq. this%lim%max_(2)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 62
    end do
62    continue
    teta(i) = grad(2) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    teta_old(i) = grad_old(2) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
  end do
end if
! 1-2-5-6
if(this%set(cr(1))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(2) .eq. this%lim%min_(2)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(4)) goto 63
    end do
63    continue
    teta(i) = - grad(2) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    teta_old(i) = - grad_old(2) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
  end do
end if
! 5-6-7-8
if(this%set(cr(1))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(3) .eq. this%lim%max_(3)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(5) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(6) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(7) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(8) .eq. cr(4)) goto 64
    end do
64    continue
    teta(i) = grad(3) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    teta_old(i) = grad_old(3) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
      u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
  end do
end if
! 1-2-3-4
if(this%set(cr(1))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(2))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(3))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3) .and. &
  this%set(cr(4))%mas_(3) .eq. this%lim%min_(3)) then
  do i = 1, 4
    grad = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
    grad_old = grad_u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    do j = 1, c_local
      if(this%matr(j)%mas_(1) .eq. cr(1) .and. &
        this%matr(j)%mas_(2) .eq. cr(2) .and. &
        this%matr(j)%mas_(3) .eq. cr(3) .and. &
        this%matr(j)%mas_(4) .eq. cr(4)) goto 65
    end do
65

```

```

65         end do
        continue
        teta(i) = - grad(3) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
        u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_curr)
        teta_old(i) = - grad_old(3) * this%matr(j)%lambda_ + beta * &
        u_(this%set(cr(i))%mas_(1), this%set(cr(i))%mas_(2), this%set(cr(i))%mas_(3), this%t_old)
    end do
end if

h1 = 0d0
h2 = 0d0
do i = 1, 3
    tmp = dabs(this%set(cr(1))%mas_(i) - this%set(cr(2))%mas_(i))
    if(tmp .gt. eps)then
        h1 = h1 + tmp
    end if
    tmp = dabs(this%set(cr(1))%mas_(i) - this%set(cr(3))%mas_(i))
    if(tmp .gt. eps)then
        h2 = h2 + tmp
    end if
end do
! добавка в правую часть
hplane = h1 * h2 / 36d0
vec_tet = (matmul(this%lc_matr%c_1, teta) + matmul(this%lc_matr%c_1, teta_old)) / 2d0
do i = 1, 4
    teta_old(i) = this%q_old(cr(i)) ! Это у нас такой q_old
end do
teta = (matmul(this%lc_matr%c_1, teta_old)) / 2d0 ! А это у нас такой C1*q_old
do i = 1, 4
    this%gl_matr%f(cr(i)) = this%gl_matr%f(cr(i)) + hplane * vec_tet(i) - hplane * teta(i)
end do
! добавка в глобальную матрицу
hplane = hplane * beta / 2d0
do i = 1, 4
    this%gl_matr%di(cr(i)) = this%gl_matr%di(cr(i)) + hplane * this%lc_matr%c_1(i, i)
    do j = 1, i - 1, 1
        call this%add(cr(i), cr(j), hplane * this%lc_matr%c_1(i, j))
    end do
end do
end do
close(40)
continue
200 ! учет первых краевых условий
open(50, file = 'bound1.txt', status = 'old', err = 300)
rewind 50
!print*, '1 bound detected!'
do while(.true.)
    read(50, *, err = 300, end = 300) cur_row
    tmp = u_(this%set(cur_row)%mas_(1), this%set(cur_row)%mas_(2), this%set(cur_row)%mas_(3), this%t_curr)
    this%gl_matr%di(cur_row) = 1d0
    this%gl_matr%f(cur_row) = tmp
    i_s = this%gl_matr%ig(cur_row)
    i_e = this%gl_matr%ig(cur_row + 1) - 1
    do i = i_s, i_e, 1
        this%gl_matr%f(this%gl_matr%jg(i)) = this%gl_matr%f(this%gl_matr%jg(i)) - this%gl_matr%gg(i) * tmp
        this%gl_matr%gg(i) = 0d0
    end do
    do p = cur_row + 1, this%gl_matr%n, 1
        i_s = this%gl_matr%ig(p)
        i_e = this%gl_matr%ig(p + 1) - 1
        do i = i_s, i_e, 1
            if(this%gl_matr%jg(i) .eq. cur_row) then
                this%gl_matr%f(p) = this%gl_matr%f(p) - this%gl_matr%gg(i) * tmp
                this%gl_matr%gg(i) = 0d0
            end if
        end do
    end do
end do
close(50)
continue
300 end subroutine

subroutine dealloc_(this) ! освобождение памяти
implicit none
class(fem) :: this
call this%gl_matr%dealloc_all()
deallocate(this%set)
deallocate(this%matr)
deallocate(this%q_curr)
deallocate(this%q_old)
end subroutine

end module

```

## 7.2. param\_module

```

if __GFORTRAN__ == 1 && __GNUC__ == 4 && __GNUC_MINOR__ < 5
#define class type
#endif

module param_module
  double precision, parameter :: derivative = 1d-8
  double precision, parameter :: t_start = 0d0, t_delta = 0.0125d0, t_end = 1d0
  double precision, parameter :: x_start = 0d0, x_delta = 1d0, x_end = 10d0
  double precision, parameter :: y_start = 0d0, y_delta = 1d0, y_end = 10d0
  double precision, parameter :: z_start = 0d0, z_delta = 1d0, z_end = 10d0
  double precision, parameter :: lambda_grid = 1d0

contains

  function u_(x, y, z, t)
    implicit none
    double precision :: x, y, z, t, u_
    !u_ = x**2 + t**2 + y**2 + z**2
    !u_ = x**2 + y**2 + z**2 + t
    !u_ = 2d0*x + y*t + z - 2d0 + t + 3d0*t**2
    !u_ = 2d0*x + y*t + z**2 - 2d0 + t + 3d0*t**2 + x**2*t**2
    u_ = sin(x + y + z + t**2)
  end function

  function f_(x, y, z, t) ! функция правой части уравнения
    implicit none
    double precision :: x, y, z, t, f_
    !f_ = -6d0 + sigma_(x, y, z, t) * 2d0 * t
    !f_ = -6d0 + sigma_(x, y, z, t)
    !f_ = sigma_(x, y, z, t) * (y + 1d0 + 6d0*t)
    !f_ = sigma_(x, y, z, t) * (y + 1d0 + 6d0*t + 2d0*t*x**2) - 2 - 2d0*t**2
    f_ = sigma_(x, y, z, t) * 2d0 * t * cos(t**2 + x + y + z) + 3d0*sin(t**2 + x + y + z)
  end function

  function sigma_(x, y, z, t)
    implicit none
    double precision :: x, y, z, t, sigma_
    sigma_ = 1d5
  end function

  function grad_u_(x, y, z, t)
    implicit none
    double precision :: x, y, z, t
    double precision :: grad_u_(4)
    !grad_u_(1) = (u_(x + derivative, y, z, t) - u_(x - derivative, y, z, t)) / (2d0 * derivative)
    !grad_u_(2) = (u_(x, y + derivative, z, t) - u_(x, y - derivative, z, t)) / (2d0 * derivative)
    !grad_u_(3) = (u_(x, y, z + derivative, t) - u_(x, y, z - derivative, t)) / (2d0 * derivative)
    !grad_u_(4) = (u_(x, y, z, t + derivative) - u_(x, y, z, t - derivative)) / (2d0 * derivative)
    grad_u_(1) = 2d0*x
    grad_u_(2) = 2d0*y
    grad_u_(3) = 2d0*z
    grad_u_(4) = 2d0*t
  end function

end module
```